

## 技術紹介

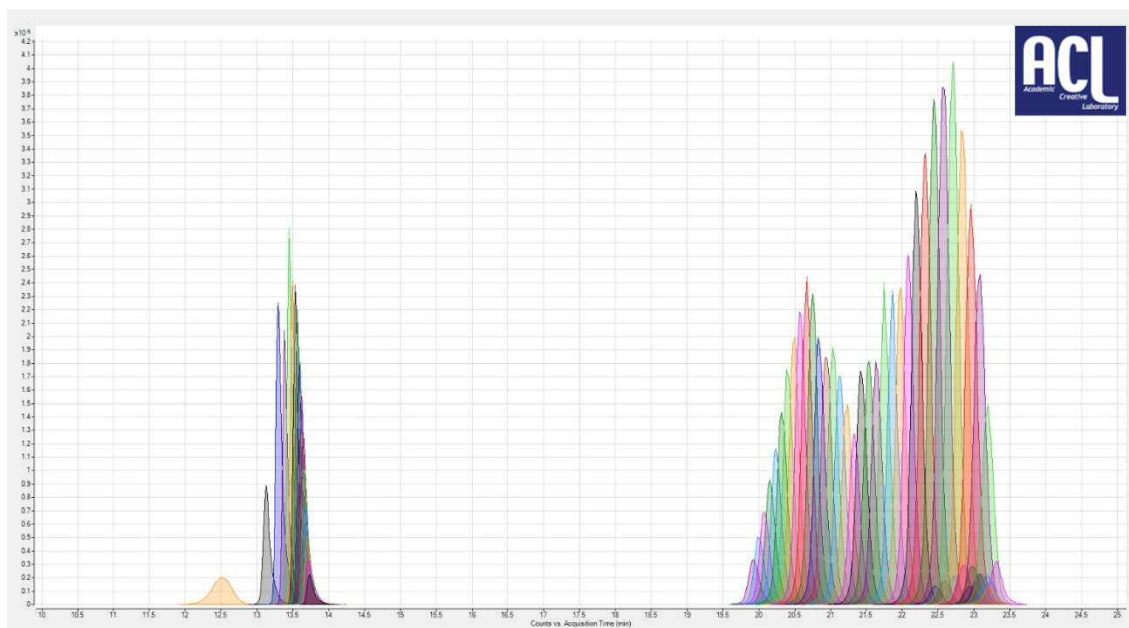
### ノニオン界面活性剤のKMD plot

界面活性剤は複数種をブレンドして使用されることが多く、個々の界面活性剤だけを見ても多数の同族体で構成され、含有成分数が100を超えることも珍しくありません。このような場合にLC/Q-TOFMSとKMDプロット解析を用いれば、正常品と異常品の違いを視覚的に判別できます。

ノニオン界面活性剤を含む薬剤の異常品について成分調査を行いました。このような薬剤の評価法として、一般的な液体クロマトグラフ質量分析装置（LC/MS）に替え、液体クロマトグラフ/四重極飛行時間型質量分析装置（LC/Q-TOFMS）とKMDプロット解析による化合物の種別判定を検討しました。

#### ①LC/MSによる薬剤含有成分判別の困難さ

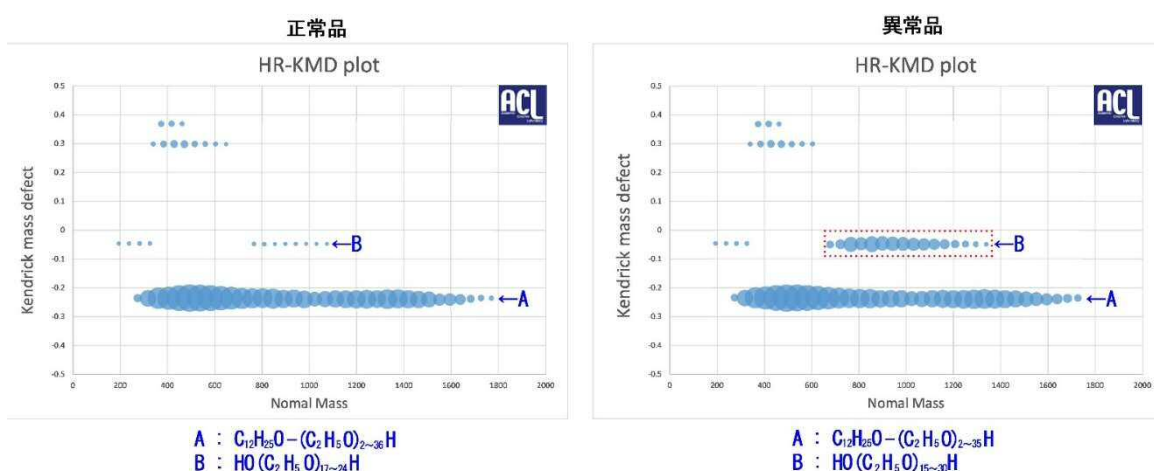
薬剤中の含有成分の評価には、以前からLC/MSが用いられてきました。薬剤中に含有される成分数が増えるほど、以下のように複数成分によるピークが重畳し、マスクロマトグラムから目的とするNG成分のピークを探し出すことはかなりの労力が必要でした。



ノニオン界面活性剤（異常品）のLC/MSによるマスクロマトグラム

## ② LC/Q-TOFMSデータを用いたKMDプロット解析

LC/Q-TOFMSデータを用いてKMDプロット解析を行い、正常品と異常品を比較した結果を以下に示します。



### ノニオン界面活性剤2製品のKMDプロット解析結果

主成分のポリオキシエチレンラウリルエーテル（A成分）の他に、4グループの少量成分が存在することが確認でき、特にポリエチレングリコール（B成分）が異常品に多く含まれていることがわかります。検出成分の精密質量数を元にKMDプロット解析した結果をバルーンチャートとして表すことにより、視覚的に試料間の違いを識別することができました。

### ③原理

KMD(Kendrick mass defect, ケンドリック質量欠損)プロット法は、高分解能質量分析で観測される精密質量のずれ(mass defect)を用いて繰り返し分子構造を持つ有機化合物の元素組成解析を行うために考案されました。この方法を用いれば容易に同族体ごとの分類が可能です。また、2製品を比較するのであれば、異物の存在や検出量が異なる化合物を視認することができます。

LC/Q-TOFMSのKMDプロット解析では、視覚的に試料間の違いを識別することが可能ですので、複数種の界面活性剤が混在する製品中から添加剤の違いを探り当てることも可能です。合せて、精密質量測定による元素組成解析から未知成分の種別を推定することができます。

各種成分分析につきましては、 にご相談ください。

お問い合わせ先

株式会社 分析センター URL <https://www.analysis.co.jp/>

材料評価事業部 〒101-0032 東京都墨田区東向島1丁目12番2号  
TEL 03-3616-1612 FAX 03-3616-1615

会社HP 分析無料ご相談

