

# 유기화합물의 예측과 유기개념도

李 忠 南

(태평양기술연구소)

## 1. 서 론

유기화합물은 각각 일정한 화학구조식으로 나타낼 수 있고 그 치환기나 변화부분에 의하여 산성, 중성, 염기성, 산화-환원성과 같은 성상이 예측되며, 또한 유기성, 무기성 개념에 의한 후지다씨의 “유기 개념도”로 나타낼 수 있다. 이것은 비극성과 극성 각각의 값으로 표시되는 특징이 있고  $x$ (유기성치)축,  $y$ (무기성치)축의 그래프상에 유기화합물을 좌표로써 나타내기 때문에 교점(원점 0)으로부터 좌표의 선은 비극성이나 극성의 비율에 해당하고 그 좌표는 다시 많은 성상관계를 예측할 수 있다.

유기성 무기성 개념을 분산, 유화, 가용화 방면에 적용하면, 다성분이 혼합된 계의 성상이나 안정성, 특히 온도와의 관계 등이 좌표나 선으로 표시되어 복잡한 다성분의 계를 정연하게 볼 수 있고 계면활성제 등의 배합성분의 선택방법도 용이하게 된다.

## 2. 유기화합물의 성상 및 구조의 개괄적 예견

### 2-1 유기화합물의 법칙성의 유래와 그래프와의 기초

유기화합물의 성상은 원자보다는 오히려 그 결합 상황에 있고 유기·무기를 막론하고 전부 2개의 원자가 결합하는 양식은 공유결합과 정전결합으로 대별된다. 공유결합은 결합에 참여하

는 양원자에 의하여 각각 하나씩의 가전자를 대칭적으로 공출하는 것이고 쌍극자 능률 0인 것, 즉 무기성인 것이 특징이다.

이것에 대하여 정전결합에서는 결합에 참여하는 가전자가 크게 작게 편재하여 비대칭적으로 되어 있고 양원자는 음 또는 양으로 대전하여 그 특징은 다소에 관계없이 쌍극자를 나타낸다. 무기 유기를 불문하고 실제에는 순수한 공유결합도 정전결합도 아닌, 예를 들면 완전한 이온결합이라고 생각할 수 있는 식염에서도 그 결합의 얼마는 공유결합이고 또한 순공유결합으로 생각되는 메탄에서도 그 결합의 소부분은 정전적으로 되어 있다고 한다. 기본적 메탄계 탄화수는 그 각원자간은 압도적으로 공유결합이 지배하고 있고 그것도 최고도의 공유이며 이것에 반하여 치환기, 변태부의 부분은 크고 작게 정전결합으로 되어 있어 일반적으로 극성을 나타낸다.

메탄계 탄화수소는 거의 완전한 무기성의 것이 아니면 수소대신에 치환기가 도입될 경우에는 탄화수소 잔기는 그 치환기의 활성을 약하게 한다. 그래서 잔기가 커지면 커질수록 약해지는 힘도 커진다. 그 둔해진 정도는 공유결합으로부터 생기는 메틸렌쇄의 길이에 대체로 비례한다. 결국 고도의 공유결합으로 된 메틸렌쇄는 치환기의 정전적 성질과 대립할 때에는 정전성의 전체적 강약을 가져오는 길항력이 있다. 이와같은 길항력 즉 유기적 특징의 본체를 유기성이라고 한다.

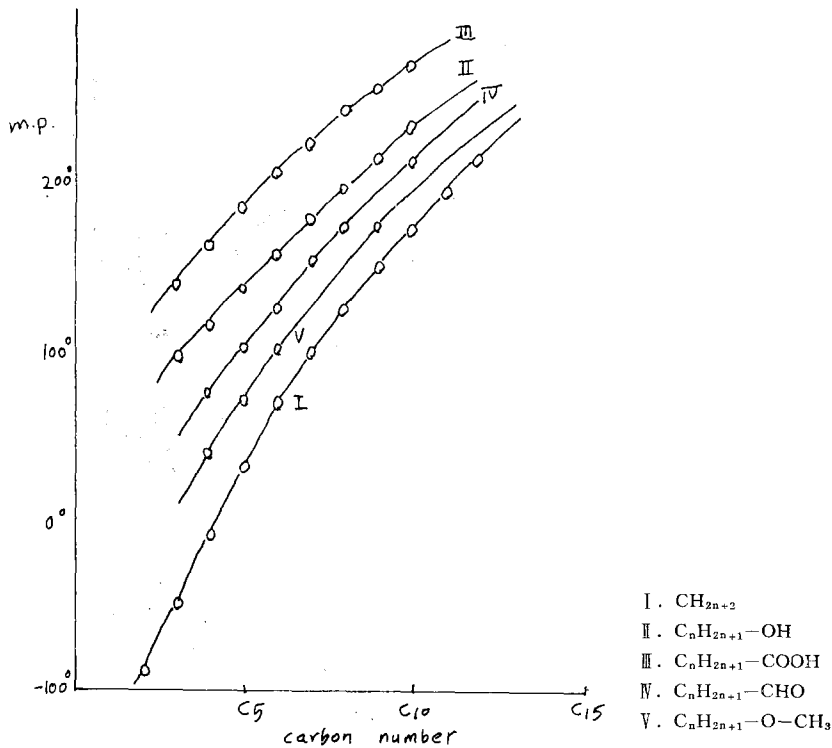
“유기성”에 대립하는 것은 치환기 및 변태부에 존재하여 정전결합을 만드는 정전적 성격의 것으로 화학반응성의 근원이며 여러가지의 물리화학적 성상도 이것을 중심으로 발현된다. 두전

항수, 쌍극자능률, 분자분극, 원자분극, 전자분극 등은 정전적 성격에 입각하여 측정하지만 그 유도된 결과는 아주 합치하는 점이 많다. 즉, 비점, 응점, 표면장력, 점조도 등 각종의 물리 화학적 성질은 직접 정전성으로 하지 않아도 분자내에 있는 정전결합 부위의 영향을 받기 때문에 이 정전부위의 영향력을 평가하는 어떤 방법을 채택하면 정전력은 아니더라도 충분히 화합물의 성격을 표시하는 하나의 기준을 얻을 수가 있다. 직교축의 횡축에 탄소수를 취하고 종축에 비점을 취하면  $C_nH_{2n+2}$ 의 메탄계 직쇄탄화수소의 동계열은 제 1도의 I과 같은 곡선이 된다. 탄화수소는 거의 완전한 무극성이기 때문에 이 비점곡선은 어떤 특별한 극성의 영향을 받지 않고 거의 전부 van der Waals력에 기초를 둔 곡선이며 메칠렌기의 증가에 따라 비점이 대체로 높

아진다. 또한 수산기 1개만을 치환한 제 1급 직쇄 알코올  $C_nH_{2n+1}OH$ 은 II 곡선으로 되며 수산기 이외의 치환기를 대입하면 III, IV, V 등으로 표시된다.

이와 반대로 각 곡선이 대소 상이한 상호간의 간격은 치환기 또는 변태부위의 정전성이 비점에 미치는 영향력의 강약을 표시한다. 또한 비점이 없는 물질에서는 다른 기타의 물리항수, 예를 들면 응점, 굴절율, 점조도, 증발열 등으로도 다소 값이 다르지만 편법을 사용한다.

전술한 바와 같이 유기성에 대립하는 인자는 원래는 정전성으로부터 나와 있지만 직접 정전성 또는 극성이 아니기 때문에 무기성을 나타내는 치환기 및 변태부를 총괄하여 “무기성기”라고 칭하는 것이다. 이와같이 유기화합물의 물리 화학적인 성상은 유기성과 무기성과의 양인자에



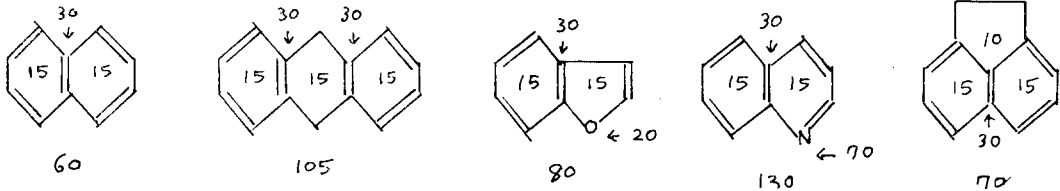
제 1도 직쇄 지방족 동계열의 비점곡선

의하여 규정할 수 있다.

## 2-2 유기화합물의 성상의 그래프화

### 가) 유기성의 수치

유기성 수치의 대소는 분자내의 메틸렌기를 단위로 하여 그 메틸렌 기를 대표하는 탄소원자의 수를 측정한다. 무기성의 수치와 그래프상의 대비를 적당히 하기 위하여 탄소원자 1개를 수치 20으로 정한다. 단 메틸기나 분자에 해당하는 메틸기→CH<sub>3</sub>, 또는 제 4급 탄소  $\begin{array}{c} | \\ -C- \\ | \end{array}$  등도 근사적으로 메틸렌기와 동격으로 하여 전부 탄소 1개로 계산한다. 이때 탄소에 부착한 수소원자의 수를 불문에 부쳐도 좋은 이유는 정규의 메탄계 탄화수소가 가지는 수소수는 탄소수에 의하여 결정되고 만약 그 수에 이상이 있다고 하면 그것은 분자로 되었거나 치환되었거나 변태를 가져온 것으로 별개의 무기성기로 고려할 수



만약 표에 없는 무기성기에 부딪힐 때는 상술한 방식으로 새로 그 수치를 산출하지 않으면 안된다. 여기에서 물리화학적 항수의 기재가 문헌에 없는 경우이다. 그러나 그 동족체의 비점 하나라도 있으면 무기성치의 산출법에 의하여 수치를 찾아낼 수 있다.

## 2-3 유기 개념도

### 가) 유기화합물의 그래프

지금 직교축을 만들어 횡축에 유기성의 수치를 종축에 무기성의 수치를 취하면 그것을 좌표로써 이 화합물의 위치가 정해진다. 이렇게 화합물을 그래프화한 것을 개념도라고 칭한다.

양축간을 폭을 “물질야”, 횡축을 유기축, 종축을 무기축, 위치를 정하는 것은 locate한다고 부른다.

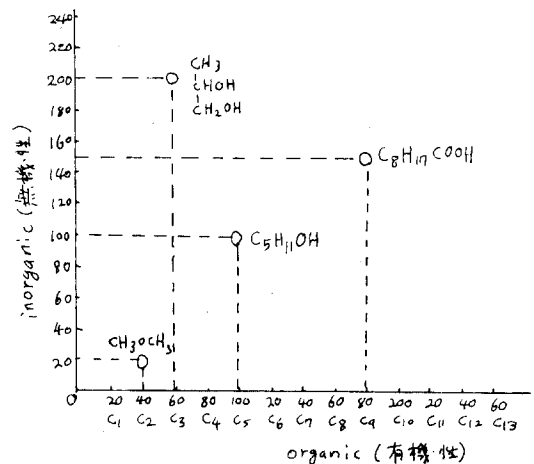
있기 때문이다.

### 나) 무기성의 수치

무기성 즉 여러가지의 치환기의 비점의 영향력의 대소를 비교함에 수산기를 기준으로 정하고 또한 유기성과의 대비상 수산기 한개의 영향력을 수치 100으로 한다. 이것을 기준으로써 다른 기의 영향력의 비례적 수치로 정한다.

### 다) 환상 화합물의 무기성의 수치

환상화합물은 동종, 이종 원소환의 구별없이 어떠한 환상을 만들면 삼각에서도 5각에서도 6각의 수에 관계없이 무기성은 10만큼 발현한다. 이때 환이 벤젠, 피리딘 등과 같이 방향족의 성질을 가질 때는 15로 한다. 또한 2개의 방향족핵이 한변을 갖고 만들어진 나프탈렌, 퀴놀린 등에서는 15의 2배의 외에 그 배중 합해진 곳으로부터 30만큼의 무기성이 발현하며 비방향족과 방향족과의 배중 합한 것으로부터는 아무것도 나타나지 않는다. 예를 들면,



제 2도 概念圖(I)



3-2. 유기성 : 무기성치의 계산 예 (1個 有機性 20 ; 無機性值 表 參照)

§ 高級 Alcohol.

cetanol	$C_{16}H_{33}OH$	$\frac{C_{16}}{\times 20} = \frac{-OH}{320} \frac{100}{100}$
---------	------------------	--

§ 高級脂肪酸

oleic acid	$C_{17}H_{33}COOH$	$\frac{C_{15}}{\times 20} = \frac{\Delta 2}{360} \frac{-COOH}{152} \frac{150}{150}$
------------	--------------------	---

§ 金屬 soap

Zinc stearate	$(C_{17}H_{35}COO)_2Zn$	$\frac{C_{36}}{\times 20} = \frac{2COOH}{720} \frac{300}{400} \frac{Zn}{700}$
---------------	-------------------------	---

§ Nonion SAA (POE-Ether型)

(EO) n=0	stearyl alcohol	$C_{18}H_{37}OH$	$\frac{C_{18}}{\times 20} = \frac{-OH}{360} \frac{100}{100}$
1.	Emalex 601	$C_{18}H_{37}OCH_2CH_2OH$ : 20 : 100	$\frac{C_{20}}{\times 20} = \frac{-O-}{400} \frac{20}{100} \frac{-OH}{100}$
2.	Emalex 602	$C_{18}H_{37}OCH_2CH_2(OCH_2CH_2)OH$ : 20 : 75 : 100	$\frac{C_{20}}{\times 20} = \frac{-O-}{400} \frac{20}{100} \frac{-OH}{75}$
10.	Emalex 610	$C_{18}H_{37}OCH_2CH_2(OCH_2CH_2)_9-OH$	$\frac{C_{(20+18)}}{\times 20} = \frac{-O-}{760} \frac{20}{100} \frac{-OH}{9 \times 75}$

§ Nonion SAA [POE-Mono ester型]

n=0	stearic acid	$C_{17}H_{35}COOH$	$\frac{C_{18}}{\times 20} = \frac{-COOH}{360} \frac{150}{150}$
1.	Emalex 801	$C_{17}H_{35}COOCH_2OH$ : 60 : 100	$\frac{C_{20}}{\times 20} = \frac{-COOR}{400} \frac{60}{100} \frac{-OH}{100}$
2.	Emalex 802	$C_{17}H_{35}COOCH_2CH_2(OCH_2CH_2)OH$ : 60 : 75 : 160	$\frac{C_{22}}{\times 20} = \frac{-COOR}{400} \frac{60}{100} \frac{-OH}{75}$
10.	Emalex 810	$C_{17}H_{35}COOCH_2CH_2(OCH_2CH_2)_9OH$	$\frac{C_{(20+18)}}{\times 20} = \frac{-COOR}{760} \frac{60}{100} \frac{-OH}{9 \times 75}$

3-3 P.E.O.계 계면 활성제 등족열 중합도 분포선(에테르계, 에스테르계)

예 1) Polyoxyethylene nonionic surfactant

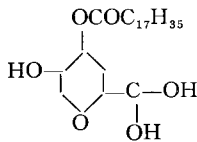
n=1	$HOCH_2CH_2OH$	$\frac{C}{\times 20} = \frac{2}{40} \frac{OH}{200}$
n=2	$HOCH_2CH_2O \cdot CH_2CH_2OH$	$\frac{C}{\times 20} = \frac{4}{80} \frac{2OH}{275} \frac{200}{75}$
n=3	$HOCH_2CH_2O \cdot CH_2CH_2O \cdot CH_2CH_2OH$	$\frac{C}{\times 20} = \frac{6}{120} \frac{2OH}{350} \frac{200}{150}$

예 2) Polyoxyethylene alkyl ether (ROCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH)

n=0	Cetanol	C <sub>16</sub> H <sub>33</sub> OH	320	: 100
n=1		C <sub>16</sub> H <sub>33</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH	320	100
			+40	+20
			360	: 120
n=2		C <sub>16</sub> H <sub>33</sub> OCH <sub>2</sub> CHOCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH	320+40+40	: 100+20+75
			320	100
			40	20
n=3		C <sub>16</sub> H <sub>33</sub> O <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH	40	75
			+40	+75
			440	: 270

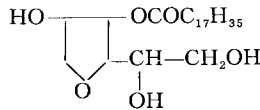
예 3) Sorbitan monostearate; Span 60

Pyranose (Mp; Low)



50%

Furanose (Mp; high)



50%

### 3-4 개념도와 HLB선

유기 개념도상의 직교좌표 사이의 어떤 원료의 유기성 : 무기성 값의 좌표와 좌표(-100, -60)을 연결하는 직선이 유기개념상의 HLB선이며 Griffins의 HLB화는 다소상이하다. HLB = 7 + 11.7 log  $\frac{M_w}{M_o}$ 로 계산한다.

$M_o$  친유성기의 분자량

$M_w$  친수성기의 분자량

예, C<sub>18</sub>H<sub>37</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-OH

## 4. 유기 개념도와 유화

콜로이드 과학에서 유화란 서로 혼합하지 않는 액상/액상의 분산상태를 말한다. 즉 각각의 상이 다성분으로 되어 있어도 유기성 : 무기성의 개념으로 2개의 상으로 나누어 취급할 수가 있다.

계면활성제의 친유성, 친수성의 대소를 나타내는 값으로 HLB가 있지만 개념도로는 그것을 각도(무기성/유기성)의 대소로 나타낼 수가 있고, 좌표가 나오기 때문에 화합물의 원점으로부터의 길이를 알 수 있다. 즉 동일 각도에서도 원점으로부터의 길이의 대소가 존재하고 그 길

이의 대소가 유화의 안정성, 사용감 등에 미치는 영향이 극히 크다는 것을 알 수가 있다.

유기화합물의 유화에의 이용에는 질과 양에 관한 인자가 있고 그것에 따라 각종의 유화의 정상 등 규칙성의 경향이 생긴다. 그리고 그 규칙성에 따라 개발할 제품에 응용을 질과 양의 인자를 선택할 수가 있다. 유기개념도를 사용한 유화에는 A형 유화와 B형 유화의 2종류가 있지만 일반적으로는 화장품 분야에서 광범위하게 사용되고 있는 크림, 유액등의 유화는 B형 유화이다.

### 4-1 유화의 질의 인자

유화시키려는 기름이 물(유기성 : 무기성 0 : 100)에 대하여 원점으로부터의 길이가 짧은가 긴가는 유화제의 선택법이나 온도에 대한 안정성이나 회석할 때의 기름에도 관계되기 때문에 벤젠, 제라친과 같은 짧은 기름(s-oil)인가 유동 파라핀 이상의 긴 기름(l-oil)인가에 유의할 필요가 있다. 일반적으로 짧은 기름일 때는 짧은 유화제를, 긴 기름일 때는 긴 유화제를 사용한다.

(1) 각도와 원점간의 길이

포화탄화수소와 같이 유기성치(유기축)뿐인

것으로부터 물과 같이 무기성치(무기축)뿐인 것의 사이에 있는 원료나 유화제를 하기의 식을 사용하여 “삼각관계의 수표”로  $\alpha$ 를 도분하여 구할 수가 있다.

$$\tan \alpha = \frac{\text{무기성치}}{\text{유기성치}}$$

각도는 극성과 비극성의 비의 값이고 각도가 적은 만큼 비극성을 의미하고 각도가 큰 만큼 극성을 의미하며, 같은 각도에서는 s가 1보다 더 잘 물에 녹는다. 원점 0와 좌표간의 거리(z)는 무기성치(y)와 유기성치(x)에서  $z^2 = x^2 + y^2$ 로 표시되며 유화상태의 온도( $20 \pm 25^\circ\text{C}$ )에 대한 안정성에 관계가 있다.

(2) A형과 B형 유화(성질과 량의 인자 점유)

유기개념도상 유화제가 A선 부근(수상측)에 많은가, B선 부근(유상측)에 많은가에 따라 A선 부근의 유화제의 량이 많을 때를 A형 유화라고 하며 B선 부근의 유화제의 량이 많을 때를 B형 유화라고 한다. 유동 파라핀의 B형 유화는 유동파라핀으로부터 B선까지를 유상(O)으로 유동파라핀 다음의 원료로부터 B선까지 선택된 원료를 유상측 유화제( $O_{SAA}$ )라 하며 B선으로부터 물까지를 수상(W)으로 하고 그 사이에 선택된 원료를 수상측 유화제( $W_{SAA}$ )라 한다. (제 3도에 표시)

또한 A형 유화는 유기측으로부터 A선까지를 유상으로 A선까지의 그 사이의 원료를 유상측 유화제라 하며 A선으로부터 무기축까지를 수상으로 그 사이의 원료를 수상측 유화제라 한다.

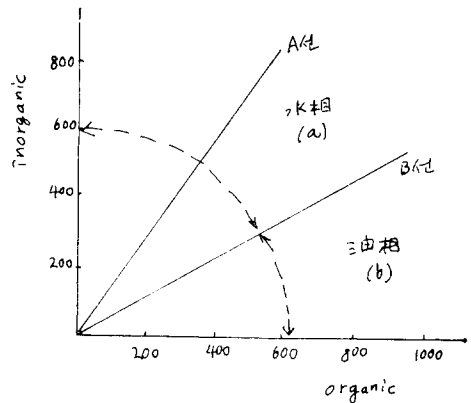
(제 4도에 표시)

(3) A선과 B선

개념도상의 원점 0에서 유기측으로부터 무기축에 향하여 1/3각도(30도)를 B선, 2/3각도(60도)를 A선이라 한다. (제 3, 4도에 표시)

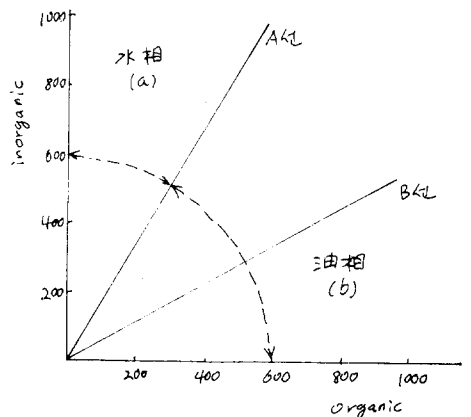
(4) 유화제의 선택

유화는 원점으로부터 A선인가, B선인가의 어느 쪽에 긴 유화제를 사용하는 편이 유화시키기가 쉽고 그리고 온도에 대한 안정성도 좋아진다. 이런 것으로부터 질의 선택에 제 5도에 표시한 것처럼 대별하여 4종류의 규칙성의 경향이 있다.



a: 水相側乳化劑의 配分領域  
b: 油相側乳化劑의 配分領域

제 3도 B型乳化에서의 油相 및 水相에 關한 概念圖



a: 水相側乳化劑의 配分領域  
b: 油相側乳化劑의 配分領域

제 4도 A型乳化에서의 油相 및 水相에 關한 概念圖

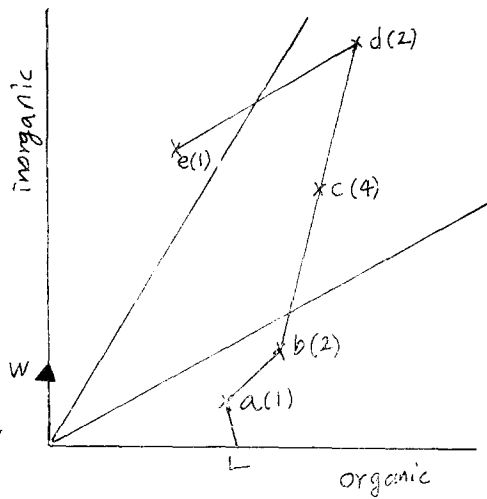


圖 5.1 BIA s:l

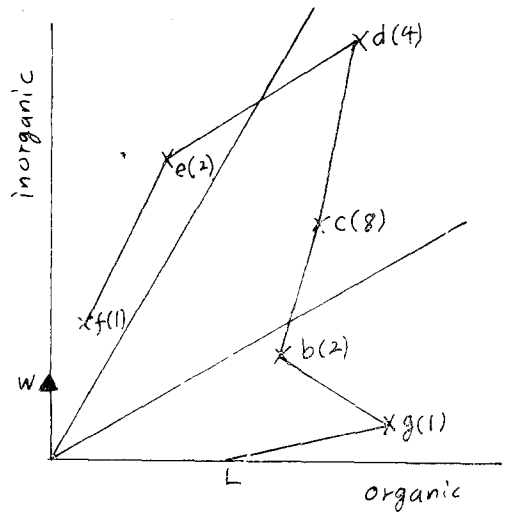


圖 5.2 BIA l:s

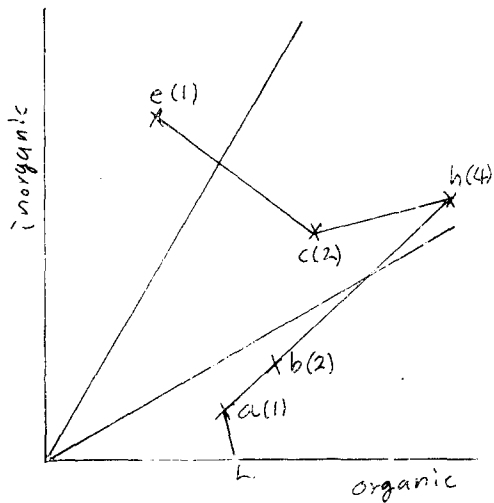


圖 5.3 B1B s:l

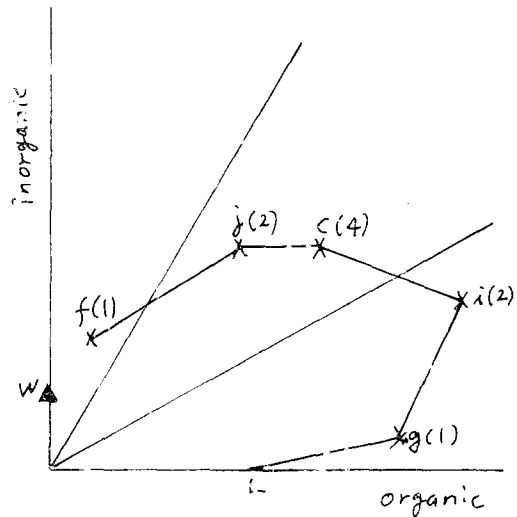


圖 5.4 B1B l:s

- a: cetyl alcohol
- b: propylene glycol monostearate
- c: P.O.E(6mol) stearyl ether
- d: P.O.E(20mol) Sorbitan monooleate
- e: N-Lauroyl Glutanic Acid mono sodium
- f: propylene glycol
- g: Beeswax
- h: PEG-400 distearate
- i: castor oil
- j: sorbitan monolaurate
- l: paraffin
- w: ion 交換水

제 5 도 B型乳化에서의 乳化劑의 質과 量을 나타내는 概念圖



(a) 1A란 A선 부근에 원점으로부터 가장 긴 유화제가 있는 경우이다. (도 5-1, 5-2에 표시)

(B) B란 B선 부근에 원점으로부터 가장 긴 유화제가 있는 경우이다. (도 5-3, 5-4에 표시)

(c) s:1란 유동 파라핀 다음에 사용된 유상층 유화제(이소프로필미리스테이트, 세틸알코올)가 유동 파라핀의 길이와 동등 혹은 짧은 것을 선택하고 그것에 대하여 물에 가까운 수상층 유화제로써는 그 보다도 긴(고급지방산 비누, N-라우릴구루타민산나트륨) 것을 택하는 경우이다. (도 5-1, 5-3에 표시)

(d) l:s란 유동파라핀 다음에 사용된 유상층 유화제(밀납, 울리브유등)가 유동파라핀보다 긴 것을 택하고 그것에 대하여 물에 가까운 수상층 유화제로써 그것보다도 짧은(글리세린, 프로필렌글리콜등) 것을 택하는 경우이다. (도 5-2, 5-4에 표시)

### 5-2 유화에 관한 “양”의 인자

유상 : 수상에 대한 유화제의 양 관계는 무한으로 자유이지만 이하의 배합과 같이 규칙적인 변화를 한다고 하면 아직 시험해 보지 않은 유화의 형식이나 상태를 알 수 있고 또한 기지의 처방이 어디에 속하고 있는가도 판명된다. 다시 이와같은 양 관계가 유화의 목적이나 상태까지도 추정가능하다.

(1) 유상대 수상에 대한 유상층 유화제, 수상층 유화제, 유상량(O)와 수상량(W)의 합계를 100으로 하고 제6도에 의하여 x축, y축의 어딘가에 유상량 또는 수상량을 취하여 그 좌표와 원점과의 내각 및 외각의 2등분선과 한쪽의 량과의 교점을 구하면 량의 변화에 대응하여 2층의 궤적의 곡선이 얻어진다.

각각의 점의 좌표의 1/10을 유상 : 수상에 대한 유상층 유화제 량 : 수상층 유화제 량으로 했다. 또한 대칭의 궤적선도 얻을 수 있고 이것에 번호를 붙이면 즉 유상이 수상보다 많은 경우, 우로부터 순번 1, 2, 3, 4 유상이 수상보다 적은 경우도 우로부터 순번 6, 5, 7, 8로 했다. (제 6 도에 표시) 이것은 하기의 방정식으로부터 구할 수

있다.

유상이 수상보다 많을 때

$$(내각) z = \frac{x}{10y} \{-x + \sqrt{x^2 + y^2}\}$$

……No. 1, 4 乳化線

$$(외각) z' = \frac{1}{10} \{-y + \sqrt{x^2 + y^2}\}$$

……No. 2, 3 可溶化線

유상이 수상보다 적을 때

$$(내각) z = \frac{y}{10x} \{-y + \sqrt{x^2 + y^2}\}$$

……No. 6, 7 乳化線

$$(외각) z' = \frac{1}{10} \{-x + \sqrt{x^2 + y^2}\}$$

……No. 5, 8 可溶化線

단 x, y는 유상량 또는 수상량(유상+수상=100%) z 또는 z'는 유상량 또는 수상량의 1/10 량에 대한 한쪽의 상의 유화제 량이다.

x(유상량) : y(수상량) = 60 : 40의 각각의 유화제 량의 계산

유상량, 수상량의 내각의 식을 사용하여

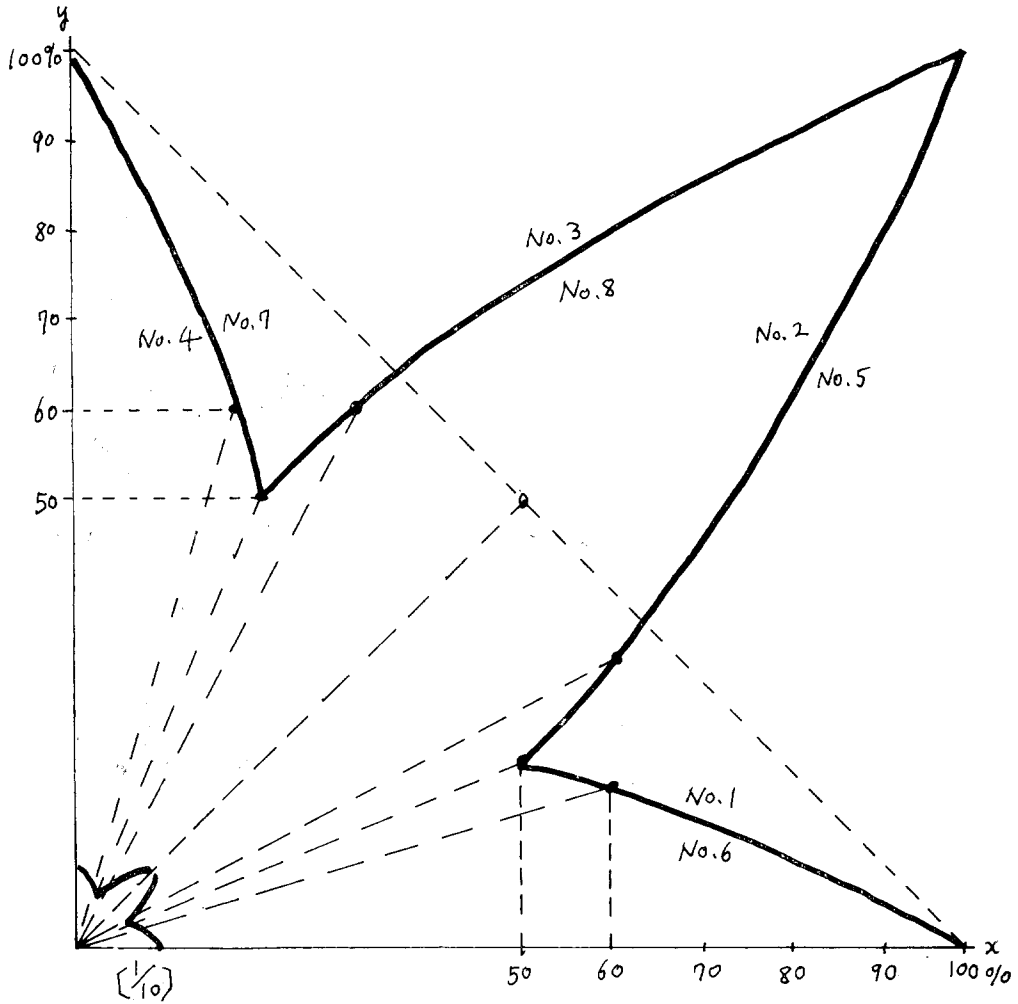
$$z = \frac{60}{10 \times 40} \{-60 + \sqrt{60^2 + 40^2}\} = 1.82$$

에 따라 유상량 : 수상량 60 : 40의 각각의 유화제 량은 궤적선 순번 1의 6.0 : 1.82와 대칭 궤적선 순번 4의 1.82 : 6.0의 2종류의 유화제 량이 있다.

이상으로부터 임의의 유상량 : 수상량에 대하여 4가지의 유상층 유화제 량이 구해질 수 있기 때문에 유상량 : 수상량이 85 : 15 - 50 : 50 - 15 : 85까지를 5%마다 번호별로 프롯트한 표를 만들어 각각의 유화형과 조합함으로써 질과 량의 계통적인 변화상태를 알 수 있다.

#### (2) 량의 배분방법

유상층 유화제 : 수상층 유화제의 배분방법은 제 3 도의 배분영역 및 제 5 도의 질을 사용하여 괄호내에 기재된 수가 표시하는 것과 같이 유상층 유화제는 기름으로부터 B선에 향하여 공비 2의 등비수열로 배분하고 수상층 유화제는 물로부터 B선에 향하여 공비 2의 등비수열로 배분한다. (B형 유화)



제 6 도 油相量 : 水相量에 對한 油相側乳化  
劑 量 : 水相側乳化劑量의 變化의 規定圖

(3) 배분방법의 실시예

유상량 : 수상량 = 70 : 30에서의 4종류의 유화제의 량을 사용하고 제 5도의 5-2의 질을 사용하여 유상 및 수상에 대한 각각의 유화제량 비의 관계가 유화의 안정성, 사용감 등에 미치는 영향의 기초적 배합 연구 예를 열거하며 유화제

량의 변화가 유화에 미치는 2~3의 규칙적인 경향과 응용적인 개량방법을 설명한다. 배합된 유화제 및 원료를 제 7도에 표시한다. (배합된 원료 및 유화제를 a.b.c.....로 기재한다)

(a) 실시예

배 합 원 료	기 호	계 적 선 변 호			
		No. 1	No. 2	No. 3	No. 4
유동 파라핀	L	46.0	46.0	48.4	51.6
바셀린 (일국)	a	10.0	10.0	10.0	10.0
고형 파라핀 (130F)	b	7.0	7.0	7.0	7.0
밀납 (영 2호)	c	1.0	1.0	0.6	0.2
아미테트 엘.지.에스.2	d	2.0	2.0	1.4	0.4
에마렉스 6J3	e	4.0	4.0	2.6	0.8
에마렉스 606	f	0.7	2.5	4.0	4.0
피로테르 GPI-25	g	0.4	1.2	1.8	1.8
아미소프트 LS-11	h	0.2	0.6	0.8	0.8
피로필텐글리콜	i	0.1	0.3	0.4	0.4
방부제		0.1	0.1	0.1	0.1
이온교환수	W	28.5	25.3	22.9	22.9
		100.0%	100.0%	100.0%	100.0%

유화방법 :

(O) 80도씨, (W) 85도씨까지 가온하여 (O) 를 교반 혼합하면서 (W)을 서서히 가하고 수냉, 교반하면서 유화물을 얻는다.

(b) 제 7도에 표시한 것과 같이 유상량 : 수상량 = 70 : 30에서 제 5도의 5-2의 질을 사용하여 유화제 량비가 4종류이기 때문에 아주 정상 등이 다른 4종류의 유화가 얻어진다. 따라서 유상량 : 수상량 = 70 : 30에서 제 5도의 질을 사용하여 각각 검토한 경우 16종류의 정상등의 다른 유화가 얻어질 수 있다.

(c) 유화제의 량비의 관계가 유화에 미치는 영향으로써 다음과 같은 규칙적 경향이 나온다.

- 1) 유화물이 폐수성 및 유분감의 강한 경향  
도7-1)도7-2)도7-3)7-4
- 2) 유화물이 물에서 재유화하기 쉬운 경향  
도7-4)도7-3)도7-2)도7-1
- 3) 고온에 안정한 유화의 경향  
도7-4)도7-3)도7-2)도7-1)
- 4) 저온에 안정한 유화의 경향  
도7-1)도7-2)도7-3)도7-4)
- 5) 점도(상온)가 높은 경향  
도7-1)도7-2)도7-3)도7-4)
- 6) 비유상(대) 수상의 각각의 유화제 량에 배율을 하는 경우 가용화를 만들기 쉬운 경향

도7-2)도7-1)도7-3)도7-4)

(d) 제 7도에서는 유화제의 질을 고정하여 유상대 수상의 유화제 량비의 변화가 유화에 미치는 영향등에 대하여 기술했지만 제7도에 표시한 각각의 유화를 목적으로 하는 온도(20±25°C) 범위에서 안정하게 하기 위하여는 유화제의 질 및 량과의 사이에 다음과 같은 규칙적인 경향이 있다.

제 7도의 B선(각도 30도) 이하의 각각의 유상측 유화제의 질 및 량은 고정하고 수상측 유화제의 질을 보다 비극성(각도가 적고 A선 부근에 원점으로 부터의 거리가 짧은 것)으로 한 경우 유화가 온도에 대하여 안정하게 되는 경향

도7-4)도7-3)도7-2)도7-1

(e) 제7도의 B선 이상의 각각의 수상측 유화제의 질 및 량은 고정하고 유상측 유화제의 질을 보다 극성(각도가 크고 원점으로 부터의 거리가 짧은 것)으로 하는 경우, 유화가 온도에 대하여 안정하게 되는 경향 :

도7-1)도7-2)도7-3)도7-4)

(f) 제7도에서 기술한 규칙적인 경향을 앞에 따라 목적으로 하는 화장품을 만들기 위한 최적 유화제 량 비를 선택할 수가 있다. 그 2~3종의 예를 하기에 표시하면,

가) 콜드크림, 나이트크림 등은 일반적으로 폐수성 및 유분감을 목적으로 하고, 피부에

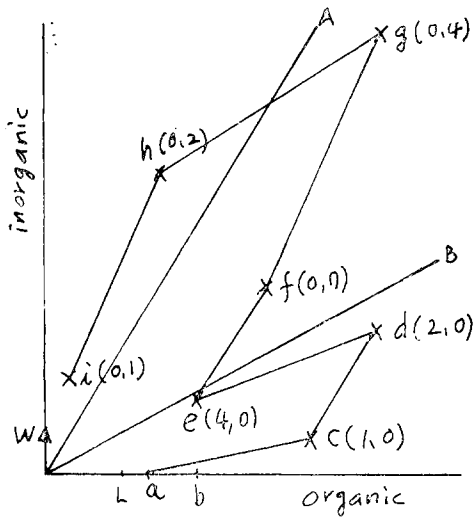


圖 7-1 軌跡番號 No.1의 量의 配分

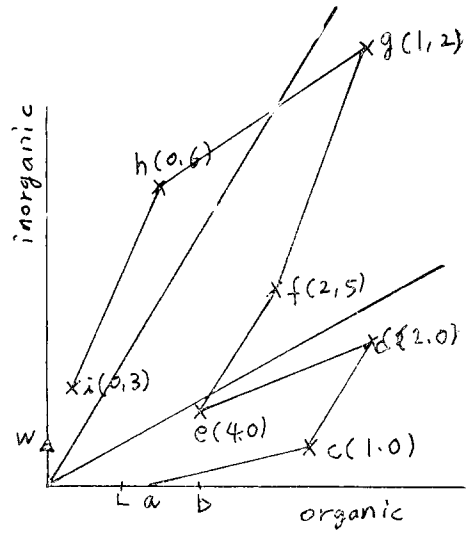


圖 7-2 軌跡番號 No.2의 量의 配分

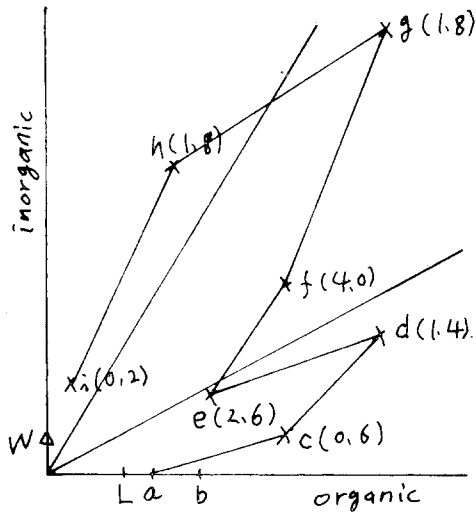


圖 7-3 軌跡番號 No.3의 量의 配分

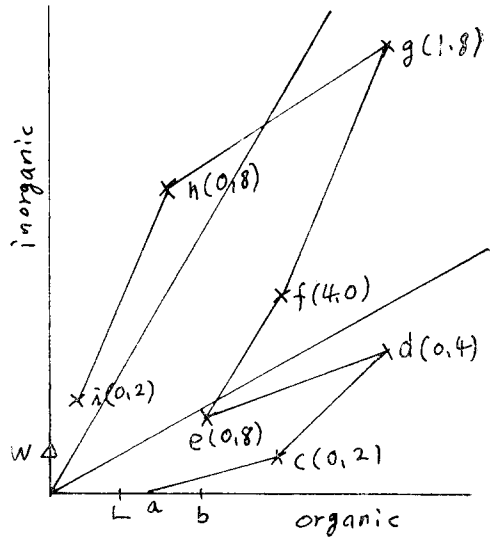


圖 7-4 軌跡番號 No.4의 量의 配分

제 7 도 油相 : 水相 = 70 : 30에서의 4種類의 乳化劑量比의 配分을 나타내는 概念圖

시간 도포하는 제품의 경우는 도7-1, 7-2가 적당하다.

나) 크린싱 크림, 욕제 등 일반적으로 단시간이고 피부보다 세척등에 의하여 제거를 목적으로 하는 제품의 경우는 도7-3, 7-4가 적당하다.

### 5-3 A형 유화

A형 유화는 B형 유화에서 기술한 질 및 량의 제인자에 대하여 공통된 점은 많지만 상이한 점으로 다음과같은 질 및 량의 인자가 있다.

(1) A형 유화에서의 유상 : 수상 및 유상측 유화제 : 수상측 유화제의 배분영역

유동파라핀의 A형 유화는 유동파라핀으로부터 A선까지를 유상(O)으로 하고 유동파라핀 다음의 원료로부터 A선까지에 택한 원료를 유상측 유화제(O<sub>SSA</sub>)라 한다. A선으로부터 늘까지를 수상(W)으로 하고 그 사이에 택한 원료를 수상측 유화제(W<sub>SAA</sub>)라 한다. (제 4 도에 표시)

(2) A형 유화에서의 유상측 유화제 : 수상측 유화제의 배분방법

제 4 도의 배분영역 및 제 8 도의 질을 사용하여 괄호내에 기재한 수가 표시하는 것처럼 유상측 유화제는 기름으로부터 A선에 향하여 공비 2의 등비수열로 배분하고 수상측 유화제는 물로부터 A선을 향하여 공비 2의 등비수열로 배분한다.

(3) 유동파라핀등의 비극성의 기름을 물에 가용화시키는 경우 유상량 ≤ 수상량의 기본으로 제 6 도에 표시한 제적번호 No.5 및 No.8의 유화제 량을 사용하고 도8-1 및 도8-2에 표시된 질을 사용하여 배합하면 용이하게 가용화한다. 단 유상량 : 수상량 = 30 : 70 전후 (20 = 80, 40 : 60의 양비)의 양비에서는 유상 : 수상의 각각의 유화제 량에 배율을 하면 가용화능은 증대한다.

(4) 일반적으로 A형 유화의 개념이 화장품 분야에 응용되고 있는 제품으로써 수용성 투명 포마드, 비누, 샴푸, 린즈, 화장수 등이 있다.

### 5-4 B형 유화 및 A형 유화에서 유화제의 질 및 량의 변화가 유화, 가용화 기타의 성상에 미치는 영향

(1) 제 6 도의 No.1, 2, 3, 4는 가용화성으로 2B 및 3B는 기준량(제 6 도에 의하여 얻은 1/10량)의 유화제에 배율을 곱하면 사용된 기름에 투명하게 가용화하고 5A 및 8A도 同一한 방법으로 물에 투명하게 가용화한다.

(2) 배합된 유화제의 질이 온도(20 ± 25°C)에 대하여 아주 안정한 유화를 만드는 경우 기준량의 1/수 ~ 1/(수+량)의 유화제로도 안정한 유화를 얻을 수 있다.

(3) No. 2의 유상 : 수상 = 70 : 30에서 얻어진 유화에 사용된 기름을 가해도, 물을 가해도 다른 No.로는 진상하지 않는다.

(4) 기포성(친수성)으로부터 보면 (a) 수상 > 유상 (b) A > B (c) I<sub>B</sub> > I<sub>A</sub> (d) s : l > l : s (e) 수상측 유화제 > 유상측 유화제 등의 조건에 합당한 7A1As : l이 가장 기포성이고 IB1B1 : s가 가장 소포성인 것을 알 수 있다.

(5) 유분감(친유성, 폐수성)은 (a) 유상 > 수상 (b) B > A (c) I<sub>B</sub> > I<sub>A</sub> (d) l : s > s : l (e) 유상측 유화제 > 수상측 유화제 등의 조건에 합당한 IB1B1 : s가 가장 유분감이 강하다.

(6) 제 5 도에 표시된 B형 유화에서는 다음과같은 경향이 있다.

(a) 유분감이 강한 경향 :

도5-4 > 도5-3 > 도5-2 > 도5-1

(b) 점도의 높은 경향 :

도5-1 > 도5-2 > 도5-3 > 도5-4

(c) 물에서 희석하기 쉬운 경향 :

도5-1 > 도5-2 > 도5-3 > 도5-4

(7) 5B와 6B에 물을 가해도 6B에서는 B선의 부근에 유상측 유화제(OSAA)의 량이 수상측 유화제(WSAA)의 양보다 훨씬 더 많고 5B는 가용화이기 때문에 점도가 내려가지 않으며 마찬가지로 3B와 4B에서도 OSAA의 양이 WSAA의 양보다 적기 때문에 기름을 가해도 점도가 내려가지 않는다.

## 6. 유화제품의 처방작성법과 처방예

### 6-1 유화제품의 처방 작성법

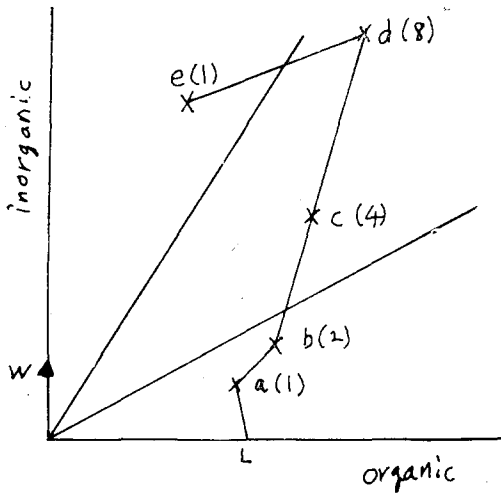


圖 8-1 A1A s:1

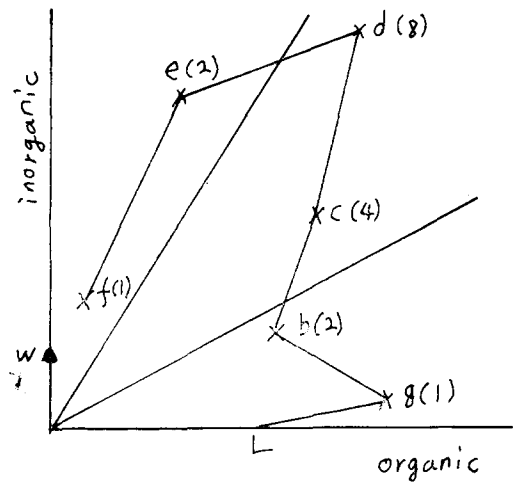


圖 8-2 A1A 1:s

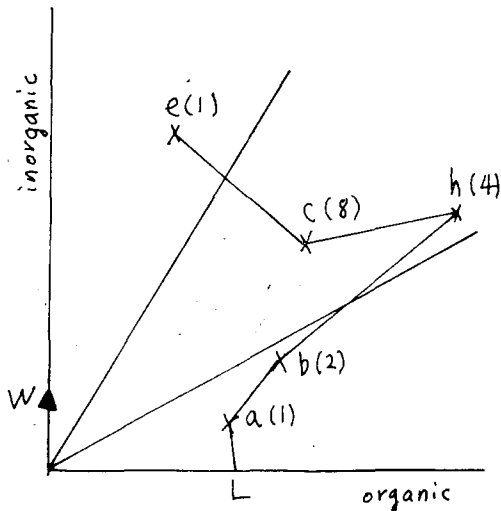


圖 8-3 A1B s:1

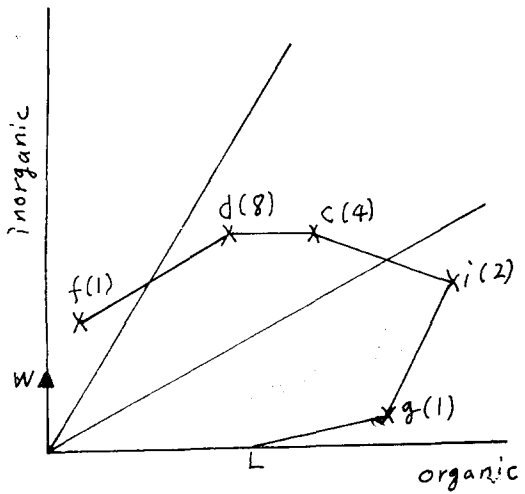


圖 8-4 A1B 1:s

a : Cetyl alcohol  
 b: Propylene Glycol Monostearate  
 c: P.O.E.(6mol) stearyl ether  
 d: P.O.E (20mol) Sorbitan Monooleate  
 e: N-Lauroyl Glutamic Acid mono sodium  
 f: Propylene Glycol

g: Beeswax  
 h: PEG-400 distearate  
 i: castor oil  
 j: sorbitan mono laurate  
 l: Liquid paraffin  
 w: ion交換水

제 8 도 A型乳化에서의 乳化劑의 質 및 量을 나타내는 概念圖

유화제품을 만들기 위해서는 다음과 같은 사항을 생각할 수 있다.

1) 물과 유화시키기 위한 기름에는 무엇이 있는가?

2) 어떤 상태의 유화로 하는가?

(W/O, O/W유상, 수상의 량, 조도, 점도의 고조, 유백도, 가용화, 기포성, 소포성, 친유성 친수성 등)

(3) 유상, 수상량에 대하여 각각 어느 정도의 유화제를 필요로 하는가?

(4) 가능한 유화제품이 목적으로 하는 사용감을 만족하고 필요 온도 범위에서 안정도를 가지고 있는가?

예를 들면, 콜드크림을 만드는 데에 필요한 조건을 간단히 기술해 보면 다음과 같이 생각할 수 있다.

- 1) o/w인가 w/o인가?
- 2) 기름과 물과의 양비
- 3) 친유성, 친수성의 정도
- 4) 조도
- 5) 사용중의 유분감, 도포중의 유백도의 유무
- 6) 사용중 퍼지는 점도
- 7) 사용후의 감각성
- 8) 특정 첨가물의 유무
- 9) pH
- 10) 안정온도의 필요범위
- 11) 사용하는 기름은 탄화수소를 주로 하는가?

다음에 콜드크림의 필요조건을 기술해 보자.

1) 콜드크림은 피부에 도포하는 기초 화장품인 고로 피부장해가 적고 유분이 많은 것이 필요하기 때문에 B형으로 한다.

2) 유분이 많고 수분이 적은 편이 좋기 때문에 양의 표 No. 1-8까지 중 No.1-4가 유분량이 많기 때문에 No.1-4로 한다. 단, O : W량비가  $\frac{o:w}{50:50}$ — $\frac{o:w}{85:15}$ 까지이지만 O : W량비를 70 : 30으로 한다. (70 : 30은 크림상에 가까운 조도를 가진다)

3) No.1-4중의 OSAA와 WSAA량비의 변화량을 보면 No.1이 제일 WSAA가 적고 OSAA가 많

기 때문에 유분감도 많게 된다. 또한 WSAA가 적기 때문에 피부 장해도 적은 경향이 있으므로 No.1로 한다. (No.1은 조도도 크림상에 가까운 것으로 되려는 경향이 강하다)

4) 다음에 권유성, 친수성의 관계에서는 친유성이지만 친수성도 필요로 한다. 그것은 피부에 발랐을 때 무거운 느낌이 적고 또한 비누, 화장수 등으로 지우기 쉬운 정도의 친수성으로 한다. 그것은 다음과 같은 경향이 있다. 수분 50% 이하의 경우 (No.1-4)에서는 친유성이 큰 순서는

(가) No.1)No.2)No.3)No.4의 순으로 된다. 이것은 OSAA와 WSAA의 량비의 변화에 의한다.

(단, O : W량비의 오일량비가 큰 쪽이 친유성이 크다.  $\left( \frac{o:w}{85:15} > \frac{o:w}{50:50} \right)$

(나)  $l_B$ 와  $l_A$ 에서는  $l_B$ 의 방향이 친유성이 크다.  $l_B > l_A$

(다) s : l와 l : s에서는 l : s의 쪽이 친유성이 크다. l : s > s : l

이상으로부터 친유성의 최대는 No.1의 B에서는  $1Bl_B l : s > 1Bl_B s : l > 1Bl_A l : s > 1Bl_A s : l$ 의 순이고 또한 O : W량비의 기름량이 많은 편이 친유성이 크기 때문에  $1Bl_A l : s$ 의 O : W량비를 70 : 30으로 본다.

사용중 유분감을 가지고 도포중 유백도가 없는 것의 순은  $l_B l : s > l_B s : l > l_A l : s > l_A s : l$ 로 되기 때문에 도포중의 유백도는 비교적 적고 유분감을 가진 제품으로 하고 싶으므로  $l_A l : s$ 로 했다. 단, l : s의 l의 길이가 길게 되면 유분감도 커진다. 달리  $l_A$ 가 길어지면 유분감도 적어지고 도포중의 유백도가 나타난다. s : l의 s가 짧아지면 반대로 유분감이 적어지고 도포중의 유백도는 커진다.  $l_B$ 가 길어지면 유분감도 커지고 도포중의 유백도는 적어진다. 이상으로부터 보아  $1Bl_A l : s \frac{o:w}{70:30} (xi)$ 로 결정했다.

6) 사용후의 감각도  $1Bl_A l : s$ 는 유연성이기 때문에 양호하다고 생각되며 퍼짐성도 l : s이기 때문에 좋은 경향이 되리라 생각된다.

7) 이상에서 필요조건에 대부분이 결정되었지만 최후에는 온도 안정성의 문제가 남아 있다.

이상의 필요조건을 만족하는가 어떤가는 실제로 처방을 짜서 실험을 행하는 것이다.

실험을 계통적으로 용이하게 행할 수 있는 유화 이론이다.

## 7. 결 론

유기 개념도를 이용한 유기화합물의 유기방법을 개략적으로 서술했으며 유상 대 수상에 대한 유상측 유화제 대 수상측 유화제의 양비관계의 변화와 질의 경과를 조합함으로써 유화상태의 변화경향과 목적으로 하는 유화상태를 예측할 수 있으며 복잡한 다성분이 배합된 화장품의 처방

## 참 고 문 헌

1. 유기개념에 의한 유화제의 선택방법  
(일본 에밀존)
2. 유기화합물의 예측과 유기개념도  
(화학의 영역, vol. 11 No.10 Oct. 1957)
3. 유기정성분석  
(가자마 소보편, 후지다 아쓰시著)