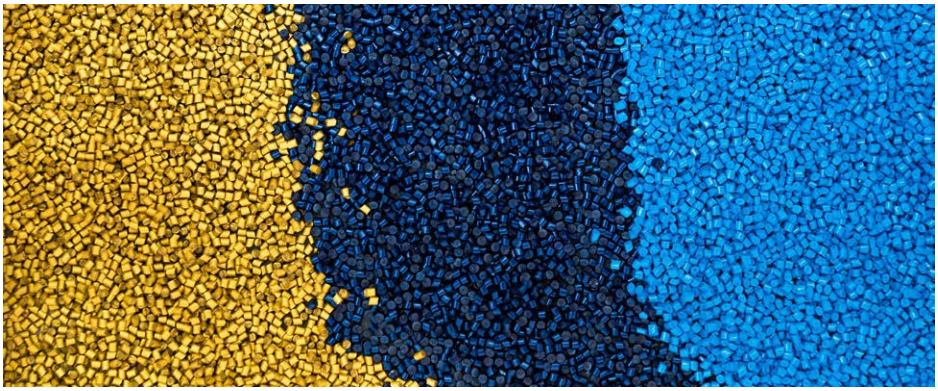
응용 자료

재료

FTIR 분광기를 통한 플라스틱 재료의 식별

ATR이 포함된 Agilent Cary 630 FTIR을 이용한 플라스틱의 폴리머 유형 식별



저자

Wesam Alwan과
Fabian Zieschang
Agilent Technologies, Inc.

서론

플라스틱이 일상 생활에서 얼마나 널리 사용되고 있는지를 생각해 본다면 플라스틱의 사용 주기에 자세히 알아 볼 필요가 있습니다. 땅에서 추출된 원유와 천연가스는 에탄과 프로판과 같은 여러 탄화수소 제품으로 정제됩니다.[1] 이 제품은 플라스틱 펠릿 또는 너들의 시재료(원재료) 또는 구성 요소 역할을 하며, 플라스틱 제품을 생산하는 데 쓰입니다. 최종 제품에 따라 플라스틱 사출, 성형 기계, 블로잉과 같은 다양한 공정을 이용하여 너들의 모양과 크기를 정할 수 있습니다. 플라스틱 완제품으로는 음료수와 액체 병, 포장재, 유아용품, 장난감, 섬유, 건축재 등이 있으며 각종 시료를 포함해 쓰이지 않는 분야가 없을 정도입니다.[2]

플라스틱 제품은 이용한 후에는 재활용하거나 매립지나 소각장에서 폐기물로 처리할 수 있습니다. 플라스틱 수거 및 폐기 관행에 허점이 있다면 폐기물은 결국 환경으로 흘러들어갈 수 있습니다(그림 1). 쓰레기를 버리거나 플라스틱 쓰레기를 부적절하게 폐기하는 행위도 환경 내 플라스틱 양을 증가시킵니다.

그림 1에 설명된 각 단계에서 재료 식별은 플라스틱 산업에서 널리 수행되는 중요한 품질 보증 또는 안전 관리 분석입니다. 사전 생산 및 생산된 재료를 분석하여 최종 제품이 의도된 목적에 필요한 품질과 순도를 충족하는지 확인합니다. 따라서 재료 식별은 많은 산업 표준에 명시된 요구 사항입니다. 재활용 센터에서 플라스틱 폐기물을 식별하는 데 동일한 테스트 기술이 점점 더 많이 이용되고 있으며, 재활용 플라스틱의 품질을 유지하고 환경에서 수거한 플라스틱 쓰레기를 식별하도록 도와줍니다.

퓨리에 변환 적외선(FTIR) 분광법은 서로 다른 유형의 플라스틱을 식별하는 데 적합하며, 신뢰할 수 있는 고품질 데이터와 비용 효율적인 분석을 제공합니다. 이 응용 자료에서는 Agilent Cary 630 FTIR 분광기(그림 2)가 플라스틱의 수명 주기 전반에 걸쳐 재료 식별을 위한 간편한 워크플로를 제공하는 방법을 중점적으로 설명합니다.

그림 2. 다이아몬드 감쇠 전반사(ATR) 모듈과 결합된 Agilent Cary 630 FTIR 분광기.

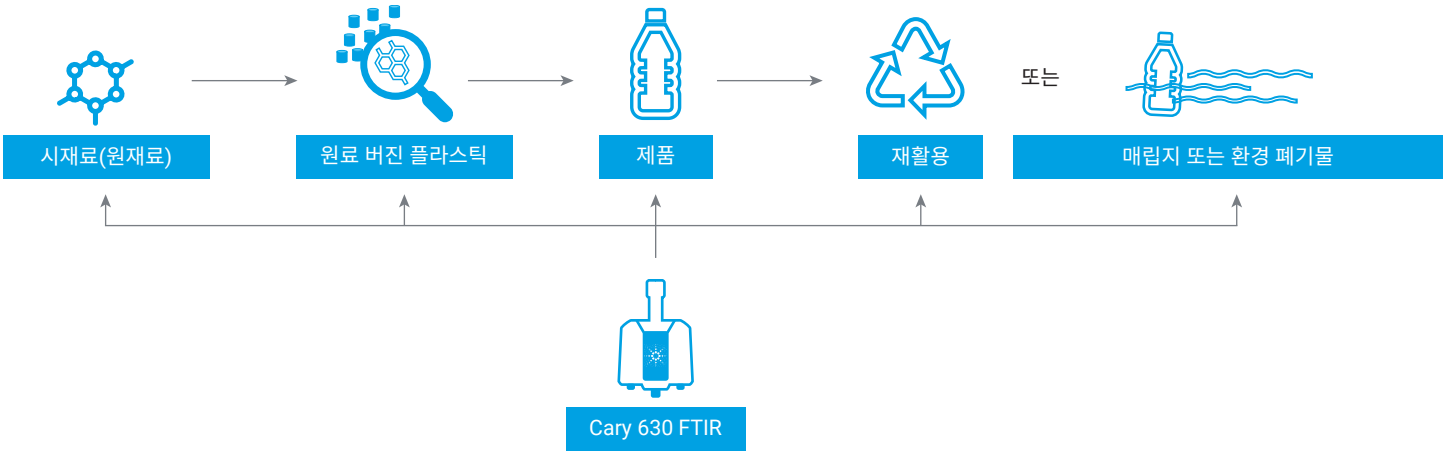


그림 1. 플라스틱의 수명 주기. 플라스틱 수명 주기의 각 단계에서 재료 식별은 신뢰할 수 있는 품질 관리를 보장하고 시재료(원재료)와 완제품에 대한 정확한 안전 요건을 제공합니다. Agilent MicroLab 소프트웨어가 포함된 Agilent Cary 630 FTIR은 다양한 시료 유형의 재료 식별 워크플로를 빠르고 쉽고 안정적으로 수행하는 데 이용할 수 있습니다.

실험

시료: 이 연구에서는 5개의 시료를 이용하여 플라스틱의 생산, 이용, 재활용, 폐기의 4단계를 다뤘습니다.

1. 가소제 - 시재료(원재료).
2. 너들 - 플라스틱 원료.
3. 커피 뚜껑 - 플라스틱 제품.
4. 물병 - 재활용 제품.
5. 플라스틱 쓰레기 - 호주 빅토리아주 모르디알록 해변에서 무작위로 채취한 것.

기기: 이 연구에는 다이아몬드 ATR 모듈과 결합된 Cary 630 FTIR 분광기가 이용되었습니다(그림 2).

소프트웨어: Cary 630 FTIR 분광기는 Agilent MicroLab 소프트웨어로 제어되며, 이 소프트웨어는 그림 인터페이스를 통해 사용자에게 시료 주입부터 보고까지의 분석 단계를 안내합니다(그림 3).

라이브러리 생성: 시료 1은 Agilent ATR 데모 라이브러리를 통해 식별했습니다. 시료 2~5는 폴리머 시료 키트(Scientific Polymer Products, Inc., 카탈로그 번호 205, 로트 번호 600801012)를 이용하여 개발된 사용자 생성 폴리머 라이브러리를 통해 식별했습니다. 사용자 생성 스펙트럼 라이브러리에는 플라스틱 업계에서 가장 일반적으로 이용되는 폴리머의 ATR 스펙트럼이 포함되어 있으며, 여기에는 다음이 포함됩니다.

- Polystyrene(PS)
- Polypropylene(PP)
- High- and low-density polyethylene(HDPE and LDPE)
- Polyethylene terephthalate(PET)
- Polyvinyl chloride(PVC)
- Polycarbonate(PC)
- Poly (methyl methacrylate)(PMMA)
- Polyoxymethylene(POM)
- Polyamide(PA)
- Polytetrafluoroethylene(PTFE)

1 분석 시작

2 그림 기반의 소프트웨어 지침을 따름

3 색상으로 구분된 실용적 결과 즉시 수신

그림 3. 직관적인 Agilent MicroLab 소프트웨어를 이용하면 Agilent Cary 630 FTIR 분광기로 쉽게 답을 찾을 수 있도록 해줍니다. 그림을 통해 안내되는 이 소프트웨어는 교육의 필요성을 낮추고 사용자의 오류 위험을 최소화합니다.

라이브러리 검색 방법은 표 1에 나타낸 파라미터를 이용하여 Similarity 검색 알고리즘을 적용했습니다. 스펙트럼 라이브러리는 MicroLab 소프트웨어에서 쉽게 생성, 유지 및 관리할 수 있습니다. 새 라이브러리는 몇 초 만에 생성 가능합니다. 스펙트럼은 생성 시 또는 결과 화면에서 언제든지 라이브러리에 직접 추가할 수 있습니다.

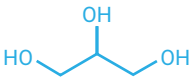
표 1. Agilent Cary 630 FTIR–ATR 작동 파라미터.

파라미터	설정
분석법	라이브러리 검색
이용된 라이브러리	사용자 생성 폴리머 라이브러리(Agilent Internal Mini) 및 Agilent ATR 데모 라이브러리
검색 알고리즘	유사성
스펙트럼 범위	4,000~650cm^{-1}
백그라운드 스캔	64
시료 스캔	64
공간 분해능	4cm^{-1}
백그라운드 수집	공기
색으로 구분된 신뢰도 수준 임계값	초록색(높은 신뢰도): >0.95 노랑색(중간 신뢰도): 0.90~0.95 빨간색(낮은 신뢰도): <0.90

결과 및 토의

다이아몬드 ATR 샘플링 모듈이 장착된 Cary 630 FTIR을 이용하여 플라스틱의 수명 주기를 대표하는 시료 다섯 가지를 찾아냈습니다. 유사성 알고리즘을 이용하여 사용자 생성 라이브러리 스펙트럼 라이브러리를 검색한 결과, 다섯 시료 모두 검색 결과 품질 지수(HQI)가 0.97 이상으로 확인되었습니다. 1은 이론적으로 가장 높은 값입니다. 표 2에서 볼 수 있듯이 HQI 값은 0.99599(가소제, glycerol), 0.99621(플라스틱 너들, LDPE), 0.97809(커피 뚜껑, PS), 0.98622(물병, PET), 0.98940(풍화된 플라스틱, PP)이었습니다.

표 2. Agilent Cary 630 FTIR-ATR 및 유사성 검색 알고리즘을 이용하여 얻은 플라스틱 소재 식별 분석 결과 요약.

시료명	이미지	재료 식별	검색 결과 품질 지수
가소제 (시재료(원재료))		Glycerol	0.99599
플라스틱 너들 (원료)		LDPE	0.99621
플라스틱 제품 (커피 뚜껑)		PS	0.97809
재활용 플라스틱 (물병)		PET	0.98622
풍화된 플라스틱 (폐기물)		PP	0.98940

Cary 630 FTIR에서 생성된 데이터를 쉽게 검토할 수 있도록 각 시료에서 얻은 재료 식별 결과는 사용자가 정의한 신뢰 수준 임계값에 따라 색상으로 구분되어 있습니다(그림 4). 이 연구에서 HQI가 0.95 이상인 결과는 녹색으로 표시되며, 스펙트럼이 잘 일치하고 재료 식별에 대한 확신을 줄 수 있음을 나타냅니다. 결과를 색상으로 구분하면 Cary 630 FTIR 시스템이 이용하기 쉬운 턴키 솔루션으로 전환되어 빠른 의사 결정을 내릴 수 있습니다.

그림 4. 5개의 플라스틱 시료(빨간색 선)과 라이브러리 검색(파란색 선)의 Agilent Cary 630 FTIR 분광기 정성 분석. 표에는 각 시료의 검색 품질, 이용된 라이브러리, 검색 이름이 나와 있습니다. (A) 가소제, (B) 너들, (C) 커피 뚜껑, (D) 물병, (E) 풍화된 플라스틱.

결론

Agilent Cary 630 FTIR 분광기는 플라스틱을 만드는 데 이용되는 원료부터 재활용 및 폐플라스틱에 이르기까지 재료 식별에 이용하기 쉬운 솔루션이었습니다.

Cary 630 FTIR 및 MicroLab 소프트웨어를 통하면 폴리머 라이브러리를 빠르고 쉽게 생성하여 가소제, 너들, 컵 뚜껑, 재활용 물병, 플라스틱 해변 쓰레기를 빠르게 식별할 수 있습니다. 다섯 시료 모두 검색 결과 품질 지수(HQI)가 0.97 이상으로 확인되었으며, 1은 이론적으로 가장 높은 값입니다. MicroLab 소프트웨어는 HQI를 기반으로 식별 결과에 색상으로 구분하는 방식을 적용하여 데이터의 품질을 빠르고 쉽게 검토할 수 있습니다.

본 연구에서는 제조업체, 재활용 업체 또는 환경 연구자들이 필요로 하는 시료의 재료 식별을 위한 ATR 샘플링 모듈이 장착된 Cary 630 FTIR의 유연성이 확인되었습니다.

참고 문헌

1. Rhodes, C. J. Plastic Pollution and Potential Solutions, *Sci. Prog.*, **2018** *101(3)*, 207–260. doi: 10.3184/003685018X15294876706211. Epub 2018 Jul 19. PMID: 30025551.
2. British Plastic Federation, Plastics Applications, accessed May 2023, https://www.bpf.co.uk/plastipedia/applications/Default.aspx

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

www.agilent.com

DE43093893

이 정보는 예고 없이 변경될 수도 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2023

2023년 6월 6일, 한국에서 발행
5994-6145KO

한국애질런트테크놀로지스㈜
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

Agilent
Trusted Answers