

Application News

No. 01-00353-ENK

Gas Chromatograph Mass Spectrometer, GCMS-QP2020 NX

가열온도가 액상전자담배 내 아로마 화합물 발생에 미치는 영향

The Effect of Heating Temperature on Aroma Compounds in E-liquid

사용자 활용 포인트

- ◆ Smart Aroma Database™ 는 아로마 화합물 분석에 용이하다.
- ◆ 사용자는 HS-20 NX를 사용하여 분석을 위한 전처리 시간과 노력을 줄일 수 있다.
- ◆ HS-20 NX의 헤드스페이스 샘플러는 넓은 온도 범위에서 안정적인 분석을 지원한다.

■ 서론

전자담배는 최근 몇 년 동안 인기가 점점 더 많아지고 있다. 전자담배는 담배 잎을 사용하는 대신 맛이 나는 전자담배 액상을 가열함으로써 그 맛을 즐길 수 있다. 각 아로마 화합물의 증기압이 다르기 때문에 온도에 따라 아로마 화합물의 기화율이 달라지며, 이로 인해 온도에 따라 액상 전자담배의 맛이 달라질 것으로 예상된다. GC/MS 분석은 맛과 아로마 화합물 간의 상관관계를 객관적으로 평가하는데 유용하다. 이 뉴스레터에서는 Smart Aroma Database와 HS-20 NX 헤드스페이스 샘플러를 사용하여 실제 사용 조건에 가까운 환경에서 전처리가 간단한 액상전자담배의 아로마 화합물을 분석하였다.



그림 1. GCMS-QP2020 NX + HS-20 NX + AOC-30i

■ 장비 및 분석 조건

분석장비는 HS-20 NX 헤드스페이스 샘플러가 장착된 GCMS-QP2020 NX 기체크로마토그래프 질량분석기를 사용하였으며, Smart Aroma Database의 특정 분석 조건을 이용하였다. 이 뉴스레터에서는 HS-20 NX의 승온 모드 기능을 선택하였다. 오븐 온도는 분석이 진행되는 동안 단계별로 승온시켰으며, 150 °C 의 초기온도에서 분당 20 °C씩 올려 270 °C 까지 승온시켰다. 샘플은 과일맛의 액상전자담배를 사용하였으며, 그 중 1 mg의 액상을 헤드스페이스용 바이알에 취하여 분석하였다. 바이알 캡은 내열 Crimp 캡이 사용 되었으며, 고내열 Septum이 사용되었다.

표 1. 장비 분석 조건

| GC-MS 분석조건 | |
|---------------------------|--------------------------------|
| Model | : GCMS-QP2020 NX |
| Column | : SH-I-5SII MS |
| Injection Mode | : Split |
| Split Ratio | : 10 |
| Carrier gas | : He |
| Ion Source Temp. | : 200 °C |
| Interface Temp. | : 250 °C |
| Scanning Mode | : Scan |
| Headspace Sampler 분석조건 | |
| Mode | : Loop (1 mL) |
| Insulation Mode | : Progress (Increment : 20 °C) |
| Oven Temp. | : 150 to 270 °C |
| Transfer Line Temp. | : 280 °C |
| Sample Line Temp. | : 280 °C |
| Vial Compressing Pressure | : 100 kPa |
| Compression Time | : 0.5 min |
| Load Time | : 0.5 min |
| Injection Time | : 0.5 min |
| Balance Time | : 0.1 min |

■ 결과

그 결과, Smart Aroma Database에 의해 47가지 아로마 화합물이 확인되었다. 다음으로 각 아로마 화합물의 피크 면적과 온도의 상관관계를 조사하기 위하여 면적값을 표준화하고, 통계분석 소프트웨어 "R" 을 이용하여 군집 분석을 실시하였으며, 군집 분석 결과 얻어진 열지도를 그림 2에 나타내었다. 여기서 전자담배 액상의 증기 압력은 온도가 증가함에 따라 증가한다. 따라서 그림 2의 피크 면적 값은 가압 가스와의 희석 비율에 의해 보정된다. 가압 가스에 의한 희석 비율은 측정된 바이알의 내압에 기초하여 계산되었다. 그림 2는 각 화합물의 피크 면적값과 오븐 온도의 상관관계를 보여주며, 이 열지도에서 상관관계를 한 눈에 확인할 수 있다. 전반적으로 발생된 가스 내 아로마 화합물의 양은 오븐 온도가 증가함에 따라 증가하는 경향이 있음을 알 수 있으며, 특히 210 °C 에서 증가하는 경향이 두드러진다. 한편, 아로마 화합물의 면적이 변화하는 경향은 구체적으로 보았을 때 화합물의 다양성에 따라 달라진다.

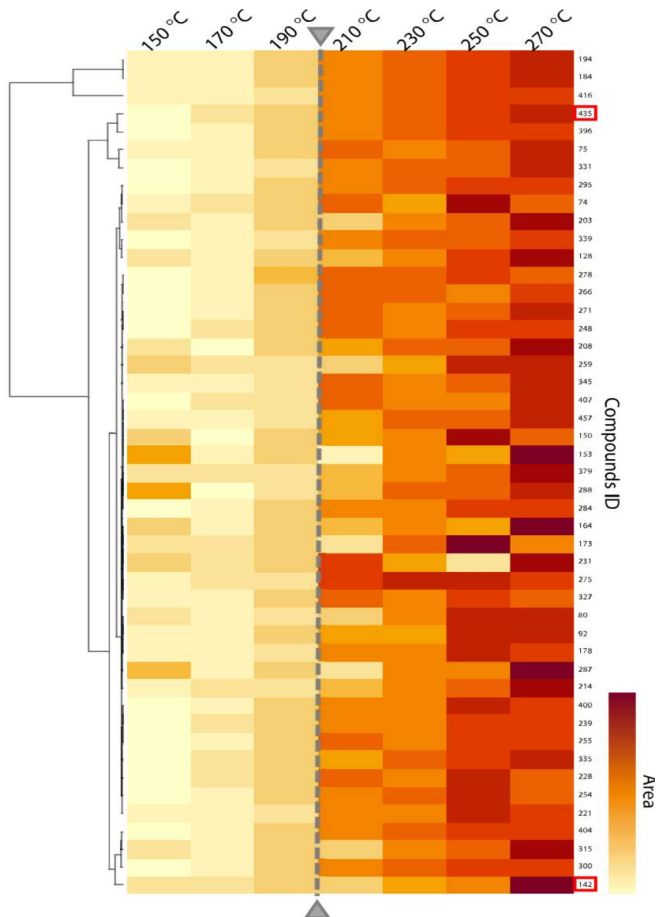


그림 2. 아로마 화합물의 면적 값과 오븐 온도의 상관관계

■ 아로마 특성의 변화

그림 3은 라즈베리 케톤과 벤조니트릴의 정량이온 피크 면적의 온도 의존성을 보여준다. 이 두 화합물은 그림 2의 빨간색 프레임으로 표시하였다(벤조니트릴 142, 케톤 435). 그림 3의 면적 값은 그림 2의 경우와 같이 가압가스의 희석 비율을 고려하여 보정하였으며, 그림 3에서 보는 것과 같이 라즈베리 케톤의 피크 면적은 온도에 따라 증가하나 210 °C 정도부터 감소하는 경향을 나타냈다. 반면 저온 영역에서 벤조니트릴의 피크 면적은 큰 변화가 없으나, 270 °C에서 피크 면적 값이 급격히 증가함을 확인할 수 있다. 이러한 결과는 두 화합물의 면적 값이 증가하는 경향이 다르다는 것을 보여준다. Smart Aroma Database에는 아로마 화합물에 대한 감각 정보도 포함되어 있는데, 감각 정보에 따르면, 예를 들어, 라즈베리 케톤은 라즈베리 냄새가 나고, 벤조니트릴은 산 냄새가 난다. 그림 2 및 그림 3의 결과로부터 라즈베리향이 210 °C까지 증가하고, 산 냄새는 270 °C 전후부터 급격히 증가함을 유추할 수 있다. 이러한 방식으로 아로마 화합물의 변화와 감각 정보를 연계하여 전략적 향기 설계 및 평가에 적용할 수 있다.

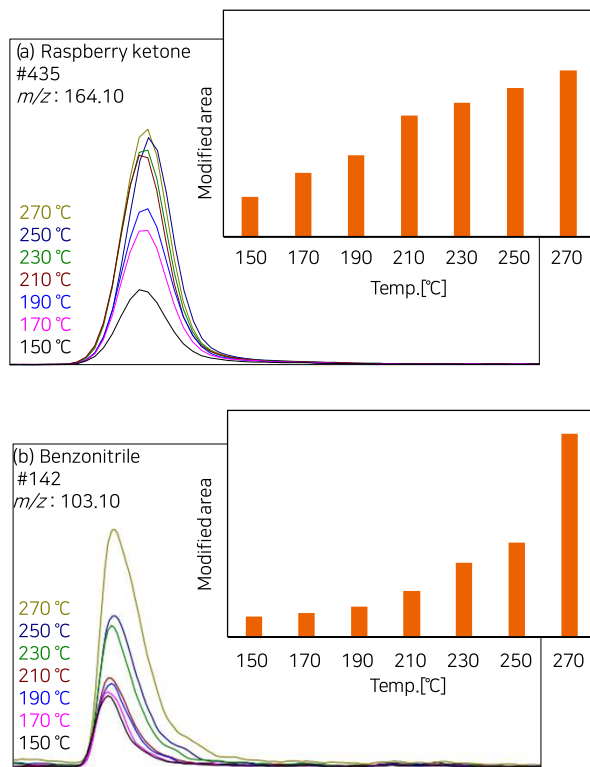


그림 3. 라즈베리 케톤과 벤조니트릴의 온도와 정량이온 피크면적의 상관관계

■ 결론

이 뉴스레터에서는 GCMS-QP2020 NX 가스 크로마토그래프 질량분석기와 HS-20 NX 헤드스페이스 샘플러를 사용하여 액상전자담배의 아로마 화합물과 가열온도의 상관관계를 평가하였다. Smart Aroma Database는 500개 이상의 아로마 화합물에 대한 특성 이온, Retention index 및 질량 스펙트럼에 대한 정보를 포함하고 있어 아로마 화합물 분석에 큰 도움이 된다. 또한 Database에는 아로마 화합물의 감각 정보가 포함되어 있기 때문에, 아로마 화합물의 분석 결과와 감각 정보를 연계함으로써 향기의 효율적인 설계 및 평가를 기대할 수 있다.

