

Application News

No. A637K

FTIR/Fourier Transform Infrared Spectrophotometer

FTIR을 이용한 알코올 손소독제의 에탄올함량 분석 및 간단한 Pass/Fail 판정(Determination of Ethanol Content in and Simple Fail/Pass Judgment of Alcohol Hand Sanitizer by FTIR)

알코올을 함유한 손소독제의 효과는 제품에 사용된 알코올의 종류와 농도에 따라 차이가 있다. 미국질병통제예방센터(CDC)는 60 - 95 %의 알코올이 함유된 손소독제를 가장 효과적인 조성으로 추천했다.

살균능력을 가지고 있는 에탄올은 시중에서 판매가능한 알코올성 손소독제의 최적 농도로 만들어진다. USP(미국약전)에서는 알코올 농도를 측정하기 위한 방법으로 증류법 또는 가스크로마토그래피(GC)을 규정하고 있다. 이러한 방법은 샘플당 20 분 이상의 분석시간이 소요되며, 희석과 같은 전처리 또한 필요하다. 이와 대조적으로 푸리에변환 적외선 분광광도계(이하 FTIR)을 사용할 경우, 전처리 단계의 생략이 가능하며, 알코올 손소독제의 에탄올 함량을 약 1분 내에 신속하게 확인할 수 있다.

이 뉴스레터에서는 Lab Solutions™ IR에서 기본으로 제공하는 측정 기능을 사용하여 시판되고 있는 손소독제의 에탄올 함량에 대해 간단한 Pass/Fail 을 판정한 내용에 대해 소개한다.

□ 실험

무수에탄올을 물에 첨가하여 70 vol %, 82 vol % 농도의 표준물질을 조제하였다. 샘플은 <그림 1>과 같이 QATR™-S (diamond crystal)가 장착된 단일반사 ATR 액세서리를 이용하여 IRSpirit™로 측정하였다. 분석조건은 <표 1>과 같으며, <그림 2>와 같이 마이크로피펫을 이용하여 샘플의 양이 20 - 30 µL 가 되게 ATR crystal 위에 올리고, 농도변화에 영향을 주는 시료의 휘발을 최소화 하기위해 즉시 휘발방지커버를 덮었다. 에탄올 표준용액의 IR 스펙트럼은 <그림 3>과 같으며, 1086 cm⁻¹과 1044 cm⁻¹(초록 선)에서의 에탄올 피크 높이와, 3340 cm⁻¹과 1650 cm⁻¹(파란 선)에서의 물의 피크 높이가 농도에 따라 다른 것을 확인할 수 있다.

표 1. 분석 조건

Instrument	: IRSpirit, QATR-S(Diamond)
Resolution	: 4 cm ⁻¹
Accumulation	: 20
Apodization	: Sqr-Triangle
Detector	: DLATGS



그림 1. QATR™-S가 장착된 IRSpirit™ FTIR

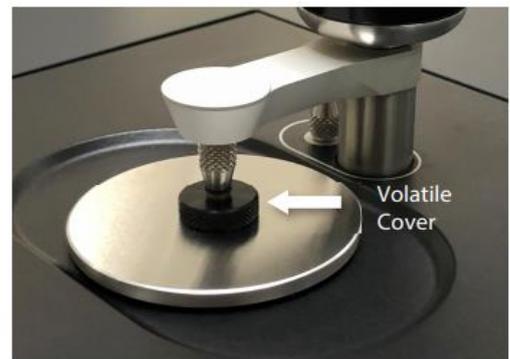


그림 2. 휘발방지커버가 장착된 QATR™-S

표 2. 에탄올 손소독제의 표시함량 및 측정결과 pass/fail 판정

샘플	제품에 표기된 에탄올 함량	Pass/Fail 판정
A	58 vol%	Fail
B	65 vol%	Fail
C	70 vol%	Pass
D	76.9 ~ 81.4vol%	Pass

□ Labsolutions IR을 이용한 Pass/Fail 판정

알코올 소독제의 품질을 유지하기 위해서 소독제 내 성분들의 농도를 조절하는 것이 중요하다. 일반적으로 농도를 알고 있는 시료와 농도를 관리해야 하는 시료의 스펙트럼을 분석하여 피크의 높이나 면적으로 관리대상 시료의 농도를 추정한다. 또한 측정된 농도는 분석자가 직접 pass/fail 판정을 해야한다. 이러한 과정은 시간이 걸릴 뿐 아니라 분석자의 실수에 의해 영향을 받을 수 있기에 주의해야 한다.

Lab Solutions IR에 기본으로 설치된 측정 기능은 특정 파수/파장에서 흡광 또는 투과도를 결정하여, pass/fail 판정 수식을 통해 결과를 계산할 수 있다. 이 기능은 작업시간을 크게 단축할 수 있다.

이 기능을 이용하여 <표 2>와 같이 시중에서 판매되고 있는 (A-D) 4 종류의 에탄올 손소독제를 판정하였으며, 샘플은 전처리나 희석없이 분석하였다. 측정 기능 화면은 <그림 4>와 같다. pass/fail 판정기능의 수식은 <그림 4>와 같이 "Equation tab(빨간색 테두리)"에 설정되어 있다. 이 분석에서는 에탄올 농도를 계산하기 위해 Baseline에서 1044cm⁻¹(C-O 스트레칭 진동)까지의 높이를 사용했다. (Baseline 위치: 1110cm⁻¹ - 1020cm⁻¹).

Pass/fail 판정 수식은 농도 70 vol%(Baseline 에서 피크까지의 높이: 0.301) - 82 vol%(Baseline 에서 피크까지의 높이: 0.348)의 샘플이 pass로 판정되고 나머지는 fail로 판정하도록 설정하였다. 샘플 스펙트럼 측정 후, 측정 결과를 판정하기 위해 데이터는 <그림 4>에 보여지는 sample table(파란색 테두리)"에 자동으로 추가된다. <표 2>와 같이 설정된 기준 농도보다 낮은 시료 A와 B가 Fail로 판정되었다.

IR 스펙트럼의 측정결과(확대뷰)는 <그림 5>와 같다. 에탄올(검정색 선)의 피크 높이를 이용하여 에탄올 농도 또한 추정할 수 있다.

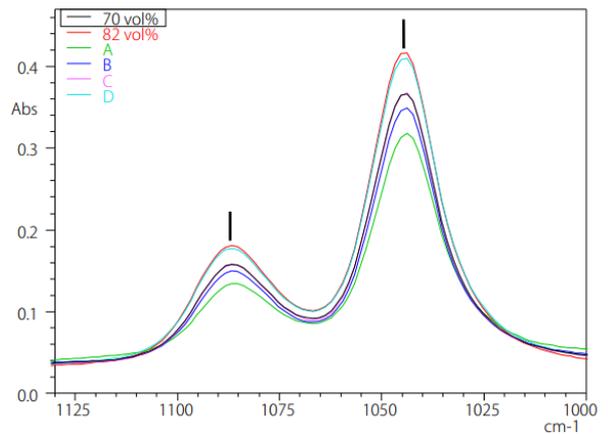


그림 5. IR 스펙트럼 측정결과(확대뷰)

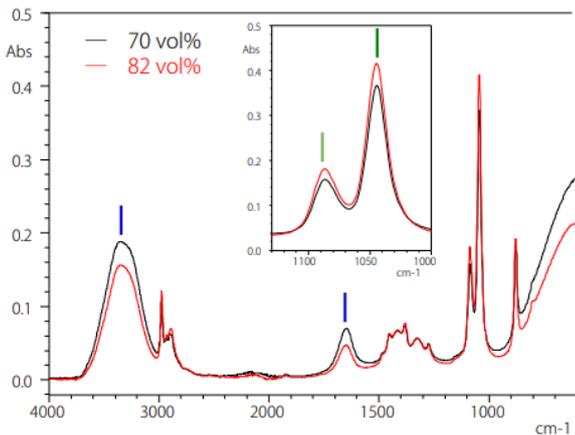


그림 3. 에탄올 표준용액의 IR 스펙트럼(70, 82 vol%)

□ 결론

IRSpirit과 QATR-S를 이용하면, 시료 단 한방울로 소독제 내 에탄올 함량을 쉽게 확인할 수 있다. 또한, 에탄올 함량은 Labsolutions IR 소프트웨어의 측정기능을 이용하여 쉽고 정확하게 pass/fail 여부를 판정할 수 있으며, 이 기능을 이용하면 판정을 포함한 분석시간을 줄일 수 있다. 소독제 내의 주요 성분인 에탄올 품질 관리를 통해 제품사기나 가짜 물질에 대한 우려를 없앨 수 있다.

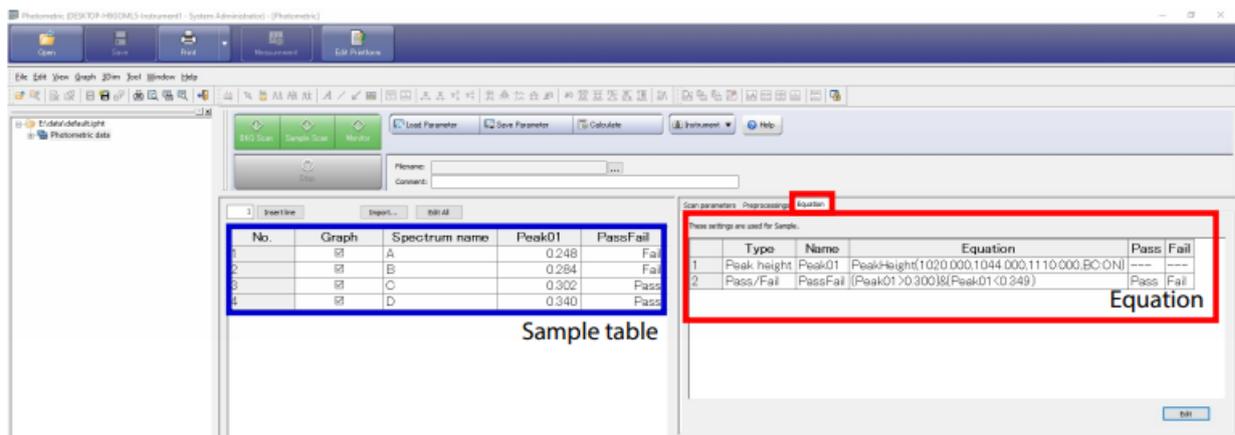


그림 4. 측정프로그램 화면



SHIMADZU Scientific Korea Corp.
www.shimadzu.co.kr

For Research Use Only. Not for use in diagnostic procedures. Not available in the USA, Canada, and China. This publication may contain references to products that are not available in your country. Please contact us to check the availability of these products in your country.

The content of this publication shall not be reproduced, altered or sold for any commercial purpose without the written approval of Shimadzu. Company names, products/service names and logos used in this publication are trademarks and trade names of Shimadzu Corporation, its subsidiaries or its affiliates, whether or not they are used with trademark symbol "TM" or "@". Third-party trademarks and trade names may be used in this publication to refer to either the entities or their products/services, whether or not they are used with trademark symbol "TM" or "@". Shimadzu disclaims any proprietary interest in trademarks and trade names other than its own.

The information contained herein is provided to you "as is" without warranty of any kind including without limitation warranties as to its accuracy or completeness. Shimadzu does not assume any responsibility or liability for any damage, whether direct or indirect, relating to the use of this publication. This publication is based upon the information available to Shimadzu on or before the date of publication, and subject to change without notice.