

## FTIR 분광법을 사용한 플라스틱 파편 물질의 빠르고 간편한 식별

ATR을 포함한 Agilent Cary 630 FTIR을 사용하여  
해변에서 채취한 시료 속 폴리머 물질 식별



### 저자

Wesam Alwan 및  
Fabian Zieschang  
Agilent Technologies, Inc.

### 서론

합성 플라스틱의 발명, 개발 및 초기 생산 단계에서는 그 생산량이 소량이었으므로 폐플라스틱 처리 및 관리가 비교적 수월했습니다. 그러나 지난 수십 년 동안 플라스틱 생산은 다른 어떤 재료의 생산보다 빠르게 늘었습니다. 오늘날 매년 약 4억 톤의 플라스틱 폐기물이 발생하고 이 폐기물의 상당 부분이 자연 환경으로 버려집니다.<sup>1</sup>

최근의 일부 연구에서 연구자들은 플라스틱 오염이 해변 생태계를 포함한 육상 생태계에 어떤 영향을 미치는지 조사했습니다.<sup>2,3</sup> 플라스틱 폐기물과 미세 플라스틱 입자를 식별할 수 있는 분석 방법의 발전은 플라스틱 오염이 환경에 미치는 영향을 이해하기 위한 중요한 단계입니다.

푸리에 변환 적외선(FTIR) 분광법은 신뢰할 수 있는 성능, 고품질 데이터 및 비용 효율적인 분석을 제공하므로 다양한 유형의 플라스틱 식별에 매우 적합합니다. 본 연구는 연구자들이 **Agilent Cary 630 FTIR 분광기**(그림 1)가 제공하는 워크플로를 이용하여 플라스틱 파편 물질을 얼마나 간단히 식별할 수 있는지 보여줍니다. 워크플로에는 시료 전처리, 라이브러리 생성, 샘플 분석 및 데이터 보고가 포함됩니다.



그림 1. 다이아몬드 감쇠전반사(ATR) 모듈에 결합된 Agilent Cary 630 FTIR 분광계.

## 실험

### 샘플

플라스틱 파편은 호주 빅토리아의 Mordialloc Beach에서 무작위로 수집되었습니다. 그 중 환경에서의 분해를 육안으로도 확인할 수 있는 총 9개의 시료가 이 연구를 위해 선택되었습니다(그림 2).



그림 2. Agilent Cary 630 FTIR 분광기를 사용한 호주 해변에서 수집한 플라스틱 폐기물 분석.

### 기기

Diamond ATR 모듈과 결합되고 Agilent MicroLab 소프트웨어로 제어되는 Cary 630 FTIR 분광기가 이 연구에 사용되었습니다(그림 1). 분석자는 Agilent MicroLab 소프트웨어에서 그림 기반 인터페이스로 구성된 분석 단계를 따를 수 있습니다. 다이아몬드 결정과 샘플 접촉을 최대화하기 위해 블레이드(~2mm)를 사용하여 각 경질 플라스틱 시료의 얇은 절편을 생성했습니다. 시료를 플랫폼에 올려놓고 표 1에 제공된 작동 파라미터를 사용하여 FTIR-ATR로 직접 측정했습니다.

### 라이브러리 생성

플라스틱 파편 시료는 플라스틱 산업에서 사용되는 가장 일반적인 폴리머의 ATR 스펙트럼을 포함하는 사용자 생성 폴리머 라이브러리를 참조하여 식별되었습니다. 이 라이브러리는 폴리스티렌, 폴리프로필렌, 고밀도 및 저밀도 폴리에틸렌, 폴리에틸렌 테레프탈레이트, 폴리염화비닐, 폴리카보네이트, 폴리(메틸메타크릴레이트), 폴리옥시메틸렌, 폴리아미드 및 폴리테트라플루오로에틸렌이 포함된 폴리머 시료 키트(Scientific Polymer Products, Inc., 카탈로그 번호 205, LOT 번호 600801012)를 사용하여 개발되었습니다.

유사성 검색 알고리즘을 사용한 라이브러리 검색이 수행되었습니다(표 1). 스펙트럼 라이브러리는 MicroLab 소프트웨어에서 쉽게 생성, 유지 및 관리할 수 있습니다. 새 라이브러리의 생성에 소요되는 시간은 몇 초에 불과합니다. 라이브러리에는 언제든지(스펙트럼 생성 시 또는 결과 화면에서 직접 등) 스펙트럼을 추가할 수 있습니다.

표 1. Agilent Cary 630 FTIR-ATR 작동 파라미터.

파라미터	설정
분석법	라이브러리 검색
사용된 라이브러리	사용자 생성 폴리머 라이브러리(Agilent Internal Mini)
검색 알고리즘	유사
스펙트럼 범위	4,000~650cm <sup>-1</sup>
백그라운드 스캔	64
시료 스캔	64
스펙트럼 분리능	4cm <sup>-1</sup>
백그라운드 수집	공기
색상으로 구분된 신뢰 수준 임계값	초록색(높은 신뢰도): >0.95 노랑색(중간 신뢰도): 0.90~0.95 빨간색(낮은 신뢰도): <0.90

## 결과 및 토의

서로 다른 시료는 그림 2에 표시된대로 뚜렷히 다른 색상을 띠었으나, 9개의 플라스틱 파편 시료 중 8개는 폴리프로필렌, 나머지 1개는 고밀도 폴리에틸렌으로 확인되었습니다. 폴리프로필렌 결과에 대한 히트 품질 지수(HQI)는 0.94651에서 0.99405 범위였으며, 고밀도 폴리에틸렌에 대한 HQI는 표 2에서 볼 수 있듯이 0.97110이었습니다.

HQI는 각 라이브러리 항목에 대해 자동으로 계산되며, 그 값은 측정된 스펙트럼과 라이브러리 스펙트럼이 얼마나 잘 매칭되는지를 의미합니다. 이러한 HQI는 종종 재료 식별에서 합격/불합격의 기준으로 사용되기도 합니다. 이 연구에 적용된 사용자 정의 기준은 표 1(색으로 구분된 신뢰 수준 임계값)에 설명되어 있습니다.

표 2. 풍화된 플라스틱 잔해 샘플에 대한 물질 식별 결과 요약.

시료명	이미지	물질 식별	히트 품질 지수(HQI)
청록색 플라스틱		Polypropylene	0.98133
녹색 플라스틱		Polypropylene	0.94651
황색 플라스틱		Polypropylene	0.98414
청색 플라스틱 1		고밀도 폴리에틸렌	0.97110
청색 플라스틱 2		Polypropylene	0.99405
주황색 플라스틱 1		Polypropylene	0.98940
적색 플라스틱		Polypropylene	0.97501
주황색 플라스틱 2		Polypropylene	0.98414
청색 플라스틱 3		Polypropylene	0.99034

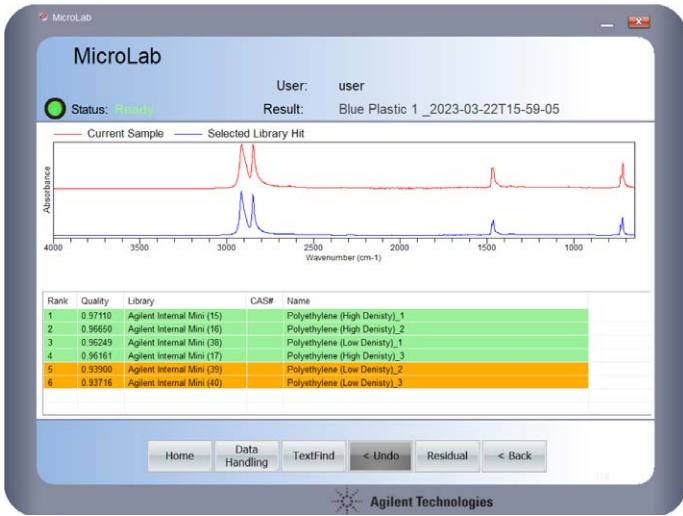


그림 3. Agilent Cary 630 FTIR 분광계의 플라스틱 파편(적색 트레이스) 및 라이브러리 히트(청색 트레이스) 정성 분석의 예입니다. 표에는 히트 품질, 사용된 라이브러리 및 각 샘플의 히트 이름이 표시됩니다. HQI를 기반으로 결과를 색상 코딩하여 신뢰 수준을 정의하는 데 사용할 수 있으므로 사용자가 결과를 해석하는 데 도움이 되고 간과하여 오류로 이어질 수 있는 가능성을 줄일 수 있습니다.

그림 3과 같이 각 시료에 대해 얻은 색상으로 구분된 재료 식별 결과가 화면에 표시되어 쉽게 해석할 수 있습니다. 이 기능은 FTIR 시스템이 빠른 의사 결정이 가능한 터키 솔루션으로 전환하는 것을 가능하게 합니다.

Cary 630 FTIR 분광계는 그림 기반 인터페이스를 사용하여 시료 도입부터 보고까지 분석 단계를 안내하는 **MicroLab 소프트웨어**를 사용하여 제어됩니다(그림 4).

ATR 모듈이 장착된 Cary 630을 사용하여 사용자가 쉽게 업데이트하고 최적화할 수 있는 라이브러리를 생성할 수 있습니다. MicroLab은 또한 다양한 분석 요구 사항을 수용할 수 있는 여러 라이브러리 검색 알고리즘을 제공하여 기기의 유연성을 추가합니다.



- ① 분석 시작
- ② 그림 기반의 소프트웨어 지침을 따름
- ③ 색상 차이를 이용한 즉각적 수신 실행 가능한 결과

그림 4. Agilent Cary 630 FTIR 분광계와 직관적인 Agilent MicroLab 소프트웨어 워크플로를 통해 빠르고 쉽게 질문에 대한 답을 찾을 수 있습니다. 그림 기반 소프트웨어는 또한 교육 필요성을 줄이고 사용자 기반 오류의 위험을 최소화합니다.

## 환경 연구를 위한 애질런트 솔루션

애질런트는 현장, 실험실, 원격 환경의 실외에서 플라스틱 및 미세플라스틱을 분석하여 즉각적이고 실시간으로 결과를 제공하는 벤치탑 및 휴대가 간편한 핸드헬드의 다양한 기기를 제공함으로써 전 세계적으로 플라스틱 및 미세플라스틱 연구를 발전시키고 있습니다. Agilent Cary 630 FTIR Spectrometer 외에 애질런트에서 제공하는 기기는 다음과 같습니다.



**Agilent 8700 LDIR(레이저 직접 적외선) 화학 이미징 시스템**  
미세플라스틱을 위한 화학 이미징과 스펙트럼 분석을 새로운 차원으로 격상시킵니다.



**Agilent 4300 핸드헬드 FTIR 분광기**

인체 공학적 가벼운 설계, 사용 편의성, 견고성 및 유연성을 하나의 시스템에 채택한 최초의 기기입니다.



**Agilent 4500 시리즈 휴대용 FTIR 분광계**

화학, 석유 화학, 식품, 폴리머 산업에서 반입 물질과 반출 완제품에 대한 현장 분석.



**Agilent 5500 시리즈 소형 FTIR 분광기**

날마다 빠르고 안정적으로 정확한 결과를 제공하도록 설계된 소형 현장 분석기입니다.

## 결론

ATR 샘플링 모듈이 장착된 Agilent Cary 630 FTIR 분광계를 사용하여 호주 해변에서 수집한 열화 플라스틱 파편 시료 9개를 빠르고 간단하게 식별할 수 있었습니다.

그림으로 안내되는 직관적인 Agilent MicroLab 소프트웨어는 분석법을 설정하고 일반적으로 사용되는 폴리머의 표준 시료를 기반으로 사용자 생성 라이브러리를 구축하는 데 사용되었습니다. Cary 630 FTIR에서 획득한 시료 스펙트럼은 폴리머 라이브러리의 스펙트럼과 자동으로 비교되었으며 소프트웨어는 사용자 정의 히트 품질 신뢰 한계를 기반으로 폴리머 유형을 식별했습니다.

이 연구에서는 ATR이 장착된 Cary 630 FTIR을 간단한 방법으로 용도에 맞게 조정하여 폴리머 유형의 폐플라스틱을 신속하게 식별할 수 있음을 보여주었습니다.

## 추가 정보

- Agilent Cary 630 FTIR 분광기
- Agilent MicroLab 소프트웨어
- Agilent MicroLab Expert 소프트웨어
- FTIR 분석 및 응용 가이드
- FTIR 분광기 기초 관련 자주 묻는 질문(FAQ)
- ATR-FTIR 분광기 개요
- 미세플라스틱 기술 관련 FAQ

## 참고 문헌

1. United Nations Environment Program, Our Planet is Choking on Plastic, accessed April **2023**, <https://www.unep.org/interactives/beat-plastic-pollution/>
2. Andrady, A. L. Weathering and Fragmentation of Plastic Debris in the Ocean Environment, *Mar. Pollut. Bull.*, **2022**, 180:113761. doi: 10.1016/j.marpolbul.2022.113761. Epub 2022 Jun 1. PMID: 35665618
3. Lavers, J. L.; Rivers-Auty, J.; Bond, A. L. Plastic Debris Increases Circadian Temperature Extremes in Beach Sediments., *J. Hazard Mater.*, **2021**, 15; 416: 126140. doi: 10.1016/j.jhazmat.2021.126140. Epub 2021 May 17. PMID: 34492929

[www.agilent.com/chem/cary630](http://www.agilent.com/chem/cary630)

DE4704429

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2023  
2023년 5월 17일, 한국에서 발행  
5994-5986KO

한국에질런트테크놀로지스(주)  
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,  
A+ 에셋타워 9층, 06621  
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)  
팩스: 82-2-3452-2451  
이메일: [korea-inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:korea-inquiry_lsca@agilent.com)