

FTIR을 통한 손 세정제 제형의 살생물 효과 및 안전성 보장

Agilent Cary 630 FTIR 분광기를 사용한 간편하고
신뢰성 높은 페녹시에탄올 정량



저자

Adam Smith
SC Johnson Professional
Ripley, UK

Rob Wills
Agilent Technologies, Inc.
Stockport, UK

개요

퍼스널 케어 제품 제조업체는 사용자 안전을 보장하고 품질 관리 표준을 준수하기 위해 제품이 필수 사양을 충족하는지 확인해야 합니다. 본 연구에서는 단일 반사 다이아몬드 감쇠 전반사(ATR) 모듈이 장착된 Agilent Cary 630 FTIR 분광기를 사용하여 살생물 손 세정제 제형의 페녹시에탄올 함량을 신속하게 정량하는 분석법의 개발 과정을 설명합니다. 이 정량 분석법의 정확도, 정밀도 및 선택성/특이성을 평가한 결과, 살생물 손 세정제의 페녹시에탄올을 일상적으로 분석하는 데 적합한 것으로 확인되었습니다.

Cary 635 FTIR-
호환 가능한 콘텐츠

동일한 분석
값거나 더 나은 결과



소개

페녹시에탄올은 화장품에 일반적으로 사용되는 보존제이며, 살생물 제형에서 보조 살생물제로 사용할 수 있습니다. 완제품 제형에서 이 물질의 함량을 정량하는 것은 제품의 효과와 소비자 사용 시 안전성을 보장하는 데 중요합니다. 일반적으로 HPLC 분석법을 사용하여 분석하지만, FTIR은 다음과 같은 이점을 제공하는 대체 분석법입니다.

- **더 빠른 분석:** 시료 측정에는 HPLC 분석법의 30분에 비해 불과 몇 초밖에 걸리지 않으므로, 시간이 항상 중요하게 여겨지는 생산 실험실의 QC 환경에 매우 적합합니다.

- **비용 효율적:** 시료 전처리가 필요하지 않아 오류 가능성과 결과 도출 시간을 줄이고 분석당 비용을 절감할 수 있습니다.
- **더 간편함:** 기기 유지보수가 더 쉽고 공급품이 필요하지 않으며, 운전 적격성 평가(OQ) 검사를 자체적으로 수행할 수 있습니다.
- **더 경제적:** 초기 기기 투자 비용이 낮고 운영 비용도 크게 절감됩니다.

이 응용 자료에서는 5% 페녹시에탄올을 함유한 살생물 손 세정제에서 페녹시에탄올을 정량하기 위해 **Agilent Cary 630 FTIR 분광기**(그림 1 참조)를 사용하여 개발한 FTIR 기반 분석법을 설명합니다. 분석법 검증 절차에 대한 세부 정보도 포함되어 있습니다.



그림 1. 다이아몬드 ATR 모듈이 장착된 Agilent Cary 630 FTIR 분광기는 손 세정제 제품의 페녹시에탄올을 빠르고 간편하게 정량하는 데 이상적입니다.

실험

기기

이 응용에서는 **단일 반사 다이아몬드 ATR 모듈**이 장착된 Agilent Cary 630 FTIR 분광기를 사용했습니다. 측정 파라미터는 표 1에 나와 있습니다.

표 1. Agilent Cary 630 FTIR-ATR의 실험 파라미터.

측정 모드	흡광도
스펙트럼 범위(cm^{-1})	4000–650
백그라운드/시료 스캔 횟수	32
스펙트럼 분해능(cm^{-1})	8
대략적인 시료당 측정 시간(초)	10

Cary 630 FTIR은 초소형 설계에 견고성, 유연성 및 뛰어난 성능을 모두 갖추고 있어 일상적인 분석에 적합합니다. Cary 630 FTIR은 사용자 정렬이 필요하지 않은 샘플링 모듈을 사용해

빠르게 재구성할 수 있습니다. Agilent MicroLab 소프트웨어의 안내용 그림과 단계별 설명은 사용자가 전체 분석 워크플로우를 직관적으로 탐색할 수 있도록 하므로 시스템 사용이 더 쉬워집니다. 이 소프트웨어에서는 사용자가 식별 및 정량을 위한 분석법을 생성할 수 있습니다. 결과는 이해하기 쉬운 형식으로 표시되며, 사용자 지정 가능한 한계값을 기준으로 결과를 색상으로 구분하여 데이터를 빠르고 직관적으로 검토할 수 있습니다(그림 2).

시료 전처리

살생물성 손 세정제의 표준 시료는 페녹시에탄올이 정확히 2, 3, 4, 5 및 6%(w/w) 함유되도록 실험실에서 조제했습니다.

완제품의 제조 시점 규격은 페녹시에탄올 4.75-5.25% w/w입니다. 페녹시에탄올은 농도가 6%를 초과하면 더 이상 용해되지 않으므로, 표준 세트의 최고 농도로 6% w/w를 선택했습니다.



그림 2. Agilent MicroLab 소프트웨어와 Agilent FTIR 분광기를 사용하면 간단한 3단계로 분석을 수행할 수 있어 분석법을 간소화하고 교육 요구 사항을 최소화할 수 있습니다.

결과 및 토의

데이터 품질

데이터 품질은 시료 매트릭스 내 분석물질에 대한 기기 응답을 육안으로 검사하여 평가했습니다. MicroLab Quant 애플리케이션의 스펙트럼에서 볼 수 있듯이(그림 3 참조), 분석물질에 해당하는 피크가 명확하게 구분되고 인접 피크의 간섭을 받지 않아 피크 면적을 기반으로 분석물질을 정량 측정할 수 있습니다.

검량 직선성

원하는 분석 범위에서 기기 응답과 시료 매트릭스 내 분석물질 농도 사이에 직접적인 비례 관계가 있는 경우, 해당 분석 범위는 직선성을 나타냅니다. 직선성은 주어진 범위에서 시험 결과와 농도가 얼마나 잘 상관되는지를 나타냅니다. MicroLab Quant

애플리케이션을 사용하여 그림 3과 같이 피크 면적을 기반으로 하는 간단한 Beer-Lambert 법칙을 적용함으로써 기기 응답과 실제 농도의 관계를 나타내는 검량선을 즉시 생성했습니다. 검량선은 0.997보다 큰 상관계수(R^2)로 뛰어난 직선성을 나타냈습니다(그림 4).

검량선

살생물질 손 세정제의 5개 표준 시료를 각각 3회 반복 측정했습니다. 피크 면적과 농도 수준의 관계를 그래프로 나타낸 결과, R^2 값이 0.99764인 직선이 얻어졌습니다(그림 4). 이처럼 높은 상관계수는 하한 및 상한 농도 범위 내에서 미지 시료를 정량적으로 평가하기에 충분한 직선성을 나타냅니다. 소프트웨어는 검량선을 자동으로 생성하고 상관계수를 계산합니다.



그림 3. Agilent MicroLab Quant 애플리케이션을 사용하면 분석물질 정량에 가장 적합한 밴드를 식별하여 피크 위치, 피크 시작점 및 종료점과 같은 분석 파라미터를 최적화할 수 있습니다. 페녹시에탄올의 1250cm⁻¹ 밴드는 뚜렷하게 구분되므로 검량선 생성에 적합합니다.

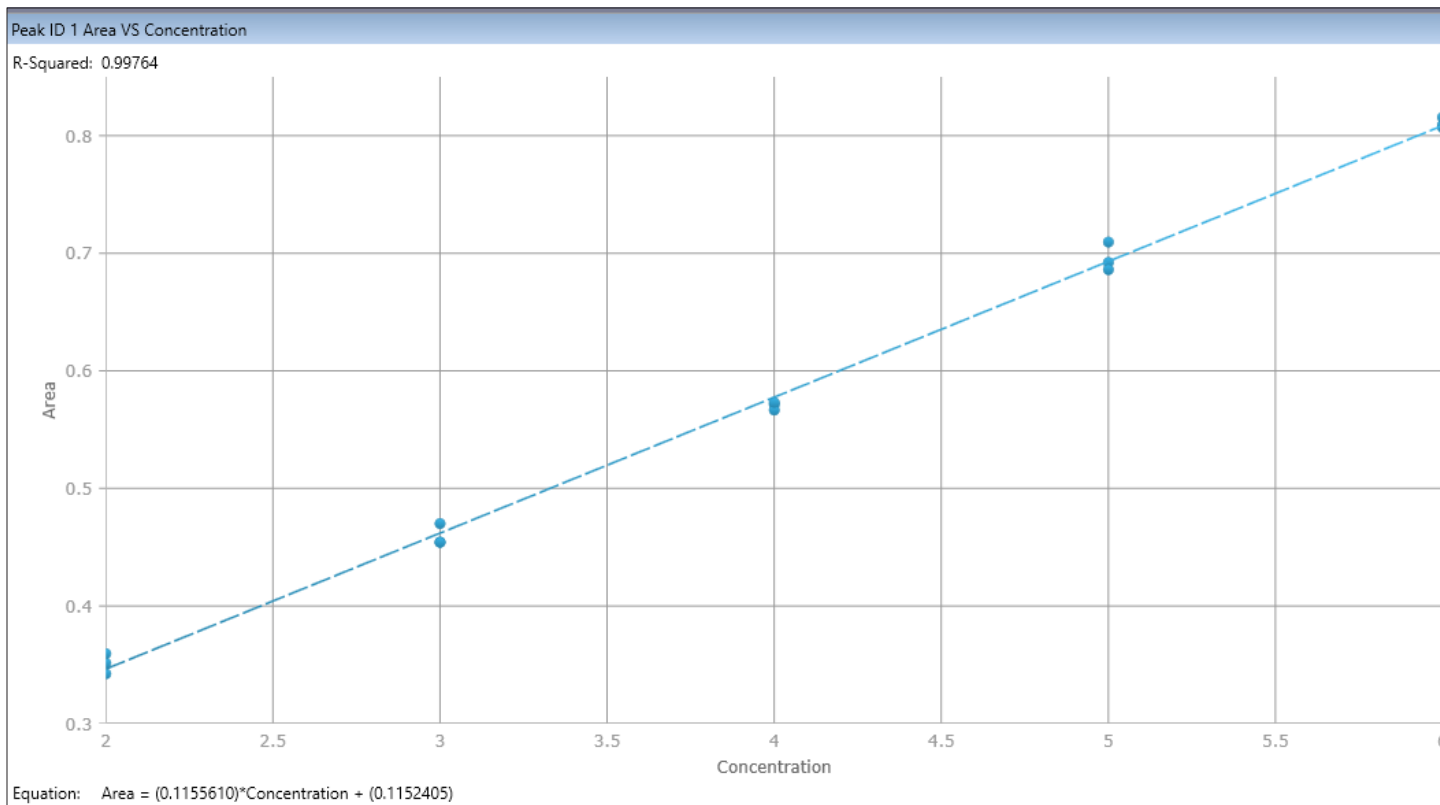


그림 4. Agilent MicroLab Quant 애플리케이션을 사용하여 검량선을 생성하고 FTIR 스펙트럼 응답의 직선성을 평가했습니다. 살생물성 손 세정제의 5개 표준 시료를 분석한 결과를 바탕으로 그림 3에 정의된 페녹시에탄올 피크를 사용하여 검량선을 생성했습니다.

정확도/회수율

분석 절차의 정확도는 참값 또는 허용된 기준값과 측정값이 얼마나 일치하는지를 나타냅니다. 정확도는 전체 정량 범위에 걸쳐 측정해야 합니다. 알려진 농도의 분석물질을 첨가한 시료 매트릭스에서 분석물질의 회수율(%)은 정확도를 측정하는 일반적인 지표입니다.

기기 응답을 기반으로 각 첨가 시료에서 측정된 분석물질의 양을 각 시료에 첨가한 분석물질의 양과 비교해야 합니다. 정확도/회수율은 첨가한 분석물질의 질량(g) 대비 회수된 분석물질의 질량(g)을 백분율로 계산합니다. 목표 분석물질 농도 5%의 경우, 평균 정확도/회수율은 이론적 분석물질 첨가량의 97-103% 범위에 있어야 합니다.

표 2는 페녹시에탄올 농도를 2-6% w/w 범위에서 1% w/w 간격으로 조제한 살생물성 손 세정제 시료에 대한 FTIR 분석법의 정확도/회수율을 보여줍니다. 각 시료를 3회 반복 측정하고 평균값을 사용하여 정확도/회수율을 계산했습니다. 모든 회수율이 $100 \pm 3\%$ 범위에 있어 분석법의 정확도가 확인되었습니다.

표 2. 분석법의 정확도와 회수율을 보여주는 살생물성 손 세정제 시료의 이론적 및 평균 측정 페녹시에탄올 함량.

이론적 페녹시에탄올 함량(% w/w)	측정된 평균 페녹시에탄올 함량(% w/w)	평균 정확도/회수율 (%)
2.00	2.06	102.77
3.00	2.98	99.26
4.00	3.93	98.33
5.00	5.03	100.54
6.00	6.01	100.24

정밀도(작업자 간)

정밀도는 동일한 시료 또는 시료 세트를 연속으로 측정한 결과가 서로 얼마나 근접하거나 일치하는지를 나타냅니다. 작업자 간 정밀도는 다른 분석자가 목표 농도의 100%에 해당하는 6개의 대체 용액 세트를 별도로 조제하고 분석하여 평가할 수 있습니다. 서로 다른 분석자가 서로 다른 기기를 사용하여 서로 다른 날에 얻은 시험 결과에서도 $\leq 2\%$ RSD의 정밀도 기준을 충족해야 합니다.

정밀도를 검증하기 위해 다른 실험실 직원이 새로 개발한 FTIR 분석법을 사용하여 5% w/w 페녹시에탄올이 함유된 살생물성 손 세정제 배치를 분석했습니다. 이 과정을 다른 분석자가 서로 다른 날에 여러 기기를 사용하여 6회 반복했습니다. 그 결과 $RSD \leq 1\%$ 로 뛰어난 정밀도를 나타냈습니다(표 3).

표 3. 서로 다른 날에 여러 기기를 사용하여 다른 분석자가 분석한 6개의 살생물성 손 세정제 시료의 페녹시에탄올 농도로, 분석법의 신뢰성과 정확성을 확인했습니다.

시료 번호	페녹시에탄올 함량(% w/w)
1	4.96
2	4.96
3	4.84
4	5.00
5	4.92
6	4.94
평균	4.94
표준편차	0.049
% RSD(정밀도)	0.99

선택성 및 특이성

분석법의 선택성/특이성은 분석물질이 포함되지 않은 공시료 매트릭스의 기기 응답과 알려진 양의 분석물질을 첨가한 공시료 매트릭스의 기기 응답을 비교하여 평가합니다. 이상적으로는 공시료 매트릭스에서 분석물질에 대한 기기 응답을 방해하는 기기 응답이 나타나지 않아야 합니다.

페녹시에탄올을 첨가하지 않은 살생물성 손 세정제 시료를 조제했습니다. 이 시료를 페녹시에탄올 정량 분석법으로 분석한 결과 0%로 나타났습니다. 그림 5에 제시된 이 결과는 해당 분석법이 특이성을 갖는다는 것을 보여줍니다.

정량 Cary 630 FTIR-ATR 분석법은 뛰어난 직선성, 정확도/회수율, 정밀도 및 선택성/특이성을 나타내어 페녹시에탄올 분석에 적합함을 보여줍니다.

MicroLab			
 Status: Ready		User:	Admin
		Method:	Phenoxyethanol Quant April 2022 AS
Results:			
Name	Value	Low Threshold	High Threshold
% Phenoxyethanol	0.000		

그림 5. 페녹시에탄올이 0% 함유된 공시료 매트릭스의 결과에서 매트릭스 간섭이 나타나지 않아 분석법의 특이성이 확인되었습니다.

살생물성 손 세정제 배치의 일상 분석

평가를 성공적으로 완료한 후 정량 모델을 MicroLab 분석법에 통합하고 허용 기준에 따라 합격/불합격 기준을 설정했습니다. 그런 다음 그림 6과 같이 결과를 해당 기준에 따라 색상으로

구분하여 데이터를 쉽게 분석하고 해석할 수 있도록 했습니다. Cary 630 FTIR 분석법은 살생물성 손 세정제 배치에 함유된 5% 페녹시에탄올의 QC를 위해 SC Johnson Professional QC 실험실에 도입되었습니다.

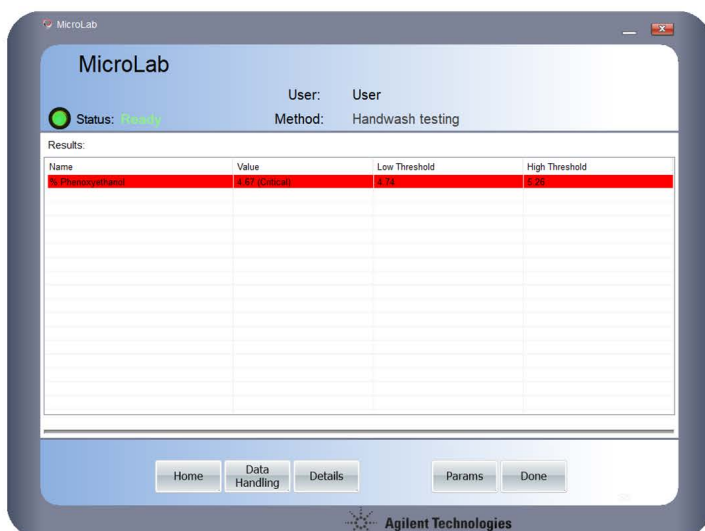
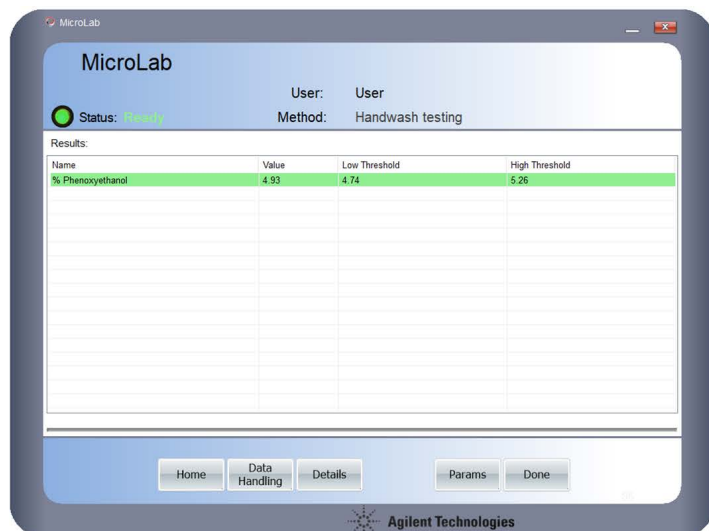


그림 6. Agilent Cary 630 FTIR-ATR 정량 모델을 Agilent MicroLab 소프트웨어 분석법에 통합하여 살생물성 손 세정제 배치의 일상 분석을 간소화할 수 있습니다. 소프트웨어는 데이터 수집 후 농도 백분율을 측정하고 조치 가능한 결과를 색상으로 구분하여 제공하며, 규격 내 시료는 녹색으로, 규격을 벗어난 시료는 빨간색으로 표시합니다.

결론

다이아몬드 ATR 모듈이 장착된 Agilent Cary 630 FTIR 분광기를 사용하여 살생물성 손 세정제 제형의 페녹시에탄올을 신속하게 정량하는 분석법을 개발하고 검증했습니다.

이 분석법은 특이성, 직선성, 정확성 및 정밀성이 우수한 것으로 확인되었습니다. 현재, Cary 630 FTIR은 5% 페녹시에탄올이 함유된 살생물성 손 세정제 제형의 제조 공정에서 SC Johnson Professional QC 실험실의 품질 관리에 사용되고 있습니다.

FTIR 분석법은 기존에 사용하던 HPLC 분석법을 대체했으며 분석 속도가 훨씬 빠릅니다. 또한 실험실 기술자가 훨씬 간편하게 수행할 수 있고 용매가 필요하지 않으며 화학 폐기물도 발생하지 않습니다. 결과를 이해하기 쉬운 색상으로 구분하여 데이터를 잘못 해석할 위험을 방지할 수 있으므로 Cary 630 FTIR은 QC 실험실의 합격/불합격 시험에 이상적인 도구입니다.

추가 정보

- Agilent Cary 630 FTIR 분광기
- Agilent MicroLab 소프트웨어
- Agilent MicroLab Expert 소프트웨어
- FTIR 분석 및 응용 가이드
- FTIR 분광학 기초 FAQ

www.agilent.com/chem/cary630

RA250605.384

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2025
2025년 8월 4일, 한국에서 인쇄
5994-8408KO

한국에질런트테크놀로지스㈜
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
DF타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090(고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com