

# Application News

No. 01-00479-ENK

GC-MS GCMS-TQ™8040 NX and Smart Aroma Database™

## Smart Aroma Database를 이용한 화장품의 아로마 화합물 분석

Analysis of Aroma Compounds in Cosmetics Using the Smart Aroma Database

### 사용자 활용 포인트

- ◆ Smart Aroma Database에는 500개 이상의 아로마 관련 화합물이 등록되어 있어 효율적인 아로마 화합물 분석 가능
- ◆ Smart Aroma Database를 사용하면 화장품 등 복잡한 매트릭스를 가진 샘플을 쉽게 분석할 수 있는 MRM 분석법을 쉽게 만들 수 있음

### ■ 서론

아로마/향기는 제품, 브랜드 이미지 및 다른 요인들에 큰 영향을 미칠 수 있으며 특히 식품 및 화장품에서 중요한 역할을 한다. 최근 아로마는 사람들이 받는 인상에 영향을 미칠 수 있는 한 가지 요소로 주목받고 있는데, 화장품 및 다른 케어 제품은 피부의 촉감과 기능성 뿐만 아니라 향까지 판단하는 경우가 늘어나고 있다. 그러나 향기는 일반적으로 사람에 의한 감각 테스트를 기반으로 평가되지만 개인의 선호도와 건강 상태에 의해 영향을 받기 때문에 많은 수의 평가 결과에 기초하여 통계적으로 결정되는 경우가 많다. 따라서 아로마/향기 평가에 높은 전문성과 시간이 요구되기 때문에 기기 분석을 활용하여 생산성을 높이고 보다 일관된 품질을 보장하는 것에 대한 관심이 증가하고 있다.

이러한 향과 관련된 아로마 화합물은 가스 크로마토그래피로 분석할 수 있지만, 타겟 아로마 화합물과 함께 검출된 오염물질이 많아 데이터 분석이 매우 어려울 수 있다. 따라서 본 뉴스레터에서는 500개 이상의 아로마 화합물 정보를 포함하는 고유 데이터베이스인 Smart Aroma Database를 사용하여 화장품의 아로마 화합물 분석을 소개하고자 한다.

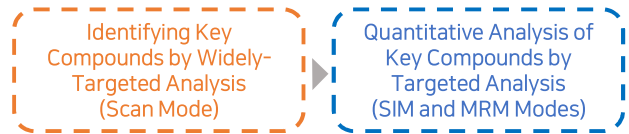


그림 2. Smart Aroma Database를 이용한 분석 절차

### ■ 샘플 및 분석 조건

SPME 법을 이용하여 AOC-6000 Plus autosampler와 GCMS-TQ8040 NX 가스 크로마토그래프-질량분석기가 연결된 시스템을 사용하여 농축 휘발성 화합물을 분석하였다. SPME 분석을 위해 시판되는 립글로스 제품 20mg 샘플을 준비해 바이알에 넣어주었다.

먼저 Smart Aroma Database에 등록된 Scan 모드 분석 조건을 이용하여 샘플에 포함된 화합물을 확인하고 다음으로 식별된 화합물에 대해 SIM 및 MRM 방법을 자동으로 생성하여 SIM 및 MRM 모드로 샘플을 분석하였다.

표 1. 분석 조건

<b>System</b>	
GCMS Model	GCMS-TQ8040 NX
Autosampler	AOC-6000 Plus
Database	Smart Aroma Database
Column	SH-I-5Sil MS (30 m x 0.25 mm I.D. 0.25 µm)
<b>AOC-6000 Conditions</b>	
SPME Arrow	DVB/Carbon WR/PDMS (O.D.:1.1 m, Film thickness: 120 µm, length: 20 mm)
Conditioning Temp.	270 °C
Pre Conditioning Time	10 min
Vial Incubation Time	15 min
Stirrer Speed	250 rpm
Sample Extract Time	30 min
Sample Desorb Time	1 min
Post Conditioning Time	5 min
<b>GC Conditions</b>	
Injection Mode	Split
Split Ratio	5
Carrier Gas	He
Carrier Gas Control	Pressure (83.5 kPa)
Column Temp.	50 °C (5min) → 10 °C/min → 250 °C (10 min)
<b>MS Conditions</b>	
Ion Source Temp.	200 °C
Interface Temp.	250 °C
Data Acquisition Mode	Scan, SIM, MRM
Event Time	0.3 sec (Scan)
Scan Range	m/z 35-400



그림 1. AOC-6000 Plus + GCMS-TQ™8040 NX System

### ■ Smart Aroma Database를 이용한 분석

Smart Aroma Database는 아로마 화합물과 관련된 약 500종의 중요 화합물에 대한 분석 정보가 포함되어 있으며, 샘플에 포함된 주요 화합물을 대상으로 한 SIM 및 MRM 모드를 사용하여 수백 개의 중요 화합물에 대한 광범위한 고감도 분석에 이르기까지 전체 프로세스를 지원한다. 분석 전 n-alkane 표준혼합물을 사용하여 머무름 시간을 조정한 후 Smart Aroma Database를 사용하여 분석 방법을 만들면 머무름 시간, 유사성 점수 및 이온 비율과 같은 여러 가지 기준에 따라 아로마 화합물을 자동으로 정확하게 식별할 수 있다.

### Smart Aroma Database를 이용한 Scan 분석

Smart Aroma Database를 사용하여 스캔 모드 분석을 통해 31가지 아로마 화합물이 검출되었으며, 검출된 화합물과 해당 라이브러리와 유사성 점수는 표 2에 나타냈다.

Smart Aroma Database는 등록된 아로마 화합물 라이브러리가 포함되어 있으며, 이 라이브러리는 머뭇 시간과 이온 비율 뿐만 아니라 라이브러리의 유사성 점수를 기준으로 대상 화합물 목록을 간추릴 수 있으므로 보다 정확하고 효율적인 분석을 할 수 있다.

또한, Smart Aroma Database에 감각 정보를 등록하여 식별 결과를 얻을 때 검출된 화합물의 아로마 특성을 동시에 확인할 수 있다. 그림 3은 LabSolutions Insight™에 표시된 Smart Aroma Database 데이터 분석 화면을 보여준다. 제품의 향을 평가하려면 각 아로마 화합물이 제품 향에 어떤 영향을 미치는지 확인해야 하는데 Smart Aroma Database를 통해 식별 결과와 감각 정보를 동시에 확인할 수 있어 아로마 제형을 결정하는데 유용하다.

표 2. 정성 결과 요약

Compound	Similarity Score	Compound	Similarity Score
1-Butanol	95	Limonene	96
Methyl Butanoate	96	Benzyl alcohol	94
Ethyl isobutyrate	92	Diethyl malonate	93
Ethyl butanoate	96	(E)-Linalool oxide	84
Ethyl lactate	92	Pentyl butyrate	92
Butyl acetate	97	Linalool	96
Ethyl 2-methylbutyrate	96	Nonanal	94
Cis-3-Hexen-1-ol	80	Benzyl acetate	94
Isoamyl acetate	97	(Z)-3-hexenyl butyrate	96
Methyl hexanoate	96	Hexyl butyrate	85
Benzaldehyde	94	Ethyl octanoate	92
Ethyl hexanoate	94	n-Decanal	95
Octanal	88	Benzyl butyrate	81
(3Z)-3-Hexenyl acetate	95	Methyl cinnamate	86
Hexyl acetate	98	Gamma-Decalactone	93
		Gamma-Undecalactone	93

Compound Information		Sensory information	
Name	RT	Area	Comment
Limonene	8.652	199705.00	lemon, oran...
Benzyl alcohol	8.740	2494982.00	sweet, flower
Diethyl malonate	9.467	299970.00	apple

그림 3. LabSolutions Insight 분석 화면

### SIM 및 MRM 분석

다음으로 스캔 모드 분석을 통해 확인된 31가지 화합물은 Smart Aroma Database로부터 자동으로 만들어진 SIM 및 MRM 방법을 사용하여 분석하였다. 향기는 각 아로마 화합물 간의 균형에 따라 결정되기 때문에 아로마 화합물의 정량적 분석이 정확해야 한다. 하지만, 화장품 또는 케어 제품들은 종종 식물이나 다른 원천으로부터 추출된 천연 물질인 향료나 활성 성분을 포함하는데 이러한 화합물은 일반적으로 여러 간섭 피크와 함께 검출되며, SIM 모드 분석에서도 정량 이온 및 오염 물질의 중첩 피크로 인해 표적 화합물을 정확하게 정량하기 어려울 수 있다.

특히 여러 분석물을 비교할 때 시료에 따라 오염물질이 달라질 수 있는데 SIM 모드 분석의 데이터를 분석할 때는 샘플에 따라 정량 이온 또는 잘못 식별된 피크를 판단 할 수 있어야 한다. 이러한 경우 MRM 모드 분석의 선택도가 높아지면 오염물질의 영향을 최소화하여 대상 화합물을 보다 정확하게 정량화하고 데이터 분석에 필요한 노력을 줄일 수 있다. 일반적으로 MRM 모드 분석 조건을 결정하는 것은 시간이 많이 소요되지만 Smart Aroma Database는 선택된 화합물에 대한 MRM 분석 조건을 자동으로 생성하여 시간적 소모없이 MRM 분석을 쉽게 수행할 수 있다. 그림 4는 Smart Aroma Database를 사용하여 얻은 SIM과 MRM 분석 결과를 비교한 것으로 SIM 모드 결과에서 표적 화합물 근처에 다수의 오염물질 피크가 포함되어 있지만 MRM 모드에서는 대상 물질이 더 큰 선택성으로 검출된다는 것을 보여준다. 따라서 복잡한 매트릭스를 가진 화장품 및 기타 샘플의 경우 MRM 모드를 사용하면 적은 노력으로 더 정확한 정량화 및 데이터 분석을 달성하기 위한 오염물질의 영향을 억제할 수 있는 효과적인 방법이 될 수 있다.

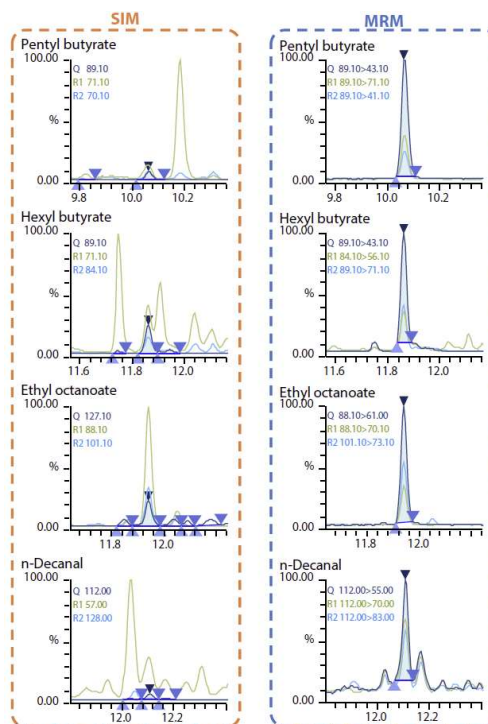


그림 4. SIM 및 MRM 분석 결과 비교

### 결론

Smart Aroma Database를 이용하여 립글로스에서 방출되는 31가지 아로마 화합물을 감지할 수 있었으며, 크로마토그램과 이온 비교만을 사용하는 것이 아니라 데이터베이스에 포함된 아로마 화합물 라이브러리를 기반으로 질량 스펙트럼 유사성 점수를 사용하여 후보 목록을 좁힘으로써 정확성과 효율성을 높이는 데 도움을 줄 수 있다. 또한, 내부 표준 물질을 이용하여 정량 분석에 신뢰성 있는 정보를 제공할 수 있다.

게다가 Smart Aroma Database를 사용하면 화장품이나 복잡한 매트릭스를 가진 다른 샘플에서도 보다 정교한 아로마 화합물 분석을 위한 SIM 및 MRM 모드 방법을 쉽게 만들 수 있다.