

1P039

## [SDS/水]系のミセル水溶液中の ミセル近傍の水の IR スペクトル測定

IR spectra measurements of the water at the neighborhood of micelles in aqueous micelle solutions of SDS

(福井大院工) ○菊地巧也 水野和子 市丸哲也

### 序論

我々のこれまでの実験及びシミュレーションから、極性基 X を持つ有機化合物の水溶液において、溶質と水との間に二種類の水素結合を見いだしてきた。1) 一つは極性基と水分子間に形成される従来の水素結合(OH $\cdots$ X)である。他方は CH 基と水分子の酸素との間に見いだされる弱い水素結合 CH $\cdots$ O 型の相互作用である。CH $\cdots$ OH<sub>2</sub>の相互作用が CH 基の水和に役割を果たしているかどうかを種々の有機化合物の水和について調べることは CH 基の水和という観点から重要である。特に CH 基を多く含むミセル形成化合物において、ミセル中の CH 基と水との相互作用を調べることは興味深い。このような観点から硫酸ドデシルナトリウム(SDS)のミセル水溶液中での CH 基と水分子との相互作用を調べた。本研究では HDO をプローブ分子にして、得られた HDO スペクトルの OD 伸縮、HOD 変角振動スペクトルから SDS 近傍の水分子の水素結合の状態を考察する。

### 方法

Table1 に記載したようなサンプル、およびリファレンスを使用し、IR でいくつかの SDS 濃度で HDO スペクトルを測定した。装置はオプションでシャトル測定装置が組み込まれている日本分

	Sample	reference
Pure-Water (Bulk-Water)	H <sub>2</sub> O+HDO	H <sub>2</sub> O
SDS solution	H <sub>2</sub> O+HDO+SDS	H <sub>2</sub> O+SDS

Table 1: sample solutions and reference solutions

光社製『FT-IR620』を使用した。測定条件は、窓板 CaF<sub>2</sub>、光路長 0.025mm の液体セルを使用し、積算回数 32 回、分解能 2cm<sup>-1</sup>、測定温度は 25.0(±1.0 度以内)とした。

### 結果

得られた  $\nu$ (O-D) と  $\nu$ (HOD) のスペクトルの SDS 濃度変化に対する波数のシフトを調べるためにスペクトルを二次微分した。Fig1~Fig4 では Pure-Water と SDS が最も高濃度のスペクトルのみ記載する。Fig1 には  $\nu$ (O-D)、Fig2 には  $\nu$ (HOD) をそれぞれ記載した。 $\nu$ (O-D) は、Pure-Water に比べてわずかであるが高波数シフトしている。また、 $\nu$ (HOD) は大きく形を変え、ピーク位置が低波数シフトしていることがわかった。

---

IR、ミセル、水素結合、CH $\cdots$ O 相互作用、SDS、濃度依存性

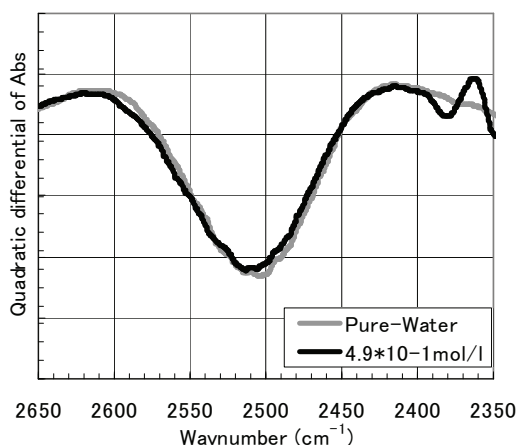


Fig.1 Quadratic differentials of spectra for  $\nu$  (O-D)

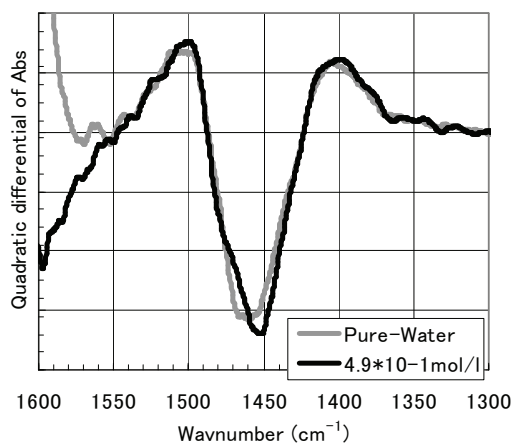


Fig.2 Quadratic differentials of spectra for  $\nu$  (HOD)

ミセル近傍の水(Surrounding Water)のスペクトルは直接測定することはできないので、得られた HDO のスペクトルは SDS の影響を受けた Surrounding Water と Bulk-Water の和であると考え。そうすると、SDS 溶液中の HDO スペクトルから、10~80%の Bulk-Water のスペクトルを数学的に差し引くことにより、Surrounding Water の HDO スペクトルが得られると考えた。サンプルの HDO スペクトルから求めた Surrounding Water のスペクトルと Pure-Water のスペクトルを比較した。ここでは Bulk-Water を 60%差し引いて解析したもののみ記載する(Fig3、Fig4)。Surrounding Water においても  $\nu$  (O-D)は高波数シフトしている。Surrounding Water の  $\nu$  (HOD)では、1450 $\text{cm}^{-1}$ の大きなピークと1480 $\text{cm}^{-1}$ の小さなピークの二つに分かれた。 $\nu$  (O-D)の高波数シフトと  $\nu$  (HOD)の低波数シフトしている 1450 $\text{cm}^{-1}$ のピークは水分子間の水素結合が弱まっていると説明できる。したがって、Iceberg structure はできていないことが結論できる。しかし、 $\nu$  (HOD)の高波数シフトは我々がこれまでに観測したいくつかの極性溶質水溶液の結果と同じで CH $\cdots$ O 相互作用を示唆している。<sup>1)</sup>

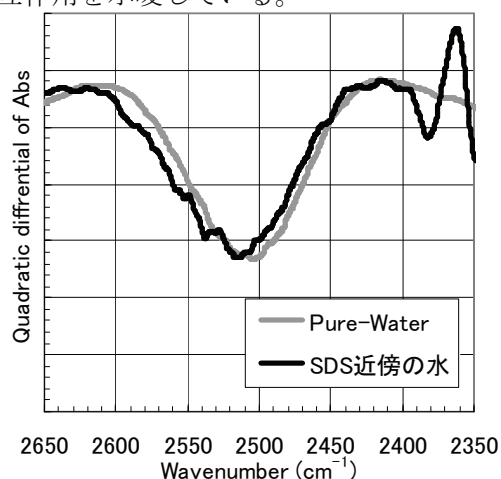


Fig.3 Quadratic differentials of  $\nu$  (O-D) for Surrounding Water

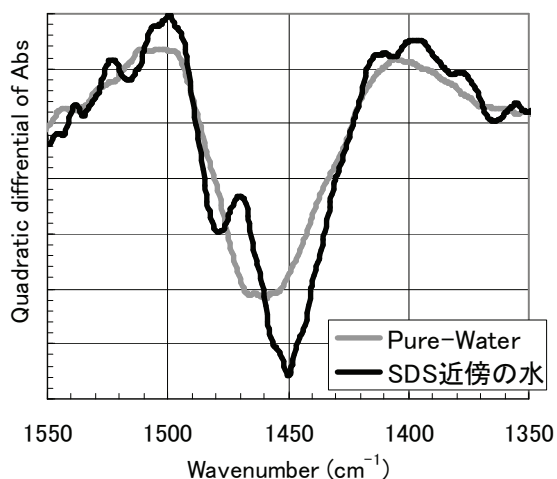


Fig.4 Quadratic differentials of  $\nu$  (HOD) for Surrounding Water

#### 参考文献

- 1) Mizuno, K. et al., J.Phys.chem.B,2009,113,113,906-915.