

# 오일이 페녹시에탄올의 유·수상 분배계수에 미치는 영향

조선웅\*, 이영근\*\*, 김미정\*\*\*

\*순천향대학교 자연과학대학 화학과, \*\*대전보건대학 화장품학과과,

\*\*\*순천향대학교 고부가생물소재 산업화지원 지역혁신센터

## The effect of Oil-aqueous phase Partition Coefficients of Phenoxyethanol according to Oils

Sun-Woong Cho\*, Young-Keun Lee\*\*, Mi-Jung Kim\*\*\*

\*Department of Chemistry, College of Natural Sciences, Soon Chun Hyang University,

\*\*Department of Cosmetic Science, Daejeon Health Science College,

\*\*\*Soon Chun Hyang University Bioresources Innovation Center

### 요 약

최근 화장품에 널리 사용되고 있는 페녹시에탄올에 대하여 오일의 종류가 유·수상 분배계수에 미치는 영향을 연구하였다. 분배계수의 측정은 오일을 탄화수소류, 고급지방산류, 고급알콜류, 에스테르류, 트리글리세라이드류 및 실리콘류로 구분하여 실험하였다.

실험결과 탄화수소류 및 실리콘류 오일은 유·수상 분배계수가 낮은 반면 고급지방산류, 고급알콜류, 에스테르류 및 트리글리세라이드류 오일의 유·수상 분배계수는 높았다. 이는 탄화수소류 및 실리콘류 오일을 혼합한 경우 다른 오일을 사용한 경우에 비해 수상에 존재하는 페녹시에탄올의 농도가 높음을 나타낸다.

화장품에서의 방부력은 수상에 존재하는 방부제의 함량이 크게 좌우함으로 위의 실험 결과를 토대로 화장품에 혼합하는 오일을 조정함에 의해 페녹시에탄올의 함량이 적은 저자극의 화장품 처방을 구성할 수 있으리라 사료된다.

### Abstract

In this study, partition coefficients( $K_w$ ) of phenoxyethanol in oil-water phase according to type of oils was investigated. Partition coefficients( $K_w$ ) were experimented by classified oils that hydrocarbones, fatty alcohols, fatty acids, esters, triglycerides and silicones. It was found that partition coefficients( $K_w$ ) of hydrocarbons and silicones were low, but partition coefficients( $K_w$ ) of fatty acids, fatty alcohols, esters and triglycerides were high.

It was known that the emulsions which were made of oils having low partition coefficients value had a good antimicrobial effects. Thus, the cosmetics stability of microorganisms and skin safety of phenoxyethanol could be improved by using the oils which have low partition coefficients value.

## 1. 서 론

일반적으로 화장품은 제조단계로부터 최종 소비자가 사용할 때까지 보관 또는 사용 중에 미생물에 오염되기 쉽다. 미생물에의 오염은 제품의 산패, 변색 및 변취를 일으킬 수 있으며, 제품의 물성 및 효능을 저하시킬 뿐만 아니라, 사용자에게 미생물 감염을 유발시킬 수 있기 때문에 주의하여야 한다[1, 2].

미생물에 의한 감염을 방지하기 위하여 화장품에는 페녹시에탄올, 파라벤류, 이미다졸리디닐우레아 등의 방부제가 배합되고 있다. 이러한 방부제는 제형의 안정성 및 방부 유효성이 우수하지만, 독성, 피부자극, 알러지를 유발하는 등의 단점이 있어 배합량을 줄이거나 방부제를 사용하지 않고도 제품의 안정성 및 유효성이 높은 보존 기술이 요구된다[3, 4].

최근 일본 모찌다(持田)제약의 조사에 따르면 젊

은 여성일수록 '자신의 피부가 민감하다'고 생각하는 사람이 많으며, 보통 피부의 여성보다 민감성 피부의 여성은 화장품 선택 등 피부에 많은 신경을 쓰면서 생활하는 것으로 밝혀졌다. 이에 따르면 피부가 약하다고 대답한 사람은 전체 평균 51.8%, 강하다고 생각하는 사람은 48.3%로 약하다고 생각하는 사람이 많은 것으로 조사됐다. 연령별로 보면 젊은 사람일수록 '약하다고 생각'하는 비율이 높아, 20대는 약 64%를 넘고 있다[5].

이에 따라 방부제의 사용량을 줄이고자 하는 연구가 많이 진행되고 있으며, 배합된 방부제가 수상에 존재하는 비율이 높을수록 방부효능이 우수함에 대한 연구 및 파라벤류의 오일에 다른 유·수상 분배계수에 대한 연구도 있었다[5,6,7]. 그러나 최근 화장품에의 사용이 늘어나고 있는 페녹시에탄올에 대하여 유·수상 분배계수에 대한 매우 미진한 실정이다.

본 연구에서는 탄화수소류, 에스테르류, 실리콘류, 트리글리세라이드류, 고급알콜류, 고급지방산류의 오일들을 선정하여 유·수상 분배계수를 측정하여, 이를 토대로 저자극 화장품용을 개발하고자 한다.

## 2. 실험

### 2.1 재료 및 기구

페녹시에탄올은 시약급인 CLARIANT사에서 사용하였으며, 본 연구에 사용한 오일인 Isostearic Acid는 Kokyu alcohol社(日)의 Isostearic Acid EX를 사용하였으며, Oleic Acid는 현성케미칼社(韓)의 Oleic Acid, Hexyldecanol은 Kokyu alcohol社(日)의 Risonol 16SP, Decyltetradecanol는 Kokyu alcohol社(日)의 Risonol 24SP, Cetyl ethylhexanoate는 Kokyu alcohol社(日)의 CEH, Neopentyl Glycol Dicaprate Kokyu Alcohol社(日)의 NPDC, Triethylhexanoin는 Kokyu alcohol社(日)의 TOG, Caprylic/Capric triglyceride는 Kokyu Alcohol社(日)의 TCG-M, Liquid paraffin은 극동유화社(韓)의 Lily 70, Squalane은 Kishimoto社(日)의 Squalane, Dimethyl polysiloxane은 DOW CORNING社의 DC 200F/100CS, Methylphenyl polysiloxane은 DOW CORNING社의 DC 556을 사용하였다. 기타 시약은 화장품용으로 사용하는 시약을 구입한 그대로 사용하였다. UV/Vis 분광광도계는 미국 Perkin-Elmer사의 Model Lambda 35를 사용하였다.

### 2.2 페녹시에탄올의 농도에 따른 UV/Vis 흡광도 측정 및 검정식 산출

페녹시에탄올 수용액을 제조하여 UV/Vis 분광광도계를 이용하여 흡광도를 측정하고, λmax의 흡광도와 농도와의 상관관계를 이용하여 검정식을 산출하였다.

### 2.3 페녹시에탄올의 분배계수 측정을 위한 유(油)·수(水)상의 준비

각종 오일 1종과 이온교환수를 1:1 부피비로 혼합한 후, 페녹시에탄올을 0.20 wt% 첨가하고 자석교반기를 이용하여 10분간 교반하였다.

### 2.4 수(水)상의 페녹시에탄올 흡광도 측정

2.3에서 제조된 시료를 25℃ 항온조에서 24시간

방치한 후, 수상을 분리하고 이를 10배 희석한 후 UV/Vis 분광광도계를 이용하여 λmax 파장에서 흡광도를 측정하였다.

### 2.5 수(水)상의 페녹시에탄올의 농도 산출

2.4에서 구해진 흡광도를 2.2에서 얻어진 흡광도-농도 검정식을 이용하여 농도를 구한 후 10배를 곱하여, 수상에 용해되어진 페녹시에탄올의 농도를 계산하였다.

### 2.6 분배계수 산출

유·상의 분배계수는 아래의 식으로부터 계산하였다.

$$Kw = [Ct(1 + \phi) - Cw] / Cw \times \phi$$

Ct : 총방부제의 농도

Cw : 수상의 방부제 농도

φ : 수상에 대한 유상의 부피비

Kw : 분배계수

## 3. 결과 및 고찰

### 3.1 페녹시에탄올의 농도에 따른 흡광도-농도 검정식

페녹시에탄올 수용액을 0.000 wt%, 0.004 wt%, 0.008 wt%, 0.012 wt%, 0.016 wt, 0.020 wt%, 0.024 wt%, 0.028 wt% 및 0.032 wt%를 준비하여 UV/Vis 분광광도계를 이용하여 흡광도를 측정하였다. λmax는 269 nm이었고, 0.020 wt% 이하의 농도에서는 직선식이 나타났으나, 0.024 wt%이상의 농도에서는 곡선식을 나타내었다.

0.020 wt% 이하의 농도에서의 농도와 흡광도와의 상관관계를 그림 1에 나타내었으며, 농도와 흡광도의 상관식은 아래와 같았고, 상관계수 R<sup>2</sup> = 0.994로서 높았다.

$$\text{흡광도}(A) = 80.25 \times \text{농도}(c) + 0.086$$

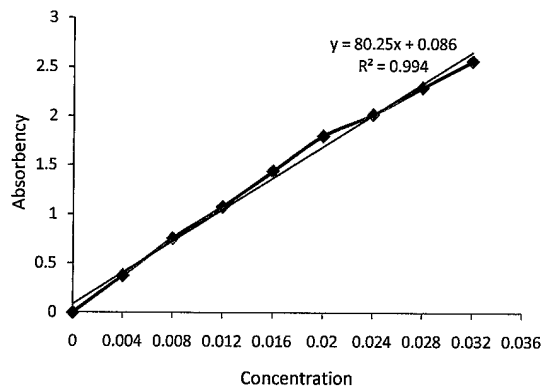
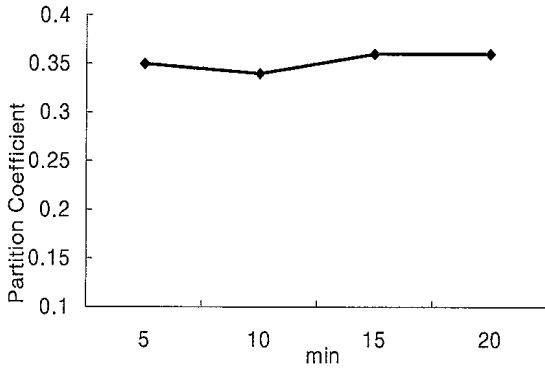


그림 1. 페녹시에탄올 수용액 농도와 흡광도와의 상관관계

### 3.2 유·수상 시료의 준비

'분배계수 측정을 위해 사용한 오일은 2.1에서 언급한 탄화수소계 오일 2종, 고급지방산계 오일 2종, 고급알콜계 오일 2종, 에스테르계 오일 2종, 트리글리세라이드계 오일 2종 및 실리콘계 오일 2종을 사용하였다.



오일 중 Mineral Oil를 선정하여 이온교환수와 그래프1:1 부피비로 혼합한 후, 페녹시에탄올을 0.20 wt%를 첨가한 후 교반기로 5분, 10분, 15분, 20분간 교반한 후 정지하고 수상을 분리하여 수상에 용해된 페녹시에탄올의 함량을 측정된 결과 시간에 따른 함량의 차이는 없었다. 이에 따라 교반시간은 10분으로 고정하였다.

### 3.3 수상에서의 흡광도 측정

3.2에서 준비한 시료를 25°C 항온조에서 24시간 보관한 후, 수상을 분리하고 이를 10배 희석한 후 UV/Vis 분광광도계를 이용하여 흡광도를 측정하였

다. 269 nm에서의 흡광도를 이용한 유·수상으로부터 분리한 수상의 10배 희석용액이 Mineral Oil에서는 2.6748, 동일한 방법으로 Squalane에서는 2.6462, Oleic acid에서는 0.7188, Isostearic acid에서는 0.9242, Decyltridecanol에서는 0.3842, Hexyldecanol에서는 0.6583, Cetyl ethyl hexanoate에서는 1.3373, Neopentyl glycol dicaprate에서는 0.7616, Caprylic/Capric triglyceride에서는 0.7065, Triethylhexanoin에서는 0.7665, Dimethyl polysiloxane에서는 1.9710 및 Methylphenyl polysiloxane에서는 2.6558를 나타내었다. 각 유·수상으로부터 분리한 수상의 10배 희석용액의 흡광도 그래프를 그림 2.에 나타내었다. 그래프에서 보는 바와 같이 탄화수소계 오일인 Liquid paraffin과 Squalane 및 실리콘계 오일인 Dimethyl polysiloxane과 Methylphenyl polysiloxane을 이용한 유·수상 시료의 수상부에서는 높은 흡광도를 나타내었으며, 고급지방산계인 Oleic acid, Isostearic acid와 고급알콜계인 Decyltridecanol, Cetyl ethylhexanoate와 에스테르계인 Cetyl ethylhexanoate, Neopentyl glycol dicaprate 및 트리글리세라이드계인 Caprylic/Capric triglyceride, Triethylhexanoin에서는 흡광도가 낮게 나타났다.

### 3.4 페녹시에탄올의 유·수상 분배계수

수상의 10배 희석용액의 269 nm에서의 흡광도를 흡광도와 농도와의 상관식(흡광도(A) = 80.25 × 농도(c) + 0.086)을 이용하여 10배 희석용액에서의 페녹시에탄올 농도를 구한 후, 이를 10배하여 수상부의 페녹시에탄올 농도를 계산하였다.

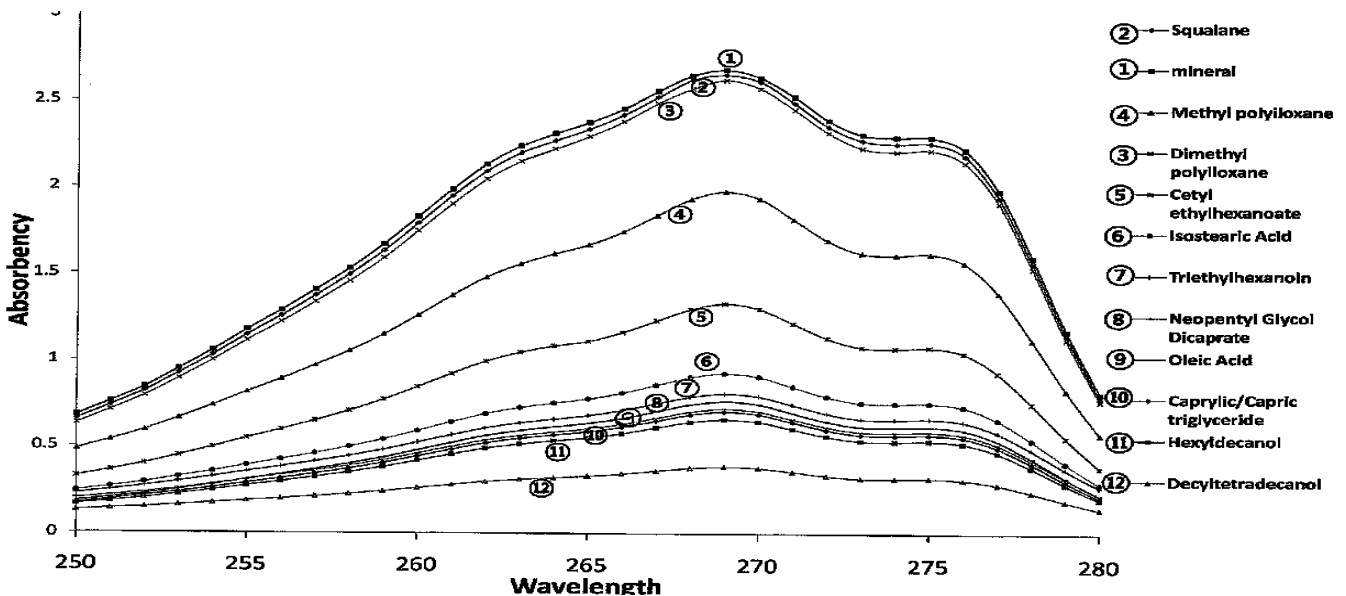


그림 2. 수상의 10배 희석용액에서의 흡광도

또한 농도와 유·수상 분배계수 관계식 ( $K_w = [Ct(1 + \phi) - Cw] / Cw \times \phi$ )을 이용하여 분배계수를 계산한 결과 Liquid paraffin을 이용한 경우 페녹시에탄올의 유·수상 분배계수는 0.34, Squalane에서는 0.36, Oleic acid에서는 4.08, Isostearic acid에서는 2.93, Decyltridecanol에서는 8.68, Hexyldecanol에서는 4.56, Cetyl ethylhexanoate에서는 1.70, Neopentyl glycol dicaprato에서는 3.79, Caprylic/Capric triglyceride에서는 4.17, Triethylhexanoin에서는 3.76, Dimethyl polysiloxane에서는 0.83 및 Methylphenyl polysiloxane에서는 0.35를 나타내었다. 이에 대한 내용을 표 1.에 나타내었다.

이상에서 보는 바와 같이 탄화수소계인 Liquid paraffin과 Squalane 및 실리콘계인 Dimethyl polysiloxane과 Methylphenyl polysiloxane에서는 유·수상 분배계수가 상대적으로 낮음을 알 수 있다. 이는 유상보다는 수상에 존재하는 방부제 함량이 상대적으로 높기 때문에 화장품에 첨가하는 방부제량을 줄일 수 있어 저자극의 화장품 처방을 구성할 수 있을 것으로 판단된다. 반면 고급지방산계인 Oleic acid, Isostearic acid와 고급알콜계인 Decyltridecanol, Cetyl ethylhexanoate와 에스테르계인 Cetyl ethylhexanoate, Neopentyl glycol dicaprato 및 트리글리세라이드계인 Caprylic/Capric triglyceride, Triethylhexanoin에서는 유상에 존재하는 방부제의 함량이 많기 때문에 미생물에 의한 오염을 방지하기 위하여 보다 많은 량의 방부제를 화장품에 첨가하여야 하기 때문에 피부안전성에 좋지 않은 영향을 미칠 것으로 판단된다.

#### 4. 결론

화장품에는 제품의 미생물의 오염에 의한 변질 및 변취를 방지하기 위하여 방부제를 첨가하고 있다. 최근 화장품에의 적용이 확산되고 있는 페녹시에탄올에 대해 농도에 따른 자외선 흡광도 상관관계를 확인하고, 각종 오일과 이온교환수를 1:1 부피비로 혼합한 후 페녹시에탄올을 0.2 wt% 첨가하여 10분간 교반기를 이용하여 교반한 후 방지하고 유·수상 분배계수를 측정하여 다음과 같은 결과를 얻을 수 있었다.

1. 페녹시에탄올 수용액 0.032 wt%까지의 범위에서는 농도와 269 nm 파장에서의 흡광도가 직선식을 나타내었다.
2. 탄화수소계인 Liquid paraffin과 Squalane 및 실리콘계인 Dimethyl polysiloxane과 Methylphenyl polysiloxane에서는 유·수상 분배계수가 상대적으로 낮았다.
3. 고급지방산계인 Oleic acid, Isostearic acid와 고급알콜계인 Decyltridecanol, Cetyl ethylhexanoate와 에스테르계인 Cetyl ethylhexanoate, Neopentyl glycol dicaprato 및 트리글리세라이드계인 Caprylic/Capric triglyceride, Triethylhexanoin에서는 유·수상 분배계수가 상대적으로 높았다.

이상의 결과를 토대로 유화 화장품에 첨가하는 적절한 오일의 종류를 선정함에 의해 소량의 페녹시에탄올을 첨가하고도 미생물에 오염이 적은 화장품을 개발할 수 있을 것으로 판단된다.

표 1. 오일의 종류에 따른 유·수상 분배계수

Division	Oils	Absorbancy (at 269nm)	Phenoxyethanol concentraion in water	Partition coefficient
Hydrocarbones	Liquid paraffin	2.6748	0.2976	0.34
	Squalane	2.6462	0.2944	0.36
Fatty acids	Oleic acid	0.7188	0.0788	4.08
	Isostearic acid	0.9242	0.1017	2.93
Fatty Alcohols	Decyltetradecanol	0.3842	0.0413	8.68
	Hexyldecanol	0.6583	0.0720	4.56
Esters	Neopentylglycol dicaprato	0.7616	0.0835	3.79
	Cetylethylhexanoate	1.3373	0.1480	1.70
Triglycerides	Caprylic/capric triglyceride	0.7065	0.0774	4.17
	Triethylhexanoin	0.7665	0.0841	3.76
Silicones	Dimethylpolysiloxane	1.9710	0.2189	0.83
	Methylphenylpolysiloxane	2.6558	0.2955	0.35

## 5. 감사의 글

이 논문은 2009년 지식경제부 지역혁신센터의 지원을 받아 연구되었음.

### 참고문헌

- [1] Mitchell L. Schlossman, The Chemistry and Manufacture of Cosmetics Volume I Basic Science, p373 - 410, 2002.
- [2] John Knowlton & Steven Pearce, Handbook of Cosmetic Science and Technology, p440 - 457, 1993.
- [3] 光井武夫, 新化粧品學, p209 - 217, 1993.
- [4] 조완구, 랑문정, 배덕환, 현대화장품학, p405 -407, 2005.
- [5] 최선례, 젊을수록 자신의 피부를 민감성으로 판단, 뷰티누리, 2003.
- [6] 한중섭, 김종일, 김의, 김형진, 강세훈, A study of the Relationship between Partition Coefficients of Oils and Antimicrobial Effects, 화장품학회지 제21집, 1995, p94 - 111