

# 혼합물 실험 계획법을 활용한 세정용 계면활성제 혼합물 조성의 최적화

송마리아 · 진병석<sup>†</sup>

동덕여자대학교 보건향장학과  
(2021년 8월 25일 접수, 2021년 10월 1일 수정, 2021년 10월 5일 채택)

## Optimization of Surfactant Mixture Composition for Cleansing Using Mixture Experiment Design

Maria Song and Byung Suk Jin<sup>†</sup>

Department of health and cosmetics, Dongduk Women's University, Seoul 02748, Korea  
(Received August 25, 2021; Revised October 1, 2021; Accepted October 5, 2021)

### 초 록

최고 품질의 클렌징 제품 개발을 위해서 계면활성제 혼합물 조성의 최적화를 시도하였다. 사전실험을 통해 세정력, 기포형성력, 오염물에서 각각 우수한 특성을 나타내는 계면활성제 3종 sodium cocoyl alaninate (SCoA), cocamidopropyl betaine (CPB), decyl glucoside (DG)을 선정하였다. 계면활성제 혼합물의 심플렉스 중심 설계 배열에 따른 실험을 수행하고, 실험에서 얻어진 데이터를 가지고 회귀분석을 실시하였다. 통계적으로 유의미한 반응 표면 모델식을 구하고, 세 개의 반응변수의 동시 최적화 과정을 통해 계면활성제 혼합물의 최적 조성은 SCoA (0.22), CPB (0.78), DG (0.00)으로 구해졌다.

### Abstract

The main goal of this study was to find an optimal surfactant mixture composition for the development of the best performing cleansing products. Three different surfactants including sodium cocoyl alaninate (SCoA), cocamidopropyl betaine (CPB), and decyl glucoside (DG) were selected, which showed excellent properties in detergency, foaming height, and contamination rate through preliminary experiments. The experiments by simplex centroid design matrix for surfactant mixtures were performed, and the regression analysis was conducted with the experimental data. Surface response model equations, which is statistically significant ( $p < 0.05$ ), were obtained. The optimal composition of the surfactant mixture was also determined as SCoA (0.22), CPB (0.78), and DG(0.00) from simultaneous optimization of three response variables.

**Keywords:** Mixture experiment design, Optimal mixture composition, Surfactant, Cleansing, Detergency

## 1. 서 론

계면활성제란 두 개의 상(phase)의 계면에 흡착되어 계면의 자유에너지를 낮추고 계면의 성질을 크게 변화시키는 물질로, 유화, 가용화, 분산, 세정, 대전방지, 습윤, 기포형성, 응집 등의 다양한 기능을 발휘한다. 따라서 계면활성제는 세제, 비누, 샴푸, 화장품, 식품 및 음료수 등 일상 제품을 비롯해 섬유, 도료, 제지, 전기, 전자, 고무 등 산업 전반적인 분야에 이르기까지, 광범위한 용도에서 필수적인 물질로 널리 사용이 되고 있다[1-3].

계면활성제는 소수성기와 친수성기를 모두 포함하는 화학 구조로, 친수성기의 형태에 따라 양이온, 음이온, 양쪽성 및 비이온 계면활성

제로 분류된다. 양이온 계면활성제는 살균 작용과 정전기 발생 억제 특성이 있어 소독제, 섬유유연제, 헤어 컨디셔닝 제품[4]에 사용되고 있으며, 양이온 계면활성제의 상당 부분은 아민염 및 4차 암모늄 화합물을 포함한 질소 화합물이다[5]. 음이온 계면활성제는 친수성기가 carbonyl, sulfate, sulfonate, phosphate 등의 음전하 작용기로 구성되어 있는데, 우수한 세정능력과 기포형성 능력, 그리고 저렴한 가격 등의 요인으로 전 세계적으로 가장 많이 소비되고 있다[6,7]. 양쪽성 계면활성제는 양이온과 음이온 작용기를 모두 보유하고 있어 용액의 pH에 따라 전하의 +, -극성이 달라지는 특징이 있다. 비이온 계면활성제는 친수성기가 이온화 되지 않기 때문에 용액 내 전해질이나 pH 변화에 비교적 안정적이며, 이온성 계면활성제에 비해서 피부에 자극이 적기 때문에 피부에 바르는 화장품에 가장 널리 쓰인다[8]. 비이온 계면활성제는 친수기에 따라 두 가지 부류로 나누는데, 여러 개의 수산기(-OH)로 구성된 폴리올(polyol)류와 폴리옥시에틸렌(POE)가 결합된 POE류로 구분된다.

계면활성제 단일성분으로 사용했을 때보다 여러 유형의 계면활성

<sup>†</sup> Corresponding Author: Dongduk Women's University  
Department of health and cosmetics, Seoul 02748, Korea  
Tel: +82-2-940-4513 e-mail: bsjin@dongduk.ac.kr

제를 혼합하여 사용할 때 시너지 효과가 나타나게 되는 경우가 많은데, 많은 연구에서 계면활성제를 단독 사용할 때보다 여러 계면활성제를 혼합 사용할 때, 더 우수한 성능을 보인다는 결과를 보고하였다 [9-11]. 세탁세제의 배합에서 단일 계면활성제보다 여러 종류의 계면활성제를 혼합할 때 기름때의 제거가 우수하게 개선되었음이 관찰되었고, 계면활성제를 혼합 사용하면 계면활성제 단독보다 훨씬 낮은 농도에서도 효과적으로 기능을 발휘하기 때문에 폐기물이 적게 생성되는 효과도 있다[12]. 유화 증합 연구에서 계면활성제를 단일성분으로 사용했을 때보다, 계면활성제를 혼합하여 사용하면 유화증합 속도가 더 빠르다는 결과가 보고되었다[13].

계면활성제를 혼합 사용하는 것은 어떠한 특정 기능의 시너지 효과를 위한 것도 있지만, 계면활성제의 각기 다른 기능을 복합한다든지, 단가나 안전성 등을 고려하여 계면활성제를 혼합 사용하는 경우도 많다. 따라서 일상에서 쉽게 접하는 의약품, 화장품, 세정제 등의 제품의 전 성분을 자세히 살펴보면 여러 개의 계면활성제가 혼합되어 있는 경우가 보편적이다. 이와 같이 제품에 계면활성제의 혼합 적용이 일반적인데도 불구하고, 기존에 계면활성제 혼합조성에 따른 특정 물성의 변화를 살펴보기나 혼합조성을 최적화하는 설계과정 방법에 관한 연구가 보고된 적이 거의 없었다.

따라서 본 연구에서는 혼합물 실험계획법을 도입하여 세정용 계면활성제 혼합물 조성의 최적화를 설계 진행하고자 한다. 혼합물 실험 계획법은 혼합물 구성을 변경하고 이러한 변화가 혼합물의 특성에 어떤 영향을 미치는지 탐구하는 설계방법으로, Simplex Lattice Design, Simplex Centroid Design, Lambrakis Design 등의 경제적 실험 방법을 통해 혼합물 구성을 최적화 할 수 있다. 계면활성제가 사용되는 제품들 중에서, 특히 세정용 제품은 전체 함량 중 계면활성제 비중이 가장 크고, 계면활성제가 제품의 물성에 미치는 영향이 매우 크다. 본 연구에서는 세정용 제품에서 요구되는 물성인 세정력, 기포형성력, 오염률을 기반으로 심플렉스 중심설계(Simplex Centroid Design)를 채택하여 계면활성제 혼합조성 설계를 진행하고, 회귀분석을 통해 혼합물 조성과 특성들 사이의 관계를 분석하여 혼합물 조성의 최적화를 시도하였다.

## 2. 실험

### 2.1. 사용 원료

일반적으로 시중 제품에 많이 사용되고 있는 계면활성제를 중심으로, 본 연구에서는 음이온, 양쪽성, 비이온 등 종류별 9개의 계면활성제를 다음과 같이 선택하였다. 음이온 계면활성제는 sodium cocoyl alaninate(상품명 MIAMI SCA, 미원상사, 약자 SCoA), sodium lauryl sulfate(상품명 MICOLIN S430, 미원상사, 약자 SLS), disodium laureth sulfosuccinate(상품명 MICONATE DLS(P), 미원상사, 약자 DLS), sodium cocoyl glutamate(상품명 MIAMI CS25, 미원상사 약자 SCoG) 4 종류를 사용하였다. 양쪽성 계면활성제는 cocamidopropyl hydroxysultaine(상품명 MITAINE CAPHS, 미원상사, 약자 CPHS), cocamidopropyl betaine(상품명 MITAINE CA, 미원상사, 약자 CPB) 2 종류를 사용하였다. 비이온 계면활성제는 decyl glucoside(상품명 Plantacare® 2000 UP, BASF사, 약자 DG), poloxamer(상품명 Poloxamer 407, Sigma사, 약자 PO), polysorbate(상품명 Tween® 60, 대정화금, 약자 PS60) 3 종류를 사용하였다. 이후 본문 내용에 계면활성제의 명칭은 편의상 약자로 표기하였다. 본 실험에 사용되는 모든 계면활성제는 각 제품별 assay 비율이 최소 30%에서 최대 98%까지 제각각 다르기

때문에, 실험에서 정량을 할 때는 각 제품의 assay 비율을 기준으로 함량을 보정하였다.

### 2.2. 세정력 테스트

세정력 시험은 합성세제 세정력 시험방법 KS M 2709을 활용하여 Terg-O-Tometer (HS-115, 흥신기계, Korea)를 이용하여 실시하였다. 면(cotton) 소재의 오염포 E-106 (Testfabrics, USA)를 5 × 5 cm<sup>2</sup> 크기로 잘라서 Terg-O-Tometer에 4매씩 넣고, 수돗물 1 L 당 계면활성제 1 g을 각각 혼합하여 0.1 wt% 농도로 맞춘 후 40 °C, 40 cpm으로 20 분간 세탁을 실시한다. 세탁 처리된 물을 버리고 같은 조건에서 새로운 물 1 L로 3분 동안 행구는 과정을 2회 반복한 후 자연 건조시킨다. 색차계 CR-400 (KONICA MINOLTA, Japan)의 표색계를 (X,Y,Z)로 설정한 후, 세탁처리 전후의 오염포와 원포 표면의 Y 값(백도)을 측정하여 세정력을 평가하였다. 세정력 %는 아래와 같이 계산되었다.

$$\text{세정력(\%)} = \frac{(\text{세척후 오염포 백도} - \text{세척전 오염포 백도})}{(\text{원포 백도} - \text{세척전 오염포 백도})} \times 100$$

### 2.3. 기포형성력 테스트

계면활성제의 기포형성력은 계량된 Ross-Miles (1989)인 KS M 696 방법을 활용하여 측정하였다. 수돗물 250 g에 각 계면활성제를 0.1 wt% 농도로 녹여 혼합한다. 이 중 50 g 을 먼저 기포 테스트 컬럼 상부의 피펫을 통해 컬럼에 떨어트린다. 그리고 나머지 200 g을 컬럼 벽면에 묻지 않도록 피펫을 통해 먼저 떨어진 물의 액면 중심 위치에 떨어트린다. 물이 떨어지는 거리는 90 cm 이상으로, 물을 다 떨어트리고 나서 기포가 어느 정도 안정이 된 후 형성된 기포 높이를 측정하였다. 기포의 안정성(지속력)을 살펴보기 위해 5분 후에 기포 높이를 다시 측정하였다.

### 2.4. 오염률 테스트

비커에 수돗물 20 g 당 계면활성제 0.02 g을 각각 혼합하여 0.1 wt% 농도로 맞춘 후, 수성용 블랙 잉크 0.2 wt%를 넣는다. 여기에 E-217 (Testfabrics, USA) 울(wool) 소재의 백색 원포를 5 × 5 cm<sup>2</sup> 크기로 잘라서 넣고, 60 °C 오븐에서 30분 동안 보관한다. 오염포를 비커에서 꺼내서 흐르는 수돗물에 행군 후 자연 건조 시킨다. 원포와 오염포의 표면을 색차계로 측정하여 아래와 같은 식으로 오염률을 평가하였다.

$$\text{오염률(\%)} = \frac{\text{세척전 원포} - \text{계면활성제 처리된 오염포}}{\text{세척전 원포}} \times 100$$

### 2.5. 혼합 조성 최적화를 위한 실험 계획 방법

계면활성제의 혼합조성의 최적화를 위해, 혼합물 실험계획법의 심플렉스 중심설계에 따라 실험을 실시하고 MINITAB 17.0을 이용하여 분석을 수행하였다. 계면활성제 혼합물 조성비율을 독립변수, 계면활성제의 특성인 세정력, 기포형성력, 오염률 등을 반응 변수(특성치)로 선택하여, 각 반응 변수 별 데이터를 분석하여 적합한 모델을 결정하였다. 또한 호감도 함수의 가중치를 적용하여 세 반응변수(세정력, 기포형성력, 오염률)를 동시에 만족시키는 최적의 혼합조성을 구하고 최적 조성에서의 확인실험을 진행하여 최적화 과정의 타당성을 검증하였다. 아래의 Figure 1은 실험계획법 과정의 순서도를 나타내었다.

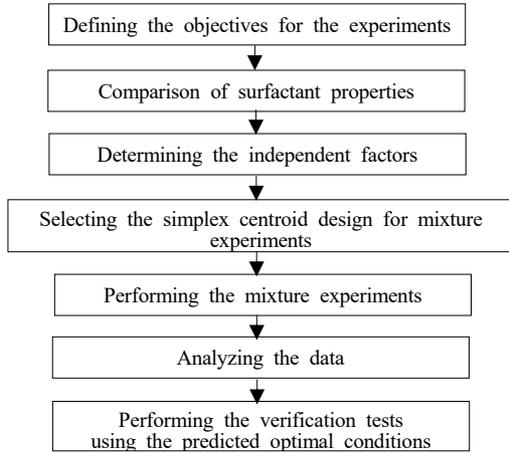


Figure 1. Flowchart for experimental design.

### 3. 결과 및 토론

#### 3.1. 계면활성제의 물성 비교

Figure 2는 물에 9종의 계면활성제를 각각 0.1 wt% 농도로 첨가하여 세정력을 비교한 결과이다. 계면활성제 없이 수돗물만 세척했을 때(R.W.)보다 모두 세정력이 높게 나타나는데, 특히 CPB와 SLS는 다른 계면활성제에 비해 월등한 세정력을 보여주었다. 일반적으로 세정력은 음이온 계면활성제가 가장 우수한 것으로 알려져 있으나[14], 양쪽성 계면활성제인 CPB가 세정력 18%로 가장 우수하게 나타나고, 심지어 시중에 세정제로 가장 많이 사용되고 있는 음이온 계면활성제 SLS보다도 세정력이 더 우수한 것으로 나타났다. CPB, SLS 다음으로 비이온 계면활성제인 DG와 음이온 계면활성제인 SCoA가 세정력이 높게 나타나고, 반대로 비이온 계면활성제 PS60가 세정력이 3%로 가장 낮게 나타났다.

Figure 3은 계면활성제의 기포형성력을 비교한 것이다. 비이온 계면활성제인 DG, 양쪽성 계면활성제 CPB, 음이온 계면활성제 SCoA의 기포가 20 cm 이상 높게 형성되었고, 비이온 계면활성제 PO, PS60과 음이온 계면활성제 SCoG는 3 cm 이하의 높이로 기포 형성이 잘 되지 않았다. 위 실험은 수돗물을 사용한 결과로, 본 논문에 그림으로 나타내지 않았지만 수돗물 대신 증류수를 사용했을 때와는 기포형성 높이에 차이가 많다. 특히 음이온 계면활성제는 그 차이가 두드러지는데, SLS 경우 증류수에서는 23 cm 높이로 기포 형성이 잘 되었지만, 수돗물에서는 높이가 7 cm 정도로 기포 형성이 적어졌다. 이는 음이온 계면활성제가 수돗물에 녹아있는 무기 이온들과 염을 형성하면서 기포형성에 영향을 주기 때문이다. 증류수와 달리 수돗물에는  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$  등과 같은 무기 이온이 존재하는데, 실제로 증류수와 수돗물의 이온 전도도를 측정하니 증류수는  $6.6 \mu S$ , 수돗물은  $358 \mu S$ 의 값으로 나타나고, 무기 이온의 총경도를 측정해보니 증류수는 0 ppm, 수돗물은 70 ppm으로, 증류수에 비해 수돗물에는 무기이온이 적지 않게 존재함을 알 수 있었다. DLS 경우는 증류수에서는 투명하게 용해되지만 수돗물에서는 염이 하얀 침전물 형태로 눈에 띄게 형성되었다. 이에 반해 SCoA는 증류수에서와는 달리 수돗물에서는 외관이 약간 푸른빛(bluish)으로 변했지만, 증류수와 수돗물 간 기포형성력에서는 거의 비슷한 결과를 나타냈다.

Figure 4는 계면활성제 별 오염률을 비교한 것으로, 값이 낮을수록 오염물 침착이 억제되어 백색 원포가 덜 오염됨을 의미한다. 실험결

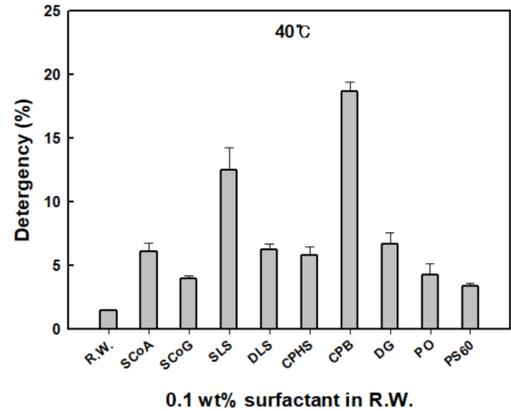


Figure 2. Comparison of detergency of surfactants.

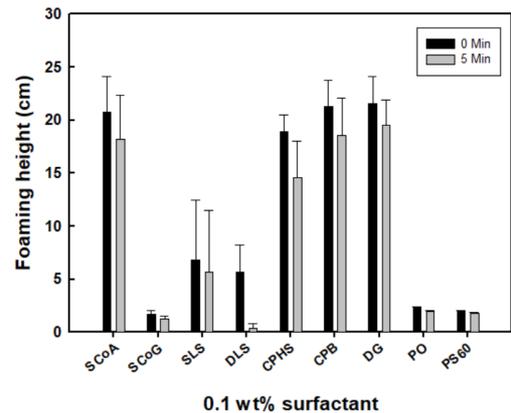


Figure 3. Comparison of foaming height of surfactants.

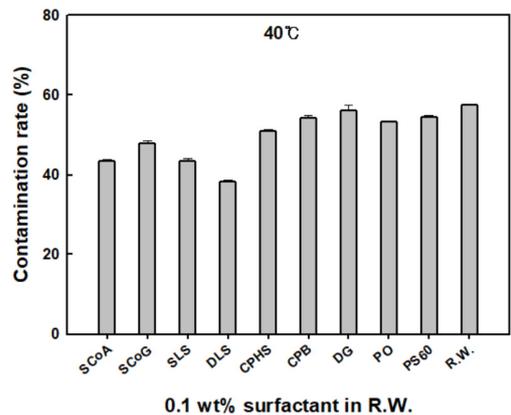


Figure 4. Comparison of black ink contamination rate of surfactant.

과 음이온 계면활성제들의 오염률 값들이 양쪽성이나 비이온 계면활성제보다 낮게 나타나 오염 방지에 효과적임을 알 수 있다. 계면활성제 없이 수돗물만으로 실험을 했을 때(R.W.)의 결과가 양쪽성이나 비이온 계면활성제와 거의 동등한 57%의 오염률 값이 나온 것을 보면, 양쪽성이나 비이온 계면활성제는 오염물 침착을 거의 저지하지 못하는 것으로 예측된다, 따라서 오염물의 침착을 저지하기 위해서는 계면활성제의 극성전하가 중요함을 알 수 있다.

Table 1. Design Matrix for the Mixture Experiment

Std No.	Run No.	Point Type	Block	X <sub>A</sub>	X <sub>B</sub>	X <sub>C</sub>	Detergency (Y <sub>1</sub> )	Foaming height (Y <sub>2</sub> )	Contamination rate (Y <sub>3</sub> )
3	1	1	1	0	0	1	6.7	21.6	99.7
1	2	1	1	1	0	0	6.1	20.8	70.5
8	3	-1	1	0.667	0.167	0.167	6.1	29.0	87.6
2	4	1	1	0	1	0	18.7	21.3	98.8
10	5	-1	1	0.167	0.167	0.667	7.0	27.8	99.4
6	6	2	1	0	0.5	0.5	9.4	25.8	99.9
7	7	0	1	0.333	0.333	0.333	7.5	27.0	95.4
4	8	2	1	0.5	0.5	0	8.7	26.7	86.7
9	9	-1	1	0.167	0.667	0.167	10.1	27.7	99.6
5	10	2	1	0.5	0	0.5	7.0	26.5	87.6

Table 2. The Analysis Result of the Regression and Variance for Detergency

Response	F	P	R <sup>2</sup> (%)	Equation on terms of pseudo composition
Regression	89.76	0.000	98.63	$Y_1 = 6.31X_A + 18.43X_B + 7.04X_C - 16.16X_A \cdot X_B - 14.31X_B \cdot X_C$
Linear	176.71	0.000		
Quadratic	33.55	0.001		
X <sub>A</sub> ·X <sub>B</sub>	37.85	0.002		
X <sub>B</sub> ·X <sub>C</sub>	29.66	0.003		

X<sub>A</sub>: SCoA, X<sub>B</sub>: CPB, X<sub>C</sub>: DG

3.2. 혼합물 실험 설계 및 회귀 분석

MINITAB 17.0 을 이용하여 혼합물 실험계획법의 심플렉스 중심설계에 중심점을 추가하여 실험을 설계하였다(Table 1). 실험은 MINITAB에서 제시하는 10개의 RUN을 랜덤한 순서로 수행하였다. Table 1의 Point Type에서 -1은 축점, 0은 중앙점이고, 1은 꼭지점, 2는 2중 혼합점을 의미한다. 계면활성제를 3개를 선택하여 혼합 조성 비율 X<sub>A</sub>, X<sub>B</sub>, X<sub>C</sub> 를 독립변수로 정하고, 계면활성제 조성에 따라 영향을 받는 세정력(Y<sub>1</sub>), 기포형성력(Y<sub>2</sub>) 오염률(Y<sub>3</sub>)을 특성치인 반응 변수로 설정하였다. 3개의 계면활성제는 사전 실험에서 가장 낮은 오염률을 나타낸 음이온성 계면활성제 SCoA (A), 제일 우수한 세정력을 나타낸 양쪽성 계면활성제 CPB (B), 그리고 나머지 하나는 비이온성 계면활성제 중에서 가장 우수한 기포형성력과 세정력을 보인 DG (C)를 선정해서 혼합물 조성실험을 실시하였다.

혼합물 실험설계법에 따라 실시한 실험으로부터 얻게 된 세정력의 값을 가지고 회귀분석을 한 결과 회귀분석 결정계수 값은 R<sup>2</sup> = 98.76%로 데이터가 모델에 적합하였으나 X<sub>A</sub> · X<sub>C</sub> 의 회귀계수는 P값이 0.544로 유의하지 않아 교락시킨 후 다시 분석하여 결과를 Table 2에 요약하였다. 회귀분석 결과를 보면 결정계수 값은 R<sup>2</sup> = 98.63%로 데이터가 모델에 적합하였으며, 분산분석 결과를 보면 선형과 2차 모형의 유의확률(P-value)이 P < 0.05로 유의성이 있는 것으로 나타났다.

Figure 5는 회귀 분석으로 얻은 식을 사용하여 혼합물의 각 성분조성 비율에 따른 세정력 값의 변화가 나타낸 그림이다. (a)의 반응 표면도를 보면, CPB (B)의 조성이 1에 가까울수록 세정력이 높아짐을 확인할 수 있다. 세정력의 목표값(target)은 최대로 설정하고 혼합조성의 최적화를 구한 결과, (b)에서 보듯 단독으로 B (CPB)만을 1.0 (100%)로 첨가했을 때가 최적조성으로 구해졌다. 이 때 세정력의 최대값은

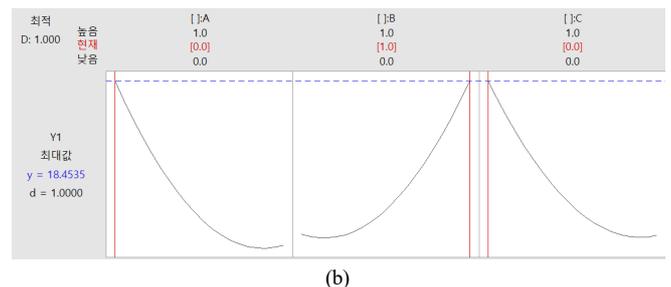
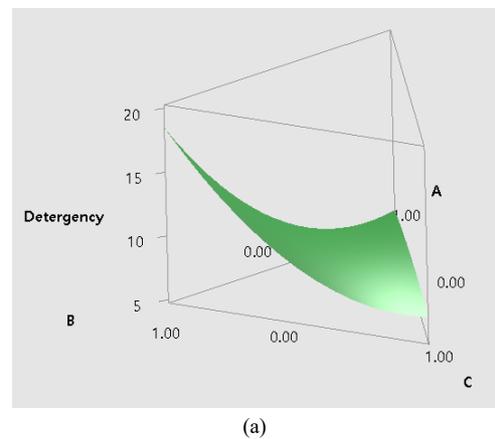


Figure 5. Effect of mixture composition on detergency (a) response surface plot (b) maximum value of detergency at optimized mixture composition.

**Table 3. The Analysis Result of the Regression and Variance for Foaming Height**

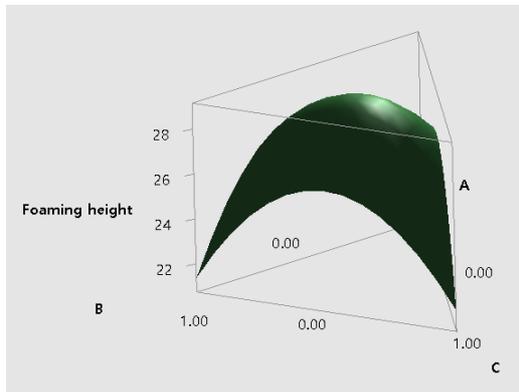
Response	F	P	R <sup>2</sup> (%)	Equation on terms of pseudo composition
Regression	6.00	0.054	88.24	$Y_2 = 21.21X_A + 21.37X_B + 21.69X_C + 24.21X_A X_B + 22.85X_A X_C + 18.37X_B X_C$
Linear	0.03	0.973		
Quadratic	10.00	0.025		
$X_A \cdot X_B$	12.30	0.025		
$X_A \cdot X_C$	10.96	0.030		
$X_B \cdot X_C$	7.09	0.056		

$X_A$  : SCoA,  $X_B$  : CPB,  $X_C$  : DG

**Table 4. The Analysis Result of the Regression and Variance for Contamination Rate**

Response	F	P	R <sup>2</sup> (%)	Equation on terms of pseudo composition
Regression	52.98	0.000	93.80	$Y_3 = 44.39X_A + 55.65X_B + 56.65X_C$
Linear	52.98	0.000		
Quadratic	1.82	0.283		

$X_A$  : SCoA,  $X_B$  : CPB,  $X_C$  : DG



(a)

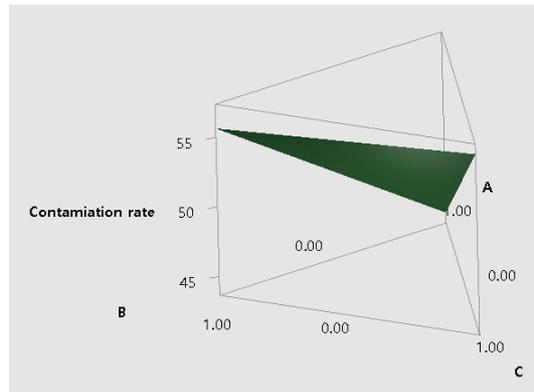


(b)

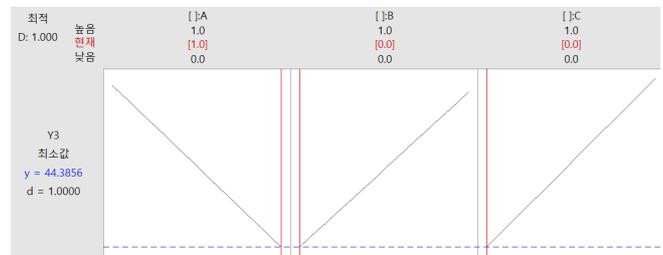
**Figure 6. Effect of mixture composition on foaming height (a) response surface plot (b) maximum value of foaming height at optimized mixture composition.**

$Y_1 = 18.4535$ 로 나타나고, 이 때 예측된 반응의 종합만족도(D)는 1로 나왔다. 모델식으로 부터 얻은 최적조성( $X_B = 1.0$ )에서의 세정력 최대값은 실제 실험을 통해 얻은  $X_B = 1.0$ 에서의 세정력 값(18.7, Run No. 4)과 거의 동일하게 나타났다.

기포형성력에 대한 혼합물 회귀 분석 결과는 Table 3과 같다. 분산 분석 결과를 보면  $Y_2$ 의 적합모델은 2차 모형으로 유의확률(p-value)이 0.025로 유의성이 있다, 회귀분석 결과를 보면 결정계수 값은  $R^2 = 88.24\%$ 로 2차 모형이 데이터에 적합함을 알 수 있다.



(a)



(b)

**Figure 7. Effect of mixture composition on contamination rate (a) response surface plot (b) maximum value of contamination rate at optimized mixture composition.**

Figure 6은 혼합물의 각 성분조합의 변화에 대한 반응 변수값의 변화가 나타나 있다. 반응표면도(a)를 보면, A(SCoA), B(CPB), C(DG)의 중간지점에서 기포형성력이 높아지는 것을 확인할 수 있다. 샴푸, 바디워시, 폼 클렌징과 같은 가정용 세정 제품에서는 기포가 많이 발생해야 피부와의 마찰 자극을 줄일 수 있다. 따라서 계면활성제 혼합하여 얻고자하는 기포형성력의 목표값은 최대로 설정하여 최적화를 시도하였다. 그 결과, A (SCoA)를 0.3705, B (CPB)를 0.3232, C (DG)를 0.3063 첨가했을 때  $Y_2=28.7176$ 로 최적화되었다(b). 세정력 결과와는

달리, 기포 형성력에서는 세 개의 계면활성제를 혼합 사용하는 것이, 계면활성제 단독 사용보다도 기포가 더 많이 발생하는 등 혼합의 시너지 효과가 발생함을 알 수 있다. 계면활성제를 단독으로 사용하였을 때보다 여러 종류를 혼합사용 했을 때 기포형성이 더 증가한다는 연구보고가 있는데, 혼합했을 때의 시너지 효과를 표면장력의 감소와 연관 지어 설명하기도 하였다[15-16].

오염물에 대한 혼합물 회귀 분석 결과, 2차 모델의 경우 유의확률 P가 0.05를 넘어 유의하지 않고, 따라서 Y<sub>3</sub>의 적합모델은 선형으로 나타났다. 회귀분석 결과를 보면 결정계수 값은 R<sup>2</sup> = 93.8%로 선형 모델이 데이터에 잘 적합함을 알 수 있다. 이 모형에 기초한 회귀식은 Table 4와 같다.

Figure 7은 혼합물의 각 성분조성 변화에 대한 오염물의 변화를 살펴본 것으로, 반응표면도(a)를 보면 A (SCoA)의 양이 증가할수록 오염물이 낮아짐을 확인할 수 있다. 오염물은 적을수록 유리하므로 목표 값은 최소로 정하고 최적화를 시도한 결과, SCoA (A)를 단독으로 1.0 (100%)를 첨가했을 때 Y<sub>3</sub> = 44.3856로 최적화되어있고 예측된 반응의 종합만족도(D)는 1로 나타났다.

### 3.3. 동시 최적화 반응

Table 2-4의 회귀식에 근거하여 Derringer and Suich (1980)가 제안한 호감도함수 접근법[17]을 이용하여 3개의 반응변수 세정력과 기포형성력, 오염물을 동시최적화 하는 조건을 찾는 실험결과를 Figure 8에 제시하였다. 동시최적화를 함에 있어 세정력은 다른 특성보다 더 중요하므로 세정력의 가중치를 2로 높였으며 오염물의 경우 세정력과 기포형성력에 비해 중요성이 덜하므로 호감도함수의 가중치를 0.5로 정하였다. 그 결과, X<sub>A</sub> = 0.2222, X<sub>B</sub> = 0.7778, X<sub>C</sub> = 0.0000의 혼합조성을 구성하였을 때, 세정력 Y<sub>1</sub> = 12.9225로, 기포형성력 Y<sub>2</sub> = 25.5181로, 오염물 Y<sub>3</sub> = 53.1485로 최적화 되어있고 예측된 반응의 종합만족도(D)는 0.8170로 나타났다.

혼합물의 최적화 반응을 토대로 최적혼합비 X<sub>A</sub> = 0.22, X<sub>B</sub> = 0.78로 계면활성제를 혼합하여 확인실험을 수행하였다. 가장 가중치가 높은 세정력의 확인실험을 실시한 결과 세정력의 평균이 12.60으로 최적 조건의 95% 신뢰구간인 (12.35, 13.65) 사이의 값으로 나타났다.

3개의 반응 값에 대해 동시 최적화한 혼합조성을 구한 결과, 3개의 계면활성제 중 비이온 계면활성제인 DG는 혼합에서 제외되고 음이온 계면활성제인 SCoA와 양쪽성 계면활성제 CPB만으로 최적의 혼합을 이루게 되었다. 오염물에서는 SCoA가, 세정력에서는 CPB가 다른 계면활성제에 비해 월등한 특성값을 보인 반면, 기포형성력에서는 DG가 가장 높은 값을 보였지만 다른 두 계면활성제도 DG 못지않은 비슷한 값을 보였다. 또한 DG 혼합에 의해 기포 형성력에서만 시너지 효과가 나타났을 뿐, 세정력과 오염물에서는 오히려 반응의 목표 값에 반대로 작용하였기 때문에 동시 최적화에서는 DG가 배제되는 결과로 나타났다.

## 4. 결 론

본 연구에서 음이온성 계면활성제 SCoA가 가장 낮은 오염물을 나타내고, 양쪽성 계면활성제 CPB가 제일 우수한 세정력을 보였다. 그리고 SCoA, CPB, DG 모두 기포 형성력이 우수하게 나타났지만, 이들을 혼합 사용하면 기포 형성이 더 잘되는 시너지 효과가 나타났다. SCoA, CPB, DG 3종의 계면활성제 혼합물 조성을 독립변수로, 세정력, 기포형성력, 오염물의 특성값을 반응 변수로 설정하여 회귀분석을

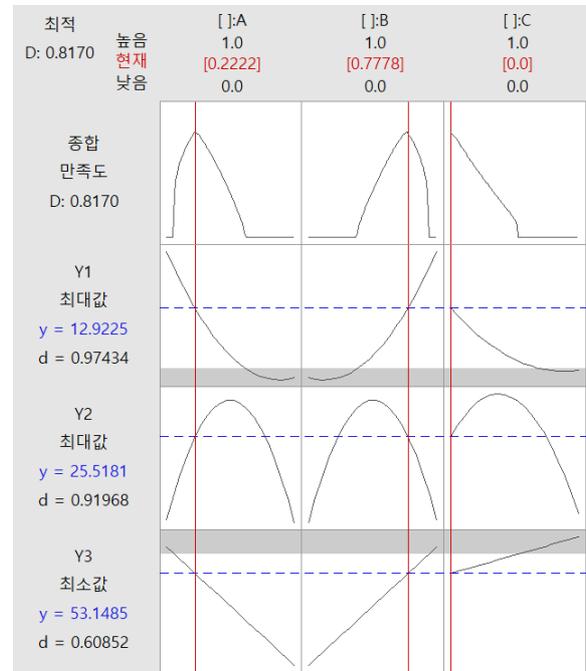


Figure 8. Results of simultaneous optimization.

실시하였다. 세정력과 기포형성력은 2차, 오염물은 선형으로 모델식이 얻어지고, 이들 식의 적합성을 분석한 결과 5% 이내의 유의성을 보여주었다. 모델 식들을 통해, CPB의 함량이 높아질수록 세정력은 증가하고, SCoA의 함량이 높아질수록 오염물은 감소함을 알 수 있었다. 또한 기포형성력은 SCoA, CPB, DG이 거의 동등한 비율로 혼합할 때 기포가 가장 잘 형성됨을 알 수 있었다. 3개의 반응 변수에 대해 가중치를 두고 동시 최적화를 실시한 결과, 최적의 계면활성제 혼합 조성은 SCoA 0.22, CPB 0.78, DG 0.00으로 구해졌다.

## References

1. P. Agredo, M. C. Rave, J. D. Echeverri, D. Romero, and C. H. Salamance, An Evaluation of the Physicochemical Properties of Stabilized Oil-In-Water Emulsions Using Different Cationic Surfactant Blends for Potential Use in the Cosmetic Industry, *Cosmetics*, **6**, 1-12 (2019).
2. R. K. Sandhu, A. Kaur, P. Kaur, J. K. Rajput, P. Khullar, and M. S. Bakshi, Solubilization of surfactant stabilized gold nanoparticles in oil-in-water and water-in-oil microemulsions, *J. Mol. Liq.*, **336**, 116305 (2021).
3. V. Krishnakumar and R. Elansezhian, Dispersion stability of zinc oxide nanoparticles in an electroless bath with various surfactants, *Mater. Today:Proceedings*, (2021).
4. S. Koner, A. Pal, and A. Adak, Utilization of silica gel waste for adsorption of cationic surfactant and adsolubilization of organics from textile wastewater: A case study, *Desalination*, **276**(1-3), 142-147 (2011).
5. S. Tamjidi, B. K. Moghadas, H. Esmacili, F. S. Khoo, G. Gholami, and M. Ghasemi, Improving the surface properties of adsorbents by surfactants and their role in the removal of toxic metals from wastewater: A review study, *Process Saf. Environ. Prot.*, **148**, 775-795 (2021).

6. B. Babajanzadeh, S. Sherizadeh, and H. Ranji, Detergents and surfactants: a brief review, *Open Access J. Sci.*, **3**(3), 94-99 (2019).
7. B. Abdellahi, R. Bois, S. Golonu, G. Pourceau, D. Lesur, V. Chagnault, A. Drelich, I. Pezron, A. Nesterenko, and A. Wadouachi, Synthesis and interfacial properties of new 6-sulfate sugar-based anionic surfactants, *Tetrahedron Lett.*, **74**, 153113 (2021).
8. I. Effendy, and H. I. Maribach, Surfactants and experimental irritant contact dermatitis, *Contact Dermatitis*, **33**(4), 217-225 (1995).
9. P. M. Holland and D. N. Rubingh, Mixed surfactant systems: an overview, 2-30 (1992).
10. A. Bera, K. Ojha, and A. Mandal, Synergistic effect of mixed surfactant systems on foam behavior and surface tension, *J Surfactants Deterg*, **16**(4), 621-630 (2013).
11. N. Jadidi, B. Adib, and F. B. Malihi, Synergism and performance optimization in liquid detergents containing binary mixtures of anionic-nonionic, and anionic-cationic surfactants, *J Surfactants Deterg*, **16**(1), 115-121 (2013).
12. J. Zawala, A. Wiertel-Pochopien, and P. B. Kowalczyk, Critical Synergistic Concentration of Binary Surfactant Mixtures, *Minerals*, **10**(2), 192 (2020).
13. H. H. Chu, Y. S. Yeo, and K. S. Chuang, Entry in emulsion polymerization using a mixture of sodium polystyrene sulfonate and sodium dodecyl sulfate as the surfactant, *Polymer*, **48**(8), 2298-2305 (2007).
14. M. Mishra, P. Muthuprasanna, K. S. Parabhe, P. S. Rani, I. A. Satish, I. S. Ch, G. Arunachalam, and S. Shalini, Basics and potential applications of surfactants-a review, *Int. J. Pharmtech Res*, **1**(4), 1354-1365 (2009).
15. T. Geng, C. Zhang, Y. Jiang, H. Ju, and, Y. Wang, Synergistic effect of binary mixtures contained newly cationic surfactant: Interaction, aggregation behaviors and application properties, *J. Mol. Liq.*, **232**, 36-44 (2017).
16. J. Huang, L. Zhu, G. Zeng, L. Shi, Y. Shi, K. Yi, and X. Li, Recovery of Cd (II) and surfactant in permeate from MEUF by foam fractionation with anionic-nonionic surfactant mixtures, *Colloids Surf, A Physicochem Eng Asp*, **570**, 81-88 (2019).
17. G. Derringer, and R. Suich, Simultaneous optimization of several response variables, *J. Qual. Technol.*, **12**(4), 214-219 (1980).

#### Authors

Maria Song; M.Sc., Graduate Student, Department of health and cosmetics, Dongduk Women's University, Seoul 02748, Korea; 20194517@dongduk.ac.kr

Byung Suk Jin; Ph.D., Professor, Division of Chemistry and Cosmetics, Dongduk Women's University, Seoul 02748, Korea; bsjin@dongduk.ac.kr