

생유기화학
(*Bioorganic Chemistry*)

Lipids and Detergents-II
(지질과 세제-2)

Soonchunhyang University

Department of Chemical Engineering

Prof. Jungkyun Im

순천향대

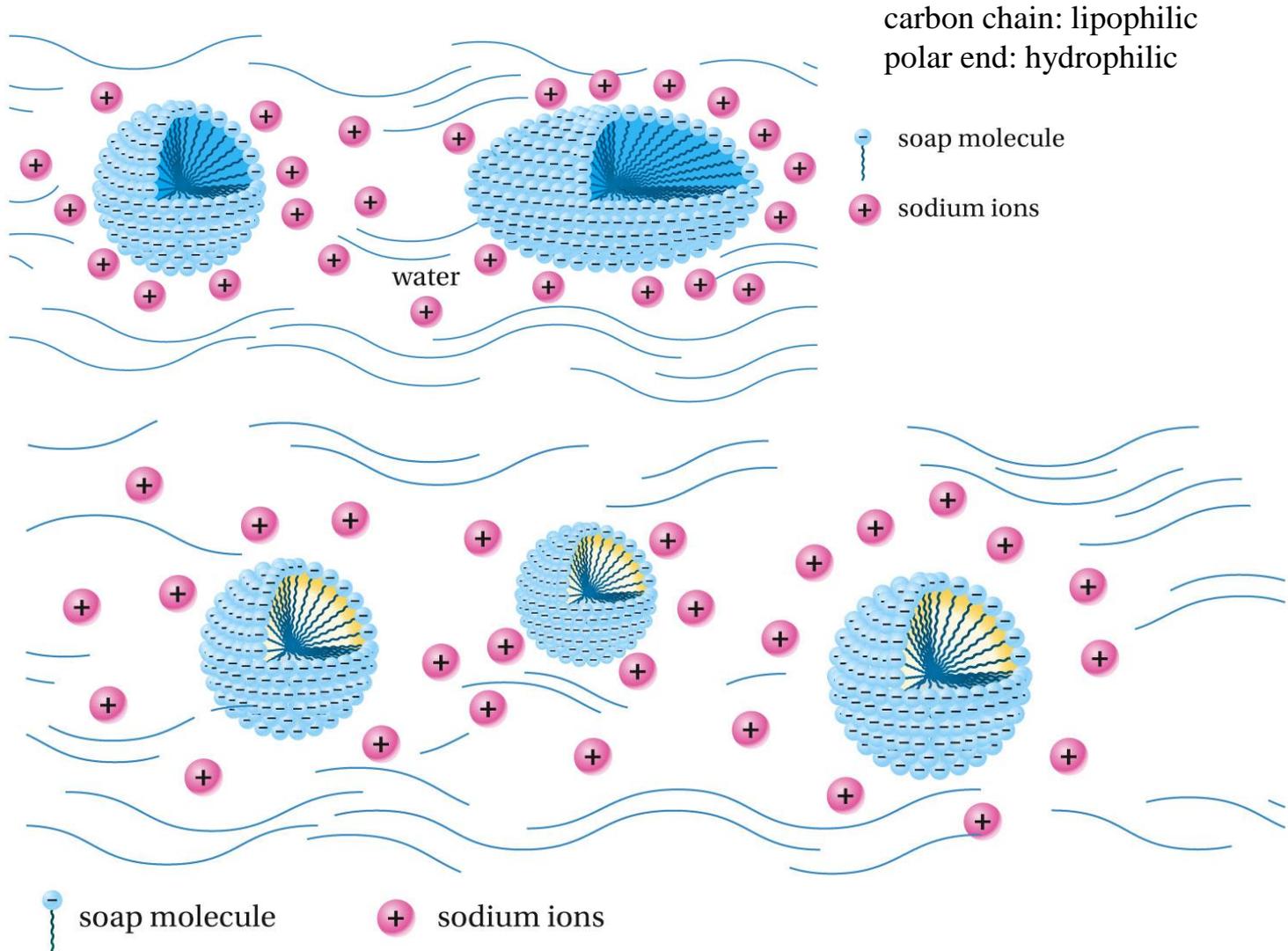
나노화학공학과

임정균 교수



4. How Do Soaps Work?

Soap molecules form globular aggregates in water, called micelles.
When soap is shaken with water it forms a colloidal dispersion-not a true solution.
Soaps belong to a class of substances called surfactants(계면활성제).



Soap solution has unusually low surface tension.

A soap solution has more “wetting” power than plain water.

Soaps belong to a class of substances called surfactants.

Surfactants: polar end and nonpolar parts, therefore act at the surfaces where different substances meet

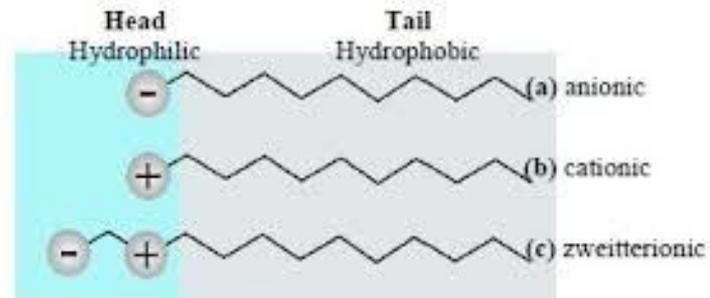
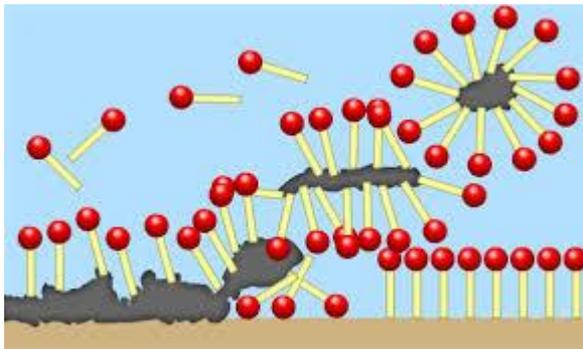


Fig. 1. Surfactant classification according to the composition of their head: (a) anionic (negatively charged), (b) cationic (positively charged) and (c) zwitterionic (two oppositely charged groups).

Soap

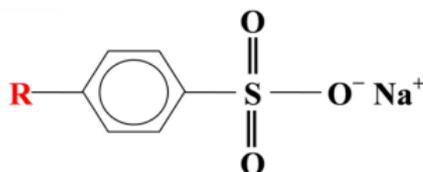
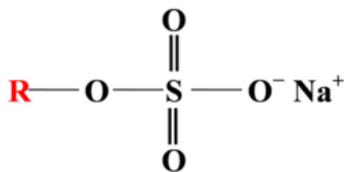
A sodium or potassium salt of long-chain **fatty acid**

General formula of soap:



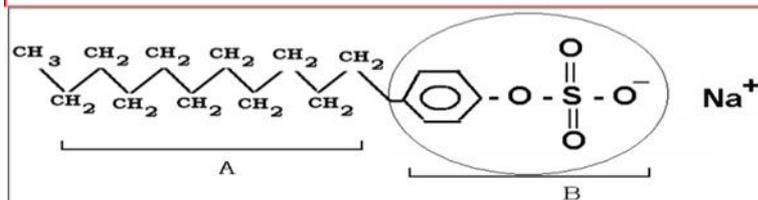
Detergent

A sodium or potassium salt of **alkyl sulphonic acids** or **alkylbenzene sulphonic acid**



- During the preparation of detergent, a long-chain hydrocarbon obtained from **petroleum fraction** is converted into an organic acid through a series of steps.
- The organic acid is then *neutralized* with **sodium hydroxide, NaOH** solution to produce a detergent.

STRUCTURE OF DETERGENT PARTICLE



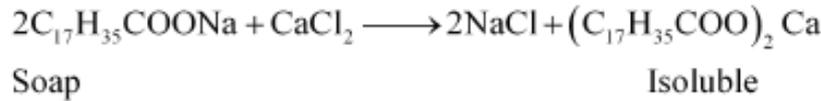
- the organic part
- the hydrophobic part
- the tail part

- the ionic part
- the hydrophilic part
- the head part

센물 [*hard water*, 경수(硬水)]

칼슘이온이나 마그네슘이온을 많이 포함한 물로 미끄러우며 비누가 잘 풀리지 않는다. 끓였을 때 단물로 바뀌는 물을 일시적 센물, 끓여도 단물로 바뀌지 않는 물을 영구적 센물이라 한다.

산이나 온천 등지에 놀러 가서 지하수로 빨래를 하거나 샤워를 하면 물에 비누가 잘 풀리지 않고, 씻어도 깨끗이 씻기지 않은 듯한 경험을 한 적이 있을 것이다.



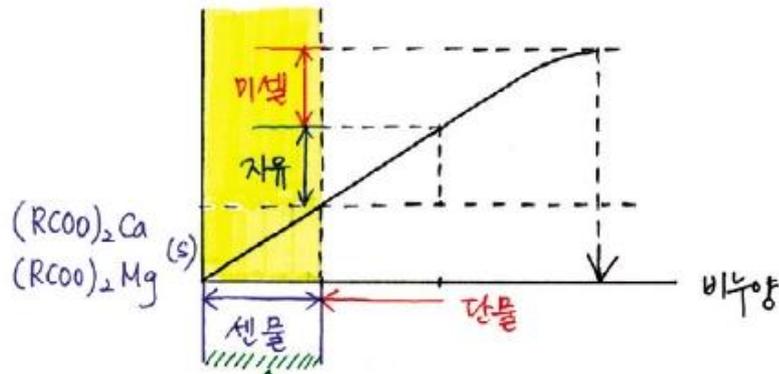
Isoluble
calcium stearate
(soap)

Scum(양금, 비누때) is insoluble in water.

Detergent는 scum을 형성하지 않고 센물에서 효과적이다.

단물 [*soft water*, 연수(軟水)]

칼슘이온이나 마그네슘이온을 적게 포함하고 있는 물로 강물이나 빗물, 수돗물, 증류수 등이 있다.

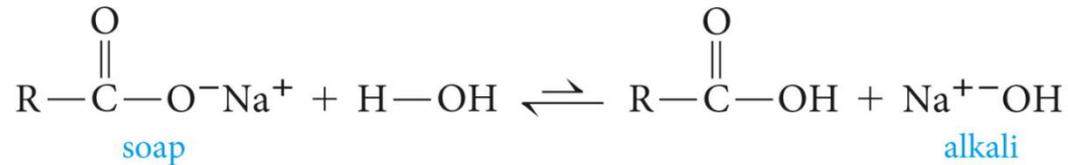


BENEFITS OF

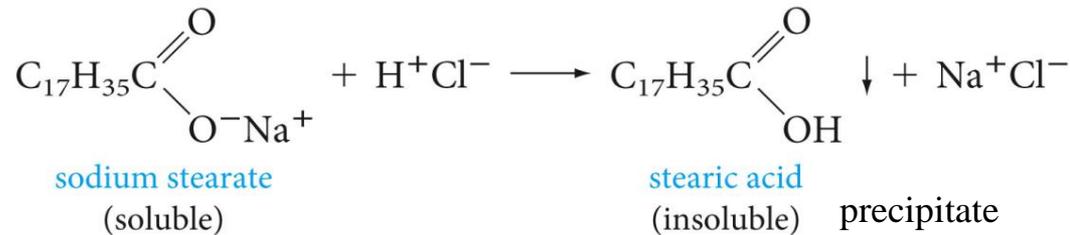
<u>HARD WATER</u>	<u>SOFT WATER</u>
<ul style="list-style-type: none"> • tastes great • supplies needed minerals in the diet • when rinsing soap - removes all traces of it 	<ul style="list-style-type: none"> • keeps water using/heating appliances clean and deposit free • Soap works better • it doesn't break water using appliances.

5. Synthetic Detergents (Syndets, 합성세제)

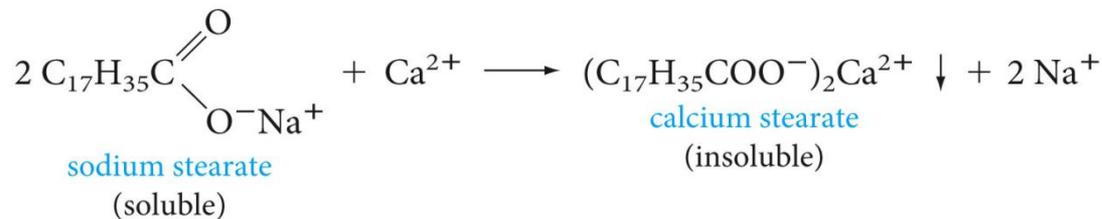
Syndets are designed to work well in hard water(센물, 경수, 지하수) and produce neutral solutions.



Soaps give somewhat alkaline solutions in water. Alkali can be harmful to certain fabrics.



비누는 산성 용액에서 작용을 못한다. Long-chain fatty acid는 침전이 되어서 scum을 형성한다.



비누는 경수에 존재하는 calcium, magnesium, ferric ion들과 만나면 불용성 염을 형성한다.

—————> 욕조나 옷깃 주위에 고리모양의 띠가 형성, 옷이나 머리를 dull look해보이는 필름 형성

경수

칼슘이온과 마그네슘이온을 중탄산염[Ca, Mg(HCO₃)₂], 염화물(Ca, MgCl₂), 유산염(Ca, MgSO₄) 등으로 해서 비교적 다량으로 포함하고 있는 경도(硬度)가 높은 물로 센물이라고도 한다. 석회암지대, 내륙분지의 호수나 지하수는 경수가 많다.

우리나라는 수도법상 음용수 수질기준을 총경도 300ppm 이하로 규정하고 있다. 경수는 보일러수로 쓸 경우 전열면에 스케일이 부착되고 세탁이나 목욕을 하면 거품이 일어나지 않고 뽀뽀해서 부적당하다. 끓이면 연수가 되는 일시경수와 끓여도 연수가 되지 않는 영구경수가 있다. 독일, 프랑스, 유럽 등지에는 석회암지대가 많아 경수가 대부분이라 일찍부터 맥주 공업이 발달되고, 경수가 많은 중국에도 물맛이 좋지 않아서 차를 마시는 습관이 생겨났다.

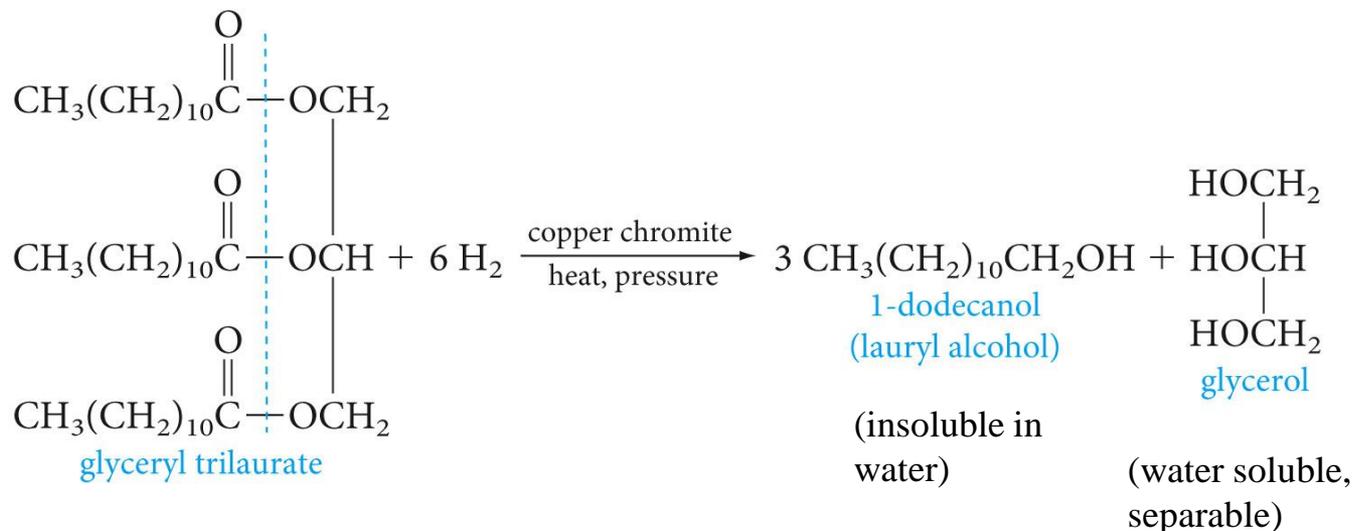
연수

칼슘이온과 마그네슘이온 함량이 적고 경도(硬度)가 낮은 물로 단물이라고도 한다. 공업용수를 다량으로 사용하고 있는 공장에서는 연화하여 특정 제품의 요구에 대응하고 있으며 보통 맑고 깨끗한 물로 경도, 철분, 유기물 등이 적은 물을 사용한다.

- 이온 교환 수지를 이용한 이온교환법을 통해 경수를 연화시켜 연수로 만들 수 있다. 이 때 Mg²⁺, Ca²⁺ 등은 Na⁺으로 대체 된다.
- Phosphates(인산염)을 세제에 첨가한다. 인산염은 금속 이온과 가용성의 complex를 형성하여 비누가 금속이온들과 불용성염을 형성하지 못하도록 한다. 그러나 인산염은 환경오염을 유발시키고, 인산염은 비료의 원료이기 때문에 강물을 녹조화 시켜서 물의 용존산소량을 떨어트린다. 인산염은 지금도 사용되고 있지만 많은 규제가 있어서 사용량은 제한적이다.
- 보통의 비누의 화학구조를 변화시켜 효과적인 합성세제로 만드는 것이다. 이 때 구조는 보통의 비누처럼 a long lipophilic chain과 polar 또는 ionic hydrophilic end를 가져야한다. 그러나 polar end는 금속 이온들과 만나서 불용성 염을 만들면 안된다. 물의 pH를 심하게 변동시켜서도 안된다.

Synthesis of Syndet-(1)

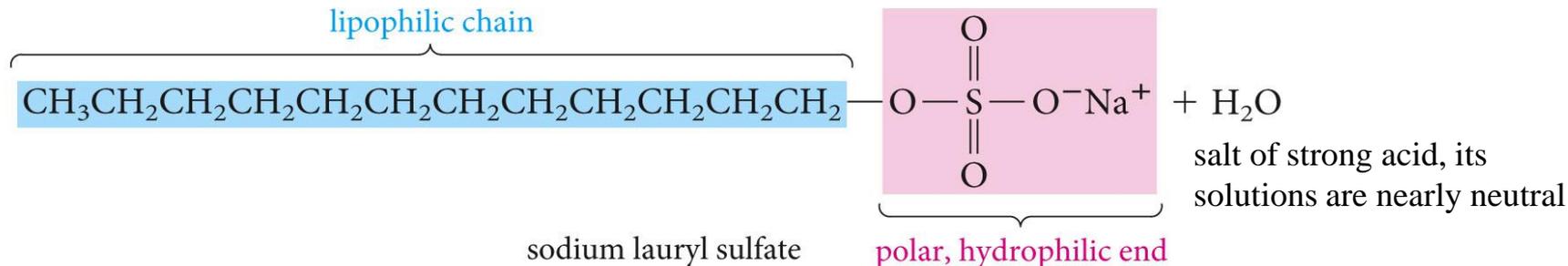
(1) 가수소 분해반응(hydrogenolysis)



(2) Sulfonation



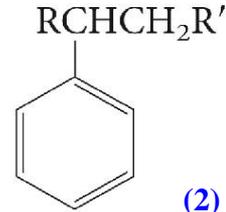
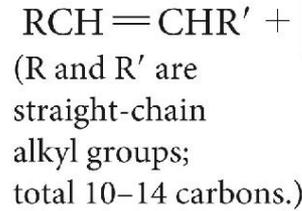
(3) Base treatment(neutralization) ↓ NaOH



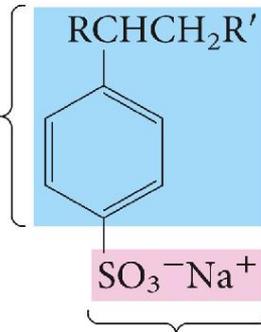
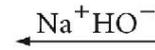
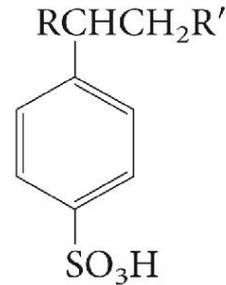
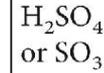
(no precipitation with metal ions, effective in hard as well as soft water)

Synthesis of Syndet-(2)

(1) Alkylation



(2) Sulfonation

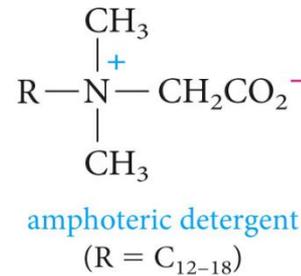
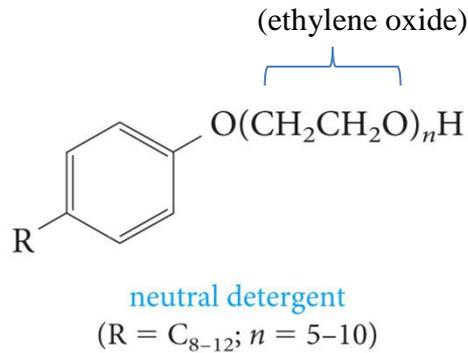
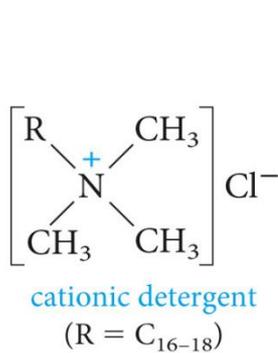


(3) Neutralization

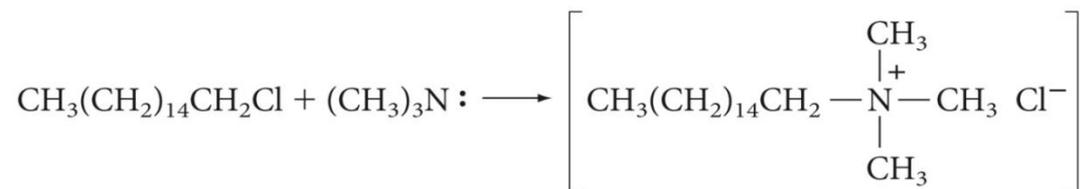
a sodium alkylbenzenesulfonate

It is nearly neutral.
Anionic syndet.

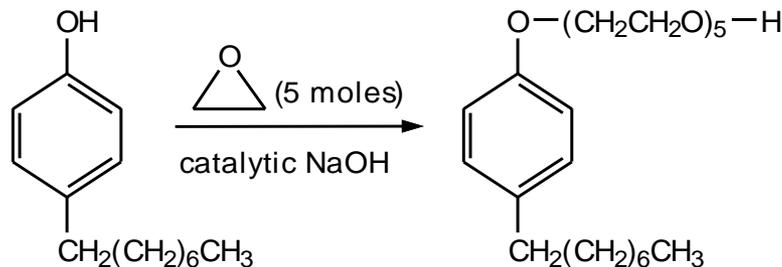
- Alkyl chains have no branches so that they are fully biodegradable and don't accumulate in the environment.



Example 3. Design a synthesis for the cationic detergent shown above ($R = C_{16}$)



Problem 5. Design a synthesis for the neutral detergent shown on the preceding page, starting with p-octylphenol and ethylene oxide ($R = C_8$, $n = 5$)



Problem 6. Design a synthesis for the amphoteric detergent shown on the preceding page, using S_N2 .

