

利用 FTIR 确保洗手液配方的杀菌效力和安全性

使用 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪轻松实现可靠的苯氧乙醇定量分析



作者

Adam Smith
SC Johnson Professional
Ripley, UK

Rob Wills
安捷伦科技有限公司
Stockport, UK

摘要

个人护理产品制造商必须确保其产品符合所需规格，以保障用户安全并符合质量控制标准。本研究介绍了使用配备单反射钻石晶体衰减全反射 (ATR) 附件的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪，开发用于快速定量测定杀菌洗手液配方中苯氧乙醇含量的方法。对该定量方法的准确度、精密度和选择性/特异性进行了评估，证实了其适用于杀菌洗手液中苯氧乙醇的常规分析。

Cary 635 FTIR
同样适用



同样的方法
同等或更好的结果

前言

苯氧乙醇是化妆品中常用的防腐剂，也可作为辅助杀菌剂用于杀菌配方。对成品配方中该物质的含量进行定量分析，对于确保产品的有效性和消费者使用安全性至关重要。通常采用 HPLC 方法进行分析，但 FTIR 提供了一种替代方案，具有以下优点：

- **分析速度更快：**样品测量仅需数秒，而 HPLC 方法需要 30 分钟，这对于时间至关重要的生产实验室 QC 环境而言十分适用

- **性价比高：**无需样品前处理，从而减少了出错的可能性，缩短了获得结果所需的时间，并降低了单次分析成本
- **操作更简便：**仪器更易于维护，无需消耗品，运行确认 (OQ) 检查可在实验室内部完成
- **成本更低：**初始仪器购置成本更低，运行成本也显著降低

本应用简报介绍了一种基于 FTIR 的分析方法，该方法使用 **Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪**（见图 1）定量分析含 5% 苯氧乙醇的杀菌洗手液中的苯氧乙醇含量。文中还提供了方法验证程序的详细信息。



图 1. 配备钻石晶体 ATR 附件的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪，是快速简便定量分析洗手液产品中苯氧乙醇的理想选择

实验部分

仪器

本应用使用配备单反射钻石晶体 ATR 附件的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪。测量参数列于表 1 中。

表 1. Agilent Cary 630 FTIR-ATR 的实验参数

测量模式	吸光度
光谱范围 (cm ⁻¹)	4000–650
背景/样品扫描次数	32
光谱分辨率 (cm ⁻¹)	8
每个样品的大致测量时间 (s)	10

Cary 630 FTIR 将耐用性、灵活性和高性能集成于超紧凑的设计中，因此非常适合常规分析。Cary 630 FTIR 可以快速重新配置采样附件，无需用户校准。为方便使用，Agilent MicroLab 软件

提供逐步图示引导，直观地引导用户完成整个分析工作流程。该软件采用一种基于方法的方案，允许用户创建用于鉴定和定量的方法。结果以易于理解的格式显示，并根据自定义限值对结果进行颜色标记，确保数据审核快速直观（图 2）。

样品前处理

在实验室配制杀菌洗手液标准样品，使苯氧乙醇含量精确为 2%、3%、4%、5% 和 6% (w/w)。

成品规格要求生产时苯氧乙醇含量为 4.75%–5.25% w/w。由于苯氧乙醇浓度超过 6% 时不再溶解，因此选择 6% w/w 作为标准样品的最高浓度。



图 2. 使用 Agilent MicroLab 软件和安捷伦 FTIR 光谱仪，通过三个简单步骤即可完成分析，从而简化方法并有效减少培训需求

结果与讨论

数据质量

通过目视检查仪器对样品基质中分析物的响应情况，评估数据质量。如 MicroLab Quant 应用程序中的光谱（见图 3）所示，分析物对应的峰清晰明确，且不受相邻峰干扰，因此可以根据峰面积对分析物进行定量测量。

校准线性

当仪器响应与样品基质中分析物浓度在所需范围内呈直接正比关系时，即认为该分析范围是线性的。线性是指测试结果在给定范围内与浓度的相关程度。使用 MicroLab Quant 应用程序，基于比尔-朗伯定律，根据峰面积（如图 3 所示）即可快速生成校准曲线 — 仪器响应与实际浓度的关系图。校准曲线显示出良好的线性，相关系数 (R^2) 值大于 0.997（图 4）。

校准曲线

对五种杀菌洗手液标准样品各进行三次重复测量。对峰面积和浓度水平作图，得到一条 R^2 值为 0.99764 的直线（图 4）。如此高的相关系数证明线性足够高，可以定量评估浓度范围下限和上限之间的未知样品。该软件可自动生成校准曲线并计算相关系数。

准确度/回收率

分析方法的准确度定义为真实值或公认参考值与测量值之间的接近程度。准确度应在整个定量范围内进行测定。加标样品基质中已知浓度分析物的回收率百分比，是衡量准确度的典型指标。

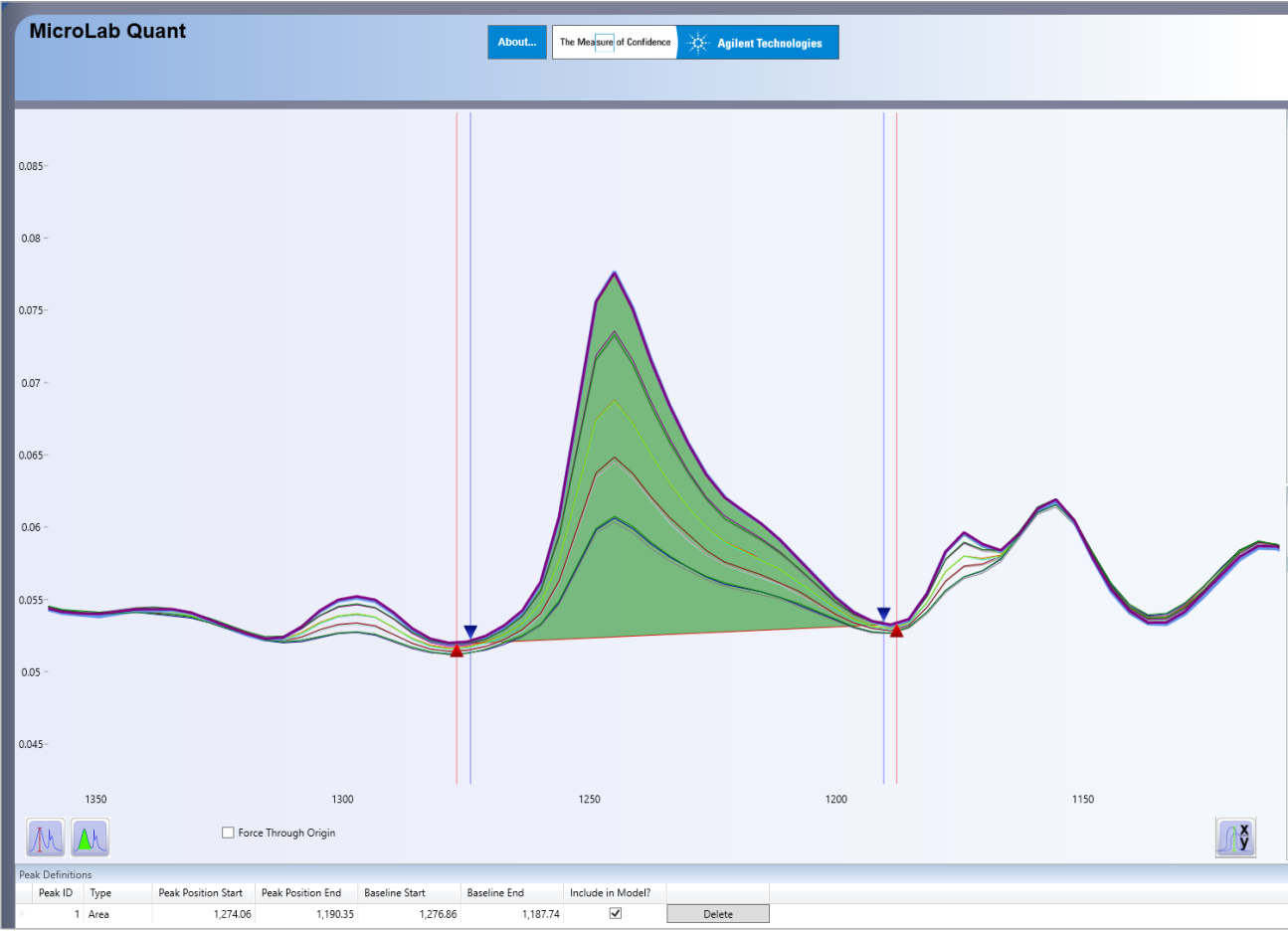


图 3. Agilent MicroLab Quant 应用程序可以识别最适合分析物定量分析的谱带，从而优化峰位置、峰起点和终点等分析参数。苯氧乙醇在 1250 cm^{-1} 处的谱带特征显著，适合用于生成校准曲线

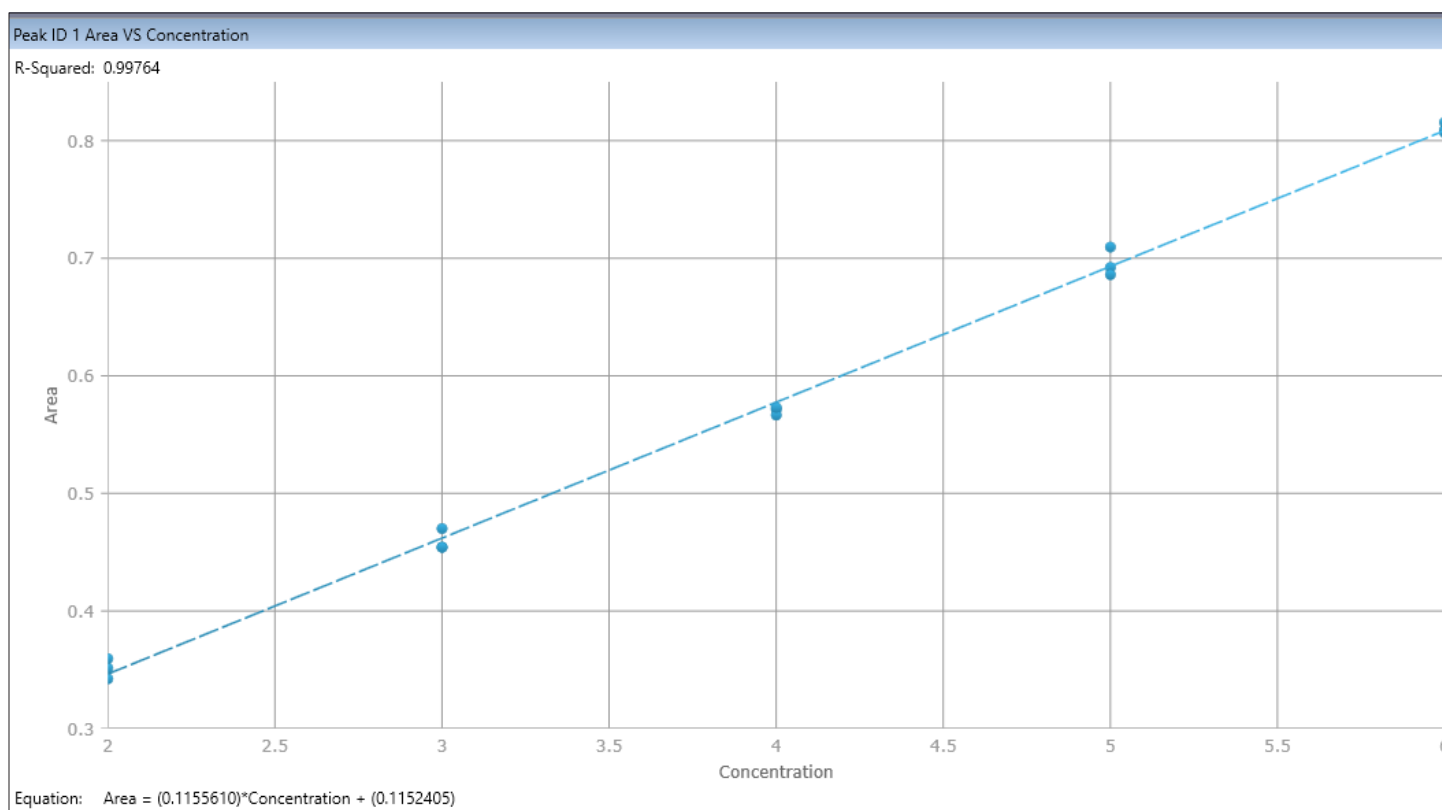


图 4. 使用 Agilent MicroLab Quant 应用程序生成校准曲线，并评估 FTIR 光谱响应的线性。基于图 3 中苯氧乙醇的峰定义，通过对五种杀菌洗手液标准样品的分析生成校准曲线

根据仪器响应测得各加标样品中分析物含量，应与各样品中分析物的加标量进行比较。准确度/回收率以从加标分析物克数中回收的分析物克数百分比来计算。对于 5% 的目标分析物浓度，平均准确度/回收率应在理论加标分析物含量的 97%–103% 之间。

表 2 显示了 FTIR 方法分析苯氧乙醇浓度为 2%–6% w/w（以 1% w/w 递增）的杀菌洗手液样品时的准确度/回收率。每个样品进行三次重复测量，并使用平均值计算准确度/回收率。所有回收率均在 $100 \pm 3\%$ 范围内，证实了该方法的准确性。

表 2. 杀菌洗手液样品中苯氧乙醇的理论含量和实测平均含量，证明了分析方法的准确度和回收率

理论苯氧乙醇含量 (% w/w)	实测苯氧乙醇平均含量 (% w/w)	平均准确度/回收率 (%)
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

精密度（不同操作人员之间）

精密度是对一样品或同一组样品进行一系列测量所得结果的接近程度或一致性。不同操作人员之间的精密度评估方式为：由其他分析人员配制并分析六份浓度为 100% 目标浓度的替代溶液。由不同分析人员在不同日期使用不同仪器获得的测试结果，仍应满足精密度 $\leq 2\%$ RSD 的要求。

为验证精密度，另一位实验室工作人员使用新创建的 FTIR 方法分析了一批含 5% w/w 苯氧乙醇的杀菌洗手液。此过程由另一位分析人员在不同日期、使用多台仪器重复进行六次。结果表明该方法具有优异的精密度， $RSD \leq 1\%$ （表 3）。

表 3. 由不同分析人员在不同日期使用不同仪器分析的六份杀菌洗手液样品中的苯氧乙醇含量，确保了方法的可靠性和准确性

样品编号	苯氧乙醇含量 (% w/w)
1	4.96
2	4.96
3	4.84
4	5.00
5	4.92
6	4.94
平均值	4.94
标准偏差	0.049
%RSD（精密度）	0.99

选择性和特异性

方法的选择性/特异性，通过比较空白样品基质（不含分析物）的仪器响应与加入已知量分析物的空白样品基质的仪器响应来确定。理想情况下，空白样品基质不应产生干扰分析物仪器响应的信号。

配制一份不含苯氧乙醇的杀菌洗手液样品。使用苯氧乙醇定量方法分析该样品时，返回结果为 0%。图 5 所示的结果表明该方法具有特异性。

Cary 630 FTIR-ATR 定量方法表现出优异的线性、准确度/回收率、精密度和选择性/特异性，充分证明其适用于苯氧乙醇分析。

MicroLab

Status: Ready

User: Admin

Method: Phenoxyethanol Quant April 2022 AS

Results:

Name	Value	Low Threshold	High Threshold
% Phenoxyethanol	0.000		

图 5. 含 0% 苯氧乙醇的空白样品基质结果显示无基质干扰，证明了方法的特异性

杀菌洗手液批次的常规分析

评估成功后，将该定量模型集成到 MicroLab 方法中，并根据可接受标准建立了合格/不合格判定标准。随后，软件会对结果进行相应的颜色标记，以便于进行数据分析和解读，如图 6

所示。SC Johnson Professional 的 QC 实验室已采用 Cary 630 FTIR 方法，用于对杀菌洗手液批次中的 5% 苯氧乙醇进行质量控制。



图 6. 将 Agilent Cary 630 FTIR-ATR 定量模型集成到 Agilent MicroLab 软件方法中，简化了杀菌洗手液批次的常规分析。该软件可在数据采集后确定百分比浓度，并提供经颜色标记的有指导意义的结果，以绿色表示合格样品，以红色表示不合格样品

结论

使用配备钻石晶体 ATR 附件的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪，建立并验证了一种可快速定量分析杀菌洗手液配方中苯氧乙醇的分析方法。

本方法具有出色的特异性、线性、准确度和精密度。SC Johnson Professional 的 QC 实验室现已使用 Cary 630 FTIR 对含 5% 苯氧乙醇的杀菌洗手液配方进行生产过程质量控制。

FTIR 方法比其替代的原有 HPLC 方法速度快得多。实验室技术人员操作起来也更简便，无需溶剂，不产生化学废液。易于理解的颜色标记结果消除了数据误读的风险，使 Cary 630 FTIR 成为 QC 实验室进行合格/不合格测试的理想工具。

更多信息

- Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪
- Agilent MicroLab 软件
- Agilent MicroLab Expert 软件
- FTIR 分析与应用指南
- FTIR 光谱基本原理 — 常见问题解答

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278，400-820-3278（手机用户）

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com/chem/cary630

RA250605.384

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2025

2025 年 8 月 4 日，中国出版

5994-8408ZHCN