

제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

The 66th Biannual Conference of The Korean Society of Analytical Sciences

2021. 5. 13.(목) ~ 14.(금)
Online Meeting

주관  사단법인 한국분석과학회
THE KOREAN SOCIETY OF ANALYTICAL SCIENCES

후원 

협찬

 ThermoFisher
SCIENTIFIC

 영인과학

 BUCHI
SWITZERLAND

 Park
SYSTEMS

 영인크로매스

 YOUNG IN
Labplus

 RIST

 SCIEX

 KSI
한국기초과학지원연구원

 PerkinElmer
For the Better

 scinco KTR 한국화학융합시험연구원
KOREA TESTING & RESEARCH INSTITUTE

 BRUKER

 KRIS
한국표준과학연구원
인증표준물질 (CRM)

 NICEM
비료표준물질 연구소

 KITECH
한국정신기술연구원

 한국화학연구원

 PHILIP MORRIS
한국필름모리스(주)

 한국분석과학기술원

 자유아카데미

 SHIMADZU
Excellence in Science

 UMC
Scientific Instruments

 PEAKMAN SP
www.peakman.co.kr

 DGMIF
Dipartimento di Chimica
Interfaciale

 바이오스펙트럼(주)
Biospectrom Inc.

 대웅제약
www.daewoong.co.kr

 Agilent

 CK CHEMCOKOREA

 elim
Global

 KRICT
한국화학연구원

 BLIRC
Biolipids Interactomics
Research Center

 사단법인 한국분석과학회
THE KOREAN SOCIETY OF ANALYTICAL SCIENCES

고분자와 첨가제, 미반응 올리고머까지
완벽한 분석을 원하신다면?

멀티샷 파이롤라이저

Frontier Lab사의 멀티샷 파이롤라이저(Multi-Shot Pyrolyzer)는 시료를
등온 또는 승온으로 가열해 발생하는 가스상 물질을 GC/MS로 분리 및 검출하여,
고분자 및 첨가제의 특성을 파악하는 열분해 전처리 시스템입니다.

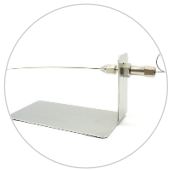
멀티샷 파이롤라이저
(모델: EGA/PY-3030D)

데모 체험
신청 접수 중!



멀티샷 파이롤라이저의 다양한 고분자 응용 확장 시스템

Vent-Free Adapter



- MS vent 없이 컬럼 간편 교체
- 분석 감도 손실 및 리크 위험 X
- 5분 이내 다음 분석 가능

F-Search Library



- 고분자 및 첨가제 전용 라이브러리
- 폴리머 개별 피크 정성 가능
- 2,000여개 이상의 상용 고분자 및 첨가제 포함

MicroJet Cryo-Trap



- 저비점 화합물의 저온 트랩핑
- -195°C, LN2

Micro UV-Irradiator



- UV를 이용한 광 분해 및 광산화 과정 신속 분석
- UV Aging 실험

Carrier Gas Selector



- 다양한 반응가스 (Air, H₂, CH₄, etc.) 를 파이롤라이저에 도입 가능
- Air를 이용한 연소 반응

MULTI-SHOT PYROLYZER

Parallel Evaporator SyncorePlus⁺



전자동 방식으로 **최대 96개** 시료를
빠르고 간편하게 증발 농축



Contact



02-6718-7500



kr-sales@buchi.com



www.buchi.com/kr-ko



카카오픈플러스친구

최상의 정확성과 사용자 편의성을 갖춘 원자현미경

Park NX10



세계 유일의 완전 비접촉 모드 | True Non-Contact™ Mode

파크시스템스의 Park NX10 원자현미경은 완전 비접촉 모드의 특성이 구현된 제품으로 반복적인 측정을 수행하여도 탐침을 날카롭게 보존하며 샘플에 손상을 가하지 않습니다. 이로 인해 더욱 향상되고 정확한 스캔이 가능해졌을 뿐만 아니라 다양한 용도에 활용될 수 있도록 설계되어 있어서 과학기술 연구자와 기술자 모두가 초정밀도의 결과를 빠르고 쉽게 얻을 수 있도록 지원해 줍니다.

강력한 원자현미경 운영 소프트웨어 | Park SmartScan™

파크시스템스의 SmartScan 소프트웨어는 과학기술 연구자와 기술자가 수행하는 많은 작업을 자동화시킴으로써 고도의 효율성을 갖추도록 설계 되어 각 연구소와 산업현장에서 괄목할만한 업무 효율 향상을 기대할 수 있게 되었습니다. 아울러 전문 고급 기술자만 가능했던 업무들을 비숙련된 기술자들도 손쉽게 운영할 수 있도록 개발 되었습니다.

Park NX10 현미경 및 계측기술에 대해 더 알고 싶으신가요?
파크시스템스에 문의하십시오.



전화: 031-546-6800 / 이메일: inquiry@parksystems.com
www.parksystems.co.kr

Park
SYSTEMS

YOUNG IN Chromass ChroZen Products Line Portfolio

ChroZen TQ GC/MS

GC컬럼 flow 방향이 유지되는 견고한 Axial ion source
90° 곡선형 q0이온 가이드로 중성이온 불순물 제거
180° 곡선형 충돌관 으로 최상의 S/N 실현
PLS 외 잔류물질 동시다성분 분석 최적화



ChroZen TQ LC/MS

고효율 VIP Heated ESI + APCI 기본 옵션
강력한 내구성과 Matrix Effect 최소화
Lens-free 180° Curved collision cell로 중성 불순물 배제 및
이온 산란 손실 감소로 MRM 감도 개선
PLS 외 잔류물질 동시다성분 분석 최적화

ChroZen HPLC

Dynamic quick-turn 제어로 초정밀 RT 재현성 확보
자동화된 퍼지 밸브로 사용자 편리성 증대
Peltier + 공기 순환형 Column oven으로 균일하고 안정적인 온도 제어
Position sensing으로 Autosampler 주입 정밀도 향상



ChroZen GC

감각적인 디자인과 직관적인 LCD
정확하고 정밀한 데이터 신뢰성
(RT 재현성: <0.0008min, 면적 재현성: <0.5%)
사용자를 위한 다양한 분석 확장성과 편리성



분석결과 만큼 중요한
실험실 안전과 분석자의 건강

영인랩플러스에서
안전관리 Solution을 제안 합니다!



실험실 안전관리 Total Solution

안전한 가스 사용
가스 발생기



HPLC 필수 안전 소모품
Safe Cap



GC 사용 실험실
Split Vent Trap



오일 교체 필요 없는
GC/MS pump



유해가스
정화장치



필요한 만큼 만들어 쓰는
수소 발생기

질소, 에어발생기도 공급 합니다!



LNI
SWISSGAS

- 고순도 수소 발생기
- GC 수량에 따라 용량 선택 가능
- 한 번의 설치로 24시간 연속 가동 가능
- 가스 실린더 대신 안전하고 편리하게 사용

다양한 실험실에 적용 가능한
유해가스 정화장치

스마트코리아 유해가스 정화장치로
안전한 실험실 환경과 연구원의 건강을 지키세요!



SMART
SYSTEM

- 음이온 발생 장치와 4종의 필터를 통해 다양한 유해물질 제거
- 특히 받은 CMO(Composite Metal Oxide) 필터를 통해 무기산과 휘발성 유기 화합물 제거
- 별도의 압후드 설치 가능하며, 4개의 이동식 바퀴 장착

금속·소재분야 상용표준물질개발보급사업

상용표준물질 개발보급사업 - 사업 목적

「소재·부품·장비 경쟁력 강화대책(19년 8월)」에 따라 공급 안정성을 확보하고자 하는 반도체, 디스플레이, 기계·금속, 기초화학 등 100대 핵심 전략품목의 신뢰성 평가 지원

Korea Reference Material Initiative			3대 전략 중점과제		
비전 소부장 품질혁신을 위한 미래핵심 표준물질 글로벌 선도			01 미래핵심 표준물질 개발 02 표준물질 산업생태계 조성 03 표준물질 정책·제도 지원	> 국산 표준물질 브랜드 메이킹(K-표준물질) > 산업 환경 변화 대응(Agile 프로세스)	
소부장 2.0  반도체·디스플레이	그린뉴딜  지구환경·수소에너지	K방역  바이오·식약품			> 생산기관 지원 (INFRASTRUCTURE) > 보급 활성화(DIGITAL PLATFORM)
목표 3대 強國 실현: (~'30) 미래핵심 표준물질 500종 개발					> 범부처 표준물질 평가시스템 통일화(범부처 협력) > 국내외 표준물질 교류 활성화(글로벌 포럼)

금속소재분야 표준물질 총괄 운영기관 - RIST

화학조성 분석용

철-니켈 합금
동합금
기계부품용 합금강
니켈 합금
타이타늄 합금

물리 시험용

샤르피 충격시험용
3 Line 단차, 거칠기

입자크기 분석용

폴리스티렌
은나노입자

화학특성 분석용

초미세먼지
액체 밀도, 당도, 점도

디스플레이 소재용 철-니켈 합금 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 디스플레이 핵심소재 새도마스크용 인바합금 화학조성 분석용 표준물질 일본 수출 규제 대응 	반도체 소재용 동합금 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 반도체 기초소재 리드프레임용 동합금 화학조성 분석용 표준물질 반도체부품 수출 규제 대응 	자동차 및 기계부품용 합금강 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 자동차 및 기계부품용 합금강 표준물질 생산공정 및 품질관리 활용 	초내열 소재용 니켈합금 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 첨단산업 초내열 핵심부품용 니켈합금 표준물질 선진국 수입 규제 대응
첨단산업 소재용 타이타늄합금 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 첨단산업 에너지/의료 소재용 타이타늄합금 표준물질 수입 대체 및 제조산업 지원 	샤르피 충격시험용 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 극한환경 소재의 인성측정용 샤르피 충격시험 표준물질 생산기술 내재화 및 수입대체 	3 Line 단차 및 표면조직 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 정밀 기계 교정 및 반도체 소재용 3Line 단차 및 표면 거칠기 분석용 표준물질 고부가가치 산업의 수요 증가에 대응 	입자분석용 폴리스티렌 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 광산량분석 입자계수기 교정용 폴리스티렌 표준물질 해외 수입 대체 및 장비 품질 개선
입자크기분석용 은나노입자 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 나노물질의 유체역학적 크기 검증용 위한 은나노입자 표준물질 국내 생산 은나노입자의 신뢰성 제고 	초미세먼지 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 미세먼지 대응 관련제품 성능평가용 초미세먼지 표준물질 미세먼지 집진 장치 성능 평가 	액체밀도, 당도 및 점도 상용표준물질 <ul style="list-style-type: none"> 화학적 특성 분석장비 정밀정확도 향상을 위한 액체밀도, 당도 및 점도 표준물질 수입대체 및 측정장비 교정에 활용 	



The Power of Precision

RUN **FAST**

데이터 품질 저하 없이 시료를 **초당 최대 3개까지** 신속하게 분석하고 기존 LC-MS에 비해 **50배 빠르게** 결과를 제공할 수 있는 유일한 Echo® MS 시스템.



 Echo® MS System

GO **BEYOND**

현재의 감도 한계, 생산성 목표, 견고성과 내구성의 문제를 **해결합니다**. SCIEX Triple Quad™ 7500 LC-MS/MS 시스템 – QTRAP® Ready로 **한계를 극복합니다**.



 SCIEX 7500 System

POWER **UP**

실험실 전체에 편리성, 효율성 및 무결성을 제공합니다. 모든 시스템과 단일 소프트웨어 플랫폼에서 모든 워크플로우가 **향상됩니다**. 스마트한 자동화 알고리즘으로 보다 빠르게 유용한 결정을 내릴 수 있습니다.

완벽한 데이터 무결성으로 정확성, 정밀성 및 일관성이 **향상됩니다**.



 SCIEX OS Software



CHROMATOGRAPHY SIMPLIFIED



SIMPLE: PerkinElmer. LC300

퍼킨엘머의 LC300 제품은 최고의 성능 및 까다로운 분석 요구를 처리할 수 있는 효율성을 제공합니다. 초정밀 분석을 위한 10k psi system과 18k psi 시스템 중 필요에 맞게 선택 할 수 있으며, 두 시스템 모두 특허받은 인젝션 밸브 기술과 다양한 샘플 처리 옵션을 제공합니다. 또한 시스템 상태를 실시간으로 한눈에 보여주는 컬러 디스플레이를 내장하고 있습니다. SimplicityChrom™ 소프트웨어는 직관적인 기기 제어를 제공하는 동시에 21CFRpart11을 지원합니다.

- Pump delay volume이 50 μ L로 고효율 컬럼 사용에 최적
- 이동상 priming과 purge를 위한 밸브 추가로 편의성 제공
- 자동희석기능 및 유도체화 기능 탑재한 autosampler
- UV/Vis, MWD, PDA, FLD, RI 검출기 제공

Learn more

Visit : www.perkinelmer.com/LC300

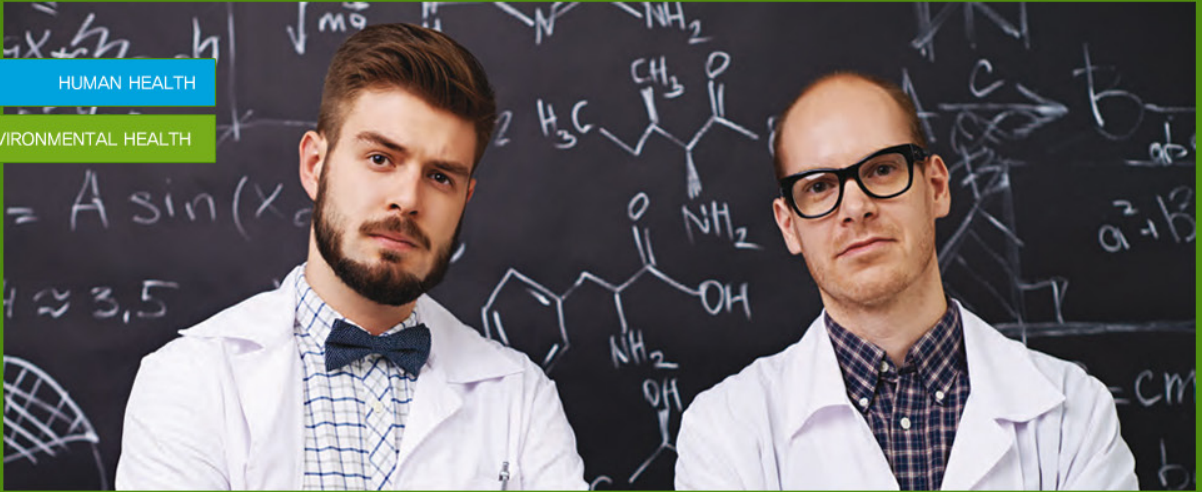
Contact us: 퍼킨엘머코리아 T)02-868-5313 E-mail: contact.KR@perkinelmer.com



PerkinElmer
For the Better

HUMAN HEALTH

ENVIRONMENTAL HEALTH



For the Better, High-Performance Spectroscopy



UV/Vis Spectrometers



UV/Vis/NIR Spectrometers



Fluorescence Spectrometers



FT-IR Spectrometers

■ 목 차 ■

초대의 글	1
학술대회 운영 공지 사항	2
2021년도 춘계 학술대회 프로그램	3
포스터 발표 목록	7
 [초 록]	
Tutorial Session	21
Luncheon Seminar	23
Special Session	27
심포지엄 강연	29
영인 분석과학상 수상 강연	74
Early Bird Seminar	76
Core Facility 소개	78
Leco 젊은 분석과학자상 수상강연	81
대학원생 구두 발표	83
포스터 발표	
환경	90
의약품/화장품	110
식품/농학	132
무기/재료	146
원자력/방사선	154
표준	162
법과학	166
일반	176
대학원생 구두 & 포스터	199
 인명 색인	 205
 [기타 안내 사항]	
한국분석과학회 임원 명단	211

초대의 글

회원 여러분, 안녕하십니까?

한국분석과학회에서는 제66회 춘계 학술대회를 2021년 5월 13일(목)~14일(금) 동안 온라인에서 진행합니다. 회원 여러분의 많은 관심과 참여 부탁드립니다.

춘계 학술대회에서는 '미세플라스틱과 표준'을 주제로 Tutorial Session이 진행되며, 'COVID-19 분자 진단기술과 동향'에 관한 Special Session도 준비되어 있습니다. 일반 세션에서도 분석과학 세부 분야의 최신 동향을 파악할 수 있는 여러 발표가 준비되어 있습니다.

온라인 미팅이지만 대회 첫날 점심 세미나에서는 선착순으로 70분께 아주 푸짐한 식사 배달 쿠폰을 드립니다. 뿐만 아니라, 학회 진행 과정에서 수시로 협찬 업체에서 제공하는 돌발 퀴즈 행사가 있습니다. 비록 비대면으로 진행되지만 활발한 학술대회의 현장감을 느끼실 수 있을 것입니다.

아울러 이번 대회에서는 영인 분석과학상과 Leco 젊은 분석과학자상을 수여하며 수상자들의 강연이 준비되어 있습니다. 우리 분야의 놀라운 성과와 업적 및 젊은 과학자들의 열정과 지적 탐구를 즐기는 시간이 되길 바랍니다.

춘계 학술대회가 성공적으로 개최될 수 있도록 회원 여러분의 높은 관심과 참여를 부탁드립니다.

감사합니다.

2021년 5월

사단법인 한국분석과학회
학회장 정 두 수 올림

학술대회 운영 공지 사항

1) 참가비 안내

2021년도 연회비를 납부하지 않은 분은 연회비 ₩30,000 (학생 ₩20,000)과 등록비를 함께 납부하여 주시기 바랍니다.

회원 구분		연회비	참가비
정회원	일반	30,000원	60,000원
	학생	20,000원	40,000원
비회원	일반		90,000원
	학생		60,000원

- 초록등록 및 참가하시는 모든 회원께서는 필히 참가비(등록비)결제 부탁드립니다.

2) 구두 발표

- 발표자에게 배정된 시간은 학술상 수상 강연 및 스페셜 세션 30분, 심포지엄 20분, 대학원생 구두 발표 10분입니다.
- 구두발표는 실시간 발표 또는 녹화 동영상 상영
- 녹화 동영상 상영 시에도 상영 후 온라인을 통한 질의응답 있으니, 연사분의 참석 요청
- 구두발표 동영상(제출 동영상 혹은 당일 녹화분)은 학회 기간 후, 한 달간 학회 홈페이지를 통하여 학술대회 등록자에게 공개예정이며, 이를 위해 연사에게는 동의서 받을 예정
- 발표자께서는 배정된 시간의 2/3 발표 시간으로, 1/3 토의 시간으로 활용해 주시고 발표 시간을 엄수해 주시기 바랍니다.
- 좌장께서는 발표자가 배정 시간을 초과하지 않도록 운영 바랍니다.

3) 포스터 발표

- 포스터는 학회 기간 후 한달간 학회 홈페이지에서 학술대회 등록자에게 공개 예정
- 본회에 별도의 연락 없이 포스터 파일을 제출하지 않으면 추후에 본인 뿐 아니라 해당 연구실의 차기 논문 발표에 제한이 있사오니, 유의하여 주시기 바랍니다.
- ※ 우수 포스터 10편 내외, 대학원생 우수 구두 1-2편을 선정하여 2021년 추계 학술대회에서 시상할 예정입니다.

4) 기타 자세한 사항은 아래로 문의바랍니다

- 학회 사무실 담당 강미경: 02-701-8661

이 발표논문집은 정부재원(과학기술진흥기금 및 복권기금)으로
한국과학기술단체총연합회의 지원을 받아 발간되었음.

This work was supported by the Korean Federation of Science and Technology Societies(KOFST) Grant funded by the Korean Government.

2021년도 춘계 학술대회 프로그램

05월 13일(목)	A	B
09:00 - 09:30	시스템 점검 및 개회	
09:30 - 10:30	Tutorial session (미세플라스틱과 표준)	
10:30 - 10:40	Break	
10:40 - 12:00	SYM I (법과학)	SYM II (에너지/재료과학)
12:00 - 13:00	런천 세미나 (연구장비 산업과 정책 현황) -선착순 70명 쿠폰 제공-	
13:00 - 14:00	포스터 발표 (실시간 채팅 및 질문 가능)	
14:00 - 15:20	SYM III (약학)	SYM IV (표준/원자력/안전)
15:20 - 15:30	Break	
15:30 - 16:00	Special Session (COVID-19 분자 진단 기술과 동향)	
16:00 - 16:40	영인 분석과학상 수상 강연	
16:40 - 17:00	Break	
17:00 - 17:30	총회	
05월 14일(금)	A	B
08:30 - 09:00	시스템 점검	
09:00 - 09:30	Early Bird Seminar (Thermo Fisher Scientific Korea)	
09:30 - 10:30	Core Facility 소개 (서울대학교, 목포대학교) 및 Leco 젊은 분석과학자상 수상강연	대학원생 구두 발표
10:30 - 10:40	Break	
10:40 - 12:00	SYM V (약학분야 젊은 과학자)	SYM VI (환경)
12:00 - 13:30	Break	
13:30 - 14:50	SYM VII (기초/화학 I)	SYM VIII (생체지질인터랙토믹스연구센터 공동주최)
14:50 - 15:00	Break	
15:00 - 16:31	업체소개 / 홍보세미나	SYM IX (기초/화학 II)
16:35 - 16:45	경품 추첨 및 폐회	

05월 13일(목)		A	B
09:30-10:30	Tutorial Session		
		좌장: 김정권(충남대학교)	
09:30-10:30	미세플라스틱과 표준(Microplastics and Standard) 정재학(한국분석과학연구소)		
10:30-10:40	Break		
10:40-12:00	Symposium I. 법과학	Symposium II. 에너지, 소재 분석기술의 최신 동향	
		좌장: 이동계(국립과학수사연구원)	좌장: 김혁년(한국분석과학기술원)
10:40-11:00	국내 폭발물 폭발사고 사례 분석 김중환(국방부조사본부)	Innovative smartphone & advanced TV 기술 및 특허 동향 권상세((주)TPI)	
11:00-11:20	Chemical asphyxia casued by toxic gases generated from rigid polyurethane foams (RPUF) fires 손민희(국립과학수사연구원)	실제 사례 중심으로 이차전지 전극소재의 X-선 결정구조 회절 분석 [X-ray structural analysis of electrode materials for rechargeable batteries: Practical examples] 홍승태(DGIST)	
11:20-11:40	화학사고 원인조사 방법 및 사례연구 황승율(화학물질안전원)	Practical application of solid-state NMR in industry 박태준(삼성 SDI)	
11:40-12:00	Change in ethanol and alcohol biomarker (EtG, EtS) under baterial conditions 이우재(국립과학수사연구원)	NMR을 이용한 소재분석의 최신 기술 동향 [Pureshift를 중심으로] 남궁현(KOLON 연구개발본부)	
12:00-13:00	Luncheon Seminar. 연구장비 산업과 정책 현황		
		좌장: 조건(한국기초과학지원연구원)	
12:00-12:20	국산연구장비 신뢰성 확보를 위한 레퍼런스 R&D 지원 정책 서인수(한국기초과학지원연구원)		
12:20-12:40	다양한 분석과학 분야를 위한 주사탐침현미경의 최신 동향 및 발전 조상준(파크시스템스)		
12:40-13:00	홀로토포그래피를 이용한 세포와 조직의 3차원 영상과 정량 분석 박용근(한국과학기술원)		
13:00-14:00	포스터 발표(실시간 채팅 및 질문 가능)		
14:00-15:20	Symposium III. 질량분석기술 활용한 COVID-19 단백질체 분석	Symposium IV. 표준/원자력/안전	
		좌장: 민호필(한국과학기술연구원)	좌장: 최기환(한국표준과학연구원)
14:00-14:20	Analysis of physicochemical properties for the biopharmaceuticals to overcome COVID-19 진종화(오송첨단의료산업진흥재단)	Particulate matters CRMs for the quality control of analytical results and basic researches 임용현(한국표준과학연구원)	
14:20-14:40	In-depth blood proteome profiling analysis revealed distinct functional characteristics of plasma proteins between severe and non-severe COVID-19 patients 한도현(서울대학교병원 의생명연구원)	Determination of element contents by k_0 -based INAA method in urban particulate matters from the greater seoul area 조하나(한국표준과학연구원)	
14:40-15:00	Machine learning classifies core and outer fucosylation of human plasma proteins and SARS-COV2 spike protein using LC-MS/MS 황희연(한국기초과학지원연구원)	Actinide chemistry: chemical behaviors of long-lived radionuclides relevant to the long-term safety assessment of SNF managements 김희경(한국원자력연구원)	
15:00-15:20	High resolution mapping of RNA-protein interactions & SARS-CoV-2 RNA interactome 김종서(서울대학교)	후쿠시마 원전사고와 해양 방사능 감시 김현철(한국원자력연구원)	
15:20-15:30	Break		
15:30-16:00	Special Session		
		좌장: 이덕희(한국분석과학기술원)	
15:30-16:00	COVID-19 분자진단 기술과 동향 박한오((주)바이오니아)		
16:00-16:40	영인분석과학상 수상강연		
		좌장: 김만구(강원대학교)	
16:00-16:40	Electrochemical sensors and biosensors for chemical and biochemical analysis 이원용(연세대학교)		
16:40-17:00	Break		
17:00-17:30	총회		

05월 14일(금)		A	B	
09:00-09:30	Early Bird Seminar	좌장: 조건(한국기초과학지원연구원)		
09:00-09:30	Orbitrap Exploris GC : the most powerful tool for targeted, untargeted-analysis 유연웅(Thermo Fisher Scientific Korea)			
09:30-10:30	Core Facility 소개 및 LECO 젊은 분석과학자상 수상강연			
		좌장: 권성원(서울대학교)	좌장: 김정권(충남대학교)	
09:30-09:45	서울대학교 약학대학 종합약학연구소 증양기기실 소개 권성원(서울대학교)	09:30-09:40	Analysis of aging related human body odor using GO/PANI/ZNRs/ZIF-8 coated wire-INME method followed by GC/MS 김세현(서울여자대학교)	
		09:40-09:50	Effective determination of nicotine enantiomers from e-liquids and biological fluids using dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME) 송승훈(경기대학교)	
09:45-10:00	목포대학교 유기 소재 및 천연물 분광화학 분석센터 소개 남상호(목포대학교)	09:50-10:00	Headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis/mass spectrometry for short chain fatty acids from a real sample 권준엽(서울대학교)	
		10:00-10:10	전기 유도 플라즈마 분광법을 활용한 부유 바이러스 전파의 실시간 탐지 양준호(서울대학교)	
10:00-10:30	[LECO 젊은 분석과학자상 수상강연] Separation of rare earth elements using gas pressurized extraction chromatography 김지혜(한국원자력연구원)	10:10-10:20	미세먼지 실시간 원인 분류를 위한 딥러닝을 이용한 전기 유도 플라즈마 방출광 신호 학습 박상훈(서울대학교)	
		10:20-10:30	Insights into the sampling methods of carbonyl compounds released from mainstream smoking 한솔(한양대학교)	
10:30-10:40	Break			
10:40-12:00	Symposium V. 약학분야 젊은 과학자	Symposium VI. 환경		
		좌장: 송은주(이화여자대학교)	좌장: 윤혜운(한국기초과학지원연구원)	
10:40-11:00	Metabolomics study to elucidate toxic mechanisms of environmental pollutant 김형민(충남대학교)	Formaldehyde can be emitted from the heated mouthpiece of tobacco sticks for heated tobacco products (HTPs) 김용현(상지대학교)		
11:00-11:20	Profiling of steroid hormones in human plasma by MAD-GC-MS/MS for diagnosis of gastric disorders 이원웅(우석대학교)	독성 유기비소 흡착 및 종 변이 특성 확인을 위한 HPLC-ICP-MS 분석 연구: 점토광물 종류에 따른 결합 특성 차이 조민규(한국기초과학지원연구원)		
11:20-11:40	Development and characterization of long-lasting anti-diabetic fusion proteins 신명철(경상대학교)	Online TD-GC-FID를 이용한 서산지역 실시간 VOCs 농도 측정 김주애(고려대학교)		
11:40-12:00	Synthesis and biological evaluation of PF-543 derivatives 백동재(목포대학교)	Recent materials prepared for simultaneous imprinted solid phase extraction of organic-inorganic materials in aqueous phase 배선영(서울여자대학교)		
12:00-13:30	Break			

13:30-14:50		Symposium VII. 기초/화학 I		Symposium VIII. 생체지질인터랙토믹스연구센터 공동주최	
		좌장: 노예철(한국화학연구원) / 최기인(한국세라믹기술원)		좌장: 김대덕(서울대학교)	
13:30-13:50	화학분석 방법을 이용한 산업 소재의 손상분석 사례 연구 김성남(포항산업과학연구원)	Analysis of seasonal variations of particulate matter-carrying materials 노민수(서울대학교)			
13:50-14:10	나노탐침 압입방식으로 제작된 나노구조물에 의한 MoS ₂ 박막 반도체 발광효율 조절 기전의 분광분석 연구 김현우(한국화학연구원)	Analysis of transcriptome change by HMTs in liver disease models 이승희(서울대학교)			
14:10-14:30	그래핀 소재와 분석기술 허승현(한국세라믹기술원)	Analysis of lipid remodeling in adipose tissue 이윤희(서울대학교)			
14:30-14:50	Determination of toluene degradation by photocatalytic building/construction materials using an in-situ gas phase infrared spectrometry with a circulating air flow photoreactor 이태규(나노텍)	Lipidomic analysis of tamoxifen-resistant breast cancer cell 황세원(서울대학교)			
14:50-15:00		Break			
15:00-16:31		업체소개/홍보세미나		15:00-16:20 Symposium IX. 기초/화학 II	
		좌장: 최기환(한국표준과학연구원)		좌장: 김주훈(경희대학교) / 한동훈(가톨릭대학교)	
15:00-15:10	써모 피셔 사이어티픽 코리아(주) 소개	15:00-15:20	Oligonucleotide-based reusable electrochemical silver(I) sensor and its optimization via probe packing density 한동훈(가톨릭대학교)		
15:10-15:15	브루커코리아(주) 소개				
15:15-15:20	한국분석과학기술원(주) 소개				
15:20-15:25	Agilent Technologies 소개	15:20-15:40	Electrochemical sensors based on carbon nanopipettes for ionic analytes 배제현(충남대학교)		
15:25-15:35	파크시스템스(주) 소개				
15:35-15:45	영인크로매스(주) 소개				
15:45-15:50	영인랩플러스(주) 소개	15:40-16:00	Molecular weight measurement of polymers using electrochemistry 김병권(이화여자대학교)		
15:50-15:56	(재)포항산업과학연구원 소개				
15:56-16:01	한국퍼킨엘머 소개				
16:01-16:06	충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터 소개	16:00-16:20	Visualizing structural characteristics of dendrimer-encapsulated Pt nanoparticles 김주훈(경희대학교)		
16:06-16:11	(주)시마즈사이언티픽 코리아 소개				
16:11-16:16	(주)유엠씨사이언스 소개				
16:16-16:21	(재)대구경북첨단의료산업진흥재단 소개				
16:21-16:31	뷰키코리아 유한회사 소개				
16:35-16:45		경품 추첨 및 폐회			

포스터 발표 목록

*: 교신저자, _(밑줄): 발표자

환경: PT-001 ~ PT-020

- PT-001 Analysis on Concentration of Organic Substances and Nutrients in the Special Management Sea of Busan Coast**
Sangwoong Yoo^{*}, Seonghyun Park, Daeyoung Jeon
Recreational Water Environment Team, Busan Metropolitan City Institute of Health & Environment
- PT-002 Study on Correlation Analysis and Influence Factors between COD and TOC in the Special Management Sea of Busan Coast**
Sangwoong Yoo^{*}, Hyojin Kim, Mihee Kim
Recreational Water Environment Team, Busan Metropolitan City Institute of Health & Environment
- PT-003 국내 A시 소재 다중이용시설의 실내공기질 오염물질 분석**
김동철, 최세현, 유제화, 박광재, 박상준^{*}
(재)FITI시험연구원 경기강원지원
- PT-004 상수도 시설에 적용할 온라인 망간 분석 시스템**
전문환, 정현상^{*}, 박종택, 김병갑, 이상민
(주)씨맥 기업부설연구소
- PT-005 오염물질 저감 테이프의 사용 적합성 확인**
신현지^{*}, 권용재, 최임성
아람기술이앤지(주)
- PT-006 판상자재의 절단면 마감 방법에 따른 오염물질 방출 특성의 비교**
최임성¹, 이현주¹, 권영진¹, 박준호², 김만구^{2,*}
¹아람기술이앤지(주), ²강원대학교
- PT-007 Determination of *N*-nitrosamines and secondary amines in the atmosphere using gas chromatography coupled with electron capture detection after derivatization**
Thu Thi Hoai Mai¹, Hekap Kim^{2,*}
¹Department of Environmental Science, Kangwon National University.
²School of Natural Resources and Environmental Science, Kangwon National University
- PT-008 (Cancel)**
- PT-009 LSC measurement for ²²⁶Ra and ²²²Rn determination in groundwater considering radionuclide interfering at interface of sample and cocktail**
Jeonghyeon Ryu¹, Hyeon-Woo Lee^{1,*}
¹Department of NORM Analysis, Korea Institute of Nuclear Safety

- PT-010 충남 서북부지역 대기환경관리를 위한 지역주민 의식도 조사**
Consciousness Survey of Residents in North-West area of ChungNam for Air Quality management
이선엽, 김종범*, 황은영, 윤수향, 조민철, 김아람, 신우석, 이상신
충남연구원 서해안기후환경연구소
- PT-011 충남지역 발전소 배출량 저감에 따른 지역 내 영향 분석**
Effect Analysis in ChungNam area by emission reduction of air pollutants in Coal-fired Power Plant
김종범*, 이선엽, 황은영, 윤수향, 조민철, 김아람, 신우석, 이상신
충남연구원 서해안기후환경연구소
- PT-012 방출셀과 소형챔버를 이용한 건축자재의 온도영향에 따른 방출특성 연구**
현승민^{1,*}, 홍길환¹, 고영환¹, 김만구², 권영진³, 최임성³
^{1*}한국산업기술시험원, ²강원대학교, ³아람기술이앤지(주)
- PT-013 수질 중 질산염의 질소와 산소 안정동위원소비를 이용한 상수원 오염원 판별**
유지수¹, 박범성¹, 김정인¹, 강은비¹, 김윤석^{1,*}
^{1*}K-water 수질안전처
- PT-014 Non-targeted screening in drinking water by liquid chromatography-mass spectrometry**
Young Jae Joo^{1,2}, Hee Soo Pyo¹, Kyoung Heon Kim², and Jeongae Lee^{1,*}
¹Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology
²Department of Biotechnology, College of Life Sciences and Biotechnology, Korea University
- PT-015 미세기포 발생장치별 용존오존량 및 색도제거 시험 비교**
김유곤¹, 이광희², 박재형²
¹한국생산기술연구원 융합기술연구소, ²해성엔지니어링(주)
- PT-016 TED-GC-MS를 이용한 다양한 환경매질별 미세플라스틱 분석방법 연구**
Microplastic analytical method Using TED-GC-MS in various environmental media
김주양, 정재학*
(주)한국분석과학연구소
- PT-017 Comparison of volatile organic compounds released from mainstream smoke of 'filtered cigarettes with flavored capsule (FCFC)'**
Dae-Hwan Lim¹, Ki-Hyun Kim^{1,*}
^{1*}Department of Civil and Environmental Engineering, Hanyang University
- PT-018 Development of simultaneous analysis of 2 pesticides and 7 PAHs in sediment**
Kyeong-Yun Choi¹, Ho-Sang Shin^{2,*}
¹Department of Environmental Science, Kongju National University,
^{2*}Department of Environmental Education, Kongju National University
- PT-019 Chemical Compositions of Fine Particulate Matters at Mt. Halla-1100 Site, Jeju Island in 2020**
Jung-Min Song¹, Hyo-Sun Yang¹, Won-Hyung Kim¹, Chang-Hee Kang^{1,*}
Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University
- PT-020 Chemical Characteristics of Precipitation Components at Mt. Halla-1100 Site in Jeju Island**
Chang-Hee Kang¹, Hyo-Sun Yang¹, Won-Hyung Kim¹, Jun-Oh Bu¹, Jung-Min Song^{1,*}
Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

의약품/화장품: PT-021 ~ PT-042

- PT-021 Isolation and characterization of selective androgen receptor modulators (SARMs) hydrolyzed YK-11 in a dietary supplement by liquid chromatography-tandem mass spectrometry**
Ji Hyun Lee, Ji Hye Han, Nam Sook Kim, Jinho Kim, and Sun Young Baek[★]
Center for Advanced Analysis, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Republic of Korea
- PT-022 Comparison of main components between the non-/bio-converted Morus alba leaves following bio-conversion process**
Jin Hyeok KIM¹, Tae Jung KIM¹, Kyung Tae KIM², Young Ho KIM¹, Cheong-Weon Cho¹, Chang-Seon Myung¹, Seok Jin Kim³, Hyun So Cho³, Min Ho Yoon⁴, and Jong Seong KANG^{1,★}
¹College of Pharmacy, Chungnam National University,
²Department of Food Science and Technology, Dong-Eui University,
³MSC Annexed Food Technology Research Institute,
⁴Department of Bio Environment Chemistry, Chungnam National University
- PT-023 HPLC-PDA-ESI-MS/MS identification and quantification of phenolic acids in enriched Isatidis Folium extract and assessment of its anti-wrinkle activity**
Gao Dan¹, Chong Woon Cho¹, Rustam Rustamov¹, Cheong Tae Kim², Won Seck Jeong², and Jong Seong Kang^{1,★}
^{1,★}College of Pharmacy, Chungnam National University, ²RNS Inc. Daejeon
- PT-024 HPLC-FLD method for analysis of N-acetylneuraminic acid in antler extracts using 1,2-diamino-4,5-methylenedioxybenzene precolumn derivatization**
Duc Thanh CHU, Chong Woon CHO, and Jong Seong KANG[★]
College of Pharmacy, Chungnam National University
- PT-025 Profiling of chemically transformed ginsenosides by steaming conditions of white ginseng based on UHPLC-Q/TOF-MS**
Seongchul Park¹, Wonwoong Lee², Jongki Hong^{1,★}
¹College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea
²College of Pharmacy, Woo Suk University, Wanju-gun 55338, Korea
- PT-026 Carvone-based green mixtures as novel, tunable, and hydrophobic bio-based solvents**
Ke Li¹, Seulgi Kang¹, Yu Li Liu¹, Inseon Hwang¹, Jeongmi Lee^{1,★}
¹School of Pharmacy, Sungkyunkwan University, Suwon
- PT-027 Novel phyto-synthesis of metallic nanoparticles using green tea-based plant extracts**
Yuli Liu¹, Seulgi Kang¹, Ke Li¹, Eun-Young Ahn², Youmie Park², Jeongmi Lee^{1,★}
¹School of Pharmacy, Sungkyunkwan University, ²College of Pharmacy and Inje Institute of Pharmaceutical Sciences and Research, Inje University

- PT-028 Non-targeted metabolomics investigation to unveil affected metabolic pathways and biomarkers of sex-specific depression using a sub-chronic variable stress model of mice**
Seulgi Kang¹, Woonhee Kim², Ke Li¹, Yu Li Liu¹, Inseon Hwang¹, Danbi Won¹, Boyeon Bae¹, Yua Kang¹, Chi Hye Chung², Jeongmi Lee^{1,*}
¹School of Pharmacy, Sungkyunkwan University,
²Dept. of Biological Sciences, Konkuk University
- PT-029 In-vitro and in-vivo metabolism of the anabolic steroid bolasterone by GC-MS/MS**
Anca Raluca Muresan^{1,2}, Khandoker Asiqur Rahaman^{1,2}, Farzana Binte Rafique^{1,2}, and Oh-Seung Kwon^{1,2,*}
¹Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea,
²Division of Bio-Medical Science & Technology, KIST School, Korea University of Science and Technology, Seoul 02792, Korea
- PT-030 The In-vitro metabolism of butizide by ultra high-performance liquid chromatography/orbitrap mass spectrometer**
Farzana Binte Rafique^{1,2}, Anca Raluca Muresan^{1,2}, Khandoker Asiqur Rahaman^{1,2}, and Oh-Seung Kwon^{1,2,*}
¹Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea,
²Division of Bio-Medical Science & Technology, KIST School, Korea University of Science and Technology, Seoul 02792, Korea
- PT-031 Characterization of in-vitro generated metabolites of Thymosin β 4 by LC-MS/MS with synthesized standards**
Khandoker Asiqur Rahaman^{1,2}, Anca Raluca Muresan^{1,2}, Farzana Binte Rafique^{1,2}, and Oh-Seung Kwon^{1,2,*}
¹Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea,
²Division of Bio-Medical Science & Technology, KIST School, Korea University of Science and Technology, Seoul 02792, Korea.
- PT-032 Capillary electrophoresis/nano-electrospray-mass spectrometry를 이용한 의약품 내의 N-nitrosodimethylamine의 분석**
Joon Yub Kwon, Roman Řemínek¹, František Foret¹, Doo Soo Chung^{2,*}
¹Institute of Analytical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, v. v. i., Brno, Czech Republic
²서울대학교 자연과학대학 화학부
- PT-033 Comparison of meta-analysis of untargeted metabolomics using public metabolome database**
Young Cheol Yoon¹, Hoang Anh Nguyen¹, Phuoc Long Nguyen¹, Sung Won Kwon^{1,*}
¹서울대학교 약학과
- PT-034 An untargeted metabolomic approach of TAZ downregulated Leydig cell**
Young Cheol Yoon¹, Eun Goo Lee¹, Hoang Anh Nguyen¹, Sung Won Kwon^{1,*}
¹서울대학교 약학과
- PT-035 Omics Study in Reprogrammed Metabolism of Breast Cancer Using Spheroid-induced EMT Model**
Young Cheol Yoon¹, Nguyen Hoang Anh¹, Sun Jo Kim¹, Sung Won Kwon^{1,*}
¹서울대학교 약학과

- PT-036 Potential clinical health benefit of ginger: A comprehensive systematic review of randomized control trial**
Nguyen Hoang Anh¹, Sun Jo Kim¹, Cheol Woon Jung¹, Sung Won Kwon^{1,*}
¹College of Pharmacy, Seoul National University, Seoul 08826, Republic of Korea
- PT-037 Ginseng polysaccharide characterization and evaluation of antioxidant effect in *Caenorhabditis Elegans***
Nguyen Hoang Anh¹, Young Cheol Yoon¹, and Sung Won Kwon^{1,*}
¹College of Pharmacy, Seoul National University, Seoul 08826, Republic of Korea
- PT-038 Geographical origin discrimination signatures investigation of white rice: An LC-MS approach**
Nguyen Hoang Anh¹, Sun Jo Kim¹, Young Cheol Yoon¹, Sung Won Kwon^{1,*}
¹College of Pharmacy, Seoul National University, Seoul 08826, Republic of Korea
- PT-039 Alteration of metabolism and phenotype in *Caenorhabditis elegans* induced by perfluorinated compounds**
윤지현¹, 김형민¹, 윤상준¹, Nguyen Hoang Anh¹, 김선조¹, 권성원^{1,*}
¹서울대학교 약학대학
- PT-040 Metabolite profiling of Blood Transfusion group through LC-Q-TOF and GC-MS**
윤지현¹, 이은구¹, 권성원^{1,*}
¹서울대학교 약학대학
- PT-041 Triclosan induces metabolomics alteration and reveals cellular toxicity in *Caenorhabditis elegans***
김석원¹, 김형민¹, Nguyen Phuoc Long¹, 윤상준¹, Huy Truong Nguyen¹, 권성원^{1,*}
^{1,*}서울대학교 약학과
- PT-042 Assessment of toxic effects of nanopolystyrene in *Caenorhabditis elegans* through phenotype monitoring and metabolomic approach**
김석원¹, 김형민¹, 이동규¹, Nguyen Phuoc Long¹, 권성원^{1,*}
^{1,*}서울대학교 약학과

식품/농학: PT-043 ~ PT-056

- PT-043 농업분야 온실가스 저감 효과 판정을 위한 신개념 평가 방법**
강남구^{1,2,*}, 정인일¹, 주옥정³
¹한국표준과학연구원(KRISS) 첨단측정장비연구소 장비인프라팀,
²과학기술연합대학원대학교(UST) 측정과학전공, ³경기도농업기술원 환경농업연구과
- PT-044 Headspace GC-MS analysis of volatile compounds in black garlic with different heat treatments**
장한별, 김정권^{1,*}
¹충남대학교 화학과

- PT-045 Characterization of TiO₂ and SiO₂ nanoparticles in food using field-flow fractionation(FFF)**
Wang Da¹, Meiyu Zhang¹, Jae-Min Oh², Jaeyeong Choi¹ and Seungho Lee^{1,*}
¹Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea,
²Department of Energy Materials Engineering, Dongguk University, Republic and of Korea
- PT-046 Study on analytical method of trace elements in care food using ICP-OES and AAS**
Yuri Lee¹, suhyun Kim¹, sunghwa Choi¹, Jaejong Jin¹, kyungsu Park^{1,*}
¹Advanced Analysis Center, Korea Institute of Science and Technology
- PT-047 Simultaneous determination of veterinary drugs conditionally allowed for residual in livestock and fishery products by liquid chromatography-tandem mass spectrometry**
박소정, 박서연, 한상범*
중앙대학교 약학과
- PT-048 Interaction Between Human Sweet Taste Receptor and Sweet-Tasting Protein by Single Molecular Pull-down Assay**
Si-Wook Jang, Sung-Jun Lee, Gi-Hyeon Chae, Hyun-A Kim, Na-Hee Jung, Kwang-Hoon Kong*
Laboratory of Biomolecular Chemistry, Department of Chemistry, Chung-Ang University
- PT-049 Isotope Dilution Liquid chromatography Tandem mass spectrometry Analysis for Vitamin B12 in Infant formula**
Hyeonwoo Yu^{1,2}, Kiwan choi^{1,*}, Byungjoo Kim^{1,2,*}
¹Organic Metrology Group, Division of Chemical and Medical Metrology, Korean Research of standards and Science, Daejeon, 34113, South Korea
²Department of Bio-Analytical Science, University of Science and Technology, Daejeon, 34113, South Korea.
- PT-050 LC-MS/MS를 이용한 참다래에서 Oxytetracycline 분석법 정립**
강성훈, 김혜영, 이현선, 박미정, 조지미*, 전향량, 강희채
국립농산물품질관리원 전남지원
- PT-051 질량분석기를 이용한 벼 작물체 중 22종 농약의 동시다성분 분석법 정립**
김혜영, 강성훈, 이현선, 박미정, 조지미*, 전향량, 강희채
국립농산물품질관리원 전남지원
- PT-052 Development of method to discriminate the geographical origin of boston butt (pork) using ICP-MS with multivariate data analysis**
Suel hye Hur, Jeong-A Choi, Eun-Hee Chang, Dong-jin Kang, Jae-Min An, Seong Hun Lee*
Experiment Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service (NAQS)
- PT-053 Statistical processing technology for advanced determination of the geographical origin in pork belly**
Jae-Min An, Dong-Jin Kang, Ji-Hye Lee, Jeong-A Choi, Yong-Sik Youn, Da-Hye Jin, Sung-Hee Lee and Seong-Hun Lee*
Experiment Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service (NAQS)

PT-054 Intra-laboratory validation of the geographical origin examination method of pork belly using ICP-OES & ICP-MS

Jae-Min An, Dong-Jin Kang, Ji-Hye Lee, Jeong-A Choi, Yong-Sik Youn, Da-Hye Jin, Sung-Hee Lee and Seong-Hun Lee[★]

Experiment Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service (NAQS)

PT-055 Improvement of origin discrimination method of pork belly using NIRS through reduction of sample weight

Dong-Jin Kang, Ji Hye Lee, Jeong A Choi, Yong-Sik Youn, Da hye Jin, Sung Hee Lee, Seong-Hun Lee, Jae-Min An[★]

Experiment Research Institute of National Agricultural Products Quality Management Service, 141, Yongjeon-ro, Gimcheon-si, Gyeongsangbuk-do, 740-220, Korea

PT-056 Method validation for simultaneous determination of *myo*-inositol and L-carnitine in milk-based infant formula by liquid chromatography-tandem mass spectrometry

방한열¹, 구명주¹, 원종은¹, 박종수¹, 곽병만^{1,★}

¹*남양유업 중앙연구소

무기/재료: PT-057 ~ PT-064

PT-057 고순도 실리카 분말 및 디스크형 인증표준물질 개발

양정환¹, 김선혜¹, 정세훈^{2,★}

¹포항산업과학연구원 분석인프라섹션, ²*포항산업과학연구원 분석평가연구센터

PT-058 연소 적외선 흡수법을 이용한 고체전해질 중 C, O, S 분석

한홍현¹, 이윤희¹, 김소영², 정세훈^{2,★}

¹포항산업과학연구원 분석인프라섹션, ²*포항산업과학연구원 분석평가연구센터

PT-059 Single Particle Study: Plasmonic Damping Induced by Mercury Amalgamation in Mesoporous Silica Coated Gold Nanorods

김근완, 하지원[★]

울산대학교 화학과

PT-060 Development of method to discriminate the geographical origin of lotus root using XRF with multivariate data analysis

Yong-Sik Youn, Jae-Min An, Dong-Jin Kang, Ji-Hye Lee, Jeong-A Choi, Da-Hey Jin, Ji-Yeon Eom and Seong-Hun Lee[★]

Experiment Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

PT-061 Analysis of Cu mapping in dementia mouse brain using fsLA-ICP-MS

Sunghwa Choi¹, yuri Lee¹, kyungsu Park^{1,★}

¹Advanced Analysis Center, Korea Institute of Science and Technology, 5 Hwarang-ro 14-gil, Seongbuk-gu, Seoul

- PT-062 탄소나노튜브를 이용한 대량 분취용 액체 크로마토그래피 분리관 개발**
Development of HPLC Separation Column of Mass Separation Analysis in Natural Substance Extract and Separation Analysis
최기정^{1,*}, 김미경¹, 김건한¹, 서정기²
^{1,*}(주)대덕분석기술연구원, ²한국표준과학연구원
- PT-063 Identification of isocyanate adducts with various diols by NMR and FT-IR spectroscopy**
Kwang Seo Park, Yun Ju Kim, Ji Sun Lee, Eun Kyung Choe^{*}
Regulatory Chemical Analysis & Risk Assessment Center, Korea Institute of Industrial Technology
- PT-064 전통 단청안료 진사(辰砂)의 열화특성 분석**
김지선¹, 유지아², 이선명^{1,*}
¹국립문화재연구소 복원기술연구실, ²국립문화재연구소 보존과학연구실

원자력/방사선: PT-065 ~ PT-072

- PT-065 Analysis of filter lifetime of HANARO reactor primary coolant purification system**
Woo-taek LEE^{*}, Yong-hwi KIM, Ho-young CHOI
Korea Atomic Energy Research Institute
- PT-066 Analysis of released amount of gaseous radioactive waste from HANARO reactor for shutdown period (2014~2020)**
Yong-hwi KIM^{*}, Woo-taek LEE
Korea Atomic Energy Research Institute
- PT-067 연구로 중성자 방사화 분석을 위한 고속중성자의 간섭 평가**
문종화^{*}
한국원자력연구원 하나로이용부
- PT-068 열이온화질량분석에 의한 Mo 동위원소 비 측정 검토**
박양순^{*}, 조혜륜
한국원자력연구원 방사성물질화학분석실
- PT-069 핵분열생성물 중 희토류 원소의 음이온교환수지 흡착특성**
강병만^{*}, 김정석, 이재석, 박재일
한국원자력연구원 방사성폐기물 화학분석센터
- PT-070 Analysis of Tritium Generation according to Operation Conditions and Management System of Tritium in HANARO**
Hoon-Jo Cho^{*}, Kwang-Young Lee, Ho-Young Choi
Korea Atomic Energy Research Institute
- PT-071 Optimization of operating parameters of aerosol generator for uranium particle swipe samples**
Hyun Young Kim^{*}, Hwan Lee, Cheong Won Lee, Eun Hee Kwon, Jung-Youn Choi, Haneol Lee, Hyun Ju Kim
Korea Institute of Nuclear Nonproliferation and Control (KINAC)

PT-072 Alpha-emitting source preparation for ^{210}Po determination in biological samples using extraction chromatography and spontaneous deposition

Hyeon-Woo Lee^{*}

Department of NORM Analysis, Korea Institute of Nuclear Safety

표준: PT-073 ~ PT-076

PT-073 Physical Properties of Drying Lacquer Films From Different Producer

Hye Hyun Yu, Jihye Lee, Yeonhee Lee^{*}

한국과학기술연구원 특성분석센터

PT-074 Performance Evaluation of the developed Mini-Automated Weighing System

김정은^{1,3}, 이진복², 김진석², 양인석^{1,3}, 홍기룡^{2,*}

¹과학기술연합대학원대학교 측정과학과, ²한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀,

³한국표준과학연구원 열역학온도팀

PT-075 Analysis of trace-level impurities in hydrogen for preparing primary reference gas mixtures for impurity measurement in pure hydrogen

Baigali Tsogt^{1,2}, Ji Hwan Kang¹, Dong Min Moon¹, Jin Seog Kim¹, Dal Ho Kim¹,

Kiryong Hong¹, Yong Doo Kim¹, Seok-Young Oh² and Sangil Lee^{3,4,*}

¹Gas Metrology Group, Division of Chemical and Biological Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science (KRISS),

²Department of Civil and Environmental Engineering, University of Ulsan,

³Division of Chemical and Biological Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science (KRISS),

⁴Science of Measurement, University of Science and Technology

PT-076 고순도 가스의 불순물 분석을 위한 3 $\mu\text{mol/mol}$ 수준의 CO, CO₂, CH₄ in N₂ 일차표준가스 개발 유효성^{1,2}, 문동민¹, 이진복¹, 김운중², 홍기룡^{1,*}

¹한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀, ²한남대학교 화학과

법과학: PT-077 ~ PT-086

PT-077 문서 중 유성볼펜 잉크의 비손상 식별을 위한 전사-액체추출 표면분석-모세관 전기영동 분석법
Seung-Hoon Bahng¹, Sunkyung Jeong² and Doo Soo Chung^{2,*}

¹Defense Institute of Forensic Science, Criminal Investigation Command, Seoul 04383, Korea

²Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea

PT-078 Structure Analysis of Isotopomers of ^{35}Cl and ^{37}Cl in 2-Chloropyridine Cation : Cation Spectroscopy and Franck-Condon Simulation

Yu Ran Lee¹ and Chan Ho Kwon^{2,*}

¹Forensic Chemistry Division, National Forensic Service

²Department of Chemistry and Institute for Molecular Science and Fusion Technology,

Kangwon National University

PT-079 Application of fragmentation patterns and fragment ion structures for the screening selective androgen receptor modulators (SARMs) adulterated in the seized dietary supplements using LC-Q-TOF/MS

Nam Sook Kim, Hwan Seong Choi, Na Young Lim, Ji Hyun Lee, Jin Ho Kim and Sun Young Baek*
Center for Advanced Analysis, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Republic of Korea

PT-080 Method development and validation for quantification of SR9009 in horse blood using liquid chromatography–tandem mass spectrometry

Young Beom Kwak^{1,3}, Jundong Yu^{1,*}, Ki Young Jang², Hye Hyun Yoo^{3,*}

^{1,*}Racing Laboratory, Korea Racing Authority, ²Veterinary Dept, Korea Racing Authority,

^{3,*}College of Pharmacy, Hanyang University

PT-081 비지도학습적 인공신경망을 이용한 법과학적 토양 분류

이충식*

국방부조사본부 과학수사연구소 약독물화학과

PT-082 화재잔류물의 GC-MS 분석을 통한 인화성 물질 검출 여부 판단 자동화를 위한 랜덤포레스트 기반 전문가 시스템 알고리즘

박치현^{1,*}, 박우용¹, 전수경¹, 이수민¹, 이준배²

¹국립과학수사연구원 대전과학수사연구소, ²국립과학수사연구원 대구과학수사연구소

PT-083 최루 스프레이의 사용 여부 판단을 위한 성분 검출 및 분석 사례연구

박우용^{1,*}, 박치현¹, 전수경¹, 주현경², 김경민²

¹국립과학수사연구원 대전과학수사연구소, ²국립과학수사연구원 서울과학수사연구소

PT-084 Use of ethyl glucuronide and ethyl sulfate as a marker of distinction of ethanol source in postmortem blood

조영훈^{1,*}, 이준배¹, 고정아¹, 박민주¹, 김현지², 권미아²

^{1,*}대구과학수사연구소 독성화학과, ²국립과학수사연구원 화학과

PT-085 An experimental analysis of the use of the CFK equation in predicting carboxyhemoglobin (COHb) formation

Yuna Kim*, Min-Hui Son, Yu Ran Lee, Mia Kwon

*Forensic Chemistry Division, National Forensic Service

PT-086 염료 동일성 판단을 위한 기기분석법 비교

Comparison of instrumental analysis for determining dye identification

이준배^{1,*}, 조영훈¹, 고정아¹, 박민주¹, 권미아²

¹국립과학수사연구원 대구과학수사연구소, ²국립과학수사연구원 화학과

일반: PT-087 ~ PT-109

PT-087 폴리우레탄 및 키토산 복합 폼에 함유된 키토산 확인에 관한 연구

A study on the qualitative analysis of chitosan in polyurethane foam coated with chitosan using Pyrolysis-GC-MS

박광서¹, 최은경^{1,*}

¹한국생산기술연구원 환경규제기술센터

- PT-088 바이오항공유 활용을 위한 나무 유래 열분해오일의 용매별 액액분리 구성성분 연구**
전화연^{1,2}, 박조용¹, 김재곤^{1,*}
¹한국석유관리원 석유기술연구소 ²*고려대학교 환경공학과
- PT-089 Laser desorption/ionization time of flight mass spectrometry (LDI-TOF-MS)를 이용한 OLED 분석**
이석열^{1,*}, 성경희¹, 오윤석², 김민기², 신동진²
¹LG Display, ²ASTA Inc.
- PT-090 유기 에어로졸 입자의 점성도(viscosity) 측정**
송영철^{1,*}
^{1,*}한국화학연구원 화학분석센터
- PT-091 Establishment of analytical method for five allergenes in Sanitary Napkins**
심희정¹, 김종환^{1,*}, 안지영¹, 조유진¹, 서종수¹
¹안전성평가연구소 경남분소 환경화학연구그룹
- PT-092 액체크로마토그래피 질량분석기를 이용한 비스페놀 3종과 프탈레이트 6종의 다성분 동시분석법 확립**
신민철¹, 이승민, 김종환^{*}
¹안전성평가연구소 환경화학연구그룹
- PT-093 Synergistic Effect of Collagen Scaffold Loaded A Biomaterial With Hemostatic Function**
Yoon Sook Na, So Hee Jang, Ryun Seung Kim, Dong Hoon Kwak^{*}
DenHouse Co.,Ltd.
- PT-094 Development of wavelength-dependent three-dimensional light-sheet-based super-resolution microscopy**
Yingying Cao¹, Seong Ho Kang^{1,2,*}
¹Department of Chemistry, Graduate School, Kyung Hee University, Korea
²Department of Applied Chemistry and Institute of Natural Sciences, Kyung Hee University, Korea
- PT-095 어류에서 농약류(esfenvalerate, triclosan)와 PAHs 7종 동시분석법 개발**
최경윤¹, 신호상^{2,*}
¹공주대학교 환경과학과, ^{2,*}공주대학교 환경교육과
- PT-096 Analysis of flavor additives added to Capsules in Cigarettes and Heat-not-Burn tobacco products**
Kyeong-Yun Choi¹, Ho-Sang Shin^{2,*}
¹Department of Environmental Science, Kongju National University,
^{2,*}Department of Environmental Education, Kongju National University
- PT-097 Optimization of asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) for size characterization of nanocellulose**
Jin Wook Kim, Meiyu Zhang, Wang Da, Jae Hyun Kim, Jaeyeong Choi and Seungho Lee^{*}
Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea
- PT-098 Investigation of effect of dioxybenzone (a UV filter) contents on size of solid lipid nanoparticle (SLN) using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF)**
Miyeon Park, Meiyu Zhang, Wang Da, Jae Hyun Kim, Jaeyeong Choi and Seungho Lee
Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

- PT-099 Development of a method for determining lamellarity of lipid vesicles using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS)**
Binnam Kang, Meiyu Zhang, Wang Da, Jae Hyun Kim, Jaeyeong Choi and Seungho Lee*
Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea
- PT-100 Label-free impedimetric sensor based on electropolymerized molecularly imprinted polymer for determination of luteolin.**
이돈희, 이원용*
연세대학교 화학과
- PT-101 Determination of Capsaicin based on Ru(bpy)₃²⁺ Electrogenerated Chemiluminescence**
Sang Jung Lee, Won-Yong Lee*
Department of Chemistry, Yonsei University
- PT-102 레이저 유도 플라즈마 분광 분석법을 이용한 코코피트 배양토의 원소 분석 방법 연구**
장진실¹, 최한범¹, 송지연¹, 서지훈¹, 오재민¹, 주신영¹, 이찬호¹, 이용훈^{1,2,*}
¹목포대학교 화학과, ²*목포대학교 화학과, 유·무기소재 및 천연물 분광화학 분석센터
- PT-103 Reliable profiling of short-chain fatty acids in human plasma by hot injector derivatization of SPME fiber**
Youlee Kim¹, Wonwoong Lee², Jongki Hong^{1,*}
¹College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea
²College of Pharmacy, Woo Suk University, Wanju-gun 55338, Korea
- PT-104 Pattern-based analysis of *Gardenia jasminoides Ellis* by High-performance liquid chromatography-diode array detector**
Sung-hyun Jeon¹, Sang Beom Han*
Department of Pharmaceutical Analysis, College of Pharmacy, Chung-Ang University
- PT-105 High performance single drop microextraction in-line coupled with capillary electrophoresis for trace analysis of NSAIDs in human urine**
Joseph E. Valdez^{1,2}, Natalia Miękus^{1,3}, Joon Yub Kwon¹, Wooyong Kwon¹, Tomasz Bczek³, and Doo Soo Chung^{1,*}
¹Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea
²Department of Natural Sciences, College of Arts and Sciences, Nueva Vizcaya State University, Bayombong, Nueva Vizcaya, 3710, Republic of the Philippines
³Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Medical University of Gdańsk, Al. Gen. J. Hallera 107, 80-416 Gdańsk, Poland
- PT-106 Liquid extraction surface analysis-capillary electrophoresis/dual C⁴D of small ions on a lithium battery anode surface**
Sunkyung Jeong¹, Byung-Hee Choi², Jonggeol Kim², Hee-Sun Yun² and Doo Soo Chung^{1,*}
¹Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea
²LG Chem Research Park, Yuseong-gu, Daejeon 34122, Korea
- PT-107 Headspace microextraction using a single bubble coupled with capillary electrophoresis**
Xamy Noulorsaytour and Doo Soo Chung*
Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea

PT-108 Efficient extraction of intact proteins from polyacrylamide gel by using ammonium sulfate

정신희, Jalaludin Iqbal, 김정권*

충남대학교 화학과

PT-109 Surface analysis of Printed Circuit Board with SEM-EDS

김연수¹, 서지형¹, 손영구^{1,2}, 김정권^{1,2,*}

¹충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터, ²충남대학교 화학과

대학원생 구두 & 포스터: PT-110 ~ PT-115

PT-110 Analysis of aging related human body odor using GO/PANI/ZNRs/ZIF-8 coated wire-INME method followed by GC/MS

Sehyun Kim, Sunyoung Bae*

Department of Chemistry, Seoul Women's University

PT-111 Effective determination of nicotine enantiomers from e-liquids and biological fluids using dispersive liquid-liquid microextraction(DLLME)

Seung Hoon Song and Seung-Woon Myung*

Department of Chemistry, Kyonggi University, Suwon 16227 Korea

PT-112 Headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis/mass spectrometry for short chain fatty acids from a real sample

권준엽¹, 정두수^{1,*}

¹서울대학교 자연과학대학 화학부

PT-113 전기 유도 플라즈마 분광법을 활용한 부유 바이러스 전파의 실시간 탐지

양준호¹, 여재익^{1,*}

^{1,*}서울대학교 기계항공공학부

PT-114 미세먼지 실시간 원인 분류를 위한 딥러닝을 이용한 전기 유도 플라즈마 방출광 신호 학습

박상훈¹, 양준호¹, 여재익^{1,*}

^{1,*}서울대학교 기계항공공학부

PT-115 Insights into the sampling methods of carbonyl compounds released from mainstream smoking

Sol Han¹, Sang-Hee Jo², Ki-Hyun Kim^{1,*}

^{1,*}Department of Civil & Environmental Engineering, Hanyang University,

²Radiation Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Tutorial Session

-미세플라스틱과 표준-

Tutorial session

미세플라스틱과 표준

Microplastics and Standard

Jaehak Jung*

Korea Institute of Analytical Science and Technology

*Corresponding author: jh3370@naver.com

In the COVID-19 epidemic, pollution from PPE is becoming a rising concern as the wearing of masks to contain the spread of corona virus from person to person was instructed globally and has become a frequent sight in countries around the world. Various PPEs and single use plastics (food packaging etc) used exceeded the processing capacity of each country. Eventually, various untreated plastics flow into the sea along the river, become secondary microplastics, and eventually become contaminated with various aquatic organisms. It will come up to the table. Furthestmost the soil was contaminated for a long time due to agricultural seeds and fertilizers that were used by making micro-encapsulated microplastics, and as a result, root plants (carrots, etc.) and fruits (apples, etc.). The discovery of microplastics in the size of microns shows that the world is contaminated with microplastics in a very wide range.

Since 2018, KIASST which has been leading the microplastics testing service and standardization for the first time in Korea, has recently been providing testing services for environmental samples and food containers such as tea bags, paper cups, baby feeding bottles, and various seafood. Currently, in ISO, various Technical Committees (TCs) are very active to propose new international standardization by medium. In particular, firstly, TC 61 (Plastics) established a microplastics WG (working group) in 2018 to begin standardization of test methods. After that, NWIP was proposed by TC 147 (Water quality) and TC 38 (Textile) to achieve international standardization. In the future, standard proposals for each medium of each ISO TCs (Soil, Air, Sewage sludge, Fertilizer, Rubber and others) are expected, and discussions on establishing joint working group (JWG) between TCs and harmonization among ISO TCs are underway and many changes are expected in the future.

Therefore, this tutorial introduces the basics and applications of microplastic testing, and also introduces the importance of international standardization.

keywords: microplastics, ISO, standard.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Luncheon Seminar

-연구장비 산업과 정책 현황-

Luncheon Seminar. 1

국산 연구장비 신뢰성 확보를 위한 레퍼런스 R&D 지원 정책

서인수^{1,*}, 김혜진¹

¹한국기초과학지원연구원

*Corresponding author: sis1031@kbsi.re.kr

우리나라의 국가연구개발사업 예산은 연간 20조원을 넘어섰으며 2021년은 2020년 대비 13.1%증가한 27.4조원 규모가 될 것으로 예상된다. 이와 함께 국가연구개발사업으로 구축된 연구시설장비 투자규모는 최근 5년간(2015~2019년) 4조 2,305억원(국방R&D제외)으로 국가연구개발사업 투자규모의 5.1%를 차지한다. 연구시설장비, 특히 첨단 분석목적용 연구장비는 선도형 R&D 및 우수성과 창출을 위한 핵심 인프라로 볼 수 있다. 그러나 우리나라의 연구장비는 외산에 의존하고 있는 실정으로 2019년 국가연구시설장비 조사·분석 보고서에 따르면, 실험실용 연구장비의 해외의존도(구축장비 수 기준)는 광학/전자영상장비 84.2%, 화합물전처리/분석장비 84.1%, 물리적측정장비 77.1%, 임상의료장비 90.4%인 것으로 나타났다. 이러한 외산 연구장비 위주의 도입은 국가연구비가 해외로 유출되고 있으며, 과학기술계/산업계 측면에서 해외장비 중심의 연구/장비산업 생태계 고착화 우려도 제기된다.

이러한 측면에서 우리나라의 R&D생산성 및 경쟁력 제고를 위해서라도 연구장비산업 경쟁력 강화를 위한 국가차원의 R&D 정책 및 지원이 절실하다. 본 연구에서는 연구장비산업 육성을 위한 국가 R&D 정책 중 한국기초과학지원연구원에서 수행 중인 연구장비 레퍼런스R&D지원 사업에 대하여 알아보려 한다.

과학기술정보통신부는 지난해 8월 연구장비산업을 육성을 위해서, 연구장비 기술의 글로벌 경쟁력 확보, 연구장비 산업성장 생태계 조성, 전략적 시장 진출 지원 등 3대 전략과 9대 과제로 구성된 「연구장비산업 혁신성장전략」을 발표하였다. 한국기초과학지원연구원은 본 전략 중 「연구장비 산업성장 생태계 조성」을 목표로 연구장비 레퍼런스R&D사업(사업명 : 성능평가 및 기반조성)을 통해 국산장비의 신뢰성 검증 및 성과 확산을 지원하고 있다. 본 사업은 연구장비 성능을 검증하는 '성능평가', 국산 연구장비를 활용한 SCI급 논문 게재 등 우수 연구성과 창출을 지원하는 '활용연구', 연구장비 필드테스트를 통한 수요층 발굴·확산을 위한 '실증연구', 그리고 본 R&D사업을 통해 창출한 성과의 확산·보급을 위한 '플랫폼 구축' 등으로 구성되어 있다. 본 사업은 수요층(연구자)가 직·간접적으로 공급자(기업)의 제품을 활용을 통해 상호간의 신뢰를 확보함을 목표로 한다. 또한, 우수하고 저렴한 연구장비 보급·확산을 통해 연구자의 연구활동을 촉진하고, 연구자에게 세계적인 우수 연구 성과를 창출을 지원하고자 한다.

한국기초과학지원연구원은 국내 연구장비 선도 기관으로서, 연구장비산업 생태계 조성뿐만 아니라 분석기술 및 장비 개발, 연구장비 및 분석과학 전문인력양성 등을 통한 과학기술계 연구장비분야 혁신 성장을 위한 발전방안을 모색할 것이다.

Luncheon Seminar. 2

다양한 분석과학 분야를 위한 주사탐침현미경의 최신 동향 및 발전

조상준^{1,*}

¹파크시스템스 응용기술센터

*Corresponding author: msjcho@parksystems.com

주사탐침현미경의 가장 큰 장점 중 하나는 장비의 구성에 따라 시료를 공기, 액체, 진공 속 어디에서나 사용 할 수 있다는 점으로, 고해상도의 이미지를 얻기 위해서는 복잡한 시료 준비 절차를 거친 후 진공 속에서 측정해야 하는 전자 현미경에 비하여 다양한 환경에서 시료를 전자현미경에 필적하는 해상도로 관찰 할 수 있는 원자현미경의 장점은 많은 연구자들에게 가장 큰 매력이 아닐 수 없다. 이를 바탕으로 다양한 장비기술과 응용기술이 개발되어 왔으며 그 중 몇가지를 소개하고자 한다.

주사탐침현미경은 광학 한계 이하의 초미세 표면구조에 대한 고해상도 이미지와 다양한 물리학적 성질에 대한 정보를 제공할 수 있으며 기존의 분석계측 기술과는 상보적으로 결합이 가능하여 Correlative microscopy 분야의 발전에 큰 기여를 하고 있다. 주사탐침현미경 기술과 백색광 간섭계 기술과의 결합, 라만, 형광 현미경 기술과의 결합 등은 나노기술 분야의 발전에 큰 영향을 미치고 있다. 또한 최근에는 주사탐침현미경의 한계를 극복하는 기술들도 빠르게 발전하고 있다. 광유도력 힘 현미경 (Photonic Induced Force Microscopy:PiFM)의 경우에는 IR 기술을 접목하여 나노미터 수준에서의 화학적인 분석을 하지 못하던 주사탐침현미경의 한계를 극복하고 있으며 주사이온전도 현미경 (Scanning Ion Conductance Microscopy:SICM)의 경우에는 액상에서 불가능에 가까웠던 살아있는 세포와 같이 출렁이는 표면 위의 생체분자나 모양의 측정의 가능성을 보여주고 있다. 이런 기술들은 재료과학과 바이오 분야에서의 연구를 위한 많은 잠재적 주사탐침현미경 기술의 몇가지 예들이며 본 강의를 통하여 최신 주사탐침현미경 기술들을 소개하고자 한다.

Luncheon Seminar. 3

홀로토포그래피를 이용한 세포와 조직의 3차원 영상과 정량 분석

박용근^{1,*}

^{1,*}한국과학기술원 물리학과

*Corresponding author: yk.park@kaist.ac.kr

Quantitative phase imaging (QPI) exploits refractive index (RI) distribution as intrinsic imaging contrast and enables label-free quantitative phase imaging. Optical diffraction tomography (ODT) or holotomography (HT), is one of the 3D quantitative phase imaging (QPI) techniques, uses laser interferometry to measure 3-D refractive index (RI) distribution. HT is an optical analogous to X-ray computed tomography (CT). HT measured multiple 2-D holograms of a sample with various illumination angles, from which a 3-D RI distribution of the sample is reconstructed by inversely solving the wave equation. The combination of QPI and AI will open new avenues for label-free bioimaging. Although this talk will focus on the AI-based analysis of 3D QPI data, QPI and AI will also be useful for various aspects of imaging and analysis, including phase retrieval, tomographic reconstruction, virtual staining, and noise reduction. Advances in QPI instruments and AI algorithms will further expand the applicability of this emerging fields.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Special Session

Special session

COVID-19 분자진단 기술과 동향

박한오

(주)바이오니아

2019년 12월 중국 우한에서 발생한 COVID-19가 전 세계를 휩쓸면서 2021년 4월 23일 기준 전 세계 감염자 수는 약 1억 4,500만 명을 넘어섰고 사망자도 300만 명에 육박하고 있다. COVID-19는 전염성이 높고 지역사회 내 무증상 감염자 비율이 높으며, 유사한 증상을 보이는 독감과 정확하게 구분하고 질병에 맞는 치료 및 대처를 하는 것이 중요하다.

COVID-19 백신이 보급됨에 따라 집단면역을 통한 예방 및 확산 방지를 기대하고 있으나, 전 세계적으로 변이 바이러스가 등장하면서 집단면역을 회피하는 변이체로 인해 재감염 및 재확산의 우려가 존재하고 있으며, 이는 새로운 변이체를 지속적으로 모니터링하여 빠르고 즉각적인 대처를 함으로써 방지할 수 있다.

PCR 진단은 높은 민감도와 특이도로 COVID-19와 유사 증상의 질병뿐만 아니라 COVID-19 변이체까지 정확하게 구분이 가능한 방법으로, 바이오니아는 COVID-19 분자진단을 위한 장비부터 시약까지 Total solution을 제공한다.

바이오니아는 29년간 구축된 특허받은 자체 원천기술을 기반으로 핵산추출자동화장비 및 핵산증폭 장비(Real-time PCR)와 관련 시약들을 개발하였으며, 다양한 분자진단 제품으로 사용자 환경에 맞는 분자진단 시스템을 전 세계 90여 국가에 제공하고 있다.

현재 현장진단용 신속 분자진단 장비(POCT, Point-of-Care Testing) 및 대용량 전자동화 장비(Fully automated MDx system) 등을 개발함으로써 분자진단의 문제점과 한계를 극복하기 위해 앞장서고 있으며, Post COVID-19 상황에도 다양한 질병의 검사를 위한 연구를 지속할 계획이다.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Symposium I

-법과학-

SYM I-01

국내 폭발물 폭발사고 사례 분석

김동환*

국방부조사본부 과학수사연구소 총기폭발물과

*Corresponding author: kdh1960@naver.com

2001년 9월 11일 미국에서 발생한 911 테러 이후 전 세계는 적극적인 대테러 대책 수립과 테러에 대한 국제적 공조를 통하여 테러의 발생 예방은 물론, 만약 테러가 발생하였을 경우 피해를 최소화하고 체계적인 복구를 진행하며, 폭발 현장을 집중 분석하여 신속하게 테러 단체를 규명, 추적하는 시스템을 구축하기 위해 노력하고 있다.

국내의 경우는 법과학 연구기관과 테러 대응기관을 중심으로, 911 테러 이후 크게 관심이 높아진 IED(Improvised Explosive Device, 급조폭발물)의 분석 방법 연구와 현장 대응훈련을 꾸준히 지속하고 있으며, 2017년에는 평창 동계올림픽에 대비하여 경찰청 PBI(Post Blasting Investigation)팀을 발족하여, 현재에도 비상설로 운영하고 있다.

국내에서도 다양한 폭발물 폭발 사고가 발생하고 있으며, 과거 90년대 중반까지는 차량에 다이너 마이트와 같은 폭발물을 설치하고, 기폭장치를 ignition 키의 전원장치에 연결하여, 차량의 시동을 거는 순간 폭발이 발생하여 인명 살상을 의도하거나, 일종의 파이프 폭탄(pipe bomb)을 실내에 설치하고, 기폭장치는 조명 스위치에 연결하여, 조명등을 켜는 순간 폭발하여 인명 살상을 의도한 사건이 다수 발생하였으며, 당시의 사건은 채석장 등 폭약을 사용하는 사업장에서 유출된 폭발물을 이용한 경우가 대부분이었다.

이후 88 올림픽을 계기로 80년 후반부터 시작된 엄격한 치안 정책으로 인해, 한국은 90년 후반 들어 총기와 폭발물 청정국가로 인식되었으며, 폭발물을 이용한 테러 성격의 사건은 거의 발생하지 않았다.

하지만, 2000년 이후 인터넷의 급속한 보급으로 인해 폭발물 제조방법을 누구나 쉽게 접할 수 있게 되면서, 청소년의 호기심 또는 자기 과시 욕구에 의한 폭발물 사건이 발생하기 시작하였고, 최근에는 성인에 의한 폭발물 제조 시도가 다수 발생하는 추세에 더하여, 급기야 국제적 테러에 사용되는 과산화물 폭발물질인 TATP(Tri Acetone Tri Peroxide)를 이용한 폭발 상해사고가 다수 발생하고 있다.

이와 같은 국내 상황의 변화에 더하여, 최근에는 평화유지군의 역할로서 중동 지역으로의 파병이나 청해부대의 페르시아만 주둔 등으로 인해 한국도 중동지역 국제 테러집단의 표적이 될 수 있다는 견해도 높아지고 있다.

본 발표에서는 국제 테러집단에 의한 국내 테러 발생의 위험이 높아지는 시점에서, 국내에서 발생한 대표적인 폭발물 폭발사고의 유형과 성격을 분석하여 체계적인 자료로 정리하고, 이를 폭발물을 이용한 테러 성격의 사고 발생을 억제할 수 있도록 활용하고, 나아가 대테러 정책 수립의 기초자료로 이용할 수 있도록 하고자 한다.

SYM I-02

Chemical asphyxia caused by toxic gases generated from rigid polyurethane foams (RPUF) fires

Min-Hui Son^{*}, Yuna Kim, Young-Hoon Jo and Mia Kwon

^{*}국립과학수사연구원 화학과

^{*}Corresponding author: sonmh07@korea.kr

Rigid polyurethane foams (RPUF) are one of the most prominent polyurethane (PU)-based products and have been widely used for thermal insulators due to convenient construction and low cost. However, it is easily flammable and the fire risk is also astronomical because it is a special combustible material with fast fire growth rate. Once fire has happened, various thermal decomposition products of RPUF and toxic fumes including carbon monoxide (CO), hydrogen cyanide (HCN) and nitrogen dioxide (NO₂) can be produced depending on the material composition and fire conditions. In particular, CO and HCN are considered as chemical asphyxiants that may be directly causative of death by forming carboxyhemoglobin without oxygen transfer capability and impairing cellular respiration by inhibition of cytochrome *c* oxidase (CCO), respectively. For these reasons, it is important to prove the inhalation of those gases for diagnosis of the cause of death in fire casualties.

In this study, we investigated toxic gas poisoning to CO, HCN and NO₂ in RPUF fires by measuring levels of carboxyhemoglobin (COHb, %), cyanide (CN⁻, μg/mL) and free methemoglobin (MetHb, %) using postmortem blood of 38 victims and the likelihood of inhalation of NO₂ that might be generated from the fire was suggested. In an effort to better understand the lethal effect by toxic gases, we classified all cases into two groups on the basis of injuries and room of origin of the fire.

In conclusion, we demonstrated the possibility of chemical asphyxial death caused by toxic gas poisoning in RPUF fires and combined inhalation of more than two gases was identified in all cases.

SYM I-03

화학사고 원인조사 방법 및 사례연구

Analytical Methods for the Chemical Incident Investigation and Case Study

황승울*, 조운제, 류태인, 박효진, 김찬식, 윤영욱, 이두연

화학물질안전원 사고대응총괄과

*Corresponding author: komelong@korea.kr

화학물질 취급시설에서 유누출로 인한 사고가 발생하면 현장에서 작업자의 안전을 위협하고 나아가 주변지역에 거주하는 주민들과 자연생태계에도 영향을 미치게 되는 경우가 있다. 대부분의 화학물질 유누출 사고 즉 화학사고는 취급시설의 운영 기록이나 현장에서 채취한 시료를 분석하여 원인을 규명할 수 있지만 화재, 폭발이 수반되는 경우에는 현장에 남겨진 증거만으로 정확한 원인을 찾아내기 어려우므로 사고가 발생한 취급시설에 사용된 화학물질에 대한 조사와 함께 부가적인 화학반응에서 발생하는 부산물 (transformation product)에 대한 조사도 필요하다. 또한 화학사고로 인해 유출된 화학물질이 대기 중으로 확산되면 주변지역의 주민과 환경에 영향을 미치게 되므로 사고원인 화학물질의 종류와 농도에 대한 조사가 향후 수습 및 복구에 중요한 역할을 할 수 있다. 화학물질의 분자구조와 농도를 확인하기 위해 일반적으로 사용되는 분석기기로는 핵자기공명분광기, 적외선 분광기 등의 분광분석기, 화학물질을 분리하는 크로마토그래피와 함께 사용되는 각종 질량분석기가 사용되며 최근 관련 기술의 발달로 pg 수준의 미량 화학물질을 분석할 수 있는 고분해능 분석기기의 사용이 확대되는 추세이다. 그리고, 화학반응에서 화학물질의 변화를 추적할 수 있는 열중량-기체크로마토그래피-질량분석기, 가속속도 열량계 등을 사용하여 화학물질 유누출이 화재, 폭발과 같은 화학반응을 수반하게 되는 경우, 사고원인에 대한 정보를 조사할 수 있다. 금번 발표에서는 환경부는 화학사고 예방, 대비, 대응 및 수습을 위해 지정한 사고대비물질 97종을 조사하기 위해 물리화학적 특성에 따라 순차적으로 핵자기공명분광기, 적외선분광기, 크로마토그래피-질량분석기 등을 사용하여 정성 및 정량하는 분석체계를 제시하고자 한다. 화학사고 원인조사의 간단한 예로 운반차량에서 운전자의 실수로 유출된 ADC (azodicarbonamide)의 열분해 부산물이 주변지역으로 확산되어 농작물에 피해가 발생한 사건이 있다. 현장에서 농작물과 토양에 흡착된 고체를 채취하여 핵자기공명분광기의 ^{13}C -NMR, ^1H -NMR 분석결과를 기초로 ADC와 부산물인 바이우레아(biurea)와 사이아누릭산 (cyanuric acid)을 확인할 수 있었다. 이와 같이 사고 현장에서 채취한 시료의 화학물질 정성 및 정량분석을 통해 화학사고의 발생 원인과 사후 영향을 규명하고 유사 사고의 재발을 예방하기 위해 신속하고 정확한 화학물질 분석체계의 운영이 효과적일 것으로 기대된다.

SYM I-04

Change in ethanol and alcohol biomarker (EtG, EtS) under bacterial conditions

Woojae Lee¹, Younghoon Jo¹, Soomin Kim¹, Songhie An¹, Hyunjee Kim¹, Mia Kwon^{1,*}

¹*National Forensic Service, Forensic Chemistry division, Wonju-si

*Corresponding author: miakwon@korea.kr

While the ethyl alcohol concentration (EtOH) is maintained for up to 8 to 12 hours in blood and urines the drinking metabolites, ethyl glucuronide (EtG) and ethyl sulfate (EtS) can be analyzed up to three days for urine and 14hours for blood and it can be also measured quantitatively. It can be used for unsolved sex crimes or autopsy cases. However, according to a recent study, EtG is known to be degraded by bacteria. There is also a study that EtG can be produced when E. coli exists with ethanol. There is a growing demands for ways to store samples in a stable manner for accurate evaluation.

In this study EtS and EtG in urine were analyzed, cut-off values were set up to 0.5 mg/L for EtG and 0.1 mg/L for EtS, Measurement for whether EtG and EtS were degraded by bacterial condition was done with LC-MS/MS in-vitro condition. For several weeks urine EtG and EtS concentration were checked in controlled temperature (4°C, 25°C), with bacteria (E. coli, C.albican) and EtOH within the preservative (NaF ,10 mg/mL) was added to suppress the reactions of these substances. The same samples without EtOH was prepared to see the generation of EtOH by Candida Albicans with glucose, these were kept in 4°C, 25°C for 2 weeks. then alcohol level was measured with GC-FID, EtG and EtS was measured with LC-MS/MS.

In this study sample stored at room temperature with E. coli within, EtG can 50mg/L was completely decomposed to 0 mg/L but EtS was relatively stable and degradation was effectively prevented by the low temperature or preservative. EtOH can be made by C.albican up to 0.68g/dL, EtG can be generated by the E.coli were up to 9.26 g/dL. and alcohol EtOH made by C.albican can influence the E.coli to make EtG.

In conclusion EtG can be affected by E.coli, temperature, ethanol and etc. In order to get precise data simultaneously analyzing EtOH, EtG, EtS is needed. This can be important for putrefied samples or E.coli contaminated Urines.

Symposium II

- 에너지 · 소재 분석기술의
최신 동향 -

SYM II-01

Innovative Smartphone & Advanced TV 기술 및 특허 동향

권상세

(주)TPI

주지하고 있는 바와 같이 제4차 산업혁명의 핵심 트렌드 중의 하나는 Mobilty Centric Society 일 것이다. 모바일로 이동하고 있는 제품과 콘텐츠의 중심에 스마트폰이 존재한다. 먼 장래를 예측해 보면 지금 우리 세대는 원시 스마트폰 기기 사용을 이제 막 경험하기 시작했다고 볼 수 있다. 다양한 디지털 기기들의 기능들이 스마트폰 속으로 집중되고 있으며 글로벌 IT 기업들은 이처럼 거대한 시장의 성장과 제품 혁신의 소용돌이를 경험하고 있다. 본 세미나를 통하여 스마트폰의 핵심 트렌드인 폴더블 스마트폰의 기술개발 동향과 각 기업들의 특허 출원 동향 분석을 통하여 우리가 추구해야 할 미래의 핵심역량에 대하여 알아보기로 하겠다.

아울러 1980년부터 우리의 안방과 거실을 장악하고 있는 TV라는 제품도 이제 막 변화의 기지개를 켜고 있다. Flat Panel Display의 대명사인 LCD TV 가 수요의 대부분을 차지하고 있지만 이 또한 다양한 Form Factor를 가진 디스플레이로 변화되고 있는 것을 알 수 있다. 이번 발표에서는 LG의 Rollable TV 제품 동향과 중국 굴지의 TV제조사인 TCL의 Mini LED TV 제품과 특허 동향을 살펴보기로 하겠다.

SYM II-02

실제 사례 중심으로 이차전지 전극소재의 X-선 결정구조 회절 분석

(X-ray structural analysis of electrode materials for rechargeable batteries: Practical examples)

홍승태*

디지스트 에너지공학과

*Corresponding author: st.hong@dgist.ac.kr

Single crystals are the best forms to analyze their crystal structures. However, most new application materials are available only as powder forms. Electrode materials in battery applications are typical examples, and so are the resultant materials after the electrochemical reactions. If a material adopts an unknown and new structure type and only powder form is available, it would be a great challenge to determine the structure. An ab initio method has been developed that is a combination and iteration of the powder and the single-crystal refinement techniques. Crystal system and unit cell parameters of an unknown structure should be determined first, followed by the space group determination. Structure factors are extracted from the powder data by Le Bail fit that are strongly dependent on the structural model. Because the structure is unknown, the initial model is just a trial one, and thus the extracted structure factors usually include serious errors. However, these are treated as single-crystal data and yet quite useful for getting a starting model with a routine single crystal technique. The enhanced model goes back to be used for Le Bail fit, and improved structure factors are extracted. The process is iterated until a complete and satisfactory structure is obtained. Rietveld refinement may be employed in the final step. It should be emphasized that the procedure is not always straightforward, especially for materials with unidentified impurities, high symmetry, and preferred orientations. In this talk, recent progress in our exploration for new intercalation chemistry of monovalent and divalent ions into various host materials will be presented, focused on structural determination of new phases during the electrochemical reaction.

SYM II-03

Practical applications of solid-state NMR in industry

Taejoon Park

Samsung SDI

ssnmr.park@samsung.com

Solid-state nuclear magnetic resonance (NMR) is a specialized characterization technique used to determine chemical composition or structural properties in a variety of industrially relevant materials. The utility of the solid-state NMR approach to a wide range of materials areas including polymers, energy materials, micro-/macroporous materials, geomaterials, hybrid biomaterial composites, catalysis system, glasses and functional materials. Solid-state NMR can provide insight, especially at the atomic scale, into the structure-function relationship of them. Here, we would like to demonstrate how solid-state NMR spectroscopy could be used to support the research and development for industrial quality and process control. In this presentation, we present some applications of solid-state NMR to investigate the degradation mechanisms of polymer film and quantify the degree of cross-linking in silicone materials.

SYM II-04

NMR을 이용한 소재분석의 최신 기술 동향 [Pureshift를 중심으로]

Hyun Namgoong

Research and Development Division, KOLON Industries, Seoul, Korea

hyun@kolon.com

Abstract Decoupling has been powerful NMR method to increase the resolution especially in the multiplet overlapped ^{13}C spectrum. However, homonuclear proton decoupling technique is thought to be challenging one because it is only applicable to the narrow band irradiation due to the polarization loss when using the broad proton decoupling. Indirect 2D method can switch the inherent cumbersome problem with the spin decoupling spectrum. In this article, based on the slice and shift selective Zangger-Sterk method complex A_3X_2 spin system can be well resolved to assign the precise ^1H chemical shift satisfactorily. To get the increased sensitivity the precise phase cycling and processing parameters is required, which is described in detail.

keyword: homonuclear decoupling, phase cycling, Zangger-Sterk

Symposium III

-질량분석기술을 활용한
COVID-19 단백질체 분석-

SYM Ⅲ-01

Analysis of physicochemical properties for the biopharmaceuticals to overcome COVID-19

Narae Kang^{1,2}, Jonghwa Jin^{1,*}

^{1,*}New Drug Development Center, 123 Osongsaengmyeong-ro,
Cheongju-si, Chungbuk 28160, Republic of Korea.

²College of Pharmacy, Chungbuk National University, 194-21,
Osongsaengmyeong 1-ro, Cheongju-si, 28160, Korea.

*Corresponding author: jichang011@kbiohealth.kr

COVID-19 is an acute respiratory disease caused by the RNA virus SARS-CoV-2. Since its first outbreak in China, the disease has rapidly spread to more than 175 countries around the world. The WHO (World Health Organization) declared it as a public health emergency and assessed it as a pandemic. In addition, the situation of the COVID-19 pandemic is continuously evolving all over the world. Effective treatments are still in urgent need, but currently, no drug with stable performance has been found for COVID-19. Here we introduce the promising strategy composed of two stages for development of therapeutic antibodies of COVID-19. First stage is the development of antibody drug, and next stage is the stable antibody production. In the first stage, high-resolution proteomics analysis of immunoglobulin (Ig-seq) coupled with high-throughput sequencing of transcripts encoding B cell receptors (BCR-seq) is used to quantitatively determine the antibody repertoire, in which plasma from recovered patients is used. The second stage is the production of stable therapeutic antibodies of COVID-19 based on the recombinant protein expression system, where various analyses of physicochemical properties are performed such as intact mass, peptide mapping, disulfide bond, glycan composition, and HDX-MS.

Although it will take too much time and effort in development of therapeutic antibodies for COVID-19, we hope that our suggested strategy help someone who want to develop antibody drug to understand establishing the strategy of development for therapeutic antibodies.

SYM III-02

In-depth blood proteome profiling analysis revealed distinct functional characteristics of plasma proteins between severe and non-severe COVID-19 patients

Joonho Park¹, Hyeyoon Kim¹, So Yeon Kim², Yeonjae kim³, Jee-Soo Lee⁴, Kisoan Dan¹, Moon-Woo Seong^{4,*}, Dohyun Han^{1,*}

¹*Proteomics Core Facility, Biomedical Research Institute,

²Department of Laboratory Medicine, National Medical Center,

³Department of Infectious Disease, National Medical Center,

⁴Department of Laboratory Medicine, Seoul National University Hospital

*Corresponding author: hdh03@snu.ac.kr

The severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) has infected over forty million patients worldwide. Although most coronavirus disease 2019 (COVID-19) patients have a good prognosis, some develop severe illness. Markers that define disease severity or predict clinical outcome need to be urgently developed as the mortality rate in critical cases is approximately 61.5%. In the present study, we performed in-depth proteome profiling of undepleted plasma from eight COVID-19 patients. Quantitative proteomic analysis using the BoxCar method revealed that 91 out of 1222 quantified proteins were differentially expressed depending on the severity of COVID-19. Importantly, we found 76 proteins, previously not reported, which could be novel prognostic biomarker candidates. Our plasma proteome signatures captured the host response to SARS-CoV-2 infection, thereby highlighting the role of neutrophil activation, complement activation, platelet function, and T cell suppression as well as proinflammatory factors upstream and downstream of interleukin-6, interleukin-1B, and tumor necrosis factor. Consequently, this study supports the development of blood biomarkers and potential therapeutic targets to aid clinical decision-making and subsequently improve prognosis of COVID-19.

SYM III-03

Machine learning classifies core and outer fucosylation of human plasma proteins and SARS-COV2 spike protein using LC-MS/MS

황희연^{1,*}, 이주연¹, 김진영¹, 유종신¹

¹한국기초과학지원연구원 바이오융합연구부

*Corresponding author: heeyounh@kbsi.re.kr

Protein glycosylation is known to be involved in biological progresses such as cell recognition, growth, differentiation, and apoptosis. Fucosylation is one of the common decoration of glycoproteins, and plays an important role for structural stability and function of N-linked glycoproteins. Although many of biological and clinical studies of protein fucosylation by fucosyltransferases has been reported, structural classification of fucosylated N-glycoproteins such as core or outer isoforms remains a challenge. Here, we report for the first time the classification of N-glycopeptides as core- and outer-fucosylated types using tandem mass spectrometry (MS/MS) and machine learning algorithms such as the deep neural network (DNN) and support vector machine (SVM). Training and test sets of more than 800 MS/MS spectra of N-glycopeptides from the immunoglobulin gamma and alpha 1-acid-glycoprotein standards were selected for classification of the fucosylation types using supervised learning models. The best-performing model had an accuracy of more than 99% against manual characterization and area under the curve values greater than 0.99, which were calculated by probability scores from target and decoy datasets. Finally, this model was applied to classify fucosylated N-glycoproteins from human plasma and spike protein from SARS-COV2. As a result, outer fucosylation was dominant in tri- and tetra-antennary N-glycopeptides, while core fucosylation was dominant in the mono-, bi-antennary and hybrid types of N-glycoproteins. Thus, the machine learning methods can be combined with MS/MS to distinguish between different isoforms of fucosylated N-glycopeptides.

SYM Ⅲ-04

High Resolution Mapping of RNA-Protein Interactions & SARS-CoV-2 RNA interactome

김중서

서울대학교 자연과학대학 생명과학부

Mass spectrometry (MS) based proteomics has been used to elucidate the RNA-interactome in various biological systems. However, the profiling resolution of RNA-binding sites or domains still remains in poor and vague stage. Here, I will present a couple of recently developed methods for high-resolution mapping of RNA-binding sites or regions using chemical tools; 1) RBS-ID and 2) FAX-RIC. RNA-binding site (RBS)-ID is a method that uses hydrofluoric acid to fully cleave RNA into mono-nucleosides, thereby minimizing the search space to drastically enhance coverage and to reach single amino acid resolution. The simple mono-nucleoside adducts offer a confident and quantitative measure of direct RNA-protein interaction. Using RBS-ID, we profiled ~2,000 human RBSs and probed *Streptococcus pyogenes* Cas9 to discover residues important for genome editing. I also introduce formaldehyde crosslinking (FAX) as an alternative chemical crosslinking for RNA interactome capture (RIC). Mild FAX captures RNA-protein interaction with high specificity and efficiency in cell culture. Furthermore, FAX-RIC is applicable to mammalian tissue samples such as *Mus musculus* liver, extending the RNA interactome profiling into multicellular organisms. Finally, the recent result of SARS-CoV-2 RNA interactome including 109 host factors that directly bind to SARS-CoV-2 RNAs, which were identified via newly developed robust ribonucleoprotein capture protocol, will be presented.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Symposium IV

-표준/원자력/안전 -

SYM IV-01

Particulate matters CRMs for the quality control of analytical results and basic researches.

Yong-Hyeon Yim^{1,*}

¹Korea Research Institute of Standards and Science

*Corresponding author: yhym@kriss.re.kr

Particulate matter (PM) has always been a central component of the earth's atmosphere affecting its climate and ecosystem. Increasing human activities ever since the first Industrial Revolution rapidly changed the quantity as well as the nature of generated PMs, which introduced major air pollutions harmful to human health and environments. Therefore, our government is operating national air quality monitoring network to analyze PM concentration and hazardous chemicals in PMs for monitoring and management of air quality. KRISS has launched a project to develop certified reference materials (CRMs) for quality control and method validation of PM analysis and collected several candidate PM materials, including average urban PMs, road PMs, PMs from municipal waste incineration, and indoor PMs, in large-scale for last two year. As the first candidate CRM, a large amount of urban PM was obtained from air filter systems of large buildings in the Greater Seoul area. About 2.5 kg materials recovered from vibrating stepwise sieving and air-jet sieving were used to produce candidate urban PM CRMs with PM 10 characteristics. After characterization of various physicochemical and biological properties, including major/trace elements, PAHs and other hazardous organic constituents, ions, isotope ratios, and metagenomes, it will be released as the first KRISS CRM for PM analysis reflecting the characteristic of regional PMs. The characteristics of the candidate CRM are also compared with similar CRMs from NIST and JRC. By evaluating certified and information values for various chemical and biological properties for regional PMs, it is expected to provide a useful tool for quality control of chemical analysis, source identification as well as more robust evaluation of PM toxicity.

SYM IV-02

Determination of element contents by k_0 -based INAA method in urban particulate matters from the Greater Seoul area

**Hana Cho^{1,*}, Kishore B. Dasari², Myung Chul Lim¹, Gwang Min Sun²,
Radojko Jaćimović³, and Yong-Hyeon Yim¹**

^{1,*}Inorganic Metrology Group, Korea Research Institute of Standards and Science,

²HANARO Utilization Division, Korea Atomic Energy Research Institute,

³Department of Environmental Sciences, Jožef Stefan Institute

*Corresponding author: hanacho@kriss.re.kr

We report the comprehensive elemental composition of Korea Research Institute of Standards and Science (KRISS) certified reference material (CRM) of urban airborne particulate matter (PM) through k_0 -based instrumental neutron activation analysis (k_0 -INAA). The k_0 -INAA method is a nondestructive method and compensates for the influence of the matrix effect on trace elemental quantification. The method also complements a primary method of measurement for amount of an element such as isotope dilution mass spectrometry and standard comparator-INAA. In this study, the analytical method was validated using National Institute of Standards and Technology (NIST) urban PM Standard Reference Material[®] (SRM). Results are in well agreement with corresponding certified and information values. The feasibility of using k_0 -INAA in quantifying various elements and using them in verifying environmental matrix CRMs was investigated.

A total of 46 elements in an urban PM sample collected in the greater Seoul area in Korea in 2019 were analyzed, and their concentrations were compared with those of available urban PM CRMs. The potential major source of urban airborne PMs was discussed. The results showed that vehicle emissions were the largest potential cause of urban PMs. The candidate CRM of KRISS urban PM contained significantly lower levels of hazardous elements, such as As, Cd, Cr, Hg, and Pb, than NIST SRM 1648a. Both materials were collected from an aerosol sample used in CRM preparation without the addition of external elemental quantities.

The obtained elemental composition information of CRM not only is greatly useful in ensuring the reliability of PM analysis of quality control samples but can also contribute to the enhancement of the analytical procedures of environmental sample analysis using the k_0 -INAA method. [*Appl. Sci.* 2020, 10(19), 6649]

SYM IV-03

Actinide chemistry: chemical behaviors of long-lived radionuclides relevant to the long-term safety assessment of SNF managements

Hee-Kyung Kim^{*}, Hye-Ryun Cho, Euo Chang Jung, Wansik Cha, Tae-Hyeong Kim

Korea Atomic Energy Research Institute

^{*}Corresponding author: hkim11@kaeri.re.kr

Actinide elements are the major radionuclides that dominate the long-term radiotoxicity of spent nuclear fuel (SNF). For the safety assessments of the deep geological disposal of SNF, chemical behaviors of actinides in natural aquatic systems should be understood. Reliable chemical thermodynamic data of radionuclides are essential for modeling study of radionuclide migrations in geochemical environments. Actinide ions can be stabilized in various oxidation states spanning from +3 and +6 that entail strong multifaceted interactions with environmental matters. Our research group has been working on geochemically relevant reactions of major actinide ions, U(IV, VI), Pu(III-VI), and Am(III). In this presentation, spectroscopic approaches for actinide chemistry will be briefly introduced with our recent representative results on various actinide systems. More detailed discussion on thermodynamic and structural properties of Am(III) complexes with carboxylic organic ligands will be presented. Combinational use of various spectroscopic methods and computations enable quantitative analysis of optical properties of Am(III) for the chemical speciation and determination of reaction equilibriums. DFT calculations provide deeper insights into the binding structures of the actinide complexes. Distinct optical properties of Am(III) complexes with various ligands are discussed in relation to the coordination mode of each ligand.

SYM IV-04

후쿠시마 원전 사고와 해양 방사능 감시

김현철*

한국원자력연구원 원자력환경실

*Corresponding author: hckim3@kaeri.re.kr

2011년 3월 발생한 후쿠시마 원전 사고 이후, 환경 방사능은 중요한 관심대상이 되었다. 통제되지 않은 방사성물질이 육지와 바다로 유출되었으며, 여전히 후쿠시마 원전 부지 내에서 방사성오염수가 발생하고 있기 때문이다. 최근 일본 정부의 후쿠시마 오염수 방류 결정이 알려진 뒤로, 해양환경 방사능은 주요 이슈가 되었다. 해양에 오염수를 방류할 경우, 언제 우리나라 해역에 영향을 미칠지는 국민 건강 및 환경보전 측면에서 중요하다.

해양확산 예측과 더불어 중요한 것은 실제 해양환경의 방사능을 분석하는 것이다. 이 발표에서, 해양환경 방사능 분석에 관한 최근 기술동향을 살펴보고, 미래에 필요한 분석기술을 다루려고 한다.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Symposium V

-약학분야 젊은 과학자 -

SYM V-01

**Metabolomics study to elucidate toxic mechanisms
of environmental pollutant**

Hyung Min Kim^{1,*}

¹College of Pharmacy, Chungnam National University

*Corresponding author: kimhm@cnu.ac.kr

There is a growing concern regarding the toxic effects of emerging environmental contaminants. However, an all encompassing phenotyping- and omics-based strategy for the toxicity assessment of contaminants on soil living organisms remains to be established. Herein, we applied a comprehensive phenotyping and multi-omic profiling method to examine the molecular disturbance of *Caenorhabditis elegans* (*C. elegans*) exposed to various type of environmental toxicant. We evaluated the ability of reproduction and locomotion, as well as oxidative stress of worms upon exposure to environmental toxicant. Additionally, we developed analytical method to evaluate the metabolome and lipidome of the *C. elegans*. This made us able to evaluate the dysregulation of metabolic pathways. Along with metabolomics and lipidomics, transcriptome profiles of *C. elegans* were monitored to find the association between metabolic pathways and transcriptome. Collectively, we demonstrated that comprehensive phenotyping and omics-based profiling establish a practical framework that allows us to gain deeper insights into the maladaptive consequences induced by environmental toxicant in *C. elegans*. It can be utilized for the evaluation of emerging environmental contaminants in the terrestrial ecosystem.

SYM V-02

Profiling of steroid hormones in human plasma by MAD-GC-MS/MS for diagnosis of gastric disorders

Wonwoong Lee¹, Bong Chul Chung², Jongki Hong^{3,*}

¹College of Pharmacy, Woosuk University

²Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology

³College of Pharmacy, Kyung Hee University

*Corresponding author: jhong@khu.ac.kr

Steroid hormones are associated to cellular signaling, inflammatory immune responses, and reproductive functions, and their metabolism alterations can incur various diseases. In particular, quantitative profiling of steroids in plasma of gastric cancer patients can provide information to understand development of gastric cancer, since both sex hormones and glucocorticoids might be related to the pathological mechanisms of gastric cancer. Here, we developed a gas chromatography-tandem mass spectrometry-dynamic multiple reaction monitoring (GC-MS/MS-dMRM) method combined with solid-phase extraction (SPE) and microwave-assisted derivatization (MAD) to determine 20 endogenous steroids in human plasma. In this study, SPE and MAD conditions were optimized with respect to elution solution and volumes and irradiation power and time, respectively. The optimized SPE enabled effective cleanup and extraction for profiling of steroid hormones in human plasma samples. The MAD could improve laborious and time-consuming derivatization procedure, since dielectric heating using microwave directly increase molecular energy of reactants by penetrating through medium. Furthermore, dMRM method provided more sensitive determination of 20 steroids, compared to traditional MRM detection. The limits of quantification of steroids were below 1.125 ng/mL and determination coefficients of calibration curves were higher than 0.9925. Overall precision and accuracy results were below 19.93% and within $\pm 17.04\%$, respectively. The developed method provided sufficient detection sensitivities and reliable quantification results. The established method was successfully applied to profile steroid metabolism pathways in plasma of patients with chronic superficial gastritis (CSG), intestinal metaplasia (IM), and gastric cancer. Statistical significances of steroid plasma levels between gastric disorder groups were investigated. In conclusion, this method provided comprehensive profiling of 20 steroids in human plasma samples and will be helpful to discover potential biomarkers for the development of gastric cancer and to further understand metabolic syndrome.

SYM V-03

Development and characterization of long-lasting anti-diabetic fusion proteins

신명철^{1,*}

^{1,*}경상대학교 약학과

*Corresponding author: shinmc@gnu.ac.kr

For any therapy to be effective, sufficient delivery of the drugs to their specific target organs is a key issue. However, because of various obstacles, this goal has often been unfulfilled and, the therapeutic outcome has fallen short from achieving their full effectiveness. Specifically, this may be a usual case for the treatment of cancer and neurological disorders with protein therapeutics. To address this challenge, recently, our lab has focused our research efforts to find ways to improve the drug delivery efficiency by enhancing their plasma half-lives. In this presentation, I would like to share the findings from our recent studies with the newly developed long-lasting exendin-4 (EX-ABD-AFF). The EX-ABD-AFF is a genetically engineered fusion protein of a clinically available anti-diabetic exendin-4 peptide with an albumin binding domain (ABD) and an anti-FcRn affibody (AFF). Compared with the exendin-4, the EX-ABD-AFF displayed a remarkably longer plasma half-life (6.4 days vs. 1.5 h) in mice, and, in result, could provide significantly extended hypoglycemic effects for over 12 days in high-fat diet-fed obese mice model. In the long-term study, the EX-ABD-AFF was found effective in not only lowering the blood glucose levels, but also reversing a variety of obesity-related metabolic complications (hyperglycemia, hyperlipidemia, hepatic steatosis, and cognitive deficits). Overall, our study results demonstrated that the 'ABD-AFF fusion' could greatly increase the plasma half-life of exendin-4 and markedly improve its druggability.

SYM V-04

Synthesis and biological evaluation of PF-543 derivatives

박은영, 백동재*

목포대학교 약학과

*Corresponding author: dbaek@mokpo.ac.kr

스핑고신 키나아제(sphingosine kinase, SK)는 세포 내에서 스핑고신(sphingosine)을 스핑고신-1-포스페이트(sphingosine-1-phosphate, S1P)로 변형시켜 세포성장을 유도한다. 동물대상 연구에서 SK를 저해했을 때 다양한 암 억제효과가 밝혀졌으며 암환자의 혈액에서 비정상적으로 SK가 증가되는 것이 관찰되었다. SK는 SK1과 SK2의 두 가지 isoform을 가지고 있으며 둘 모두 저해했을 때 암세포의 억제가 확인되었다. SK1과 SK2는 세포 내에서 각각 다른 위치에서 작용하는 것으로 알려져 있다. 현재까지 가장 강력하게 SK1을 저해하는 물질은 Pfizer에서 개발한 PF-543으로 $IC_{50}=2.0$ nM 수준으로 SK1을 선택적(170배)으로 저해하며 비지질 구조를 가지고 있다. 대장암 동물연구에서 PF-543의 암 성장억제가 확인되었으나 다른 암에서 세포실험과 동물실험에서 암성장 억제 효과가 SK1저해효과에 비해 크지 않은 것으로 보고되었다. 미국제약사인 Apogee에서 개발한 SK2저해제인 ABC294640(Opaganib, Yeliva[®])은 비지질 구조를 가지고 있다. 임상1상에서 다양한 고형암에서 효과를 보였으며 임상2상이 진행 중에 있다. 또한 미국 FDA에서 담관암, 골육종 등 희귀암 치료물질로 지정되어 임상이 진행 중에 있다. 현재까지 연구결과로 SK저해제는 대부분의 암에서 공통적으로 효과를 보이고 있어 희귀암과 기존치료제의 병용치료제로 연구되고 있다. 현재까지 연구되고 있는 SK저해제는 구조적으로 스핑고신과 유사하거나 SK1저해효과를 보이는 FTY720(Fingolimod, Gilenya, Novartis)과 유사한 구조를 가지고 있다. 이러한 긴 aliphatic사슬을 가지고 있는 구조는 약물로서 개발하는데 어려움이 있다. 본 연구자는 현재까지 가장 강력한 SK1저해효과를 보이는 비지질구조의 PF-543 유사체를 전통적인 의약화학적 방법을 이용하여 합성하였다. PF-543의 polar한 head group과 backbone구조인 tolyl group 그리고 benzenesulfonyl tail구조를 다양한 작용기로 변형하여 50여종의 유도체를 합성하였다. 현재 SK1 저해제 1종과 SK1/2저해제 1종이 현재 췌장암 동물실험이 진행 중에 있다. 현재 다른 연구그룹에서 보고된 SK저해제는 대부분 SK1의 선택적인 저해제이며 SK2 선택성을 보이는 물질은 거의 보고되지 않았다. SK1과 다르게 SK2의 crystal 구조가 밝혀지지 않았으며 SK2의 세포내 역할이 명확하지 않은 것이 원인으로 보인다. 본 연구자는 독특한 작용기를 head group에 도입하였을 때 backbone과 tail구조와 상관없이 SK2 선택성을 가진다는 것을 밝혀내었다. 이 중 1종의 화합물이 Gemcitabine과 췌장암 동물 실험이 진행 중에 있으며 이 화합물을 Gemcitabine과의 병용 치료물질로 개발하기 위해 PK연구와 독성, 안정성 연구가 진행 중에 있다.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Symposium VI

-환경-

SYM VI-01

Formaldehyde can be emitted from the heated mouthpiece of tobacco sticks for heated tobacco products (HTPs)

김용현^{1,*}

^{1,*}상지대학교 환경공학과

*Corresponding author: yhkim2021@sangji.ac.kr

가열담배제품(heated tobacco product, HTP)은 담배 스틱을 가열함에 따라 다양한 종류의 유해화학물질이 방출될 수 있다. 일반적으로 담배 스틱 내 연초의 가열에 의해 유해화학물질이 발생하게 되는데, 담배 스틱 내 필터의 가열에 의해서도 유해화학물질이 발생할 수 있다. 본 연구에서는 HTP 담배 스틱 내 필터를 가열함에 따라 유해화학물질이 발생하는지 여부를 평가해 보았다. 대표적인 HTP 기기 브랜드 제품 3종을 이용하여 담배 스틱에서 연초를 제거하고 열을 가하는 방식 (방법 1)과 담배 스틱에서 연초를 제거한 상태에서 담배 필터 부분을 기기에 일부 넣어 가열하는 방식 (방법 2), 그리고 담배 스틱을 일반적인 방법으로 열을 가하는 방식 (방법 3: conventional case)으로 가열담배 연무를 발생시켰다 (puff number = 6, puff volume = 55 mL, puff interval = 30 sec, puff duration = 2 sec). 그리고 발생시킨 가열담배 연무를 carbonyl 성분들을 중심으로 분석 및 비교해 보았다. 일반적인 방법 (방법 3)으로 연무를 발생시킬 경우 acetaldehyde와 propionaldehyde가 상대적으로 높은 농도를 기록 하였다 (acetaldehyde = $63.5 \pm 18.4 \mu\text{g}/\text{stick}$ and propionaldehyde = $1.71 \pm 0.123 \mu\text{g}/\text{stick}$). 그러나 연초를 제거한 상태에서 일부 담배 필터를 가열한 연무의 경우 (방법 2), formaldehyde의 농도가 평균 $0.945 \pm 0.214 \mu\text{g}/\text{stick}$ 으로 일반적인 방법으로 발생시킨 연무(방법 3: formaldehyde = $0.641 \pm 0.092 \mu\text{g}/\text{stick}$)에 비해 높은 농도 수준을 기록 하였다. 즉, 가열담배 스틱의 담배 필터에 열이 가해짐에 따라 유해화학물질 중 하나인 formaldehyde가 생성되는 것을 확인하였다. 또한, acetone은 일반적인 방법 (방법 3)으로는 가열담배 연무에서 검출되지 않았지만, 연초가 제거된 가열담배 연무에서는 $0.580 \pm 0.305 \mu\text{g}/\text{stick}$ (방법 2) 농도로 검출되었다. 따라서 HTP 제품의 관리를 위해서는 가열담배 스틱을 구성하는 재질들을 조사하고 가열에 의해 발생 가능한 유해화학물질들을 평가해야 한다.

SYM VI-02

**독성 유기비소 흡착 및 종 변이 특성 확인을 위한 HPLC-ICP-MS 분석 연구:
점토광물 종류에 따른 결합 특성 차이**

조민규^{1,*}, 손주희¹, 김선지¹, 정슬기¹, 윤혜은^{1,*}

^{1,*}한국기초과학지원연구원 서울센터

*Corresponding author: dunee@kbsi.re.kr

일반적으로 환경 중 존재하는 유기비소의 경우, 무기비소에 비해 낮은 독성을 지니고 있지만, 유기체의 대사과정 중 발생하는 methylation 또는 thiolation에 의해 고독성 유기비소가 발생할 수 있어 유기비소의 존재형태 및 변이 특성에 대한 연구가 꾸준히 수행되고 있다. 본 연구에서는 비소 종의 분리 분석을 위해 가장 널리 사용되는 고성능 액체 크로마토그래피 (High Performance Liquid Chromatography, HPLC)와 이온 결합 플라즈마-질량분석기 (Ion Coupled Plasma-Mass Spectrometry, ICP-MS)가 결합된 HPLC-ICP-MS를 활용하여 3 종의 유기비소를 대상으로 점토광물에 흡착되는 정도와 종 변이 특성을 확인하였다. 대상 유기비소는 dimethylarsinic acid (DMA^V), dimethylmonothioarsinic acid (DMMTA^V), dimethyldithioarsinic acid (DMDTA^V)이며, 토양 중 주요 점토광물인 몬모릴로나이트(montmorillonite)와 카올리나이트(kaolinite)에 3종의 유기비소를 10 µM 농도로 pH 6, 고액비 1:20 (w/v) 조건에서 48시간 동안 흡착 실험을 수행하였으며, 2, 6, 12, 24, 48시간에 각각 비소의 농도 및 종 변이를 확인하였다. 비소 종의 분석을 위해 Agilent technology사의 Infinity 1260와 7700 Series ICP-MS를 활용하였다. Thermo Scientific 사의 HyPURITY C18 (250 X 4.6 mm) 컬럼을 사용하였고, 용리액으로 5 mM formic acid (98.0%, Wako chemical, Japan)를 사용하였다.

연구 결과, 몬모릴로나이트의 경우, DMA^V에서 82~84%의 높은 흡착율을 보이고, DMDTA^V (7~22%)와 DMMTA^V (2~7%)의 흡착율을 나타냈다. 카올리나이트에는 DMDTA^V가 45~61%의 높은 흡착율을 보였고, DMA^V와 DMMTA^V가 각각 9~17%, 0.5~3%의 흡착율을 보여 동일 유기비소 종일지라도 점토광물의 종류에 따라 서로 다른 흡착 특성을 나타냈다. 흥미롭게도 DMDTA^V의 경우, 몬모릴로나이트에서는 흡착시간에 따라 DMMTA^V로의 종 변이 정도가 증가한 반면, 카올리나이트에서는 흡착시간에 상관없이 DMMTA^V로 100% 종 변이가 발생한 것을 확인할 수 있다. 이러한 점토광물 종류에 따른 유기비소 종의 흡착 및 종 변이 특성 규명을 위해 XAFS(X-ray absorption fine structure)를 활용한 화학결합 특성 분석을 수행하였다.

사사: 본 연구는 한국연구재단 “독성 유기비소종의 환경 중 출현 가능성 평가를 위한 거동 특성 연구”(NRF-2019R1A2C2007092)의 지원을 받아 수행하였음을 밝힙니다.

SYM VI-03

Online TD-GC-FID를 이용한 서산지역 실시간 VOCs 농도 측정

김주애¹, 강성구¹, 이미혜^{1,*}, 이광렬²

¹고려대학교 지구환경과학과, ²국립환경과학원 대기환경연구과

*Corresponding author: meehye@korea.ac.kr

충청남도 서산은 대산, 당진 및 태안에 위치한 화력발전소, 제철소, 화학공장등 대형 점 오염원과 가까이 위치하고 있어 기상 요건에 따라 오염물질 유입으로 인한 미세먼지 증가등 대기질 악화가 문제 되고 있다. 특히 고농도 미세먼지와 오존 발생의 원인인 휘발성 유기화합물(VOCs)의 관리가 강화됨에 따라 한-미 협력 국내 대기질 공동조사(KORUS-AQ)를 통해 VOCs 주요 배출 지역으로 지목되고 있는 서산지역에서 VOCs의 종별 연속관측은 필수적이다. 본 연구에서는 서산시 수석동에 위치한 충청권 대기환경연구소에서 2020년 10월부터 오존 전구물질 56종에 대해 online TD-GC-FID를 이용하여 1시간 간격으로 연속 측정하였다. VOCs 실시간 연속분석 시스템은 inlet, TD(thermal desorption), GC-FID(Flamelonized Detector)로 구성되어있으며 Cold trap, Dean switch(dual column), 2 FID detectors를 이용하여 ethane, propane을 포함한 저탄소 탄화수소 분석이 가능하다. 대기중 VOCs 농도는 O₃ precursor 표준가스(1 ppm)를 희석하여 검량선을 작성하여 정량하였다. 연속측정 결과 서산에서는 ethane, propane, propylene, i-butane, n-butane, i-pentane, n-pentane, hexane, heptane, benzene, toluene, ethylbenzene, mp-xylene, styrene, o-xylene, octane, nonane 등이 주로 검출되었다. Toluene과 n-butane의 농도가 가장 높았으며 검출빈도 역시 가장 높았다. 또한, 서산에서 풍향에 따라 VOCs 농도 및 종 분포가 다르게 나타났다. Benzene, toluene, hexane, heptane은 사업단지로부터 영향을 반영하였으며 pentane, xylene 등은 서산 주변 배출 영향을 반영하였다.

SYM VI-04

Recent materials prepared for simultaneous imprinted solid phase extraction of organic-inorganic materials in aqueous phase

Sunyoung Bae^{*}, Yelin Lee, and Hyeyoung Jung

서울여자대학교 화학생명환경과학부

^{*}Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

Molecularly and ion imprinted polymers attract a lot of attention due to their easy preparation and high selectivity. To extract organic and inorganic materials simultaneously in aqueous phase, imprinted solid phase extraction (ISPE) was proposed using molecularly imprinted polymer mixed with ion imprinted polymer. In general, the analysis of organic and inorganic materials require different pre-treatment and analytical methods leading to a lot of labor, time and cost. Sometimes, one adsorbent is not able to achieve the reasonable removal of heterogeneous analytes such as organic and inorganic mixture. In this study, 5-Hydroxymethyl-2-furaldehyde (5-HMF) and Zn as target compounds for organic and inorganic materials to be extracted simultaneously were investigated using 5-HMF molecularly imprinted polymer(FIP) mixed with Zn ion imprinted polymer(ZIIP). Synthesis of each imprinted polymer and adsorption conditions on the mixed polymers (FIP/ZIIP) including adsorbent mixing ratio, adsorbate mixing range, and equilibrium time were optimized. Adsorption isotherm test was conducted to identify adsorption mechanism. Selectivity test was performed using homologues of 5-HMF and ions which have similar radius and charge. In conclusion, FIP/ZIIP showed reasonable feasibility that could be used as an adsorbent possibly filled in solid phase extraction cartridge for simultaneous extraction of organic and inorganic compounds present in the sample.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Symposium VII

-기초/화학 I-

SYM VII-01

화학분석 방법을 이용한 산업 소재의 손상분석 사례 연구

김성남*, 김선혜, 김진원, 이동길, 이재광, 김학현, 김규태, 조용선

*포항산업과학연구원 분석평가센터

*loverist@rist.re.kr

산업 소재의 손상분석은 우리의 일상에서부터 기반산업까지 매우 중요하다. 최근 들어 손상으로 인해 경제적인 손실 뿐 아니라 대형 인명사고로 이어져 사회적 갈등을 유발하는 일들이 잦아지고 있다. 2019년 8월 수도관의 손상으로 나타난 인천의 붉은 수돗물 사건 등과 같이 소재의 손상으로 인해 어려움을 겪는 사람들에 대한 피해 보상 및 관리 등의 책임 소재를 가리기 위한 논의가 계속되고 있으며, 정부는 각 분야별 안전관리 특별법 제정을 통해 이러한 일상 및 산업 안전과 관련된 리스크를 예방하기 위한 노력을 전개하고 있다. 하지만 1970년대 이후 폭발적으로 조성된 사회간접시설 및 산업 설비 등이 계속해서 노후화 되고 있고 아직 손상 사례가 없는 새로운 신규 소재들이 개발되어 일상 제품과 산업 시설에 적용되고 있기 때문에 앞으로도 계속해서 손상과 관련되어 더 많은 사회적 비용을 지출해야 할 것으로 예상된다.

손상분석은 소재의 손상을 확인하고 손상의 종류 및 관련 현상이 일어나는 과정을 규명하기 위해, 전기적 특성, 물리, 금속, 화학적 특성 등의 최신 분석기술에 의해 손상 발생 후 원인 조사를 하는 것이다. 즉, 현재 발생한 손상메커니즘이나 앞으로 발생할 잠재적인 손상의 영향을 검토하고 사전 조치를 결정하기 위한 활동과 연구라고 할 수 있다. 손상 분석을 위해서는 소재의 특성에 따라 다양한 분석 장비를 활용하여 분석목적에 따라 분석을 하여야 하며, 각 기기의 전문가들이 참여하여 데이터의 신뢰성을 높이도록 해야 한다.

본 연구에서는 화학분석 방법을 이용한 산업 소재의 손상분석에 대해 포항산업과학연구원 분석평가센터에서 진행해 왔던 몇 가지 사례를 중심으로 발표하고자 한다. 자동차 산업, 제철산업, 일상 공산품에 사용된 금속소재, 비철소재, 고분자 소재, 오일류, 혼합 수용액 등의 손상을 분석하기 위해 화학분석 장비인 ICP-AES, XRF, GC-MS, CIC, IC, EA, FTIR, Titration 등의 분석 기기의 활용방법과 손상 분석 절차, 손상분석 단계별로 고려할 사항에 대해 고찰하고자 한다.

SYM VII-02

**나노탐침 압입방식으로 제작 된 나노구조물에 의한
MoS₂ 박막 반도체 발광효율 조절 기전의 분광분석 연구**

김현우^{1,*}, 서영덕¹, 김태완², 신채호³

¹한국화학연구원, 의약바이오본부

²전북대학교, 전기공학과

³한국표준과학연구원, 나노측정분석센터

*Corresponding author: hwkim@kriect.re.kr

전이금속 Dichalcogenide 계열 이차원 물질들은 원자층 수준의 두께 (~0.7 nm)와 가시광선 에너지 영역대 밴드갭을 가짐으로서 차세대 광전, 센싱소자 등의 후보물질로 각광 받고 있다. 이차원 물질들의 얇은 두께는 개발 소자의 극소화에 도움이 되는 반면에, 입사광이 흡수 가능한 영역이 작아짐으로서 광반응성에 근원적인 한계가 된다.

이 문제를 극복하기 위해서 외부 빛을 나노스케일로 집속 시킬 수 있는 표면플라즈몬 현상을 가지는 금속나노입자들을 이차원 물질과 결합하는 시도가 활발히 이루어 졌으며, 그 결과로 photoluminescence (PL) 분광신호를 수십배 이상 향상 시키고, 조절하는 결과를 보였다. 그러나, 이런 PL 증폭현상을 가능하게 하는 기전에 대해서는 아직 연구가 필요하다.

이번 발표에서는 나노탐침압입방식으로 제작 된 나노구조물에 의한 Molybdenum Disulfide (MoS₂)의 PL 증강현상을 단일 나노구조물 분해능으로 측정하여, 증폭효율을 정량적으로 분석하는 방법에 대해서 다룬다. 특히, 표면플라즈몬 에너지 대비 detuning 된 파장의 광원에서 발생하는 PL 증폭효율을 단일나노구조물 별로 측정함으로써, PL 증강현상의 기전이 여기 파장에 따라서 구별 되는 것을 실험적으로 증명하였다. 이러한 단일나노구조물 분해능 PL 증강신호 측정분석법은 이차원 박막소재를 활용한 나노 광전, 센싱 소자 등의 성능 모니터링, 정량수치 확보 등에 유용하리라 기대된다.

SYM VII-03

그래핀 소재와 분석기술

허승헌*, 최기인, 안해준

한국세라믹기술원

★shhuh@kicet.re.kr

그래핀은 탄소원자들로 이루어진 2차원 판상 구조(6각 벌집구조)를 기본으로 하는 단층막 그래핀과 적층된 구조를 갖는 다층막 그래핀으로 나눌 수 있다. ISO/TS 80004-13: 2017 표준문서에 따르면, 그래핀 분류로서 RGO(Reduced graphene oxide), Graphene flake, Graphene nanoplate(GNP) 등이 있으며, 10층 이하의 그래핀은 양자역학적 물성을 가지며, 이보다 두꺼운 그래핀은 벌크물성을 갖는다고 정의하고 있다 (10층 이하 그래핀의 중요성). 한편 그래핀은 CVD법으로 만들어진 박막형 그래핀과 흑연의 박리를 통해 만들어진 분말형 그래핀으로도 분류할 수도 있다. 본 발표에서는 산업적으로 중요한 분말형 그래핀을 중심으로 응용사례들을 살펴보고, 기존 분석기술들이 그래핀 소재와 만났을 때 나타나는 한계와 향후 그래핀 분석기술이 나아갈 방향을 간단히 토론해보고자 한다.

SYM VII-04

Determination of Toluene degradation by photocatalytic building/construction materials using an in-situ gas phase infrared spectrometry with a circulating air flow photoreactor

Tai Kyu Lee^{1,*}, Woo Seok Yoon¹, Ho Seok Lee, Kiin Choi²

¹NANOPAC Co Ltd, ²Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology

*Corresponding author: tklee@nano-pac.com

This work describes the test method with an FTIR analysis to evaluate the photocatalytic performance of gaseous toluene (C₇H₈) over TiO₂ on the surface of the photocatalytic materials under irradiation by ultraviolet (UV) light. The method described is intended to collect and interpret FTIR spectra monitored during photocatalysis. Toluene is chosen as a typical aromatic volatile organic compound (VOC) with an offensive odor. Test materials such as building materials or construction materials with a commercial size, placed in a recirculating air flow photoreactor, are activated by UV irradiation, and adsorb and oxidize the gas-phase toluene to form CO₂ and other oxidation products. The air-purification performance is determined from the amount of toluene removed by the test materials, in dimensionless concentration or in ppm. The simple adsorption by the test material (not due to photocatalysis) is evaluated by test run in the dark. Concerning the test method to determine the photocatalytic activity of gaseous toluene, ISO22197-3 has been established, which applies to evaluate the oxidation activity of toluene not only for photocatalytic films on the surface of the materials but also for materials containing a photocatalyst for air purification. This standard can be utilized only for photocatalytic materials of a limited size by measuring the change in concentration of toluene in a continuous flow photoreactor using a gas chromatograph(GC). However, the proposed method in this work can be employed for close to commercial size photocatalytic materials by an in situ FTIR analysis with a recirculating air flow photoreactor. Unlike a GC analysis based on ISO22197, in situ FTIR spectra can provide additional information regarding the intermediates or by-products during the photocatalysis of toluene without taking out gas samples at regular intervals from the photocatalytic reactor. In situ infrared reaction studies provide real-time monitoring of transient events that occur on the photocatalyst during the reaction. Among all of bands the IR spectrum for toluene, the photocatalytic efficiency of toluene degradation is obtained with the peak area integral in the IR spectrum at 3042 cm⁻¹ by equation (1).

$$\text{Degradation ratio of toluene, } e (\%) = ((A_0 - A_t) / A_0) \times 100 \quad (1)$$

where A₀ is the initial peak area integral of R spectrum (3042 cm⁻¹) when irradiation time, t=0 irradiation time t = 0, and A_t is the initial peak area integral of IR spectrum (3042 cm⁻¹) when irradiation time t.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Symposium VIII

-생체지질인터액토믹스연구센터
공동 주최-

SYM VIII-01

Analysis of seasonal variations of particulate matter-carrying materials

Minsoo Noh

Natural Products Research Institute, College of Pharmacy, Seoul National University

*Corresponding author: minsoonoh@snu.ac.kr

Airborne particulate matters (PMs) cause diverse toxic responses in human physiology. PMs have been suspected as a primary etiologic factor for human respiratory diseases and indirectly affect pathogenesis of various diseases such as pulmonary hypertension, atopic dermatitis, and even cancers. In this regard, the elucidation of toxicological mechanisms caused by PMs is essential to understand the PM-associated human diseases and also to develop therapeutic strategy. Currently, the standard reference PMs validated by United States National Institute of Standards and Technology (US NIST) have been extensively used in toxicological studies because of their commercial availability. In this study, airborne PMs were domestically collected in Seoul and their associated contaminated materials were analyzed with scanning electron microscopy (SEM), energy dispersive spectroscopy (EDS)-based chemical analysis and chemical profile measurements of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). In domestic PMs, crystalline sulfide, heavy metals, carbon materials, unidentified microorganisms, and pollens were detected in SEM and EDS analyses. Notably, the chemical profile of PAHs detected in domestic PMs was significantly different from those of the US NIST PMs. Therefore, special cares should be directed for the choice of appropriate PM samples when designing diverse toxicologic studies.

SYM VIII-02

Analysis of transcriptome change by HMTs in liver disease models

Hyejin An¹, Seunghee Lee^{1,*}

¹College of Pharmacy and Research Institute of Pharmaceutical Sciences, Seoul National University

*Corresponding author: leeseung@snu.ac.kr

Non-alcoholic fatty liver disease (NAFLD) is tightly associated with 'Metabolic Syndrome', and both are rapidly becoming a pandemic. NAFLD shows a spectrum of liver pathology that mimics alcohol-induced fatty liver damage. A subset of individuals with NAFLD develops non-alcoholic steatohepatitis (NASH), some of which progresses to cirrhosis and/or liver cancer. Importantly, this pathophysiologic continuum of NAFLD begins with steatosis; i.e., accumulation of triglyceride (TG). Despite many studies discovered gene regulatory program directing steatosis, the epigenetic mechanisms that drive steatosis are still ill-defined. Transcriptional coactivator complex named MLL4-complex (herein referred to as MLL4-C) contains the histone H3-lysine 4-methyltransferase MLL4 and H3K27-demethylase UTX that function together to form transcriptionally active open chromatin on target genes of MLL4-C. With the mutant mouse models of Mll4, we revealed that MLL4-C acts as major epigenetic regulator of diverse metabolic processes including steatosis and NASH. Analysis of transcriptome changes in WT and *Mll4*^{+/-} mice livers in high fat diet (HFD) and methionine and choline-deficient (MCD) diet conditions identified key targets genes of MLL4 involved in hepatic steatosis and inflammatory pathways, respectively. These studies provide the critical regulatory axis in overnutrition-directed hepatic liver diseases and present MLL4-C as a potential target for anti-steatosis and anti-NASH drug development.

SYM VIII-03

Analysis of lipid remodeling in adipose tissue

Yun-Hee Lee^{1,*}

¹College of Pharmacy, Seoul National University

*Corresponding author: yunhee.lee@snu.ac.kr

Obesity is often associated with non-resolving inflammation in adipose tissue, which is a key pathologic event that leads to insulin resistance and metabolic dysregulation. Specialized proresolving mediators (SPMs) are a class of endogenous lipids that trigger and orchestrate the resolution of inflammation. In this regard, dysregulation of SPM biosynthesis in adipose tissue involves pathogenesis of obesity-related metabolic disease. Here, we examined obesity-driven defects in SMP biosynthesis in adipose tissue and determine the metabolic phenotype of Alox15 KO mice. Lipidomic analysis of adipose tissue indicated downregulation of Alox15 metabolites. Genetic deletion and pharmacological inhibition of Alox15 diminished the levels of adipocyte clearance by macrophages in a coculture system. Gene expression profiling of macrophages isolated from gWAT of Alox15 knockout (KO) mice demonstrated distinct phenotypes, especially downregulation of genes involved in lipid uptake and metabolism compared to wild-type mice. Finally, in vivo β 3-adrenergic stimulation in Alox15 KO mice failed to recruit crown-like structures, a macrophage network clearing dying adipocytes in gWAT. Consequently, in Alox15 KO mice, proliferation/differentiation of adipocyte progenitors and β 3-adrenergic remodeling of gWAT were impaired compared to wild-type control mice. Collectively, our data established a pivotal role of Alox15 in the resolution of adipocyte death and in adipose tissue remodeling.

SYM VIII-04

Lipidomic analysis of tamoxifen-resistant breast cancer cell

황세원^{1,2}, 이미옥^{1,2,*}

¹서울대학교 약학대학, ²서울대학교 생체지질 인터랙토믹스 연구센터 (MRC)

*Corresponding author: molee@snu.ac.kr

The most accepted targeted-agent for treating ER-alpha positive breast cancer is Tamoxifen. Yet over 30% of patients gain resistance. Recently, lipid metabolism has been rising as a new mode of anticancer drug resistance. In order for a rapid growth, cancer cells show a strong avidity for lipids which they obtain by *de novo lipogenesis* or increasing the uptake of exogenous lipids. Lipid metabolism may confer anticancer drug resistance, but little is known about its association with endocrine resistance. Thus, we aimed to investigate specific alterations in lipid metabolic pathways in the context of tamoxifen resistance. First, according to microarray data analysis, a set of genes responsible for fatty acid uptake and activation were elevated in MCF7/TAMR and T47D/TR cells. Also, genes involved in ketogenesis were overexpressed in resistant cell lines as well. We have previously found that tamoxifen-resistant cells uptake more fatty acids due to CD36 upregulation, hence accumulate more TG compared to the control cells. Additionally, tamoxifen-resistant cells produced more 3-hydroxybutyric acid and acetoacetate, both of which are metabolites derived from fatty acids. Based on the findings, tamoxifen resistant cells may have a tendency of utilizing fatty acid-derived lipid metabolites for cellular survival and proliferation. In order to investigate differential metabolic profiles between the control and tamoxifen-resistant cells, we are currently in the process of performing CE-MS-based lipidomic analysis. The results obtained by lipidomic analysis will potentially reveal novel lipidomic biomarkers and promote clinical applications in endocrine-resistant breast cancer drug discovery.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Symposium IX

-기초·화학 Ⅱ-

SYM IX-01

Oligonucleotide-based Reusable Electrochemical Silver(I) Sensor and its Optimization via Probe Packing Density

Kyoungsoo Kim¹, Je Hyun Bae², Donghoon Han^{1,*}

¹Department of Chemistry, The Catholic University of Korea

²Graduate School of Analytical Science and Technology, Chungnam National University

*Corresponding author: dhan@catholic.ac.kr

We report a selective, sensitive, and reusable electrochemical sensor for the detection of Ag⁺ ions. This sensor detects Ag⁺ ions through a conformational change in an electrode-bound oligonucleotide by measuring the changes in electron transfer efficiencies. Single-stranded DNA (ssDNA) involves an electroactive, methylene blue (MB)-labeled DNA folding structure and strategically provides the selective binding of a cytosine-cytosine mismatch for Ag⁺ ions. The DNA-modified electrode showed a voltammetric signal due to a redox reaction of the surface-confined MB moiety. The "turn-on" signaling upon silver(I) binding could be attributed to a change in conformation of the MB-labeled DNA from an open structure to a restricted folding structure. Differential pulse voltammetry (DPV) of the modified electrode showed a linear response of the MB reduction signal with increasing Ag⁺ concentration in the range 10–200 nM, with a detection limit of 10 nM. The structure-switching silver (I) ion sensor was amenable to regeneration by simply unfolding the MB-labeled DNA in 100 mM EDTA, and it could be regenerated with no loss in signal gain upon subsequent silver(I) ion binding. We also demonstrated that by controlling the density of probe DNA molecules on the electrode surface, the fabrication parameters can be varied to achieve optimal sensor performance.

SYM IX-02

Electrochemical sensors based on carbon nanopipettes for ionic analytes

배제현¹, Michael V. Mirkin^{2,*}

¹충남대학교 분석과학기술대학원, ^{2,*}뉴욕시립대-퀸즈대학교 화학/바이오화학과

*Michael V. Mirkin: Michael.Mirkin@qc.cuny.edu

Electroanalysis based on nanoelectrodes has been advancing and offers new opportunities in analysis. Here, we employ carbon-coated nanopipettes (CNPs) for studying permselective electrochemistry in a conductive nanopore. A significant accumulation (up to 2000-fold) of cationic redox species and anion depletion inside a CNP by diffuse layer and surface charge effects in solution of low ionic strength were observed as well as the shift of the voltammetric mid-peak potential. Finite-element simulations of electrostatic effects on CNP voltammograms show permselective ion transport in a single conducting nanopore and semi-quantitatively explain our experimental data. For more practical applications, CNPs employ for permselective detection of ascorbic acid (AA) and dopamine (DA). The reported results are potentially useful for improving sensitivity and selectivity of CNP sensors for ionic analytes.

SYM IX-03

Molecular weight measurement of polymers using electrochemistry

김병권★

Ewha Womans University, Department of Chemistry and Nanoscience

★Corresponding author: kimb@ewha.ac.kr

Rapid measurement of the molecular weight of a polymer within a few seconds by simple and compact instruments is a challenging task both in the scientific and industrial community. Until now, the molecular weight of a polymer has been determined using the viscosity method (Ostwald, Cannon-Fenske, and Ubbelohde), gel permeation chromatography (GPC), nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, static light scattering (SLC) and other methods. These methods each have their own advantages. However, they all share a weakness in that it is not possible to perform rapid measurement because of the long analysis times. To overcome this drawback, we propose a novel method for estimating polymer molecular weight using electrochemistry.

In this study, poly(methyl methacrylate) formed by reversible addition-fragmentation chain transfer polymerization was considered as a model system. As polymerization proceeded, a gradual decrease in steady-state current was observed. The decrease in current was compared to the molecular weights of the polymer obtained using the conventional methods of GPC and NMR, and the results clearly support that the polymer molecular weight can be determined accurately by measuring current.

SYM IX-04

Visualizing structural characteristics of dendrimer-encapsulated Pt nanoparticles

주영원¹, 조태훈¹, 전상미², 김주훈^{1,*}

¹경희대학교 화학과, ^{2,*}한국기초과학지원연구원

*Corresponding author: jkim94@khu.ac.kr

Synthesis of nanoparticles having well-controlled small sizes less than ~3 nm has been in the forefront of research attention in diverse fields including biomedical imaging and diagnostics, drug delivery, sensors, and catalysis because of unique features of such very small particles. However, synthesis and characterization of such tiny particles still remains challenging due to the extremely small dimension of the particles. Here, we present two main research topics. The first topic is the synthesis of dendrimer-encapsulated nanoparticles (DENs). Specifically, we synthesized Pt DENs using hydroxyl-terminated 6th generation polyamidoamine dendrimers via galvanic exchange repetitively coupled with chemical reduction reactions [1]. In the new synthetic approach, the synthesis of Pt DENs is achieved without being compromised by the fixed number of complexation sites for Pt precursor ions in the dendrimers. The second topic is the structural characterization of Pt DENs for their 3-dimensional (3-D) visualization by using 3-D electron tomography to reveal intricate structural characteristics of their whole organic-inorganic hybrid nanostructure [2].

[1] *Langmuir* **34**, 7436 (2018).

[2] *Anal. Chem.* **93**, 5, 2871 (2021)

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

영인 분석과학상 수상강연

영인 분석과학상 수상강연

Electrochemical sensors and biosensors for chemical and biochemical analysis

Won-Yong Lee*

Department of Chemistry, Yonsei University

*Corresponding author: wylee@yonsei.ac.kr

Electrochemical sensors and biosensors based on electrochemiluminescence (ECL) of luminol and tris(2,2'-bipyridyl)ruthenium(II) ($\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$) have developed over the last 20 years in my laboratory. ECL has attracted much attention as a powerful analytical tool due to its inherent sensitivity, selectivity, and wide linear dynamic range for a variety of analytes such as alkylamines, amino acids, NADH, and a number of pharmaceutical compounds. The ECL emission of the $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ /analyte system presumably arises from the energetic electron transfer between the electrogenerated $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{3+}$ and a strong reducing intermediate (reductant) formed by the oxidation of analytes. The reaction scheme for $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ ECL indicates that the starting material $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ is regenerated in-situ when it is immobilized on an electrode surface. Therefore, much efforts have been focused on the immobilization of $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ on an electrode surface, thus recycling $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ permanently in theory and making the detection system simpler in ECL-based chemical sensors, biosensors, and detectors in flowing streams such as high-performance liquid chromatography, capillary electrophoresis and microchip. In the present seminar, novel approaches for the preparation of the $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ ECL sensor will be presented. Electrochemical and ECL behaviors of the new ECL sensors will be presented along with their possible applications as chemical sensors and biosensors. In addition, electrochemical biosensing of carbohydrate and carbohydrate-binding proteins based on carbohydrate-stabilized gold nanoparticles will be discussed.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Early Bird Seminar

Early Bird Seminar

**Orbitrap Exploris GC
: the most powerful tool for targeted, untargeted-analysis**

Yeanwoong You^{1,*}

¹Thermo Fisher Scientific Korea, Chromatography & Mass Spectrometry Division

*Corresponding author: yeanywoong.you@thermofisher.com

In high-throughput analytical testing laboratories, robust streamlined analytical and data processing workflows are key requirements for the accurate and reliable determination of trace level residues and contaminants (such as pesticides and PCBs) in food. These methods must overcome the challenges of an ever-growing list of compounds and diversity of sample matrices, in addition to ever-demanding sensitivity and identification requirements.

Typically, gas chromatography coupled to low resolution, nominal mass triple quadrupole mass spectrometers (GC-MS/MS) has been the system of choice for the sensitive and selective detection of a wide range of target compounds. A GC-MS/MS acquisition method requires at least two precursor ions for product selected reaction monitoring (SRM) transitions to be optimized for selectivity and sensitivity for each analyte. The development of additional hyphenated GC-MS analytical systems such as high-resolution accurate mass (HRAM) Orbitrap mass spectrometry coupled to GC has proved to be a valuable alternative to triple quadrupole GC-MS. With HRAM mass spectrometry, the default

acquisition mode is untargeted (full-scan) meaning that all the ions are acquired with high selectivity at the same time across a specified mass range, making the method setup and data acquisition simple to manage and giving the analyst the flexibility to decide which compounds to focus on. This can extend into retrospective analysis of data to evaluate for the presence/absence of other contaminants not necessarily of interest at the time of acquisition.

Core Facility 소개

Core Facility 소개. 1

서울대학교 약학대학 종합약학연구소 중앙기기실 소개

권성원^{1,*}

¹서울대학교 약학과

*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

서울대학교 약학대학 종합약학연구소의 중앙기기실은 고가의 연구기자재를 중앙화하여 집중적으로 관리, 운용함으로써 그 활용성을 제고하였습니다. 서울대학교 약학대학 중앙기기실은 약학연구에 필요한 각종 최신 기자재를 보유하고 있으며 석사 및 박사급 전문 기기 운영요원을 확보하여 본 대학은 물론 외부 대학과 산업체의 연구활동도 지원하고 있습니다. 현재 중앙기기실은 총 100종, 150점의 기자재를 보유하고 있으며 6명의 기기 전문 관리자가 기기의 운용과 관리를 담당하고 있습니다. 대표적인 장비로는 핵자기공명을 통해 미량의 유기화합물, 천연물 및 단백질 구조 입체분석을 할 수 있는 800MHz NMR, 레이저를 이용해 시료를 이온화하여 거대 분자의 질량을 측정함으로써 단백질 및 펩타이드를 정량분석할 수 있는 MALDI-TOF MS, 휘발성 화합물의 분리 및 정성, 정량 분석이 가능한 GC-TOF MS, 회절된 X-ray 데이터를 이용하여 물질의 결정 구조 확인이 가능한 Single Crystal XRD, 대사체와 지질체를 high resolution으로 분리 및 분석할 수 있는 UHPLC-Q/Orbitrap MS 등이 있습니다. 본 발표에서는 이러한 대표적인 중앙기기실의 분석장비에 대한 소개를 진행하겠습니다.

Core Facility 소개. 2

목포대학교 유무기소재 및 천연물 분광화학 분석센터 소개

남상호

목포대학교 화학과

★Corresponding author: shnam@mokpo.ac.kr

국립목포대학교 핵심연구지원센터인 “유무기소재 및 천연물 분광화학 분석센터 (센터장 : 남상호 교수)”는 분광학을 이용한 원소분석법의 개발 연구 및 공동 연구, 원소분석 전문가 양성, 지역 산업 지원을 위하여 교육부와 한국기초과학지원연구원 장비진흥센터에서 주관하는 “핵심연구지원센터 조성 지원” 사업을 통해 2019년 8월에 구축되었습니다.

센터에서 진행하는 연구 및 분석 서비스는 보유 장비인 유도결합플라즈마 원자 방출 분광분석기 (Inductively-Coupled Plasma Optical Emission Spectroscopy, ICP-OES), 유도결합플라즈마 질량분석기 (Inductively-Coupled Plasma Mass Spectrometry, ICP-MS), 레이저 유도결합 플라즈마분광기 (Laser-Induced Breakdown Spectroscopy, LIBS), 이온 크로마토그래피(Ion Chromatography, IC), 고성능 액체 크로마토그래피(High Performance Liquid Chromatography, HPLC)를 활용하여 지원하고 있습니다. 이러한 장비를 단독 사용뿐만 아니라 레이저와 ICP-OES 및 ICP-MS가 결합된 레이저 어블레이션(Laser Ablation)-유도결합 플라즈마 원자 방출 분광분석 및 질량분석(LA-ICP-OES/MS) 방법을 이용하여 고체 시료 속에 존재하는 무기 원소들을 시료 전처리 없이 직접 분석하고, 화학 이미징 기술을 이용하여 시료 내에 무기 원소들의 분포를 분석하는 기술을 고도화하고 있습니다. 또한 IC와 ICP-OES 및 ICP-MS가 결합된 분석 방법을 이용하여 시료 속에 존재하는 무기 원소들의 화학종 형태를 밝히고 정량 분석할 수 있는 시스템을 구축하는 등 장비를 결합하는 분석방법은 우리 센터의 주요 분석방법 중 하나입니다. 본 발표에는 목포대학교 유무기 소재 및 천연물 분광화학 분석센터에서 진행하고 있는 연구와 지원하고 있는 분석 서비스, 보유 장비에 대한 소개를 진행하도록 하겠습니다.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

Leco **젊은**
분석과학자상
수상강연

Leco 젊은 분석과학자상 수상강연

Separation of rare earth elements using gas pressurized extraction chromatography

Jihye Kim^{*}, Namuk Kim, and Sang-Eun Bae

Korea Atomic Energy Research Institute, Korea

^{*}Corresponding author: jihyekim21@kaeri.re.kr

A study of rare earth elements and isotopes are significant interests in geology and nuclear-related fields such as nuclear forensics and nuclear waste treatments for dating rocks, monitoring radioactive materials, and measuring fuel burn-up. Chemical separations among these elements are difficult due to their similar chemical properties. Here, we introduce an analytical separation of light rare earth elements using a gas-pressurized extraction chromatography (GPEC) system with a column containing Eichrom Ln-resin. In this system, nitrogen gas was applied to deliver the sample and elution solvent from an injection loop to a separation column with a flow rate of 0.1 mL/min. Hydrochloric acids of varying concentrations were evaluated as elution solvents. Compared to the conventional column extraction chromatography, a rapid separation was achieved within 30 min, and the consumption of solvent was reduced to 200-fold with the GPEC system. Notably, the use of low solvent volumes has advantages in reducing radioactive wastes production.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

대학원생 구두발표

GO-01

Analysis of aging related human body odor using GO;PANI/ZNRs/ZIF-8 coated wire-INME method followed by GC/MS

Sehyun Kim, Sunyoung Bae^{*}

Department of Chemistry, Seoul Women's University

^{*}Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

Human body odor gives information about skin aging, sexual activities, and health status. Interactions between eccrine, sebaceous, apocrine gland and skin bacteria are the dominant factors of human body odor. Headspace-solid phase microextraction (HS-SPME) has been generally used as the in-vivo method, which collects body odor directly from the skin. However, this method has disadvantage that it is difficult to sampling body odor directly from skin and the fiber can be easily damaged. In this study, headspace in-needle microextraction (HS-INME) using graphene oxide; polyaniline/zinc nanorods/zeolitic imidazolate framework-8 (GO;PANI/ZNRs/ZIF-8) adsorbent followed by gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS). Target compounds such as 2-nonenal, benzothiazole, hexyl salicylate, α -hexylcinnamaldehyde, and isopropyl palmitate were selected as key indicators. The adsorbent was sequentially synthesized by electrodeposition, cyclic voltammetry, and chemical interaction. The mole ratio of reactants and HS-INME condition were optimized using the design of the experiment (DOE) method. Physicochemical characterizations were investigated. The proposed method was validated including limit of detection (LOD), limit of quantitation (LOQ), recovery, and reproducibility. Finally, standard compounds spiked on the artificial skin were analyzed by the proposed method to confirm that it could be used as the in-vivo sampling method for aging related human body odor.

Keywords: Age-related body odor, GO;PANI/ZNRs/ZIF-8, INME, in-vivo sampling, CV

GO-02

Effective determination of nicotine enantiomers from e-liquids and biological fluids using dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME)

Seung Hoon Song and Seung-Woon Myung*

Department of Chemistry, Kyonggi University, Suwon 16227 Korea

*Corresponding author: swmyung@kyonggi.ac.kr

Nicotine is stimulant and potent alkaloid, It usually extracted from tobacco plant, but these nicotine can also be obtained through chemical synthesis. In the case of natural nicotine, the content of (S)-nicotine is overwhelmingly higher than that of (R)-nicotine. The synthetic nicotine is generally used in the production of E-liquid to called "Tobacco Free Nicotine" (TFN). In the absence of a selective synthesis process, synthetic nicotine is synthesized as a racemic compound in a 1:1 ratio. in this study, To analyze the nicotine enantiomers, we use dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME), and compared the efficacy of enantiomers GC and chiral HPLC for the analysis of nicotine. To develop a suitable DLLME method, the parameters were optimized(pH, type, ratio and volume of extraction solvent and dispersive solvent, type and quantity of salt, and temperature). The LODs were 0.11 $\mu\text{g/mL}$ and 0.17 $\mu\text{g/mL}$ for the (S)- and (R)- enantiomers, respectively. The LOQs were 0.3 $\mu\text{g/mL}$ and 0.44 $\mu\text{g/mL}$, respectively. The optimal calibration range was between 0.3–18 $\mu\text{g/mL}$ and 0.44– 4.4 $\mu\text{g/mL}$, respectively, and the correlation coefficient (r^2)was0.9978–0.9996. The intra-day accuracy was 79.9–110.6%, and the precision was 1.3–12.0%. The inter-day accuracy was 87.8–108.0%, and the precision was 4.0–12.8%. E-liquid and biological fluids(urine and saliva) were analyzed using the established method.

GO-03

Headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis/mass spectrometry for short chain fatty acids from a real sample

권준엽¹, 정두수^{1,*}

¹서울대학교 자연과학대학 화학부

*Corresponding author: dschung@snu.ac.kr

Short chain fatty acids (SCFAs) are volatile and hydrophilic organic acids, causing environmental stink. SCFAs are metabolites from organisms' corpse, feces, and byproducts. Analyzing SCFAs reveals not only stink's identity but also the sources. Without derivatizing the SCFAs, headspace in-tube microextraction using the acceptor plug placed inside the separation capillary inlet tip was coupled in-line with of capillary electrophoresis (CE) for sample cleanup and enrichment. The effects of increasing extraction temperatures and agitating the sample were also investigated. For further sensitivity enhancements using a sensitive detector, CE/electrospray ionization triple quadrupole mass spectrometer with a flowthrough microvial interface (FMI) was used. Although the SCFAs are difficult to undergo fragmentation, pseudo multiple reaction monitoring, in which the molecular ions are selected and monitored by the first and third quadrupoles to reduce noise, was employed for sensitive determination of the SCFA composition.

GO-04

전기 유도 플라즈마 분광법을 활용한 부유 바이러스 전파의 실시간 탐지

양준호^{1,*}, 여재익^{1,*}

^{1,*}서울대학교 기계항공공학부

*Corresponding author: jjyoh@snu.ac.kr

2020년 3월, 우한에서 발생한 COVID-19 바이러스는 공식적으로 전염병으로 분류가 되었으며, 그 결과 많은 사람들은 마스크 착용을 생활화 하였으며, 자가 격리와 같은 감염을 예방하기 위한 강력한 조치를 취했습니다.

코로나 바이러스는 오랫동안 공기 중 전파는 가능하지 않다고 알려져 있었습니다. 그러나 다양한 연구 결과에 따르면 바이러스가 공기를 통해 전염될 수 있으며 상당한 시간 동안 공기 중에 살아남을 수 있다고 주장합니다. 본 연구에서는 전기 유도 플라즈마 분광법을 사용하여 실시간으로 바이러스의 공기 중 전파를 특성화하였습니다. 바이러스의 이동 거리 및 측정 시간에 따른 농도 변화를 조사하여, 전파의 위험성을 평가할 수 있는 방법을 고안하였습니다. 결과적으로 본 연구를 통하여 공기 중 바이러스 전파의 실시간 탐지를 수행하고 실시간 모니터링을 수행하기 위한 benchmark를 제공할 수 있습니다.

GO-05

**미세먼지 실시간 원인 분류를 위한 딥러닝을 이용한 전기 유도
플라즈마 방출광 신호 학습**

박상훈¹, 양준호¹, 여재익^{1,*}

¹*서울대학교 기계항공공학부

*Corresponding author: jjyoh@snu.ac.kr

미세먼지의 해로운 영향에 관해 국제적인 관심이 커지면서 미세먼지 ($PM < 10\mu m$)에 대한 정확한 분류와 예측의 중요성이 증대하고 있습니다. 또한, 미세먼지의 근원지를 파악하는 것은 환경 재난을 막는 것만큼 인간의 건강을 보호하는 데 매우 중요한 역할을 합니다.

그러나 기존의 방식들은 위성 카메라에 의해 포착되는 대기의 흐름에 의존하거나 크고 비싼 실험 장비 기반의 지엽적인 측정인 경우가 대다수입니다. 이에 본 연구진은 딥러닝 기법을 기반으로 공기 중 부유물질 검출에 효과적인 전기 유도 플라즈마 분광법(SIPS)을 결합하여 미세먼지의 근원지를 식별하는 방법을 제안합니다. SIPS는 화학적 전처리 없이 실시간 정성 및 정량 분석이 가능하며, 화학적 안정성과 민감성을 갖춘 분광 방식입니다. 최종적으로 본 연구에서는 Convolutional neural network 기법의 하나인 DenseNet을 통해 미세먼지 식별을 진행했고, 뛰어난 성능 (>98%)을 바탕으로 새로운 플라즈마 분광법의 데이터 분석 기법으로써 가능성을 제시합니다.

GO-06

Insights into the sampling methods of carbonyl compounds released from mainstream smoking

Sol Han¹, Sang-Hee Jo², Ki-Hyun Kim^{1,*}

^{1,*}Department of Civil & Environmental Engineering, Hanyang University,

²Radiation Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute

*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

Cigarette contains more than 7,000 kinds of toxic and harmful constituents. Among them, carbonyl compounds including formaldehyde and acetaldehyde are known as carcinogenic substances that can cause respiratory and cardiovascular diseases. According to the World Health Organization (WHO) Standard Operating Procedure for Intense Smoking of Cigarettes, cigarette samples are burned using an automatic cigarette smoking machine to collect harmful constituents in mainstream smoke. Accordingly, carbonyl compounds are to be captured in an impinger filled with a 2,4-dinitrophenylhydrazine (DNPH) solution and derivatized for the analysis by HPLC/UV or DAD detector. The automatic smoking machine has the advantage of collecting standardized mainstream smoke by burning cigarette samples evenly, but it may not be easy to access due to high cost. To find an alternative method, we studied a variety of methods to efficiently collect mainstream smoke for the analysis of 10 carbonyl compounds (e.g., formaldehyde, acetaldehyde, acetone, acrolein, propionaldehyde, crotonaldehyde, butyraldehyde, benzaldehyde, isovaleraldehyde, valeraldehyde) in mainstream smoke by varying the volume collected per puff (Puff volume): (1) Collecting mainstream smoke directly into the DNPH cartridge by connecting the cigarette filter-DNPH cartridge-syringe in series (Cartridge: CT), (2) Collecting mainstream smoke through the cigarette filter into the syringe; subsequent dilution of this sample with nitrogen gas in a polyester aluminum bag for the final DNPH cartridge sampling (Bag to cartridge: BC), and (3) Collecting mainstream smoke in DNPH solution through the impinger filled with DNPH solution for quantitation for carbonyls (Impinger to syringe: IS). The possibility of effective collection of carbonyl compounds in the mainstream without the use of smoking machine was evaluated for each carbonyl compound.

2021년도 제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회

포스터 발표

PT-001 [환경]

Analysis on Concentration of Organic Substances and Nutrients in the Special Management Sea of Busan Coast

Sangwoong Yoo^{*}, Seonghyun Park, Daeyoung Jeon

Recreational Water Environment Team, Busan Metropolitan City Institute of Health & Environment

^{*}Corresponding author: swyoo@korea.kr

Concentration of organic substances and nutrients were analyzed for five points (Haeundae, Suyeong Bay, Namcheon Bay, Haeundae Beach, and Gwangalli Beach) in special management sea of Busan coast for the past five years(2016-2020). When comparing and analyzing each point, the point of Suyeong Bay, which is located in the direct influence zone of the Suyeong River, showed the highest concentration in all items. Comparing the variance, standard deviation, and relative standard deviation of COD and TOC concentration, it showed that the degree of dispersion of COD tends to be relatively high. It is believed that the reason for this dispersion is that oxygen is consumed not only for the organic matter but also for the oxidation of other reduced inorganic components (eg, hydrogen sulfide and ammonia).

The average COD and TOC values are 1.65 mg/L and 1.55 mg/L, respectively, while the median values are 1.28 mg/L and 1.47 mg/L, respectively, and the COD values are higher based on the average values. This is the same reason that the variance, standard deviation, and relative standard deviation of COD are significantly higher than that of TOC. especially in summer when the inflow of ground pollutants increases and internal production increases. In particular, COD concentrations were maintained at explosive water quality for a short period of time in the summer when the inflow of land pollutants increased and internal production increased. Looking at the annual water quality, it can be seen that the water quality is relatively high in the summer, which is believed to be due to the increase in the autogenous COD due to the mass generation of phytoplankton under the high water temperature environment and the non-point pollution load from land due to precipitation. In terms of nutrients, the concentration of Suyeong Bay, which is directly affected by land pollutants, also tended to be relatively high. Similar to the trend of organic substances it can be seen that it maintains relatively high water quality in summer due to the contribution of land contaminants and the supply of DIN (Dissolved Inorganic Nitrogen) and DIP (Dissolved Inorganic Phosphorus) in the reduction environment of sediment under high temperature.

key words : COD, TOC, nutrient, coast

PT-002 [환경]

Study on Correlation Analysis and Influence Factors between COD and TOC in the Special Management Sea of Busan Coast

Sangwoong Yoo^{*}, Hyojin Kim, Mihee Kim

Recreational Water Environment Team, Busan Metropolitan City Institute of Health & Environment

^{*}Corresponding author: swyoo@korea.kr

The correlation equation for the chemical oxygen demand (COD) and total organic carbon (TOC) of the five points (Haeundae, Suyeong Bay, Namcheon Bay, Haeundae Beach, Gwangalli Beach) in the special management sea of Busan coast was 『COD(mg O₂/L) = 1.60 × TOC (mg C/L) - 0.834』. The Pearson correlation coefficient for the two factors was 0.822 (<0.01), and the significance probability(p-value) was 0.000, confirming a significant positive (+) correlation. For samples in the low concentration range, the correlation was found to be extremely low, which is thought to be due to the fact that the amount of organic substances contained in the sample reached or was close to the lower limit of quantification of the laboratory's COD measurement method. In the section larger than 2.0 mg/L of TOC concentration, the coefficient of determination (r^2) is 0.683, which satisfies $|r^2| \geq 0.65$, so there is no difficulty in deriving the correlation between TOC and COD using a regression equation. Pearson correlation coefficient derived based on COD showed the highest positive (+) correlation with T-P (0.884), followed by TOC (0.875), T-N (0.858), and Chl-a (0.700). Chl-a concentration can also be found to be relatively high in correlation with COD at 0.700, which can be interpreted that internally produced autogenous CODs due to the proliferation of phytoplankton also account for a significant portion of the total COD. As a result of the factor analysis, a statistical technique that can explain the common dimensions of variables between COD, TOC, and other pollution indicators, the results of the test for sphericity of KMO and Bartlett was 0.675 and higher than the general appropriate value of 0.6 (more than 0.7 when strictly applied), so the selection of the variables was appropriate. In addition, in determining the number of principal component factors, the cumulative rate of eigenvalues should be at least 60~80%, and the analysis showed that it was 70% or more, which was sufficient to explain the factors. As a result of factor analysis, four factors were extracted, and the cumulative% was 79.6%. Factor 1 was TP, TOC, COD, TN, salt, chlorophyll a, and temperature, and factor 2 was TSS and VSS, and factor 3 was POC, DOC, and transparency. It was confirmed that the fourth factor (factor 4) was extracted as a single item of pH, so that the pH did not correlate with any factor.

key words : COD, TOC, Correlation, Coefficient, Coast

PT-003 [환경]

국내 A시 소재 다중이용시설의 실내공기질 오염물질 분석

김동철, 최세현, 유제화, 박광재, 박상준*

(재)FITI시험연구원 경기강원지원

*Corresponding author: sjpark@fitiglobal.com

실내공기질관리법은 다중이용시설, 신축되는 공동주택 및 대중교통차량의 실내공기질을 알맞게 유지하고 관리함으로써 그 시설을 이용하는 국민의 건강을 보호하고 환경상의 위해를 예방함을 목적으로 한다. 이중 다중이용시설은 지하역사, 지하도상가 등 25개 시설군, 신축 공동주택은 100세대 이상의 공동주택, 대중교통차량은 도시철도, 철도, 시외버스 등을 대상으로 한다. 다중이용시설의 관리자는 1년마다 유지기준, 2년마다 권고기준을 측정해야한다. 유지기준 오염물질 항목은 PM-10, PM-2.5, 이산화탄소, 폼알데히드, 총부유세균, 일산화탄소가 있으며, 권고기준 오염물질 항목은 이산화질소, 라돈, 총휘발성유기화합물, 곰팡이가 있다.

본 연구에서는 국내 A시 소재 다중이용시설 총 106개소(도서관 1개소, 학원 3개소, PC방 4개소, 산후조리원 7개소, 노인요양시설 10개소, 어린이집 81개소)를 대상으로 실내공기질관리법상 유지 및 권고기준 오염물질에 대한 분석을 실시하였다. 총 106개소 다중이용시설 중 4개소(산후조리원 1개소, 노인요양시설 1개소, PC방 2개소)에서 실내공기질 유지기준을 초과하였고, 5개소(어린이집 4개소, 노인요양시설 1개소)에서 실내공기질 권고기준을 초과하였다.

유지기준을 초과한 4개소 중 PM-2.5가 초과된 경우는 3개소, 폼알데히드가 초과한 경우는 1개소, 이산화탄소가 초과된 경우는 1개소로 분석되었다. 노인요양시설 1개소에서는 PM-2.5와 폼알데히드가 동시에 초과되었다.

권고기준을 초과한 5개소 중 총휘발성유기화합물이 초과된 경우는 4개소, 곰팡이가 초과된 경우는 1개소로 분석되었다.

본 연구결과를 통해 국내 A시 소재 다중이용시설 총 106개소 중 4개소(3.8%)에서 실내공기질 유지기준을 초과, 5개소(4.7%)에서 실내공기질 권고기준을 초과하였음을 확인하였다. 권고기준 초과 시 현재까지는 특별한 불이익은 없으나 유지기준 초과 시에는 불이익을 감수해야할 수도 있다. 각 지자체에서는 연 1회 이상 실내공기질 오염도검사를 실시하고 있으며, 자가측정 결과가 유지기준을 초과한 시설은 오염도검사 대상으로 우선 선정된다. 오염도검사에서 유지기준을 초과하면 지자체에서는 해당 시설물에 대해 과태료 부과 및 개선명령 등의 행정조치를 취한다. 따라서 해당 시설물에 대한 적절한 환기 또는 오염발생원의 차단·제거 등을 통해 실내공기질을 적합하게 관리해야 지자체의 행정조치를 피할 수 있으며, 더 나아가 국민의 건강을 보호하고 환경상의 위해를 예방하기 위해 노력해야 한다.

PT-004 [환경]

상수도 시설에 적용할 온라인 망간 분석 시스템

전문환, 정현상*, 박종택, 김병갑, 이상민

(주)씨맥 기업부설연구소

*Corresponding author : cmac2531@gmail.com

최근 적수 사고 발생 등으로 인한 수돗물에 대한 국민적 불안이 증대되고 있으며, 이러한 문제를 해결하고자 환경부는 스마트 상수도 관리체계 도입을 통해 수돗물 신뢰도 향상을 위한 노력을 진행 중이다.

국내 수돗물 변색 원인으로 지목되고 있는 망간 먹는 물 수질환경기준 및 먹는 샘물 수질환경기준에서 0.05mg/L 이하로 규정하고 있으며, 0.1mg/L 초과 시 불쾌한 맛과 변색 현상을 일으키고 28mg/L 이상 고농도 폭로 시 무기력 및 의식장애 등의 증상이 발생하는 것으로 보고되고 있다.

망간 분석은 크게 습식, kit 그리고 온라인 방법으로 분류하며, 특히 국내 온라인 망간 분석기 시장의 95% 이상을 해외 제품이 점유하고 있어 국산 제품으로의 대체가 필요한 실정으로 현재 국내 온라인 망간 분석기 기술개발 수준은 상용화 단계로 진입하고 있는 상황이다.

본 연구에서는 해외 온라인 망간 분석기의 성능은 유지하면서 현장에서 요구되는 요소 기술들을 접목한 온라인 망간 분석 시스템을 자체 개발하였으며, 정확도 및 재현성 등의 정량적 평가 외에 A 정수장과 B 정수장 내에 test bed 구축 후 6개월 이상 현장 운영을 진행하였다.

망간 표준시료(KANTO Chemical, Standard Solution 1,000 mg/L, 100 mL, 25824-B) 0.1 ppm을 기준으로 분석 정확도 99% 및 주입 재현성 $\pm 1\%$ 이하로 확인할 수 있었으며, 현장에서 실시간 분석 결과를 통해 망간 처리 공정 제어가 가능하도록 통신 구성을 완료하였다.

또한 유해화학물질관리법 시행에 따라 기존 반응 및 발색 시약 중 사고대비물질과 유독물질 농도 기준 이상의 화학물질을 대체 가능한 기준 농도 이하의 반응 및 발색 시약 개발을 완료하였으며, 이와 관련하여 특허 출원이 진행 중이다.

본 연구결과를 통해 상수도 관련 공기업 및 지자체 등 국산 온라인 망간 분석 시스템 도입이 활발히 진행될 것으로 기대되며, 아울러 해외 제품 사용에 따른 높은 구매 비용, 제조사 전용 시약 사용 및 A/S 등의 불편함을 해소할 수 있을 것으로 판단된다.

PT-005 [환경]

오염물질 저감 테이프의 사용 적합성 확인

신현지*, 권용재, 최임성

아람기술이앤지(주)

*Corresponding author. hj_shin0924@naver.com

우리는 표면에서 총휘발성유기화합물(TVOC)과 폼알데하이드(HCHO)가 방출되고 있는 건축자재 제품에 둘러싸여 생활하고 있다. 오염물질은 주로 제품의 표면에서 방출되기 때문에 소형챔버 방출시험에서는 제품의 표면을 노출시켜 제품의 표면을 노출시켜 시험을 하고 있다.

현재 소형챔버 방출시험에서 시료 모서리 부분을 밀봉하는 데에 알루미늄 호일과 함께 오염물질 저감 테이프가 사용되고 있다. 시료의 방출시험을 진행하기 위해 제작된 시험편은 기존 제품에서 시험 규격에 맞게 잘라서 제작하기 때문에 시험편에 절단면이 생기게 된다. 절단면이 발생하면 표면뿐만 아니라 절단면에 방출되는 오염물질이 시험에 영향을 줄 수 있기 때문에 절단면을 마감처리 할 필요가 있다. 테이프가 사용되는 시료의 종류에는 롤 형태와 판상 형태, 그리고 가구용구성재 시료가 있다.

본 시험에서는 오염물질 저감 테이프에서 방출되는 총휘발성유기화합물(TVOC)과 폼알데하이드(HCHO)를 확인하기 위해 7일 동안 방출시험을 진행하였다. 테이프 ¹겉면과 ²접착면에서 자체적으로 방출되는 양을 알아보기 위한 시험과 ³테이프가 시료에 영향을 미치는지 알아보기 위한 시험 세 가지 방법으로 진행하였다.

1, 2 시험에서는 테이프의 겉면과 접착면을 노출되도록 열세척 한 유리 와 테프론 시험틀에 테이프를 부착하여 시험편을 제작하였다. 3 시험에서는 건축자재인 단열재와 시트, 가구용구성재인 PB 18T 시료에 테이프를 부착하여 시험편을 제작하였다. 시험편의 크기는 가구용구성재는 130 mm * 130 mm * 18mm(가로, 세로, 두께), 나머지 시료는 165 mm * 165 mm로 제작하여 시험하였다.

기존에 사용 중이던 오염물질 저감 테이프의 단종에 따라 새로운 테이프의 선정을 위해 본 시험을 진행하였으며, 7일 간의 방출시험의 결과를 토대로 오염물질 저감 테이프의 사용 적합성을 확인하고자 한다.

PT-006 [환경]

판상자재의 절단면 마감 방법에 따른 오염물질 방출 특성의 비교

최임성¹, 이현주¹, 권영진¹, 박준호², 김만구²*

¹아람기술이앤지(주), ²강원대학교

*Corresponding author: mgkim@kangwon.ac.kr

현재 실내 인테리어에 사용되는 가구와 건축자재 등의 판상 자재들의 대부분은 표면이 마감 처리된 형태로 사용되고 있다. 표면 마감처리로 인해 내부자재와 표면이 다른 경우가 대부분이다. 이로 인해 표면과 내부자재에서 방출되는 오염물질이 상이하게 나타난다. 실제 제품이 사용될 경우 제품 사이의 이음매 또는 마구리면을 통해 내부자재가 노출되어 실내공기질에 영향을 미친다. 하지만 현행의 시험방법들은 제품의 표면만을 평가대상으로 하여 내부자재의 영향이 반영되지 않고 있다. 이러한 자재들이 인체에 미치는 영향을 정확히 평가하기 위해서는 표면과 내부자재의 오염물질 방출을 분리하여 평가할 필요성이 있다.

선행 연구에서는 표면과 내부자재의 방출을 평가하는 방법으로 절단면을 모두 마감한 후 개방하는 개방방법을 제시하였다. 절단면을 저방출 테이프로 마감하는 방법을 제시하였으나 이는 마감방법의 한계로 인해 절단면 마감 비율에 따른 내부 자재에서의 방출이 상이하게 나타났다.

본 연구에서는 4가지 방법으로 동일한 비율의 절단면을 마감하여 마감 방법에 따른 오염물질의 방출 특성을 비교하였다. 시험편으로는 표면이 LPM(Low Pressure Melamine) 마감 처리된 MDF(Medium Density Fiberboard)를 이용하였다. 시험편의 크기는 두께 18 mm, 가로 x 세로 165 mm로 제작하였으며 시험방법으로는 소형챔버법을 적용하였다. 시험편은 절단면의 마감 방법에 따라 4가지 형태로 제작하였으며, 절단면의 마감 면적은 동일하게 적용하여 절단면 마감 형태에 따른 방출 특성의 차이를 비교하였다. 21일차까지의 TVOC와 HCHO의 농도를 측정하였다. 향후 35일차까지의 측정을 진행하여 방출경향을 확인하려 한다.

PT-007 [환경]

Determination of *N*-nitrosamines and secondary amines in the atmosphere using gas chromatography coupled with electron capture detection after derivatization

Thu Thi Hoai Mai¹, Hekap Kim^{2,*}

¹Department of Environmental Science, Kangwon National University

²School of Natural Resources and Environmental Science, Kangwon National University

*Corresponding author: kimh@kangwon.ac.kr

N-Nitrosamines (NAs) are groups of chemical compounds containing nitroso (*N*-NO) functional groups known to be highly carcinogenic to our health. In addition, secondary amines are important precursors of corresponding *N*-nitrosamines in the presence of nitrogen oxides or other nitrosating agents. Atmospheric secondary amines (SAs) contribute to the nucleation and initial growth of new particles as well as secondary organic aerosol formation in salt-producing acid-base reactions, influencing the radiative balance of the earth's atmosphere. Therefore, the aim of this study was to investigate the relationship between the NAs and corresponding SAs in the atmosphere using gas chromatography coupled with electron capture detection (GC-ECD) after derivatization. The method employed liquid-liquid extraction (LLE) of the pentafluorobenzensulfonyl derivatives of the SAs under optimized conditions. The operation parameters included the reaction duration, and extracting solvent, which were optimized to be 40 °C, 10 min, and methyl*tert*-butyl ether (MTBE), respectively. NAs were derivatized as SAs after denitrosation with hydrobromic acid-acetic acid to produce the corresponding SAs. This study was performed to analyze the NAs and corresponding SAs in the atmosphere for the particle phase and the gaseous phase. In the particle phase, samples were collected on quartz filters by a cyclone sampler operated with a flow rate of 16.7 L/min; each sampling was lasted for 48 hours. In the gaseous phase, samples were collected on the SPE cartridge with a mixture of silica gel and sulfamic acid; operated with a flow rate of 2 L/min; each sampling period was 48 hours. Calibration curves were linear in the range of 5 to 35 µg/L with the coefficient of determination (r^2) > 0.99. The method detection limits of secondary amines ranged from 1.96 to 4.63 pg for the analytes while the method detection limits of *N*-nitrosamines ranged from 2.76 to 8.23 pg for the analytes. The recovery at a concentration of 6 pg ranged from 81.2 to 103% on the particle secondary amines; and from 81.0 to 117% on the gaseous secondary amines. The recovery at a concentration of 6 pg ranged from 82.4 to 108% on the particle nitrosamines; and from 82.9 to 113% on the gaseous nitrosamines. These results indicate that the proposed method can be satisfactorily applied to the determination *N*-nitrosamines and secondary amines in the atmosphere. The mean concentration of the particulate NDMA, NMEA, NDEA, and NDPA were 0.06±0.06 pg/m³, 0.05±0.02 pg/m³, 0.78±0.05 pg/m³, and 0.84±0.05 pg/m³, respectively. The mean concentration of the particulate DMA, MEA, DEA, and DPA were 0.02±0.00 pg/m³, 0.41±0.09 pg/m³, 0.28±0.00 pg/m³, and 0.09±0.00 pg/m³, respectively. This study proved that DMA, MEA, DEA, and DPA would be one of the important the precursors of NDMA, NMEA, NDEA, and NDPA, respectively, in the atmosphere.

PT-008 [환경]

Cancel

PT-009 [환경]

LSC measurement for ^{226}Ra and ^{222}Rn determination in groundwater considering radionuclide interfering at interface of sample and cocktail

Jeonghyeon Ryu¹, Hyeon-Woo Lee^{1,*}

¹Department of NORM Analysis, Korea Institute of Nuclear Safety

*Corresponding author: hwlee@kins.re.kr

^{226}Ra ($T_{1/2}=1.600 \times 10^3$ yr) and ^{222}Rn ($T_{1/2}=3.8$ days) are present in all environments as decay series nuclides of ^{238}U . The World Health Organization(WHO) has reported these two nuclides as the major cause of lung cancer and has limited ^{226}Ra and ^{222}Rn activity concentration in drinking water to less than 1 Bq/L and 100 Bq/L, respectively. Liquid Scintillation Counter(LSC) is widely used for ^{226}Ra and ^{222}Rn analysis due to its advantages such as low background, high counting efficiency, and low detection limit. To determine the type of scintillation cocktail for LSC measurement, a single-phase or two-phase cocktail should be selected considering whether the sample and target nuclide are water soluble. The two-phase scintillation cocktail is mainly used to separate the target nuclide from the interfering nuclides, and the cocktail acts as a solvent extractant for radon gas present in the sample or newly formed by the decay of radium. During the measurement, nuclides that are not dissolved in the cocktail are partially located at the interface between the sample and the cocktail and may decay in the direction of the cocktail. In this case, the decayed particles generate scintillation resulting in overestimation, and increasing MDA due to the increased background. The LSC alpha-beta discrimination system results are difficult to evaluate by completely separating alpha and beta pulses, so not only the alpha nuclides in groundwater but also the beta nuclides can interfere with the alpha measurement. Therefore, in order to accurately measure the activity concentrations of ^{226}Ra and ^{222}Rn using a two-phase scintillation cocktail, the effect of the interfering nuclides at the interface must be evaluated.

In this study, a simple method for evaluating ^{226}Ra and ^{222}Rn concentration in groundwater with just one sample is proposed using the radioactive equilibrium properties. In addition, the effect of radioactive decay of interfering nuclides at the interface between sample and cocktail was evaluated. By measuring ^{241}Am pure alpha and ^{36}Cl pure beta nuclides with the two-phase scintillation cocktail, it was evaluated whether the alpha and beta nuclides at the interface affect the LSC background.

PT-010 [환경]

충남 서북부지역 대기환경관리를 위한 지역주민 의식도 조사

Consciousness Survey of Residents in North-West area of
ChungNam for Air Quality management

이선엽, 김종범*, 황은영, 윤수향, 조민철, 김아람, 신우석, 이상신

충남연구원 서해안기후환경연구소

충청남도는 CAPSS 기준 경기도에 이어 2번째로 많은 대기오염물질 배출지역으로 석탄화력발전소를 중심으로, 대산석유화학단지, 당진제철소 등 대형 배출시설들이 다수 위치하고 있다. 이와 더불어 충청남도 인구의 45.1%가 거주하고 있는 천안, 아산의 경우 도시환경문제가 심각한 수준으로 지역적으로 분포되어 있는 산업단지 또한 주요 대기오염원으로 기여하고 있다. 이처럼 충남지역의 대기오염 문제는 타 지역에 비해 주민생활권에 밀집되어 있으며, 이를 해결하기 위해 다양한 환경정책들이 추진되고 있다. 2020년 수립된 대기환경권역법에 의거 충청남도에서는 “충청남도 대기환경관리 시행계획”을 수립하였고, 이에 대한 적절성 여부를 현재 환경부에서 검토 중에 있다. 충남지역 인구의 61.4%가 거주하면서 더불어 대부분의 대기오염물질을 배출하고 있는 충남 서북부지역의 천안, 아산, 서산, 당진은 2019년 12월 “충남 서북부 미세먼지 대응 행정협의회”를 발족하였고, 공동의 대책마련과 사업추진, 개선대책 마련을 추진 중에 있다.

한편 주민친화적인 사업 발굴 및 정책수립을 위해 지역주민들의 의견수렴이 중요한 가운데 본 연구에서는 4개시의 주민들을 대상으로 대기환경관리를 위한 지역주민 의식도 조사를 수행하였다. 공간적 범위는 4개시에 거주 주민 및 시군 담당자를 대상으로 하였고, 주민 10,14명, 담당자 222명에 대한 설문을 진행하였다. 의견조사는 2021년 2월 24일부터 3월 18일까지 4주간 시행하였고, 수집된 자료는 데이터처리를 거쳐 SPSS와 Excel 프로그램을 활용하여 통계처리 하였다.

설문조사 결과 77.6 %의 주민이 거주지역의 대기질이 나쁘다고 생각하고 있고, 대기환경문제가 가장 큰 문제(84.7 %)라고 답하였다. 주요 오염물질로는 미세먼지(63.3 %), SO₂(46.4 %), NO₂(43.2 %, 중복가능)로 나타났고, 평상시 환경에 대한 관심은 크게 없으나(73.4 %, 매우 낮음~보통), 일정이 된다면 관련 설명회나 토론회에 대한 참석의사(87.2 %)는 높은 것으로 나타났다. 우선적으로 수행되어야 할 정책으로는 발전소 등 대형배출시설 오염원 관리(35.1 %), 비산업부문 관리(24.6 %), 이동배출원 관리(18.3 %)순으로 나타났다.

PT-011 [환경]

충남지역 발전소 배출량 저감에 따른 지역 내 영향 분석

Effect Analysis in ChungNam area by emission reduction of air pollutants in Coal-fired Power Plant

김종범*, 이선엽, 황은영, 윤수향, 조민철, 김아람, 신우석, 이상신

충남연구원 서해안기후환경연구소

충청남도는 한반도 서쪽 끝에 위치하여 중국 등 외국으로부터 유입되는 황사나 장거리 이동오염물질에 대한 영향을 직접적으로 받으며, 발전소, 석유화학단지, 제철소 등 대형배출시설이 다수 존재하여 대기오염물질 배출량 기준 경기도에 이어 2위를 차지하고 있다. 특히 2021년도 기준 전국 58기의 석탄화력발전소 중 28기가 충남지역에 위치하고 있어 이에 대한 영향이 매우 큰 것으로 알려져 있다. 석탄화력발전소는 원료보관소인 저탄장의 비산먼지부터 연소 및 에너지 생상과정에서 배출되는 입자상 오염물질을 포함한 SO₂, NO₂, CO, CO₂ 등 다양한 가스상 오염물질을 배출하고 있고 대기질 개선을 위해 정부 차원의 관리를 받고 있다. 2018년 수립된 “미세먼지 관리 종합계획”에 따르면 석탄화력발전소는 크게 상한제약, 조업중지, 조기폐쇄 등의 정책이 진행되고 있으며, 이들 계획 추진에 따라 대기질 개선에 큰 영향을 줄 것으로 예측되고 있다.

충청남도에 위치한 석탄화력발전소를 중심으로 배출량 저감에 따른 지역 내영향을 분석하였다. 첫 번째로 비상저감조치시 상한제약에 따라 발전량이 20% 감소하였을 때의 주변지역 영향을 분석하였고, 두 번째로는 발전소에서 배출되는 PM₁₀의 농도를 2016년 CAPSS 기준 100%라고 했을 때 배출량 감소와 풍향·풍속 변화에 따른 지역 내 영향을 모델링을 통해 분석하였다.

첫 번째는 2018년과 2019년에 수행된 2회에 걸친 비상저감조치 결과를 대상으로 모델링을 통해 분석하였고, 분석결과 주변지역의 풍향·풍속에 따라 약간 상이하지만 화력발전소 주변에서 3.8~11.0 µg/m³의 저감효과를 보였다. 두 번째 연구에서는 2016년 기준 100%에서 40%까지 감소시킬 경우 충청남도 전체에서 최대 0.12 µg/m³의 저감효과를 보였고, 특히 풍속이 빠르고 북서풍일때의 저감효과가 가장 높은 것으로 확인되었다. 반대로 말하면 북서풍이고, 바람이 강하게 불수록 석탄화력발전소에서 배출되는 오염물질이 주변 마을에 가장 큰 영향을 미치고 있다는 것을 의미한다. 본 연구는 화력발전소가 충청남도 지역에 미치는 영향에 대한 조사 연구로 지속적인 모니터링과 분석을 통해 충청남도의 대기질 개선 정책 수립을 위한 기초자료로 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

PT-012 [환경]

방출셀과 소형챔버를 이용한 건축자재의 온도영향에 따른 방출특성 연구

현승민^{1,*}, 홍길환¹, 고영환¹, 김만구², 권영진³, 최임성³

¹*한국산업기술시험원, ²강원대학교, ³아람기술이앤지(주)

*Corresponding author: hyunsm@ktl.re.kr

건축내장재에서 방출되는 오염물질을 관리하기 위하여 건축자재 사전적합제도, 건강친화형주택 건설 기준, 환경표지, HB마크 등 각종 제도를 시행하고 있으며 오염원이 적은 건축자재 구매 및 다양한 인증 제품에 대한 소비자들의 관심이 증대 되고 있다. 그러나 건축자재 시험방법은 상온에서 표면만 노출하여 총휘발성유기화합물 및 폼알데하이드 방출량 측정하고 있으며, 시험온도, 방출시험기간 등 실제 생활공간에 설치하여 사용하는 건축자재의 방출 특성을 고려하고 있지는 않다. 국내 건축물은 대부분은 바닥방 방식으로 이루어져 있으며 온도에 직접적인 영향을 받는 마루, 장판 등 바닥재 대상으로 온도에 의한 오염물질 방출특성을 고려할 필요가 있다.

본 연구에서는 온도에 의한 건축자재의 방출특성을 확인하기 위하여 소형챔버와 방출셀 (FLEC : FIELD and Laboratory Emission Cell) 을 비교하였다. 챔버의 바닥면에 핫플레이트를 놓고 바닥재가 40 °C 온도가 되도록 가열하여 1일, 3일, 5일, 7일, 14일, 21일, 28일간 측정하여 비교하였다. 25 °C 항온조건과 40 °C 고온조건에서 바닥재에서 방출되는 휘발성유기화합물질은 비슷한 경향을 나타냈으나 고온조건에서 특정물질이 높은 방출량을 나타내었다. 시험시작 후 1일 ~ 7일경과 시 40 °C 가열조건에서 바닥재의 총휘발성유기화합물 및 폼알데하이드는 항온조건보다 높은 농도로 방출되며 7일 이후 방출농도의 감쇄율은 줄어들며 28일 경과 후 방출농도는 일정하게 유지되었다. 방출셀의 경우 시료부하율 및 환기횟수가 소형챔버보다 높아 초기방출량은 소형챔버 보다 상대적으로 높은 것으로 확인되었다.

건축자재에 열을 가하였을 때 짧은 기간 더 많은 방출농도를 나타내었으며 난방에 의해 시공 초기에는 오염물질 방출량이 급격히 증가할 것으로 판단된다. 현재의 시험 방법은 온도의 영향에 대한 고려 없이 항온조건을 표면방출을 시험하고 있어 온도에 의한 영향을 고려한 시험방법에 대한 지속적인 연구를 통해 실내 공기질의 영향을 다양한 시각으로 접근할 필요가 있을 것으로 판단된다.

PT-013 [환경]

수질 중 질산염의 질소와 산소 안정동위원소비를 이용한 상수원 오염원 판별

유지수¹, 박범성¹, 김정인¹, 강은비¹, 김윤석^{1,*}

¹*K-water 수질안전처

*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

최근 기후변화의 심화로 점(생활하수)·비점오염원(농지, 산림 등)에서 유출된 영양염(질소, 인)이 상수원 내 과도하게 축적되어 수질 오염을 유발하고 있다. 충주호 유역 또한 녹조현상과 수질 오염이 빈번히 발생하여, 발생원인의 파악 및 대책 마련이 시급한 실정이다. 질산염의 질소와 산소 안정동위원소비 분석법은 탈질작용이 일어날 때 질산염의 오염기원을 판별하는 데 유용하게 활용될 수 있으며, 하천, 지하수 등의 오염기원을 밝히는 중요한 지문으로 사용되고 있다. 이에 따라 본 연구에서는 충주호 유역의 주요 오염원을 판별하기 위하여 유입지천, 댐 호소 등 총 15개 지점을 대상으로 질산염($\text{NO}_3\text{-N}$) 농도와 질산염의 질소($\delta^{15}\text{N}$)와 산소($\delta^{18}\text{O}$) 안정동위원소비를 분석하였다. 질산염 농도는 먹는물 수질공정시험기준에 따라 이온 크로마토그래피(Ion Chromatography)를 이용하여 분석하였다. 또한, 수질 시료에 탈질 박테리아를 주입하여 질산염을 환원시키는 전처리를 하였으며, 안정동위원소비는 안정동위원소-질량분석기(Stable isotope ratio-Mass spectrometer)를 이용하여 분석하였다. '20년 4~10월 분석결과, 제천천 유역과 고교천 상류 지점의 질산성 질소 농도가 높았으며, 명확한 오염원 파악을 위하여 질산염의 질소와 산소 안정동위원소비를 분석하였다. 충주댐 본류와 제천천 구역의 $\delta^{15}\text{N}$, $\delta^{18}\text{O}$ 값이 유사한 범위를 나타내어 제천천 유역의 오염원이 충주댐으로 유입되는 것으로 판단되었으며, 주요 오염원은 생활하수 및 축산분뇨로 판단되었다. 고교천 상류인 포전교 지점은 화학비료가 하천으로 유입된 후 탈질화 되어, 높은 $\delta^{15}\text{N}$ 값을 나타낸 것으로 보인다. 이를 통해, 충주호로 유입되는 주요 오염원은 제천천 유역의 생활하수, 축산분뇨 그리고 고교천 상류의 화학비료로 판단된다. 그러나, 추후 주변 축산분뇨, 생활하수 등 End-member 시료의 안정동위원소비 분석을 통해 수질 시료와의 상관관계 분석이 진행되어야 하며, 특히 오염원의 기여율을 평가하면 좀 더 명확한 해석이 가능할 것으로 사료된다.

PT-014 [환경]

Non-targeted screening in drinking water by liquid chromatography-mass spectrometry

Young Jae Joo^{1,2}, Hee Soo Pyo¹, Kyoung Heon Kim², and Jeongae Lee^{1,*}

¹Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology

²Department of Biotechnology, College of Life Sciences and Biotechnology, Korea University

*Corresponding author: frans@kist.re.kr

Since the increasing number of emerging and unregulated pollutants have been detected in surface water. Most compounds such as pharmaceuticals, surfactants, biocides and personal care products enter surface water primarily through treated and untreated wastewater and the advent of large-scale commercial production of chemicals released into the water has contaminated the aquatic environment with complex chemical mixtures that can harm both human and ecosystem. In order to identify the substances of these compounds, raw and purified water of Han river were analyzed through non-target screening. Solid-phase extraction was used as a pretreatment, and analysis was performed in positive and negative modes using LC-HRMS. The raw data were deconvoluted by aligning the peaks using PROGENESIS QI software. In the process, data with an ANOVA p-value of 0.05 or more and a CV value less than 30 percent were filtered to reduce the number of variables of more than 5,000 to 137 for positive and 535 for negative mode analysis. To find out the correlation between the two samples, the data were imported to SIMCA software and the score plot was checked. Among them, the variables with the highest VIP and score value were selected. In both positive and negative modes, the concentration of polymers, commercial resins, plastics, and explosives synthetic materials were higher in purified water and plant growth inhibitors, synthetic material for food sweeteners, different solvents and biochemical tool used experimentally as a carcinogen and mutagen were higher in raw water. We plan to expand these methods to focus on the other major rivers in South Korea for future research.

keywords: non-target screening, purified water, raw water

PT-015 [환경]

미세기포 발생장치별 용존오존량 및 색도제거 시험 비교

김유곤¹, 이광희², 박재형²

¹한국생산기술연구원 융합기술연구소, ²해성엔지니어링(주)

Corresponding author: kyg00789@hanmail.net, +82-(0)31-8065-4226

최근 폐수 및 하수에서 미량오염물질 및 냄새 그리고 색도 등의 문제가 제기 되고 있는 상황에 본 연구에서는 미량오염물질 및 색도 등에 탁월한 효과를 나타내고 있는 오존을 이용한 고도산화처리(AOP)를 위한 핵심 부분인 마이크로버블 발생장치 종류에 따른 용존오존 농도 비교 분석실험과 색도제거 실험을 비교 분석하였다.

실험장치로는 기존 산기관방식과, 나노버블방식, 울트라파인버블(UFB)방식 그리고 마이크로버블방식 등을 비교실험하였다. 이는 동일한 조건에서 기존 산기관방식에 비해 버블 사이즈별로 용존오존 발생량을 측정하여 비교 평가하였다. 실험방법은 반응조에 물 약 100L를 채우고 오존발생장치를 켜고 5분간 안정화 시킨다. 산소발생장치의 콤프레서와 오존발생장치가 정상적으로 작동되는지 점검하고 탱크에서 믹싱이 잘 되는지 확인 후 용존오존 측정기를 이용하여, 각 측정구간 시간대별, 장치 가동 후 5분 뒤 1분, 3분, 5분, 10분, 15분 20분 각각 오존의 기체유량(g/hr기준)과 용존오존량(mg/L), 온도, 압력, DO 등을 측정하여 기록지에 기록하였다. 그리고 색도실험에서도 상기와 같은 장비를 이용해 반응조에 수돗물 100L를 넣고 오염원(검정잉크) 50mL를 넣고 잘 저어준 후 오존발생장치를 가동시켜 각 시간대별로 얼마만에 오염원이 제거되어 투명한 색으로 변화하는지 변화시간을 측정하였다.

각 장치별 용존오존량 실험결과, 기존산기식시스템 대비 각 버블발생장치별 용존오존율을 비교한 결과, UFB장치는 5분에서 46.11%, 10분에서 50.34%, 15분에서 44.50%, 20분에서 35.69%로 산기식 대비해 다소 높은 용존오존율을 보였으며, 나노버블장치와 마이크로버블장치에서도 산기식 대비 높은 용존오존율을 보였으나, 울트라파인버블(UFB)장치의 용존 오존율이 가장 좋은 결과를 나타냄을 알 수 있었다. 색도제거실험에서도 UFB장치에서 색도제거 시간이 4분 51초로 마이크로버블 5분 11초, 나노버블 8분 12초 대비 색도제거에 효율적인 장비로 평가되었다.

PT-016 [환경]

TED-GC-MS를 이용한 다양한 환경매질별 미세플라스틱 분석방법 연구

Microplastic analytical method Using TED-GC-MS in various environmental media

김주양, 정재학*

(주)한국분석과학연구소

*Corresponding author: jh3370@naver.com

코로나19로 인한 일회용품, 플라스틱 사용량이 급증함에 따라 미세플라스틱 오염과 환경 중 미세플라스틱 노출로 인한 건강에 관한 우려도 커지고 있다. 환경 중에 존재하는 미세플라스틱의 정확한 분석을 위해서는 분석 대상 매질, 주변 방해 요소의 존재유무 및 미세플라스틱의 농도 수준에 따라서 전처리 및 분석 기법을 차별화하여 적용하는 것이 필요하다. ISO/TC 61(플라스틱)/SC 14(환경측면)/WG 4(미세플라스틱)에서 개발중인 표준안에서도 수질, 토양, 대기 등의 다양한 매질별로 샘플링 방법과 전처리 방법, 그리고 정성/정량분석방법 등 다양한 접근 방법이 제안되어 개발되고 있다. 미세플라스틱의 전처리에는 주로 매트릭스와 미세플라스틱의 분리 및 농축을 위한 유기물 분해, 무기물 처리를 위한 밀도 분리가 이루어지게 되는데 이 과정에서 결과적으로 용액 상태인 시료를 여과한 필터가 최종 분석 대상이 된다.

본 연구에서는 환경매질 시료의 열분석법 연구에 초점을 두고 TED-GC-MS를 이용한 미세플라스틱 분석방법을 검토하였다. TED-GC-MS는 대표적인 열분석-질량분석 기기인 Py-GC-MS와 비교해 10배 이상 큰 Sample cup (최대 900 μ L)을 활용하여 많은 양의 시료를 도입할 수 있다는 장점이 있다. 이러한 장점을 살려서 본 연구에서는 최종 분석 대상인 필터 위의 미세플라스틱을 Sample cup에 옮기는 과정 없이, 필터를 접어서 Sample cup에 직접 도입하는 방법을 이용하였다. 미세플라스틱을 샘플컵에 옮기는 과정을 생략할 수 있어서 정확성과 편리성을 확보할 수 있는 큰 장점이 있다. 또한 미세플라스틱 정량한계를 낮추기 위해서 표준물질 도입 방법을 검토하여 solvent 희석법을 이용한 정량방법을 개발하였다. 다양한 매질에 적용 가능한 TED-GC-MS를 이용한 분석방법 개발 진행 상황 공유 및 환경 매질 중 미세플라스틱을 분석한 결과를 소개하고자 한다.

Key words: TED-GC-MS, Microplastics, Environmental media, Analytical method

참고문헌

1. ISO/TC 61, ISO/CD 24187, Development of technical principles, which will be used across the board for future standardization projects on testing methods for plastics and microplastics in various matrices

PT-017 [환경]

Comparison of volatile organic compounds released from mainstream smoke of 'filtered cigarettes with flavored capsule (FCFC)'

Dae-Hwan Lim¹, Ki-Hyun Kim^{1,*}

¹*Department of Civil and Environmental Engineering, Hanyang University

*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

Mainstream cigarette smoke is a complex aerosol known to contain as many as 8,000 chemicals. In this work, the quantities of volatile organic compounds (VOCs) released from the mainstream smoke were determined from two different types of 'filtered cigarette with flavored capsules (FCFC)' under the two contrasting conditions such as: (a) with and (b) without breaking the capsules. This study was organized to assess the VOC levels in the mainstream smoke of FCFC based on quantitative analysis of 7 major VOCs (i.e., isoprene (IP), acrylonitrile (AN), methyl ethyl ketone (MEK), benzene (B), m-xylene (m-X), and styrene (S)) in reference to standard cigarette. The flavored cigarette with breaking capsule released about 1.01 – 2.62 fold higher levels of VOCs (e.g., IP, MEK, B, and AN) in comparison to the reference cigarette (3R4F). We also evaluated other VOCs and total VOCs (TVOC) from the mainstream smoke samples. As a result, substantial amount of VOCs are emitted from capsule. Especially, the TVOC released from mainstream smoke after breaking capsules of two different flavored cigarettes were 799 and 1,334 ug cig⁻¹, which are 2.33 – 3.89 fold higher than that of 3R4F. The result of our study provide a comparative assessment of the actual effect of capsule between flavored and non-flavored cigarette.

PT-018 [환경]

Development of simultaneous analysis of 2 pesticides and 7 PAHs in sediment

Kyeong-Yun Choi¹, Ho-Sang Shin^{2,*}

¹Department of Environmental Science, Kongju National University,

^{2,*}Department of Environmental Education, Kongju National University

*Corresponding author: hshin@kongju.ac.kr

Various water pollutants are discharged into rivers as industrial activities are advanced and numerous chemicals are used and distributed for convenience in life. As these water pollutants enter the rivers, they are adversely affecting the aquatic ecosystems. The residue pollutants leach from sediments into the water over time, and become pollution sources. The leached pollutants accumulate in accordance with the food chain, increasing damages to the aquatic ecosystems. Therefore, it is necessary to develop analysis methods of water pollutants for the environmental impact assessment.

In this study, we developed a simultaneous analysis method of 2 pesticides and 7 polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in sediment. The pollutants in sediment were extracted with dichloromethane and acetonitrile, cleaned up with SPE and analyzed using GC-MS/MS.

The limit of quantitation of 2 pesticides and 7 PAHs was 0.01 µg/kg in sediments, and linearities were above 0.995. Recoveries were 53.4 to 110 %, the accuracies were 88.8 to 117 %, and the precisions were less than 11.4 %.

As a result of the quality control, developed simultaneous analysis method will be sufficiently applied. It is also believed that this method will be used for monitoring and impact assessments, such as risk assessments.

PT-019 [환경]

**Chemical Compositions of Fine Particulate Matters
at Mt. Halla-1100 Site, Jeju Island in 2020**

Jung-Min Song¹, Hyo-Sun Yang¹, Won-Hyung Kim¹, Chang-Hee Kang^{1,*}

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

*Corresponding author: changhee@jejunu.ac.kr

The collection of PM₁₀ and PM_{2.5} samples has been made at the Mt. Halla-1100 site, which is a background site located at the Planetary Boundary Layer (PBL) of Jeju Island in 2020. Mass concentrations of PM₁₀ and PM_{2.5} were 15.6±14.0 and 7.1±5.8 µg/m³, respectively, during the study period. The concentrations of secondary pollutants such as NO₃⁻, nss-SO₄²⁻, NH₄⁺ were 1.25, 1.77 and 0.86 µg/m³ in PM₁₀ and 0.58, 1.56, 0.83 µg/m³ in PM_{2.5}, respectively. Composition ratios of the secondary pollutants (NH₄⁺, nss-SO₄²⁻, NO₃⁻), marine species (Na⁺, Cl⁻, Mg²⁺) and soil source (nss-Ca²⁺) were 79.6%, 8.3%, and 6.4% in PM₁₀ aerosols. Meanwhile, those of PM_{2.5} were 91.9%, 1.7%, and 0.6%, respectively. From the study of particle size distributions, the concentration ratios of PM_{2.5}/PM₁₀ for nss-SO₄²⁻ and NH₄⁺ were 0.96, 0.88, respectively, indicating that those species were existed mainly in PM_{2.5} aerosols. On the other hand, NO₃⁻, Na⁺, Cl⁻ and nss-Ca²⁺ were rich in PM₁₀ aerosols. From the elemental analysis, The composition ratios of anthropogenic (S, Zn, Pb), soil (Al, Fe, Ca) and marine (Na, Mg) sources occupied 23.0%, 25.2% and 44.9% in PM₁₀ and 50.9%, 13.8%, 26.5% in PM_{2.5} aerosols, respectively. Based on the neutralization factors, the fine particulate matters were acidified mainly by sulfuric and nitric acids, and the neutralization was relatively caused by calcium carbonate in PM₁₀ aerosols and ammonia in PM_{2.5} aerosols. The clustered back trajectories showed that 57% of total air mass inflows was from the China, and the concentrations of NH₄⁺, nss-SO₄²⁻, NO₃⁻ and nss-Ca²⁺ were especially high corresponding to the inflows.

PT-020 [환경]

**Chemical Characteristics of Precipitation Components
at Mt. Halla-1100 Site in Jeju Island**

**Chang-Hee Kang¹, Hyo-Sun Yang¹, Won-Hyung Kim¹, Jun-Oh Bu¹,
Jung-Min Song^{1,*}**

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

*Corresponding author: songjm@jejunu.ac.kr

The collection of precipitation samples was collected the 32 samples at Mt. Halla-1100 site (a site at an altitude of 1100 meter on Mt. Halla) of Jeju Island in 2020, and their major ionic components were analyzed by ion chromatography. From the comparison by ion balance, electric conductivity, and acid fraction of precipitation, their correlations were found in the range of 0.995~0.998, indicating a good quality of the analytical data. Over the study periods, the volume-weighted mean pH and electric conductivity were 4.8 and 17.8 $\mu\text{S}/\text{cm}$, respectively. Acidity of the precipitation at Jeju Island showed that 93.8% frequencies were below pH 5.6, and the ionic strength was 0.11 ± 0.09 mM, indicating 65.6% of total precipitation within pure rainwater criteria. The volume-weighted mean concentrations ($\mu\text{eq}/\text{L}$) of the ionic species in precipitation were in the order of $\text{Cl}^- > \text{Na}^+ > \text{H}^+ > \text{nss-SO}_4^{2-} > \text{NH}_4^+ > \text{NO}_3^- > \text{Mg}^{2+} > \text{nss-Ca}^{2+} > \text{HCOO}^- > \text{K}^+ > \text{CH}_3\text{COO}^- > \text{HCO}_3^- > \text{C}_2\text{O}_4^{2-} > \text{F}^- > \text{CH}_3\text{SO}_3^-$. The major marine (Na^+ , Cl^- , Mg^{2+}), secondary pollutants (NH_4^+ , NO_3^- , nss-SO_4^{2-}) and soil (nss-Ca^{2+}) species have contributed to the total ionic components of precipitation samples by 49.8%, 31.3%, and 4.1%, respectively. The acidity contributions by sulfuric and nitric acid were 45.9% and 46.1%, respectively. Meanwhile the acidity contributions by formic and acetic acids were 5.0% and 3.1%, respectively. Based on the investigation of neutralization factors, the neutralization of precipitation species was occurred mainly by ammonia and calcium carbonate, and their contributions were 46.3% and 22.8%, respectively. From the back trajectory analysis, the concentrations of precipitation components were high when the air masses moved from China continent and Korea peninsula into Jeju Island, but low when they moved from East Sea and the North Pacific Ocean

PT-021 [의약품/화장품]

Isolation and characterization of selective androgen receptor modulators (SARMs) hydrolyzed YK-11 in a dietary supplement by liquid chromatography-tandem mass spectrometry

Ji Hyun Lee, Ji Hye Han, Nam Sook Kim, Jinho Kim, and Sun Young Baek*

Center for Advanced Analysis, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation,
Republic of Korea

*Corresponding author: stepany9838@korea.kr

Selective androgen receptor modulators (SARMs) that possess the beneficial effect of androgens via androgen receptors has spread widely throughout all layers of the population, specifically sportsmen, athletes, or people who practice sports for aesthetics. Due to their anabolic properties, they have been on the World Anti-Doping Agency prohibited list for more than a decade. To avoid the chance of an unattended positive doping test and potential serious health problems, adequate screening methods for the detection of a wide range of SARMs in these supplements is necessary. In this study, we investigated characterization of hydrolyzed YK-11 and their isomer by liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS). As the result of analyzed a sample labelled with YK-11, a protonated ion $[M+H]^+$ at m/z 431 for YK-11 was not detected, but the $[M+Na]^+$ ion of YK-11 at m/z 453 was detected. And a protonated ion $[M+H]^+$ at m/z 431 for YK-11 was also not detected, the fragmentation of YK-11 was revealed in the MS^2 spectra of LC-Q-TOF/MS. In addition, the total ion chromatogram of LC-MS/MS showed the peak of hydrolyzed YK-11 and YK-11 isomer. Since YK-11 is known to be particularly unstable, the isolated YK-11 dissolved in water, then analyzed by LC-MS/MS 18 h later. As the result, the YK-11 was almost completely shifted to the that of the hydrolyzed product of YK-11. These results indicate that the sample preparation and analysis conditions for SARMs analysis needs to be optimized for the unstable YK-11 in future studies. Moreover, since contamination of dietary supplements with SARMs may lead to unexpected adverse effects, this study is especially important when drug impurities with unknown effects are observed in the studied material.

※ This research was supported by a grant (MFDS CAA2021 and 21201MFDS306) from Ministry of Food and Drug Safety in 2021.

PT-022 [의약품/화장품]

**Comparison of main components between the non-/bio-converted
Morus alba leaves following bio-conversion process**

**Jin Hyeok KIM¹, Tae Jung KIM¹, Kyung Tae KIM², Young Ho KIM¹, Cheong-Weon Cho¹,
Chang-Seon Myung¹, Seok Jin Kim³, Hyun So Cho³,
Min Ho Yoon⁴, and Jong Seong KANG^{1,★}**

¹College of Pharmacy, Chungnam National University

²Department of Food Science and Technology, Dong-Eui University

³MSC Annexed Food Technology Research Institute

⁴Department of Bio Environment Chemistry, Chungnam National University

★Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

The bioconversion by enzymes is recently interested to enhance bio-activities of herbal materials as resources of functional foods and herbal medicines. However, there is few analytical study of main compounds in bioactive materials processed with enzyme for the explanation. Therefore, this study aims to develop an analytical method to explain the enhanced bioactivity and to apply quality control of the bio-converted LM products. First, liquid-liquid extraction was applied to divide into water and ethyl acetate layer for better pattern analysis and minimize matrix effect. HPLC-DAD-ESI-MS analysis was performed on a HECTOR-M C₁₈ column (4.6 × 250 mm, 5 μm) consisted of mobile phase with 0.1 % aqueous formic acid (A) and 0.1% formic acid in acetonitrile (B). In results, new peaks were not observed after bio-conversion by HPLC-DAD-ESI-MS analysis. However, five peaks were increased by bio-converting in LM extracts and four peaks of them were identified as trans-caffeic acid, morin 3-O-β-D-glucopyranoside, moracin M 3'-O-β-glucopyranoside and astragalin, respectively. These peaks were suitable as good marker compound candidates to explain the enhanced bio-activities in the processed LM extract with enzyme. Also, the developed method will be useful for quality control and standardization of bioconversion product.

PT-023 [의약품/화장품]

HPLC-PDA-ESI-MS/MS identification and quantification of phenolic acids in enriched Isatidis Folium extract and assessment of its anti-wrinkle activity

**Gao Dan¹, Chong Woon Cho¹, Rustam Rustamov¹, Cheong Tae Kim²,
Won Seck Jeong², and Jong Seong Kang^{1,*}**

^{1,*}College of Pharmacy, Chungnam National University

²RNS Inc. Daejeon

*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

Currently, most of extracts extracted from natural products are being used as additives of cosmetic products for reducing symptom like facial aging and wrinkle disease. This study is to estimate the anti-wrinkle activity for the purified extract from Isatidis Folium for manufacturing a novel anti-wrinkle cream product and to develop the analytical method for quality control of the cream products. In results, it demonstrated that this purified the extract with the excellent anti-wrinkle activity by significantly inhibiting mRNA expression of MMP-1, MMP-3, and pro-inflammatory cytokines IL-1 β and up-regulating the mRNA expression of IL-4 and procollagen. Additionally, to implement effective quality control of the entire manufacturing process of anti-wrinkle cream products based on the purified extract of Isatidis Folium, the main chemical constituents in the purified extract of Isatidis Folium were evaluated by high-performance liquid chromatography-photodiode array-tandem mass spectrometry (HPLC-PDA-ESI-MS/MS), five constituents were observed as main compounds. Among them, 3,4,5-trimethoxycinnamic acid (TMCA) was selected as a marker compound of Isatidis Folium and the cream products. An HPLC-UV analytical method for effective quality control of anti-wrinkle cream products was developed, which was successfully validated well. The optimal conditions for extracting TMCA from the developed antiwrinkle cream products were determined using response surface methodology based on central composite design. The established HPLC method and optimized extraction condition will be useful for effective quality control of this novel anti-wrinkle cream product.

PT-024 [의약품/화장품]

HPLC-FLD method for analysis of N-acetylneuraminic acid in antler extracts using 1,2-diamino-4,5-methylenedioxybenzene precolumn derivatization

Duc Thanh CHU, Chong Woon CHO, and Jong Seong KANG*

College of Pharmacy, Chungnam National University

*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

N-acetylneuraminic acid (Neu5Ac), one of the most common species in sialic acid family, has been proved to possess the crucial bio-functions in tumor biology such as facilitating immune escape, enhancing tumor proliferation and metastasis, promoting tumor angiogenesis etc ... The velvet antler, used as an important traditional medicinal material for hundred years, mainly consists of minerals, proteins, polysaccharides, fatty acid and phospholipids, which can be related to the form of glycoconjugates such as glycoproteins, glycolipids and glycolipids. In the diverse set of compounds from antlers, the growing attention has been paid on the Neu5Ac. In this study, we have carried out the determination of Neu5Ac in water extract of antler samples based on its derivatization with 1,2-diamino-4,5-methylenedioxybenzene (DMB) using the HPLC fluorescence detection. The DMB reagent as a fluorophore has been used to make derivatization with Neu5Ac to yield a fluorescent adduct with excitation and emission wavelength of 373 nm and 448 nm, respectively. The high performance liquid chromatography parameters include gradient elution: solvent A (0.1 % formic acid) and solvent B (methanol containing 0.1 % formic acid) with program 0-10 min: 0-22 % solvent B, 20-30 min: 22-40 % solvent B; HECTOR C18 (5 μ m, 250 x 4.6 mm) column; flow rate 0.5 mL/min. The analytical method has been fully validated with parameters such as linearity range, precision, accuracy, limit of detection and limit of quantification. The Neu5Ac-DMB derivative adduct also has been characterized by HPLC-DAD-ESI-MS/MS.

Keywords: N-acetylneuraminic acid, DMB, HPLC, fluorescence pre-column derivatization, antlers

PT-025 [의약품/화장품]

**Profiling of chemically transformed ginsenosides by steaming conditions
of white ginseng based on UHPLC-Q/TOF-MS**

Seongchul Park¹, Wonwoong Lee², Jongki Hong^{1,*}

¹College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea

²College of Pharmacy, Woo Suk University, Wanju-gun 55338, Korea

When steaming with high temperature and pressure, triterpenoid saponin in ginseng are chemically transformed via deglycosylation and dehydration. The pharmacological and biological activities of monodesmoside saponins, containing only 1 or 2 glucose rings, are more potent than intact ginsenosides, containing over 3 glucose rings. In this study, to profile biological active saponins for white ginseng (WG), red ginseng (RG), and black ginseng (BG) according to variation of steaming conditions, UHPLC-Q/TOF-MS experimental conditions were optimized for separation and detection of various types of saponins. To maximize the contents of monodesmoside ginsenosides, steaming conditions were also carefully investigated according to temperature, time, and pressure. Approximately 47 ginsenosides in WG, RG, and BG were detected and tentatively identified using high resolution MS. Compared to WG and RG, intact triterpenoid ginsenosides were converted into new ginsenosides in BG due to various chemical transformation mechanisms during steaming process of ginseng. Established method will contribute to find the formation conditions of targeted ginsenosides (such as Rg3, Rg5, Rk1, Rh2, compound K, and F2) with potent biological activity and to control quality of processed ginseng products.

Keywords: triterpenoid ginsenoside; transformed ginsenoside; steaming process; chemical transformation; black ginseng; UHPLC-Q/TOF-MS

PT-026 [의약품/화장품]

Carvone-based green mixtures as novel, tunable, and hydrophobic bio-based solvents

Ke Li¹, Seulgi Kang¹, Yu Li Liu¹, Inseon Hwang¹, Jeongmi Lee^{1,*}

¹School of Pharmacy, Sungkyunkwan University, Suwon

*Corresponding authors: jlee0610@skku.edu

The use of petrochemical solvents still occupies the major portion in many chemical procedures despite their negative effects against environment and human health. Thus, green and sustainable solvents have been investigated as their substitutes. In this study, R-(-)-carvone was examined as a potential candidate for novel bio-based solvent and was mixed with various classes of natural compounds including carboxylic acids, terpenes and benzoate ester. The resulting mixtures were hydrophobic, and their solid-liquid equilibrium phase diagrams unveiled a wide liquid window for many mixtures. Computational and empirical investigation revealed that the carvone-based mixtures could have varying properties in terms of density and polarity, while they generally had low viscosity and reasonable biodegradability. These mixtures was applied to liquid-liquid partition of two hydrophilic and hydrophobic model dyes. They also showed different performances in the extraction of natural hydrophobic pigments from red algae (laver). The current study suggests the carvone-based mixtures as novel versatile green solvents that can be tuned to possess diverse properties.

Keywords: carvone; green solvents; tunable; liquid-liquid extraction.

PT-027 [의약품/화장품]

**Novel phyto-synthesis of metallic nanoparticles using
green tea-based plant extracts**

Yuli Liu¹, Seulgi Kang¹, Ke Li¹, Eun-Young Ahn², Youmie Park², Jeongmi Lee^{1,*}

¹School of Pharmacy, Sungkyunkwan University

²College of Pharmacy and Inje Institute of Pharmaceutical Sciences and Research, Inje University

*Corresponding author. E-mail: jlee0610@skku.edu; tel.: +82-31-290-7784; fax: +82-31-292-8800.

Phyto-synthesis methods are mainly used to synthesize metallic nanoparticles due to its merits such as no need to use high temperature, pressure, energy and toxic chemicals. Conventional methods often involve the plant extracts prepared using methanol and water. In this study, deep eutectic solvents (DESs) were employed to prepare various kinds of extracts of green tea leaves, which were subsequently used to synthesize silver nanoparticles (AgNPs) from silver salts at room temperature. DES-based extracts could synthesize AgNPs with higher efficiency, and the produced AgNPs were more stable after synthesis. Interestingly, several urea-based DESs could dramatically shorten the reaction time without compromising the synthesis efficiency and could synthesize stable AgNPs with small-size. Moreover, the size of synthesized AgNPs using these DESs did not change with the reaction time, while that of AgNPs synthesized using methanol and water increased significantly over time. Currently, detailed characterization of the prepared AgNPs and the mechanism of fast synthesis of stable AgNPs are under investigation.

Keywords: silver nanoparticles, deep eutectic solvents, extraction solvents.

PT-028 [의약품/화장품]

Non-targeted metabolomics investigation to unveil affected metabolic pathways and biomarkers of sex-specific depression using a sub-chronic variable stress model of mice

**Seulgi Kang¹, Woonhee Kim², Ke Li¹, Yu Li Liu¹, Inseon Hwang¹, Danbi Won¹,
Boyeon Bae¹, Yua Kang¹, Chi Hye Chung², Jeongmi Lee^{1,*}**

¹School of Pharmacy, Sungkyunkwan University

²Dept. of Biological Sciences, Konkuk University

*Corresponding author: jlee0610@skku.edu

Neuropsychiatric disorders such as depression are not yet fully understood for pathological mechanism and there are currently no specific methods to accurately test the severity. While depression affects both women and men, females are more prone to the incidence of depression. Despite the strong sex-associated differences, the majority of animal studies has been performed on male models. Here, we explored the sex-specific depression using a sub-chronic variable stress (SCVS) model of mice, which was observed to induce depression-like behavior in female. Non-targeted metabolomics approach was applied using liquid chromatography and gas chromatography both coupled to mass spectrometric detection, while analytical conditions including the extraction and derivatization conditions were optimized for plasma and whole brain. The resulting datasets were subjected to two well-known data preprocessing platforms, MarkerLynx™ and XCMS and applied to principal component analysis (PCA), followed by orthogonal partial least-squares discriminant analysis (OPLS-DA). The OPLS-DA score plots demonstrated that the female group of SCVS-treated mice were distinguishable from both female control mice and SCVS-treated male mice, having reasonable cumulative fitness (R^2X and R^2Y) and cumulative prediction power (Q^2). Differential metabolites were identified as biomarker candidates according to variable importance for projection (VIP) statistics (VIP value > 1.0), t-test ($p < 0.05$) and an area under the receiver operating characteristic curve (ROC). Currently, discovery of potential biomarkers and affected metabolic pathways and subsequent interpretation of the biological implications are under investigation.

PT-029 [의약품/화장품]

**In-vitro and in-vivo metabolism of the anabolic steroid
bolasterone by GC-MS/MS**

**Anca Raluca Muresan^{1,2}, Khandoker Asiqur Rahaman^{1,2},
Farzana Binte Rafique^{1,2}, and Oh-Seung Kwon^{1,2,*}**

¹Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea,

²Division of Bio-Medical Science & Technology, KIST School, Korea University of Science and
Technology, Seoul 02792, Korea

*Corresponding author: oskwon@kist.re.kr

Bolasterone (7 α ,17 α -dimethyltestosterone) is an anabolic steroid derived from testosterone with higher anabolic than androgenic properties and higher oral bioavailability. It started with the usage in veterinary medicine and it transitioned to human use as well, which is now banned in various sports disciplines. This study aims to investigate the metabolites of bolasterone (MW 316) through both *in-vitro* (rat liver microsomes) and *in-vivo* (urine after oral administration to rats) experiments using GC-MS/MS. A total of 12 metabolites were found as 3 mono-hydroxylated (m1-m3 as M⁺=548 and MW 333), 7 di-hydroxylated (m4-m10 as M⁺=636 and MW348), and 2 di-hydroxylated dehydrogenated metabolites (m11 and m12 as M⁺=634 and MW 346). Based on the characteristic ion fragments, their plausible structures were suggested for most of the resulted metabolites. The parent compound was the basis of structural elucidation that gave the specific ring ions. The ions at m/z 182, 196, and 224 are for the B ring, m/z 264 is for the C ring, and m/z 143 is for the D ring characteristic ion.

After the excretion profile, metabolites m5, m8, m9, followed by the metabolites m2 and m10, were detected for the longest time. These metabolites could be a potential screening target to control the abuse of bolasterone.

PT-030 [의약품/화장품]

The In-vitro metabolism of butizide by ultra high-performance liquid chromatography/ orbitrap mass spectrometer

**Farzana Binte Rafique^{1,2}, Anca Raluca Muresan^{1,2},
Khandoker Asiqur Rahaman^{1,2}, and Oh-Seung Kwon^{1,2,*}**

¹Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea,

²Division of Bio-Medical Science & Technology, KIST School, Korea University of Science and Technology, Seoul 02792, Korea

*Corresponding author: oskwon@kist.re.kr

Butizide is a diuretic compound from the thiazide group. It is found on the WADA list of prohibited substances as a result of athletes often use diuretics in and out of sports competitions due to their ability to mask the usage of performance-enhancing drugs. Diuretics can increase the volume of urine, and thus the concentration of other drugs can be reduced. The objective of this study is to investigate the metabolism of butizide (MW 353) through in vitro conditions (using rat liver microsomes). The identification of butizide and its metabolites was accomplished by using UHPLC-MS/MS. A full scan and dd-MS/MS modes in negative ionization and gradient elution mode were used to obtain detailed information on the metabolites. Based on butizide ($[M-H]^-$ at m/z 352, with retention time at 11.13 min) and their MS and MS/MS spectra, we have characterized 3 mono-hydroxylated metabolites with $[M-H]^+$ at m/z 368, MW 369 (M1a-M1c with retention times at 7.39, 7.63, and 8.05 min), and a dehydrogenated metabolite with $[M-H]^-$ at m/z 350, MW 351 (M2 with retention time at 10.14 min). Further in vitro phase II and in vivo studies should be conducted to get more insights into biotransformation pathways and find better biomarkers for anti-doping analysis.

PT-031 [의약품/화장품]

Characterization of *in-vitro* generated metabolites of Thymosin β 4 by LC-MS/MS with synthesized standards

**Khandoker Asiqur Rahaman^{1,2}, Anca Raluca Muresan^{1,2},
Farzana Binte Rafique^{1,2}, and Oh-Seung Kwon^{1,2,*}**

¹Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea,

²Division of Bio-Medical Science & Technology, KIST School, Korea University of Science and Technology, Seoul 02792, Korea.

*Corresponding author: oskwon@kist.re.kr

Thymosin β 4 is a highly active protein that exerts biological activities such as actin-binding, tissue repair, regeneration, anti-inflammation, and maturation in cells. Thymosin β 4 has also been listed in WADA prohibited drugs. Based on its biological activities, thymosin β 4 undoubtedly has a high potential to be abused by athletes.

The objective of this study is to identify metabolites of thymosin β 4 in 6 different enzyme-buffer systems of porcine carboxypeptidase (CPB), porcine leucine aminopeptidase N (LAP), Trypsin, recombinant human carboxypeptidase B (rhCPB1), recombinant human aminopeptidase (rhAPN), and recombinant human carboxypeptidase (rhCBM), and characterizing each m/z ion of the detected metabolite in-silico and by confirming its structure with the synthesized authentic standards. At first, thymosin β 4 was metabolized with an appropriate buffer system for 22 hours. The samples were collected and analyzed for metabolites by UHPLC-Q-Exactive Orbitrap MS. The metabolites were calculated by Mass prospector (<http://prospector.ucsf.edu/>). The standards for detected metabolites were ordered synthetically and metabolites are examined for similarities through respective TIC, MS and MS/MS.

In this study, we detected 13 new metabolites ($y_{13}, y_{8}, a_3-NH_3, y_{42}, C_{11}, C_{23}, y_{27}, y_{41}, y_{20}-NH_3, y_{24}, C_{14}, C_{15}, C_{17}$). From 13 detected metabolites, 7 metabolites were found in CPB, 8 in LAP, 5 in Trypsin, 5 in rhCPB1, 4 in rhAPN, and 2 in rhCBM. Moreover, more than one enzyme system shared many metabolites, but the abundance was different. We characterized all the detected metabolites according to respective m/z ion in-silico and matched them to the synthesized standards.

Our metabolites M1, M5, M7, M11, M12, M13 were confirmed to their synthesized authentic standards, respectively. Further studies on biological activities and screening of these novel metabolites are going on in-vivo model for developing potential biomarkers in doping.

PT-032 [의약품/화장품]

Capillary electrophoresis/nano-electrospray-mass spectrometry를 이용한 의약품 내의 N-nitrosodimethylamine의 분석

Joon Yub Kwon, Roman Řemínek¹, František Foret¹, Doo Soo Chung^{2,*}

¹Institute of Analytical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, v. v. i., Brno, Czech Republic

²서울대학교 자연과학대학 화학부

*Corresponding author: dschung@snu.ac.kr

N-nitrosodimethylamine (NDMA)는 간독성이 있는 물질로 고혈압 치료제로 널리 사용하는 발사르탄(valsartan)을 포함하여 여러 원료 의약품에서 최근 수년 동안 지속적으로 발견되는 불순물이다. 의약품 내의 NDMA의 검출하기 위해서는 낮은 검출 한계치를 가진 분석 방법이 필요하다. Capillary electrophoresis/nanoelectrospray ionization-mass spectrometry (CE/nanoESI-MS)는 기존의 CE/MS에 필요한 sheath liquid나 nebulizing gas를 사용하지 않고, 사포로 날카롭게 연마한 모세관을 질량분석기 입구에 최대한 가까이 배치하여 160 nL/min의 유속으로 완충 용액과 시료를 ESI로 분사하고, 잃어버리는 시료의 양을 줄여 검출 감도를 크게 향상시킨다. 시료 주입 후 CE/nanoESI-MS로 5분 만에 발사르탄과 NDMA를 분리할 수 있었고, 2~500 ng/mL까지 정량 분석이 가능했다. 이는 기존의 GC/MS, LC/MS에 비교할 만한 검출 결과이며, 모세관만으로도 소량의 시료로 분석이 가능하여 경제적이다. 이번 발표에서는 NanoESI의 제작 과정과 NDMA의 분석 결과에 대한 내용을 소개한다.

참고문헌

1. Roman Řemínek, František Foret, and Doo Soo Chung, "Application of capillary electrophoresis-nanoelectrospray ionization-mass spectrometry for the determination of N-nitrosodimethylamine in pharmaceuticals," *Electrophoresis* **42**, 334 (2021).
2. Anna Tycova, Jan Prikryl, and František Foret, "Reproducible preparation of nanospray tips for capillary electrophoresis coupled to mass spectrometry using a 3D printed grinding device," *Electrophoresis*, **37**, 924 (2016).

PT-033 [의약품/화장품]

**Comparison of meta-analysis of untargeted metabolomics
using public metabolome database**

Young Cheol Yoon¹, Hoang Anh Nguyen¹, Phuoc Long Nguyen¹, Sung Won Kwon^{1,*}

¹서울대학교 약학과

*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

In clinical and molecular biology, large scale data is the first-line tool, but only few studies tried meta-analysis in metabolomics. Batch effects, different data structure, and identification of metabolites were main obstacle of meta-analysis, but the development of various tools made overcoming problems. This study selected untargeted metabolomics studies of hepatocellular carcinoma and liver cirrhosis from public database, 'MetaboLights'. MTBLS17 and MTBLS19, which contain LC-MS analyses were used for meta-analysis of untargeted metabolomics. MTBLS105 which contains targeted GC-MS analysis supported meta-analysis. 1) Manual integration, 2) metaXCMS integration, and 3) Multimodal XCMS were conducted and compared. All of meta-analyses found primary bile acid pathway changes, but only meta-analysis integrated by metaXCMS revealed BCAA degradation changes and lipid perturbations. Multimodal XCMS is very fast and convenient, but the results left a lot to be desired. Meta-analysis integrated by metaXCMS showed the best performance, and was revealed suggest rational metabolic pathway changes.

PT-034 [의약품/화장품]

An untargeted metabolomic approach of TAZ downregulated Leydig cell

Young Cheol Yoon¹, Eun Goo Lee¹, Hoang Anh Nguyen¹, Sung Won Kwon^{1,*}

¹서울대학교 약학과

*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

TAZ is known as downstream regulator in Hippo pathway and promoting cell proliferation. Metabolomic approach of TAZ in Leydig cell has not yet been achieved whereas TAZ and Hippo pathway has been studied in stem cell. This study tried to discover the metabolic alteration and pathway changes of TAZ downregulated Leydig cell. Extracted cell was analyzed using UPLC-QTOFMS and the results were processed by XCMS online. We found metabolic pathway perturbations through Mummichog, which is well-known untargeted metabolomic pathways analysis tool. Total 17 pathway changes were predicted, most of amino acid pathways and aminoacyl-tRNA biosynthesis was included. In addition, negative ion result suggested change of glycosphingolipid biosynthesis, additional lipidomics analysis will be required. In conclusion, this study found metabolic pathway perturbations through untargeted metabolomic analysis and give insight of relationship between metabolome and physiological changes.

PT-035 [의약품/화장품]

**Omics Study in Reprogrammed Metabolism of Breast Cancer
Using Spheroid-induced EMT Model**

Young Cheol Yoon¹, Nguyen Hoang Anh¹, Sun Jo Kim¹, Sung Won Kwon^{1,*}

¹서울대학교 약학과

*Corresponding author: 권성원 (swkwon@snu.ac.kr)

When tumor cell grows, it goes through reprogrammed metabolism and understanding this process is essential in tumor treatment. Especially the dysfunction of cancer lipidome during malignant transformation of breast cancer is needed to be explored.

In our research, we applied multi-layered lipidomics and transcriptomics in breast cancer progression. In this, spheroid-induced epithelial-mesenchymal transition (EMT) model was applied. Noticeable alterations were found in lipidome at the mesenchymal state. Lipids such as ceramide, sphingomyelin, ether-linked phosphatidylcholines, and ether-linked phosphatidylethanolamine were extremely different. With the transcriptomic analysis, we found that in spheroid cells, reduced level of polyunsaturated fatty acids composition was related to gene expression patterns of lipid regulators such as up-regulated SCD, ACOX3, and FADS1 and the down-regulated PTPLB, and ELOVL2.

Here, we suggest the possibility of ELOVL2 as a prognostic biomarker in breast cancer. The ratio of C22:6n3 (docosahexaenoic acid, DHA) to C22:5n3 was significantly reduced in spheroid cells along with the down-regulation of ELOVL2. Furthermore, the inhibition of ELOVL2 was related to metastatic features in breast cancer cells through SREBPs axis.

PT-036 [의약품/화장품]

Potential clinical health benefit of ginger: A comprehensive systematic review of randomized control trial

Nguyen Hoang Anh¹, Sun Jo Kim¹, Cheol Woon Jung¹, Sung Won Kwon^{1,*}

¹College of Pharmacy, Seoul National University, Seoul 08826, Republic of Korea

*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

Ginger (*Zingiber officinale* Roscoe) is one of the long-term history herbal plants. Ginger can be variously served as food, spice, and natural medicine in many different ways. Also, a variety of benefits of ginger made it be the most investigated herbal. Recently, ginger's role in human health has been increasing the number of studies, particularly clinical studies. Thus, we conducted a comprehensive systematic review to summarize the biological properties of ginger, focusing on randomized controlled trials (RCTs) studies. Four databases were searched for comprehensive data collection. Next, gathered data was screened and relevant data were extracted. Finally, one-hundred nine RCTs were collected after carefully screening by at least two independent authors. Consequently, characteristics of each study and key findings were extracted and evaluated on the quality assessment. The result showed that common health functions are related to six main sections including antiemetic function, metabolic improvement, analgesic function, anti-inflammatory function, gastrointestinal function, and others. Among these, these health benefits that were strongly and consistently reported in ginger were related to the improvement of nausea and vomiting in pregnancy, metabolic syndromes supported, and digestive function with the highest number of evidence supported these effects. This research was supported by the Rural Development Administration of Korea (PJ01420102).

Keyword: Ginger; Systematic review; Randomized controlled trial; Human health

PT-037 [의약품/화장품]

Ginseng polysaccharide characterization and evaluation of antioxidant effect in *Caenorhabditis Elegans*

Nguyen Hoang Anh¹, Young Cheol Yoon¹, and Sung Won Kwon^{1,*}

¹College of Pharmacy, Seoul National University, Seoul 08826, Republic of Korea

*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

Oxidative stress accumulation has a negative effect on metabolic homeostasis. Recently, the antioxidant effects were reported in various compounds derived from natural plants. Ginseng is one of the herbal owing a variety of beneficial effects from its biological components, including polysaccharides. In this study, we separated and isolated the white ginseng neutral polysaccharide (WGNP) and white ginseng acidic polysaccharide (WGAP) of Panax Ginseng C. A. Meyer using anion-exchange chromatography (IEC), and the chemical composition was examined and the antioxidant effect was subsequently assessed. Furthermore, an in vivo study using *Caenorhabditis Elegans* (*C. elegans*) was employed to evaluate the anti-radical, antioxidant, and hydrogen peroxide scavenging activities. After purification, chemical properties of WGNP and WGAP were evaluated using high-performance gel permeation chromatography, Fourier-transform infrared spectroscopy, and high-performance liquid chromatography with an ultra-violet detector. The in vitro revealed that WGAP contained higher uronic acid content and higher molecular weight compared to WGNP. In addition, WGAP also showed a more potent antioxidant effect that were subsequently validated by in vitro model. In conclusion, our study suggested that WGAP has a higher antioxidant effect than WGNP and can play a potential antioxidant compound.

Keyword: Antioxidant, *Caenorhabditis elegans*, ginseng polysaccharide, in vitro

PT-038 [의약품/화장품]

Geographical origin discrimination signatures investigation of white rice: An LC-MS approach

Nguyen Hoang Anh¹, Sun Jo Kim¹, Young Cheol Yoon¹, Sung Won Kwon^{1*}

¹College of Pharmacy, Seoul National University, Seoul 08826, Republic of Korea

*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

White rice (*Oryza sativa* L.) is the main food material worldwide. White rice originated from different geographical sources will contain different nutrition components. This study aims to explore the markers to discriminate. In this study, we analyzed 80 commercial white rice samples collected from various domestic markets around Korea and China. Samples were extracted and analyzed with LC-MS and GC-MS. Multivariate statistical analyses were employed to discover the geographical specific signature of white rice. As a result, sugar, sugar alcohol, and fatty acids were recorded as potential discriminating markers by a significant difference in GC-MS analysis. More importantly, LC-MS result suggested that phospholipids are the different potential signatures. To demonstrate the discriminatory ability, principal component analysis and k-means clustering showed the possibility of geographical classification of white rice between Korea and China by fatty acids and phospholipids. Partial least squares-discriminatory analysis showed a strong classification performance with a high Goodness-of-fit (R²) of 0.902, goodness-of-prediction (Q²) of 0.870, and permutation test p-values of 0.001. Furthermore, a Random Forests prediction model has further consolidated the ability to discriminate geographical origin. Besides, a validation set including 20 independently collected samples consistently confirmed the validity of the selected discrimination markers. In conclusion, phospholipids showed an outstanding performance in geographical discrimination ability in separating commercial white rice between Korea and China.

Keywords: *Oryza sativa* L.; Geographical marker; Metabolomics; Phospholipid; Multivariate analysis

PT-039 [의약품/화장품]

**Alteration of metabolism and phenotype in *Caenorhabditis elegans*
induced by perfluorinated compounds**

윤지현¹, 김형민¹, 윤상준¹, Nguyen Hoang Anh¹, 김선조¹, 권성원¹*

¹서울대학교 약학대학

*Corresponding author: 권성원 (swkwon@snu.ac.kr)

Perfluorinated compounds (PFCs) is considered to cause environmental problems because their remarkable stability retains its degradation, leading to bioaccumulation in rivers, lakes, oceans, and soil. When exposed, the toxic compound can negatively impact reproduction, behavior, and morphology in living organisms.

Of many components, perfluorooctane sulfonate (PFOS) and perfluorooctanoate (PFOA) are considered the major ones in PFCs. In this study, the toxic effects of PFOS and PFOA were measured in *Caenorhabditis elegans* (*C. elegans*) model. Lethality assay was applied and uptake amount of PFCs was measured in *C. elegans*. Along with reproduction assay and reactive oxygen species (ROS) assay, metabolomics and lipidomics were applied. Also, amino acids including phenylalanine, tyrosine, and tryptophan, were largely affected. In our mass spectrometry-based lipid profiling approach we found that the exposure alters various species that belong to glycerophospholipids and triacylglycerol. The result of lipidome was distinctively different in PFOS and PFOA treated *C. elegans*. Also, ROS assay revealed increased level of internal ROS in PFOS (1.5 fold, p -value = 0.0067) and PFOA (1.46 fold, p -value = 0.0253) groups. Decrease in reproduction was shown in PFOS (0.53 fold, p -value b 0.0001) and PFOA (0.69 fold, p -value = 0.0003). Our study propose that exposure of PFCs in *C. elegans* leads to perturbation of various phenotypes along with principal amino acids and lipid metabolism.

PT-040 [의약품/화장품]

**Metabolite profiling of Blood Transfusion group
through LC-Q-TOF and GC-MS**

윤지현¹, 이은구¹, 권성원^{1,*}

¹서울대학교 약학대학

*Corresponding author: 권성원 (swkwon@snu.ac.kr)

Blood transfusion is carried out in surgical situation for patients who need large volume of blood. Supplying blood can temporarily alleviate the emergent situation. However it has side effects such as allergic reaction, coagulopathy, infections or even cancer recurrence.

Our study is set to study the difference between autologous and allogenic blood transfusions (ABT). Rat model was considered to find the interplay between blood transfusions and homeostasis. Liquid chromatography-quadrupole time-of-flight mass spectrometry (LC-Q-TOF) and gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) was used to find significant alterations between autologous and allogenic blood transfusions.

We conducted metabolite profiling and went through multivariate statistical analysis, heat map visualization metabolic pathway analysis and sandwich enzyme-linked immunosorbent assay. There was micro-environment change in ABT group, one of which was related to high expression of GLUT1/GLUT4. Also IL-6 and IRS1, which is related to glucose metabolism showed difference between two groups. Reduction in LysoPC and PLA2 was observed, suggesting the possibility of glucose homeostasis being affected.

PT-041 [의약품/화장품]

Triclosan induces metabolomics alteration and reveals cellular toxicity in *Caenorhabditis elegans*

김석원¹, 김형민¹, Nguyen Phuoc Long¹, 윤상준¹, Huy Truong Nguyen¹, 권성원^{1,*}

^{1,*}서울대학교 약학과

*Corresponding author: 권성원 (swkwon@snu.ac.kr)

Triclosan (TCS) is an antibacterial and antifungal component that is commonly contained in daily products such as soaps, toothpaste, and toys. Due to the multiple-use purposes it has recently become one of the major contaminants of the environment. As a result, it raised a concern regarding the human health effect. This study aimed to investigate the toxicity of TCS to *Caenorhabditis elegans* induced metabolomics alteration. Additionally, phenotype assays including the lifespan, locomotion, and reproduction were assessed to provide a comprehensive evaluation of toxic effects. After exposure with TCS at 1 mg/L concentration, *C. elegans* average lifespan was decreased in approximately 3 days. Besides, reproduction and locomotion assay were also affected by TCS exposure. Notably, we recorded that exposure to TCS leading the number of progenies, head thrashes, and body bends decreased to 45.15 ± 11.63 , 39.60 ± 5.90 , and 9.20 ± 1.56 , respectively. Also, oxidative stress effect was observed and additionally confirmed by using DAF-16:GFP strain and H₂DCF-DA-based ROS assay. Finally, a metabolomics evaluation revealed that carbohydrates and amino acids related to energy production were mainly affected by TCS exposure. Finally, levels of tyrosine, serine, and polyamines were significantly altered. In conclusion, our study suggests that TCS induces toxic effects by various mechanisms, particularly amino acids related compounds, and strongly influence *C. elegans* in various phenotypes.

Keywords: Triclosan, metabolomics, oxidative stress, *C. elegans*, Toxicity

PT-042 [의약품/화장품]

Assessment of toxic effects of nanopolystyrene in *Caenorhabditis elegans* through phenotype monitoring and metabolomic approach

김석원¹, 김형민¹, 이동규¹, Nguyen Phuoc Long¹, 권성원^{1,*}

^{1,*}서울대학교 약학과

*Corresponding author: 권성원 (swkwon@snu.ac.kr)

Abundant use of plastics in earth has been a big issue regarding protection of human environment for a while. Polystyrene is one of the most widely used plastic materials due to its low price and wide range of use. From industrial usages including protective packaging to household goods, for instance, disposable spoons or containers, polystyrene is being massively consumed by people from day to day. Thus, we aimed to study nanopolystyrene particles' toxic effects to *Caenorhabditis elegans*, to which most of the people in these days also possibly and vastly be exposed. Nanopolystyrene particles with different sizes were exposed to *C. elegans* for 24 h. At the same time, monitoring of their uptake of the particles using confocal microscopy had been conducted to observe their locomotion and to measure reproductive change and the oxidative stress they received. Moreover, metabolomics study was also conducted to elucidate the effect of nanopolystyrene particles to *C. elegans*. As a result, *C. elegans*' locomotion and reproduction reduced and damages caused by oxidative stress had been detected. Plus, exposure to nanopolystyrene particles altered metabolites regarding energy metabolism of *C. elegans* including glucose and lactic acid. These results provide new aspects of toxic effects of nanopolystyrene particles by providing not only observational results but also metabolomic sketch.

PT-043 [식품/농학]

농업분야 온실가스 저감 효과 판정을 위한 신개념 평가 방법

강남구^{1,2,*}, 정인일¹, 주옥정³

¹한국표준과학연구원(KRISS) 첨단측정장비연구소 장비인프라팀,

²과학기술연합대학원대학교(UST) 측정과학전공, ³경기도농업기술원 환경농업연구과

*Corresponding author: nkang@kriss.re.kr

우리나라 정부는 탄소 중립을 전략적 목표로 정하고 실질적인 탄소 중립 방안을 고심하고 있다. 농업분야 온실가스 배출량의 감축 수단에 의한 저감 효과를 정량적으로 평가하기 위한 기존 방법은 국내외 문헌에서 찾기도 어려울 뿐만 아니라, 기껏해야 분산분석 방법(ANOVA method)에 의존하고 있는 실정이다. ANOVA method는 실험구들과 대조구의 비교를 위해 반복성과 재현성을 모두 고려한 전체 데이터를 사용하기는 현실적으로 불가능하다는 한계를 가지고 있다. 왜냐하면 반복성과 재현성이 혼합된 경우 평균으로 축약된 2차 자료를 활용하여 평균의 신뢰구간을 추정하기 때문이다. 본 연구에서는 이러한 근본적인 문제를 해결하기 위해 반복성과 재현성을 모두 고려한 1차 자료를 활용하여 각 처리구의 평균의 신뢰구간을 추정하는 신개념 평가 방법(Kang's method)을 개발하였다. 물론, 두 방법의 공통점은 평균값의 분포는 정규분포를 따른다는 중심극한정리에 기초하고 있다. 본 연구에서는 영농 현장 적용 사례로서 최신 영농기술로 제안된 요소분해효소 억제제를 함유한 질소 비료를 고추밭을 대상으로 아산화질소 배출 저감 효과의 유의성을 평가하였다. 평가 결과 ANOVA method를 적용한 경우 아산화질소 저감 효과가 유의하지 않은 반면, Kang's method를 적용한 경우 저감 효과가 유의한 것으로 판명되었다. 이 결과는 Kang's method가 기존의 ANOVA method보다 판정 능력이 우위에 있음을 시사한다. [본 연구는 농촌진흥청 연구사업(세부과제번호: PJ014853042021)의 지원으로 수행되었음을 알려드립니다.]

PT-044 [식품/농학]

Headspace GC-MS analysis of volatile compounds in black garlic with different heat treatments

장한별¹⁾, 김정권^{1,*}

¹충남대학교 화학과

¹⁾esther138764@gmail.com

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Black garlic is generally prepared by fermenting fresh garlic (*Allium sativum L.*) under controlled high temperature and high humidity. In this study, the volatile compounds in black garlic samples were investigated using headspace GC-MS. The black garlic samples were prepared using three different processing methods: fermentation using oven, autoclaving using autoclave, and high temperature aging using cooker. When the black garlic samples were compared with fresh garlic sample, generally different volatile compounds were identified. Organosulfur compounds such as allyl methyl sulfide, dimethyl disulfide, and dimethyl trisulfide were commonly observed in all garlic samples. However, the intensity of the organosulfur compounds generally decreased with heat treatment. In addition, significant changes in the profiles of volatile compounds were observed with different heat treatment. Principal component analysis for the volatile compounds can successfully distinguish the types of processed garlic samples.

PT-045 [식품/농학]

**Characterization of TiO₂ and SiO₂ nanoparticles in food
using field-flow fractionation(FFF)**

Wang Da¹, Meiyu Zhang¹, Jae-Min Oh², Jaeyeong Choi¹ and Seungho Lee^{1,*}

¹Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

²Department of Energy Materials Engineering, Dongguk University, Republic and of Korea

Titanium dioxide (TiO₂) and silicadioxide(SiO₂) nanoparticles are widely used as food additives to maintain or enhance the texture, flavor, color, consistency, quality, and nutrient bioavailability of food products.

Studies have revealed that food-relevant nanoparticles may be harmful to the human body. Development of effective methods for quantification and characterization is thus needed. Filed-flow fractionation (FFF) is one of the effective techniques for separation and characterization of nano to microparticles.

In this study, we have investigated the feasibility of the asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) and sedimentation field-flow fractionation (SdFFF) for separation, quantification and characterization of TiO₂ and SiO₂ in food that contains sucrose and casein.

Results showed that application of AsFIFFF is rather limited in quantitative analysis of TiO₂ in sucrose due to the interaction between the particles and the membrane (accumulation wall of AsFIFFF). SdFFF showed good calibration with the R^2 value of 0.996. Increasing concentration of sucrose resulted in increased interactions among the TiO₂ particles, leading to aggregation. In analysis of SiO₂ in casein, SdFFF showed poor resolution between the SiO₂ particles and casein. AsFIFFF provided better separation between casein and SiO₂ particles, where the calibration curve for quantification of SiO₂ particles showed the R^2 value of 0.989.

It seems FFF can be a powerful tool for quantification and characterization of nanoparticles in food with proper selection of FFF sub-technique.

PT-046 [식품/농학]

**Study on analytical method of trace elements in care
food using ICP-OES and AAS**

Yuri Lee¹, suhyun Kim¹, sunghwa Choi¹, Jaejong Jin¹, kyungsu Park¹*

¹Advanced Analysis Center, Korea Institute of Science and Technology,

*Corresponding author: pk6475@kist.re.kr

The aging population caused by the rapid entry of the super-aged society is also having a great effect on the food industry. The care Food market, a food rich in nutrients for the elderly and patients who need customized meals, was formed around facilities such as hospitals and nursing homes. In recent, due to the recent spread of Corona 19 and the expansion of the HMR market, general demand is also increasing. Nutritional Formula, which is used as a nutritional diet for patients and adults, is composed of milk, soy, rice, whey, hydrolyzed protein, starch, and amino acids in liquid form. It contains trace elements such as Ca, Fe, Mg, P, K, Na and Zn. Since the above elements are difficult to analyze by ICP-MS due to severe mass interference and are contained in high concentration (2,600 mg/kg), validation was performed using ICP-OES and AAS.

In this study, high and low concentrations were spiked with seven elements calibration standard solution in order to validate the analysis method of elements in the sample (nutritional diet). And repeated experiments were conducted to confirm the accuracy and precision. As a result of analysis by AAS, the precision (recovery) and accuracy of sodium and potassium were 87-109% and 1.0-2.7%, respectively, and the precision of iron and zinc was 82-107%, and the accuracy was in the range of 0.6-2.7%. And the precision and accuracy of magnesium, phosphorus, and calcium verified by ICP-OES were 92-104% and 1.2-1.9%, respectively. These results were all within 90-110% and 5% of AOAC standards.

PT-047 [식품/농학]

Simultaneous determination of veterinary drugs conditionally allowed for residual in livestock and fishery products by liquid chromatography-tandem mass spectrometry

박소정, 박서연, 한상범*

중앙대학교 약학과

*Corresponding author: hansb@cau.ac.kr

The 29 species of veterinary drugs exempted conditionally from the maximum residual limit (MRL) have potential of residual due to abuse. So it must be managed strictly. We developed a simultaneous analysis method using liquid chromatography-tandem mass spectrometry for 18 substances, including of 12 substances conditionally exempted from MRL and 6 substances that haven't set MRL in Korea. In this study, we applied salting-out assisted liquid-liquid extraction (SALLE) to minimize the loss of target compounds and to gain the highest recovery in sample preparation. Also, the extract was conducted cleanup to eliminate a lot of matrix interferences by dispersive solid-phase extraction (dSPE) using C18 and magnesium sulfate from biological samples (pork, beef, chicken, flatfish, eel, shrimp, milk and egg). The method validation parameter were selectivity, linearity, recovery, accuracy, precision and quantitative of limits (LOQ). As a result, all compounds are satisfied with CODEX guidelines (CAC/GL-71-2009) in all matrixes. The developed method is expected to contribute to the strengthening of safety management of veterinary drugs. This research was supported by a grant (20162수산물622) from Ministry of Food and Drug Safety in 2020.

Keywords : Veterinary drug; LC-MS/MS; SALLE; dSPE; MRL

PT-048 [식품/농학]

Interaction Between Human Sweet Taste Receptor and Sweet-Tasting Protein by Single Molecular Pull-down Assay

**Si-Wook Jang, Sung-Jun Lee, Gi-Hyeon Chae, Hyun-A Kim,
Na-Hee Jung, Kwang-Hoon Kong***

장시욱, 이성준, 채기현, 김현아, 정나희, 공광훈*

Laboratory of Biomolecular Chemistry, Department of Chemistry, Chung-Ang University
중앙대학교 화학과

*Corresponding author: khkong@cau.ac.kr

Sweetness is the taste of sugar and is known to be preferred by most animals. However, excessive sugar intake can cause number of adult diseases such as diabetes, hypertension, and obesity which are a big issue in modern society. Therefore, there is an increasing need for sugar substitutes to replace sugar. So, we want to study sweet tasting proteins that taste sweet even though they are proteins, not sugar. For this, a study on the mechanism for sweetness perception is essential.

To understand the mechanism of sweet taste perception, structural and kinetic analysis of sweet-tasting proteins and sweet receptor interactions is important. However, to date, the accumulation of sweet taste receptor subunits still presents serious obstacles to both structural and kinetic analysis, so there is also no way to investigate the kinetics of the interaction.

Here we can obtain a heterodimeric human sweet taste receptor in the mammalian expression system using HEK293A and employing SiMPull assay to evaluate the sweetness modalities. From our data, SiMPull assay was assessed for an alternative method of sweetness character evaluation. Brazzein, a sweet-tasting protein, which exhibits high intensity in sweetness and has a unique character in taste; late onset and sweetness lingering, was assessed in the assay.

With a series of antibodies, along with direct conjugation of Cy5 to brazzein, it is possible to obtain signals of sweet taste receptor and brazzein interactions. With further optimization, there is a high probability that precise kinetic measurement can be made with the SiMPull assay.

Our attempts to address the problems, currently being experienced by sweetness perception studies show potential. With further optimization, both obtaining a sufficient amount of sweet taste receptor and evaluating the accurate interaction kinetics can soon be achieved. We believed that the method suggested in this study, further research to unveil the mechanism of sweet taste perception will be accelerated.

PT-049 [식품/농학]

**Isotope Dilution Liquid chromatography Tandem mass spectrometry
Analysis for Vitamin B12 in Infant formula**

Hyeonwoo Yu^{1,2}, Kiwan choi^{1,*}, Byungjoo Kim^{1,2,*}

¹Organic Metrology Group, Division of Chemical and Medical Metrology, Korean Research
of standards and Science, Daejeon, 34113, South Korea

²Department of Bio-Analytical Science, University of Science and Technology,
Daejeon, 34113, South Korea.

*Corresponding author: kubara333@naver.com

We report the development of a method based on isotope dilution-liquid chromatography-tandem mass spectrometry (ID-LC-MS/MS) for determination of vitamin B12 (cobalamin) in infant formula. Vitamin B12-[¹³C₇] isotopically analogue was applied as internal standard. The sample preparation procedure involved extraction with 0.01M phosphate buffer (pH 7.0) in the presence of potassium cyanide. The amounts of cyanide and enzyme were optimized to improve extraction recovery. Sample purification was performed using immuno-affinity column before injecting to LC-MS. We also optimized the gradient elution and successfully separated four major peaks of methylcobalamin (Me-Cbl), hydroxocobalamin (OH-Cbl), adenosylcobalamin (Ado-Cbl), cyanocobalamin (CN-Cbl) of various forms of vitamin B12 along with matrix interferences nearby CN-Cbl peak with Acquity HSS T3 C18 column. MS was operated with the positive electrospray ionization and the LC-MS/MS measurement parameters were optimized to achieve improved ionization efficiency. The clean-up was confirmed by T-test and developed method was validated by recovery test. The method showed that the recovery of spiked Vitamin B12 with 102 % and reproducibility was less than < 1 %. The vitamin B12 content in infant formula was at the level of 40 µg/kg and expanded uncertainty was less than 3 %.

PT-050 [식품/농학]

LC-MS/MS를 이용한 참다래에서 Oxytetracycline 분석법 정립

강성훈, 김혜영, 이현선, 박미정, 조지미*, 전향량, 강희채

국립농산물품질관리원 전남지원

*Corresponding author: food1995@korea.kr

옥시테트라사이클린(Oxytetracycline)은 참다래, 배추, 복숭아, 오이 등의 농산물에 사용하는 침투 이행성 살균제로써 무름병, 세균병, 궤양병 등의 방제를 위해 경엽 처리 방식으로 사용된다. 전남지역 참다래는 주로 zero-tolerance가 적용되는 대만과 PLS(Positive List System)제도를 실시하는 일본으로 수출되어 정확하고 낮은 수준의 검출한계와 정량한계가 요구된다. 이에 따라 본 연구는 우리나라 참다래에 사용되는 Oxytetracycline 농약의 LC-MS/MS 분석법을 정립하여 국내 및 수출 농산물의 안전 관리를 강화하고자 수행되었다.

시료는 1% 포름산이 함유된 메탄올로 추출하였고, 0.1% 포름산이 함유된 아세토니트릴과 0.1% 포름산이 함유된 수용액을 사용한 이동상으로 대상 성분을 분리하여 LC-MS/MS로 기기분석 하였다. 분석을 위한 검출한계는 0.47 µg/kg 수준이었고 분석 정량한계는 1.42 µg/kg으로 나타났으며, 분석 대상 성분의 직선성은 (1-100) µg/kg 범위에서 $R^2 > 0.999$ 이었다. 분석 회수율은 저농도(10 µg/kg)에서는 89.9%, 고농도(100 µg/kg)에서는 95.8%의 수준이었다. 상대표준편차는 1.8% 이하로 20% 이내의 기준을 만족하였다. 본 연구를 통해 LC-MS/MS를 이용한 Oxytetracycline 분석법이 우리나라 참다래 농약 분석에 효과적으로 적용되어 국내 및 수출농산물의 안전관리가 한층 더 강화될 것으로 기대된다.

PT-051 [식품/농학]

질량분석기를 이용한 벼 작물체 중 22종 농약의 동시다성분 분석법 정립

김혜영, 강성훈, 이현선, 박미정, 조지미*, 전향량, 강희채

국립농산물품질관리원 전남지원

*Corresponding author: food1995@korea.kr

최근 국가의 인증을 받아 신뢰할 수 있고 안전한 농산물이라는 인식을 바탕으로 친환경 인증 농산물에 대한 관심이 높아지고 있다. 우리나라의 친환경 인증 농산물 중 가장 많은 면적을 차지하는 품목은 우리의 주식으로 이용되고 있는 벼이다.

본 연구에서는 벼에 사용되는 농약 중 기존의 분석성분 이외에 판매량이 높은 22종 농약을 추가로 선정하여 생산과정 중 농약 살포 여부를 조사하는 등 친환경 인증 농산물을 엄격하게 관리하고자 수행되었다.

시료의 추출 방법은 QuEChERS법을 이용하였고 LC-MS/MS와 GC-MS/MS로 기기분석 하였다. 분석을 위한 검출 한계는 (0.5-3.3) $\mu\text{g}/\text{kg}$ 수준이었고 분석 정량한계는 (1.4-9.8) $\mu\text{g}/\text{kg}$ 범위로 나타났으며 분석 대상 성분의 직선성은 (1-150) $\mu\text{g}/\text{kg}$ 범위에서 $R^2 > 0.99$ 이었다. 분석회수율은 저농도(10 $\mu\text{g}/\text{kg}$)에서는 (70.2-108.6)%, 중농도(50 $\mu\text{g}/\text{kg}$)에서는 (70.1-104.4)% 고농도(100 $\mu\text{g}/\text{kg}$)에서는 (71.0-103.9)% 수준이었다. 상대표준편차는 15.0% 이하로 20% 이내의 기준을 만족하였다. 본 연구를 통해 QuEChERS 전처리와 LC-MS/MS, GC-MS/MS를 이용한 22종 농약의 동시다성분 분석이 가능함을 확인하여 친환경 인증 농산물 사후관리에 효과적으로 이용할 수 있을 것으로 기대된다.

PT-052 [식품/농학]

Development of method to discriminate the geographical origin of boston butt (pork) using ICP-MS with multivariate data analysis

**Suel hye Hur, Jeong-A Choi, Eun-Hee Chang, Dong-jin Kang,
Jae-Min An, Seong Hun Lee***

Experiment Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service (NAQS)

*Corresponding author: starlee65@korea.kr

Pork is the most consumed meat by the Korean people is imported from various countries around the world. And quantity is increasing every year. Despite the continued crackdown, violations of labelling of origin have not been reduced. Currently in Korea pork varieties produce by cross-breeding Yorkshire, Landrace and Duroc which is identical to the imported pork in variety. So it is impossible to identify their origin by genetic analysis. In this study, 100 samples of boston butt were collected from Korea, U.S., Canada, Belgium, Chile, Germany, etc. The samples were analyzed using inductive coupled plasma mass spectrometer (ICP-MS). The 51 inorganic elements' contents were different between Korean and foreign. This result showed that the method can be used to discriminate geographical origin between Korean and foreign in Korea.

PT-053 [식품/농학]

**Statistical processing technology for advanced determination
of the geographical origin in pork belly**

**Jae-Min An, Dong-Jin Kang, Ji-Hye Lee, Jeong-A Choi, Yong-Sik Youn,
Da-Hye Jin, Sung-Hee Lee and Seong-Hun Lee***

Experiment Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service (NAQS)

*Corresponding author: starlee65@korea.kr

Recently, livestock products are being imported indiscriminately from various countries. The cases of false labeling of geographical origin have been increasing due to price differences between domestic and foreign livestock products. Discrimination of the livestock geographical origin of products is very important, because contamination of heavy metal and undesirable antibiotics has been found in the imported products. This study was carried out to improve the accuracy of the discrimination of the geographical origin in pork belly, it used optimal statistical techniques for 6 models using inorganic and organic ingredient data over the past 4 years. A total of 2,756 data were used for statistical analysis; inorganic component 2,031 data (domestic 978, foreign 1,053) and organic component 725 data (domestic 367, foreign 358). It was shown as according to statistical techniques were inorganic ingredient data; verification accuracy 59.6%-89.3%, discriminant accuracy 68.9%-100.0%, precision 0.525-0.817, reproducibility rate 0.821-0.988, f1-score 0.777-0.891 and AUC 0.710-0.985, and organic ingredient data; verification accuracy 63.2%-81.6%, discriminant accuracy 66.5%-100.0%, precision 0.642-0.769, reproducibility rate 0.493-0.970, f1-score 0.589-0.828 and AUC 0.772-0.948, respectively. According to the this study, the random forest was verification accuracy 89.3%, f1-score 0.891 in inorganic composition data and PLS was verification accuracy 81.6%, f1-score 0.753 in organic composition data of the geographical origin in pork belly, respectively.

PT-054 [식품/농학]

**Intra-laboratory validation of the geographical origin examination
method of pork belly using ICP-OES & ICP-MS**

**Jae-Min An, Dong-Jin Kang, Ji-Hye Lee, Jeong-A Choi, Yong-Sik Youn,
Da-Hye Jin, Sung-Hee Lee and Seong-Hun Lee***

Experiment Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service (NAQS)

*Corresponding author: starlee65@korea.kr

Recently, as imports and exports increase with the FTA on agricultural and livestock products between countries, food safety issues are increasing. Cheap foreign agricultural and livestock products, whose safety has not been verified, are imported into Korea and converted into expensive domestic products and distributed. Accordingly, in order to eradicate illegal distribution of origin due to the occurrence of vague anxiety among consumers, a scientific method of determining origin is required. This study was carried out to improve public confidence and establish legal basis domestically and internationally by verifying the validity of the method for determining the origin of agricultural and livestock products through comparative tests of three institutions. In order to verify the validity of the method for determining the origin of pork belly using the already developed ICP method, pork belly with a certain geographical origin was purchased through domestic slaughterhouses and importers. We purchased 100 samples (develop; 50 domestic, 50 foreign) and 60 samples (prediction; 30 domestic, 30 foreign) for the development of the method for determining the geographical origin. Only the lean meat from which the fat was removed was taken, freeze-dried, and then prepared into powder and distributed to three organizations (National Agricultural Products Quality Management Service, Nonghyup Food Research Institute, and Korea Testing & Research Institute). As a result of the analysis of the three organizations, the sensitivity 100%, selectivity 100%, and efficiency 100% for the sample for developing the method for determining the geographical origin of pork belly, and the domestic prediction rate for the verification sample was 93.3%-96.7%, and the foreign prediction rate was 96.7%-100%. As a result, all three institutions satisfied the verification criteria for sensitivity, selectivity, efficiency, domestic prediction rate and foreign prediction rate.

PT-055 [식품/농학]

Improvement of origin discrimination method of pork belly using NIRS through reduction of sample weight

**Dong-Jin Kang, Ji Hye Lee, Jeong A Choi, Yong-Sik Youn, Da hye Jin,
Sung Hee Lee, Seong-Hun Lee, Jae-Min An[★]**

Experiment Research Institute of National Agricultural Products Quality Management Service,
141, Yongjeon-ro, Gimcheon-si, Gyeongsangbuk-do, 740-220, Korea

Pork belly is a popular meat in Korea. Most of Korean people want to eat Korean pork belly. Therefore the price of Korean pork belly is two times higher in price than foreign pork belly in Korea. It is the reason that origin discrimination method of pork belly using NIRS(Near Infrared Spectroscopy) was developed in 2017.

Sample weight 2 kg was needed to discriminate origin of pork belly using NIRS. Lean meat of pork belly was separated, and freeze-dried to discriminate origin of Pork belly using NIRS. And then freeze-dried sample 15 g was analysed using NIRS. Investigators of NAQS(National Agricultural Products Quality Management Service) branch office suggested that sample weight reduction from 2 kg to 0.6 kg be needed to improve usefulness of origin discrimination method of pork belly. It is why sample weight reduction method is needed.

The aim of this study is to develop sample weight reduction method that NIRS value of 5 g sample weight is similar to NIRS value of 15 g sample weight by comparing NIRS value between 5 g sample weight and 15 g sample weight using NIRS sample cover.

Sample cover was applied to prevent light from interrupting scan a sample in near infrared region.

The 200 samples of pork belly were analysed using NIRS. NIRS scanning wavelength range was from 800 nm to 2,500 nm. NIRS Spectrum was acquired at a resolution of 1 nm in reflectance mode.

The difference between NIRS value average of 15 g sample weight and 5 g sample weight with sample cover was 1. The difference between NIRS value standard deviation of 15 g sample weight and 5 g sample weight with sample cover was 1. The average of NIRS value of 15 g sample weight in Korean samples was 96. The average of NIRS value of 5 g sample weight with sample cover in Korean samples was 95. The average of NIRS value of 15 g sample weight in Foreign samples was 7. The average of NIRS value of 5 g sample weight with sample cover in Foreign samples was 6.

There was no significant difference between NIRS value of 15g sample weight and 5g sample weight by t-test(p -value=0.85>0.05).

In this study, we developed the improved method condition that sample weight reduction from 15 g to 5 g on origin discrimination of pork belly using NIRS with sample cover.

PT-056 [식품/농학]

Method validation for simultaneous determination of *myo*-inositol and L-carnitine in milk-based infant formula by liquid chromatography-tandem mass spectrometry

방한열¹, 구명주¹, 원종은¹, 박종수¹, 곽병만^{1,*}

¹*남양유업 중앙연구소

*Corresponding author: fivefive@namyangi.com

An analytical method was developed for the simultaneous quantitative determination of *myo*-inositol and L-carnitine as nutritional components in milk-based infant formula using liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS). The infant formula was treated with acid for protein precipitation and chloroform for fat removal. A recovery test of *myo*-inositol and L-carnitine was performed according to the certified range and reference value from a certified reference material (SRM 1849a, NIST). The limits of detection were 0.038 and 0.00023 mg/mL, the limits of quantitation were 0.127 and 0.00076 mg/mL, and the method detection limits were 1.91 and 0.012 mg/100 g for *myo*-inositol and L-carnitine, respectively. Method validation such as linearity, selectivity, accuracy, precision, and measurement uncertainty has been successfully performed. The developed LC-MS/MS method with its simple sample preparation could be used for the quantitative determination of *myo*-inositol and L-carnitine in milk-based infant formulas.

PT-057 [무기/재료]

고순도 실리카 분말 및 디스크형 인증표준물질 개발

양정환¹, 김선혜¹, 정세훈^{2*}

¹포항산업과학연구원 분석인프라섹션, ^{2*}포항산업과학연구원 분석평가연구센터

*Corresponding author: jshoon@rist.re.kr

고순도 실리카 (Silica, SiO₂)는 반도체 공정 및 전기 전자 제품의 원료로 널리 사용 된다. 특히 고순도 실리카의 소재 특성은 불순물 원소 농도와 밀접한 관계가 있다. 본 연구에서는 고순도 실리카 소재의 불순물 원소 분석을 위하여 인증표준물질(Certified Reference Materials)을 개발하였다. 정확한 극미량 원소 분석을 위하여 분말형 소재와 Laser ablation ICP-MS(유도결합플라즈마 질량분석기) 등 기기 분석 활용을 위한 디스크형 소재를 개발 하였다. 핵심 불순물 관리 원소인, Na, Mg, K, Ca, Al, Ti, Li 등을 포함하여 10개 이상의 원소에 대한 특성값을 부여했으며, 원소별 수십 mg/kg부터 수십 µg/kg까지 극미량 원소 성분을 농도 범위로 하였다. 균질성 평가를 위해 표준물질 당 10개 이상을 샘플링하여 ICP-MS와 LA-ICP-MS법을 사용하였으며, 인증값의 특성화 및 불확도 산출을 위하여 국내외 유수의 시험기관과 공동분석 연구를 진행하였다. 향후 KOLAS 표준물질 생산기관 절차에 따라 인증표준물질로 인정을 받고 국내 극미량 분석 시험기관과 관련 산업체에 보급할 예정이다.

PT-058 [무기/재료]

연소 적외선 흡수법을 이용한 고체전해질 중 C, O, S 분석

한홍현¹, 이윤희¹, 김소영², 정세훈^{2,*}

¹포항산업과학연구원 분석인프라섹션, ^{2,*}포항산업과학연구원 분석평가연구센터

*Corresponding author: jshoon@rist.re.kr

최근 전고체전지(all-solid-state battery)는 에너지 밀도가 높고, 안전성이 높아 각광을 받고 있다. 고체 전해질은 기존의 리튬 이온 배터리(Lithium Ion Battery)의 고 인화성 및 폭발성 유기 전해질(organic electrolyte)을 대체할 수 있다. 특히 많은 종류의 배터리 중에서 $10^{-2} \text{ S cm}^{-1}$ 이상의 높은 이온 전도도를 갖는 황화물 기반 전고체 배터리가 고용량 배터리로 큰 주목을 받고 있다. 황화물계 고체 전해질은 고온에서 매우 안정하기 때문에 전기자동차의 온도 제어 시스템을 단순화하여 패키지 수준의 에너지 밀도를 높일 수 있다. Argyrodite로 불리는 고체전해질은 전고체전지에서 핵심 소재이다. 특히 Li, P, S, Cl의 주 원소 성분과 C, S 등의 불순물 원소의 정확한 정량 분석은 매우 중요하다. 일반적인 Li, P 및 Cl은 유도결합플라즈마 원자분광법 및 이온크로마토그래피 등으로 비교적 정확히 분석할 수 있다. 그러나 S는 전처리 과정에서 휘발되거나 불안정한 상으로 존재하기 때문에 화학적 전처리가 동반되는 분석방법으로는 손실 등의 문제로 분석이 어렵다. 본 연구에서는 연소 적외선 흡수법을 이용하여 주요 성분 중 하나인 S와 주요 불순물인 C과 O를 분석하였다. 시료 준비는 산소 및 수분과의 반응을 제거하기 위하여 Ar 분위기에서 전처리 되었으며, 산화물 표준물질을 이용하여 농도를 정량화 하였다. 분석결과 재현성 있는 분석 결과를 얻었다. 향후, 농도의 소급성 확보를 위한 연구를 진행할 계획이다.

PT-059 [무기/재료]

Single Particle Study: Plasmonic Damping Induced by Mercury Amalgamation in Mesoporous Silica Coated Gold Nanorods

김근완, 하지원*

울산대학교 화학과

*Corresponding author: jwha77@ulsan.ac.kr

Amalgamation is a concentrating process in which metallic gold or silver is mixed with mercury (Hg). In this work, we investigated the plasmon damping of individual mesoporous silica coated gold nanorods (mSiO₂-AuNRs) caused by the formation of Hg-Au alloy structure. First, we compared the structural change and the formation of Hg-Au alloy of Bare-AuNRs and mSiO₂-AuNRs using scanning electron microscopy (SEM) and energy dispersive x-ray spectroscopy (EDS). The Hg amalgamation, the aspect ratio of Bare-AuNRs decreased due to Hg amalgam formation, but the that of SiO₂-AuNRs were unchanged because The deformation of core-AuNR was suppressed by the silica shell. Second, dark-field (DF) microscopy and spectroscopy was used to gain deeper insight into the optical properties and plasmon damping of the mSiO₂-Hg-Au alloy nanorods at the single particle level. A strong plasmon damping in the scattering spectra of individual mSiO₂-Hg-Au alloy nanorods was observed due to the formation of Hg amalgamation on the core AuNR surface. Finally, we performed Real time monitoring of strong plasmonic damping resulted by Hg amalgamation. We confirmed the optical change due to deposition and slow diffusion of Hg on the surface of core AuNR without deformation. Furthermore, the results indicate that the plasmon damping in single mSiO₂-AuNRs can be used as a promising strategy for Hg sensing.

PT-060 [무기/재료]

Development of method to discriminate the geographical origin of lotus root using XRF with multivariate data analysis

**Yong-Sik Youn, Jae-Min An, Dong-Jin Kang, Ji-Hye Lee, Jeong-A Choi,
Da-Hey Jin, Ji-Yeon Eom and Seong-Hun Lee***

Experiment Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

Lotus root is one of the crops containing potassium and a large amount of inorganic elements. In the present era, which focuses on instant foods due to westernization, health is important, and low-calorie foods and functional foods are becoming more preferred. The lotus root of water plants is produced in Asia and Australia, and is grown mainly in ponds. Lotus root is well known as food crops in Korea. Consumers want to eat Korean lotus root in Korea. Korean people are concerned about labeling of geographical origin of Korean lotus root when purchasing Korean lotus root. The price of Korean lotus root is 2.5 times higher than Chinese lotus root in Korea. The origin of Korean lotus root is identified to prevent false indication of geographical origin of Korean lotus root. The aim of this study is to discriminate the origin of Korean lotus root by comparing inorganic elements' contents between Korean and Chinese lotus root using an energy dispersive X-ray fluorescence spectrometer(ED-XRF). In this study, 50 samples of lotus root were collected from Korea and China. The samples were analyzed using an ED-XRF. We found 11 inorganic elements' contents; P, S, Cl, K, Fe, Cu, Zn, Br, Rb, Ag and Sn. The 11 inorganic elements' contents were different between Korean and Chinese lotus root. The accuracy of discrimination for geographical origin was 100% by ED-XRF with multivariate analysis. This result showed that the method can be used to discriminate geographical origin between Korean and Chinese lotus root in Korea.

PT-061 [무기/재료]

Analysis of Cu mapping in dementia mouse brain using fsLA-ICP-MS

Sunghwa Choi¹, yuri Lee¹, kyungsu Park^{1,*}

¹Advanced Analysis Center, Korea Institute of Science and Technology,
5 Hwarang-ro 14-gil, Seongbuk-gu, Seoul

*Corresponding author: pks6475@kist.re.kr

Recently, due to an increase in life expectancy and a decrease in the birth rate, the elderly population is relatively increasing. In 2019, the number of elderly people aged 65 or older in Korea was 7,718,616, of which 761,364 people had dementia, accounting for about 10%¹).

In the brains of patients with Alzheimer's disease (AD), academic results have been published that a systemic defect in copper metabolism is a specific symptom, and it is known that the copper pathway can be destroyed by disease.

Researches confirming the distribution of inorganic elements in tissues are being analyzed using an analysis equipment using X-ray or an optical microscope such as SEM. However, most of these analysis methods can analyze concentrations of ppm or more, and since the sample injection port is in a vacuum, it is difficult to immediately analyze the tissue containing moisture.

fsLA system generates a constant particle of um unit by using the femtosecond laser and will be analyzed by this detection limit is interlocked with excellent ICP-MS.

In this study, the tissue is placed in a chamber of a femtosecond laser in which the injection port of the sample is under normal pressure. Then, a particle is generated by ablation, and they are sent to ICP-MS, which can analyze trace amounts, using carrier gas for analysis. The sample enters the chamber part, the analysis by filling in Inert gas (He).

As a result, the distribution analysis result for the bio sample could be produced in a short time, and meaningful results were obtained.

1) Ref. Central Dementia Center

PT-062 [무기/재료]

탄소나노튜브를 이용한 대량 분취용 액체 크로마토그래피 분리관 개발

Development of HPLC Separation Column of Mass Separation Analysis in
Natural Substance Extract and Separation Analysis

최기정^{1,*}, 김미경¹, 김건한¹, 서정기²

^{1,*}(주)대덕분석기술연구원, ²한국표준과학연구원

생명공학 분야의 발전과 인체에 유용한 천연원료의 유효성분 추출 시장이 크게 성장하면서 유효성분 함량 및 성분 확인을 위한 분리분석법이 지속적으로 개발되고 있는 상황이다. 천연원료 분리분석시 사용되는 HPLC 컬럼의 경우 소모품인 분리관의 가격이 대략 200~300 만원대로 고가로 형성되어 있으며 LC 분리관의 수명이 짧은 단점이 있다. 또한 천연물 분리분석에 범용으로 사용되고 있는 Amin류 컬럼의 경우에도 내구성과 수명이 짧은 단점이 있다.

또한 천연물질에서 추출되는 당류는 극성 및 점도가 있어서 분리관 성능 저하의 원인이 된다. 추출 시료의 알칼리적인 특성으로 인하여 분리관 내부 충전물 특성 변화 및 좁은 pH 범위내 사용 및 반복 사용으로 인한 꼬리끼기 현상등이 자주 발생하여 천연물 유효성분 분리분석에 제한이 많았다. 따라서 탄소나노튜브를 이용하여 내알칼리성 및 내구성이 뛰어나며 온도와 pH 영향을 받지 않는 CNT입자를 충전한 분리관을 개발하여 바이오분야 천연물 분리분석 및 식품, 의약품등의 분야 및 유관 산업분야에 활용하여 보급하고자 한다.

탄소나노소재 충전제는 Silica phase (pore size 100Å, partical size 3.5µm) 입자에 3-aminopropyl trithoxysilane (APTES)과 3% -COOH fuctional group 을 지닌 single wall nanotube (P3-SWNT)를 고정시킨 분리관 충전제를 개발하였다. 본 충전제를 패킹한 분석용 컬럼의 경우에는 단당류, 이당류, 삼당류 분리분석에 우수한 결과를 보였다. 각 당류의 분리도가 우수하였으며 재현성도 우수하였고 단당류부터 삼당류까지 23분 이내에 5종 당류 분리분석 결과를 얻었다. 크로마토그램의 꼬리끼기 (tailing)현상이 없고 충전제의 Particle size 3.5µm에서 압력 80~90 bar 이내로 양호하였다.

또한, 비교 분석을 위하여 시판되고 있는 당류분석 분리관인 BIO-RAD사에서 판매중인 Aminex HP-87H 컬럼과 Waters사에서 판매중인 Amino column(WAT084038)과 개발된 SWNT 충전제를 패킹한 분리관과 비교시 당류 분리능 및 컬럼 내구성과 안정도가 우수함을 확인하였다.

PT-063 [무기/재료]

Identification of isocyanate adducts with various diols by NMR and FT-IR spectroscopy

Kwang Seo Park, Yun Ju Kim, Ji Sun Lee, Eun Kyung Choe[★]

Regulatory Chemical Analysis & Risk Assessment Center, Korea Institute of Industrial Technology

[★]Corresponding author: ekchoe@kitech.re.kr

Per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs) which are known to be 'forever chemicals' due to their highly fluorinated aliphatic structures result in potential adverse effects on the environment and human health. As non-fluorinated alternatives to PFAS-based finishing in textiles, paraffins, silicones, dendrimers and polyurethanes using long chain linear aliphatic hydrocarbons have been developed. In this study, adducts containing urethane linkages were prepared by reacting TDI with various diols such as siloxanes with an alcoholic hydroxyl on both ends, polycarbonates and PPG as well as oley alcohol to end-cap the adducts with long chain hydrocarbons. The adducts structure were identified using ¹H nuclear magnetic resonance (¹H NMR) and FT-IR spectroscopy and molecular weights were analyzed by a gel permeation chromatography (GPC). NMR spectra for the raw materials were also taken for comparison with those of adducts where chemical shifts in protons of TDI were remarkable and new peaks were observed due to the formation of urethane linkages.

PT-064 [무기/재료]

전통 단청안료 진사(辰砂)의 열화특성 분석

김지선¹, 유지아², 이선명^{1,*}

¹국립문화재연구소 복원기술연구실, ²국립문화재연구소 보존과학연구실

*Corresponding author: choro13@korea.kr

진사는 석간주, 장단과 함께 전통적으로 사용된 적색 단청안료로 천연 수은 황화물(Cinnabar, HgS)을 원료로 한다. 오늘날 단절된 전통 단청의 제법 및 기법을 복원하고 현장에 적용하기 위해서는 단청안료별 고유한 내후특성 파악과 기대수명에 대한 데이터 확보가 필요하다. 이를 위해 국내 기후 특성이 반영된 촉진내후성 시험을 통해 진사의 열화 양상을 파악하였으며 변색 야기인자를 확인하기 위한 분석을 수행하였다.

시료는 진사 안료와 실리콘 바인더인 상온경화형 PDMS 수지를 균일 혼합한 후 필름 어플리케이터를 이용하여 150 μm 두께로 제작하였다. 촉진내후성 시험을 통해 시료를 자외선 광 열화 하였으며 조사된 총 자외선량은 334 MJ/m²이다. 열화 전후 시편을 대상으로 색도분석, 표면 및 단면의 성분 변화 등을 분석하였다.

분광측색계를 이용한 색도분석 결과, 열화 전·후 색차(ΔE)가 27.46으로 높게 나타났다. 이는 열화 후 적색도가 저하되어 분광 스펙트럼 상에서 600 nm 파장 전후의 반사율이 크게 감소했기 때문이다. 열화 전·후 단면 변화는 반사현미경 관찰을 통해 확인하였다. 열화 전 시편의 단면에서는 표면에 해당하는 최상부의 표면이 매끄러웠으나 열화 후 시편에서는 표면부 요철이 발생하였으며 변색층으로 추정되는 매우 얇은 두께의 층이 관찰되었다.

변색에 따른 성분 변화를 확인하기 위해 분광분석(FT-IR, Raman), 주사전자현미경 분석, XPS 분석을 실시하였다. 적외선분광분석에서 진사를 제외한 폴리머 성분만이 검출된 반면 Raman 분석에서는 진사와 폴리머 피크가 나타났으나 열화 전후 시편간의 차이는 뚜렷하지 않았다. 주사전자현미경에서는 반사현미경에서 관찰된 변색층을 확인하기 어려웠다. EDS 분석 결과, 열화 후 시편의 Si의 함량비가 낮아지면서 상대적으로 Hg 및 S의 함량비가 증가하는 경향이 나타났다. XPS 분석 결과, 표면에 폴리머 성분에서 기인된 유기물(C, O, Si)이 다량 분포하고 있어 표면 스캔에서는 진사의 성분 검출되지 않았다. 한편 Depth profiling 과정에서 진사 성분인 Hg와 S의 피크가 나타났으나 Hg와 Si의 오비탈이 겹치면서 피크가 중첩되는 문제가 발생하였으며 무엇보다 폴리머 성분에 비해 Hg와 S 원소의 검출 강도가 매우 낮았다.

XPS 표면 분석에서 유기물만 검출된 것은 시료제작 시 안료와 교착제를 균일하게 혼합 하였음에도 상온경화 과정에서 밀도 차에 의해 층이 일부 분리되었기 때문으로 추정된다. 향후 연구에서는 시편 제작에 전통 교착제인 아교를 사용하여 XPS 분석에서 발생한 Hg와 Si 오비탈 중첩 문제를 극복하고자 한다. 또한 Hg와 S의 낮은 피크 강도는 TOF SIMS 분석을 통해 피크 강도 차이에 대한 교차 분석을 수행할 예정이다.

사사) 이 연구는 문화재청 국립문화재연구소 문화유산조사연구(R&D)의 일환으로 진행되었다.

PT-065 [원자력/방사선]

**Analysis of filter lifetime of HANARO reactor primary
coolant purification system**

Woo-taek LEE^{*}, Yong-hwi KIM, Ho-young CHOI

Korea Atomic Energy Research Institute

^{*}Corresponding author: wtlee@kaeri.re.kr

The HANARO is a multipurpose research reactor that has been operated since 1995. The open pool HANARO reactor has a primary cooling system for cooling nuclear fuel. Demineralized water is used in this cooling system, and there is a purification system to maintain the quality of this demineralized water. This purification system consists of filters and ion exchangers. Debris in cooling water is filtered out by this system. If debris accumulates in the cooling water, it can interfere with the coolant flow to the core, or can be deposited on the surface of a nuclear fuel rod, thereby hindering long-term core cooling. Therefore, it is very important to maintain the performance of the purification system. The lifetime of the filter can be determined through a differential pressure of the filter system. When the amount of foreign matter trapped by the filter element increases, the differential pressure of the filter system also increases. When the pressure rises above a certain level, it is replaced with a new filter. Through the change of the filter lifetime, it is possible to know the amount of foreign matter contained in the cooling water that period.

This paper analyzes the change of filter lifetime from 2011 to 2020, so what causes the filter lifetime to be shortened through comparison with various variables.

PT-066 [원자력/방사선]

Analysis of released amount of gaseous radioactive waste from HANARO reactor for shutdown period (2014~2020)

Yong-hwi KIM^{*}, Woo-taek LEE

Korea Atomic Energy Research Institute

^{*}Corresponding author: dragon227@kaeri.re.kr

HANARO(High-Flux Advanced Neutron Application Reactor) is an operating research reactor, departed the critical state in 1995 for the first time. Since 2014, HANARO continually have had long shutdown periods due to the events such as seismic performance evaluation, seismic retrofitting construction, maintenance and so on. Thus, its operation time was less than two months per year from 2014 July. This study aims to confirm the nuclear safety of HANARO by finding out the correlation between the nuclear reactor operation time and the released gaseous radioactive waste and by comparing the amount of released gaseous radioactive wastes with DRL(Derived Released Limit). To do so, gaseous radioactive waste is analyzed by each different nuclide analysis for each radioactive nuclide which was generated and released from HANARO building.

The air released through the chimney of HANARO building is containing various gaseous radioactive wastes, as it comes from outside and passes the reactor hall and RCI(reactor concrete island) which has primary pumps and heat exchangers. Noble gas such as Ar-41 and Kr-85, iodine such as I-131, I-132, I-133, and tritium, are the representative substances of gaseous radioactive waste. This study uses three methods to measure each radioactive nuclide. First method is a nuclide analysis to use charcoal filter collecting iodine in the released air. Second, noble gas was measured by the nuclide analysis that collects the sample of air periodically. Third, the bubbler method was used for measuring tritium

The analysis result shows that tritium is continuously released from HANARO ventilation system during the shutdown periods. Moreover, the release of tritium tends to be paralleled by the increase in the operation time of the nuclear reactor. Noble gas and iodine, on the other hand, are rarely released during the same periods. Tritium is continuously generated and released because heavy hydrogen(²H) in heavy water (D₂O) stored in a reflector tank surrounding the reactor core turns into tritium. Also, in this process, inserted nuclear fuels in the reactor core, spent fuels, and irradiated devices in the reactor pool affect the heavy hydrogen to generate tritium. In conclusion, this study shows that gaseous radioactive wastes have been released below DRL during the shutdown periods.

PT-067 [원자력/방사선]

연구로 중성자 방사화 분석을 위한 고속중성자의 간섭 평가

문중화*

한국원자력연구원 하나로이용부

*Corresponding author: jhmoon1@kaeri.re.kr

연구용 원자로를 이용한 중성자 방사화 분석에서는 연구로 내에 분석시료를 인입하여 중성자와의 핵반응을 유발하여야 하며, 이 과정에서 열, 열외 및 고속중성자로 분류되는 3종류의 에너지 범위를 갖는 중성자가 시료중의 목적핵종과 핵반응에 참여하게 된다. 일반적으로 중성자 방사화 분석에서는 열중성자의 핵반응단면적이 가장 크며, 열외 중성자와의 반응율도 포함하여 목적 원소를 정량한다. 그러나 몇 가지 원소들의 분석에서는 고속 중성자와의 핵반응에 의하여 생성된 핵종이 목적 원소의 정량에 영향을 주게 된다. 일례로 Al의 정량을 위하여 $^{27}\text{Al}(n,\gamma)^{28}\text{Al}$ 의 열 및 열외중성자에 의한 포획반응이 이용되지만 $^{28}\text{Si}(n,p)^{28}\text{Al}$ 과 $^{31}\text{P}(n,\alpha)^{28}\text{Al}$ 과 같은 고속중성자의 핵반응에 의해 간섭을 유발하게 된다. 본 연구에서는 방사화 분석에서 고려하고 있는 고속중성자에 의한 핵반응들과 이에 대한 핵 데이터를 바탕으로 열중성자속이 고속중성자속보다 500배 큰 경우를 가정하여 정해진 조사시간 동안 핵반응에 의하여 생성된 핵종의 초기 방사능을 계산하여 각 원소에 대한 간섭의 정도를 평가하였다. 실리콘 주매질인 시료의 경우에는 주매질인 Si에 의하여 Al의 정량분석에 약 47 mg/kg, Mg의 분석에 약 2 mg/kg의 간섭 영향을 미칠 수 있으며 Al이 주매질인 경우에는 Mg의 분석에 1800 mg/kg, Co는 Fe의 분석에 740 mg/kg, Cl은 S의 분석에 3000 mg/kg 수준의 간섭을 유발할 것으로 평가되었다. 최종적인 간섭의 정도는 실제 시료를 조사한 조사공의 열중성자속과 고속중성자속과의 비율에 따라 변하며 향후 방사화 분석을 이용한 철강이나 고순도 재료중의 불순물 분석 시에 고속중성자의 간섭을 고려하는데 유용한 참고자료로 사용할 수 있을 것이다.

PT-068 [원자력/방사선]

열이온화질량분석에 의한 Mo 동위원소 비 측정 검토

박양순*, 조혜륜

한국원자력연구원 방사성물질화학분석실

*Corresponding author: nyspark@kaeri.re.kr

Mo는 이온화 온도가 높은 반면에 기화 온도는 낮아서 열이온화 효율이 좋지 않은 것으로 알려져 있다. 그러므로 열이온화질량분석 방법으로 Mo 동위원소 비를 측정하기 위하여 다양한 첨가제를 사용하곤 한다. 본 실험에서는 첨가제를 가하지 않고 한 쌍의 레늄필라멘트의 이온화 및 기화 온도를 조절하여 Mo 동위원소 비 측정이 가능한지 검토하고자 하였다. 실험에 사용한 열이온화질량분석기는 TRITON 모델(Thermo Fisher Scientific co.)로 9개의 파라데이컵(FC)과 1개의 이차전자증배관(SEM)이 장착되어있다. 시료는 Mo₂O₃ 분말 표준물(ORNL)을 1M HNO₃에 녹여 약 200 µg/mL 농도로 제조하여 준비하였다. 준비된 시료 1 µL를 취하여 기화필라멘트에 로딩하고 건조한 후, 이온화챔버에 장착하고 측정을 수행하였다. 일반적으로, 동위원소 비를 측정하기 위하여 이온화 조건을 만들 때, 이온화레늄필라멘트에 전류를 가해 생성된 Re⁺ 이온을 측정하여 슬릿의 초점을 맞추고 0.1 V의 검출세기를 나타낼 때까지 온도를 올린다. 이러한 과정으로 가열된 이온화필라멘트의 높은 온도와 슬릿의 초점을 맞추는 시간으로 인해 Mo의 손실이 우려되었다. 그러므로 이온화필라멘트의 전류를 3 A까지만 올리고 Mo⁺ 이온을 SEM 검출기로 측정하면서 슬릿의 초점을 맞춘 다음, 이온화필라멘트의 전류를 5.5 A 까지 0.4 A/min. 속도로 올리면서 Mo 동위원소를 측정하였다. 이온화필라멘트의 전류가 4 A 되는 시점에서 Mo가 로딩 되어있는 기화필라멘트의 전류도 0.4 A/min. 속도로 함께 올렸다. 측정결과, Mo의 동위원소 비 분석이 가능함을 확인할 수 있었다.

PT-069 [원자력/방사선]

핵분열생성물 중 희토류 원소의 음이온교환수지 흡착특성

강병만*, 김정석, 이재석, 박재일

한국원자력연구원 방사성폐기물 화학분석센터

*Corresponding author: bkang@kaeri.re.kr

조사후핵연료의 연소도 (Burn-up)는 핵연료 중 무거운 핵종의 핵분열수를 백분율 (% fission)로 나타낸다. 연소도 측정을 기반으로 제시된 여러 핵공학적 정보 (원자로 출력, 핵연료 특성 및 중성자속 분포 등)는 핵연료 성능평가 코드시스템의 검증과 개량, 저장시설의 차폐 및 최종처분 등에 필수적인 기초자료로 사용된다. 연소도 측정법은 U-235의 감손에 따른 무거운 핵종의 변화를 측정하거나 조사후핵연료 내에서 선택된 특정 핵분열생성물을 정량하는 방법으로 구분된다. 화학적 연소도 분석법은 핵연료 시편의 용해, 화학적 순수분리와 시료처리과정을 거쳐 특정 원소 (연소도 지표원소)의 핵종을 질량분석으로 정량한다. 이러한 연소도 지표원소로 희토류 원소들이 적합하며 특히 Nd이 가장 많이 이용되고 있다. 한편 천연 및 핵분열과정에서 생성된 다른 동중원소(Isobar)들이 지표원소의 동위원소 측정에 영향을 주고 정량에 오차를 유발하므로 이들 동중원소들로부터 화학적인 순수 분리가 우선시 되어야한다. 이에 최적화된 분리 조건을 적용하기 위해 여러 전개 (Elution) 용매 조건에서 희토류 원소들의 이온교환수지에 대한 흡착 특성과 분리 거동에 대한 연구가 선행되어야 한다. 본 연구에서는 질산-메탄올 혼합용매 조건에서 음이온교환수지 AG 1-X4 (200 - 400 mesh)에 대한 희토류 원소들의 흡착 특성을 조사하였다. 흡착 실험은 질산-메탄올 용매, 모의 시료(희토류 원소), 수지가 포함된 유리 바이알을 상온에서 24시간 동안 셰이커로 흔들어주는 Batch Method로 진행하였다. 질산-메탄올 부피비와 질산농도에 따른 각 원소들의 분배계수 (Distribution Coefficient, K_d)는 용액에 존재하는 성분원소의 ICP-OES 분석값을 토대로 계산되었다. 전반적인 K_d 산출 결과는 질산-메탄올 용매 조건에서 산농도가 증가함에 따라 희토류 원소의 흡착 정도가 증가하는 현상을 보여준다. 또한 1 M 이하의 저농도 질산 조건에서는 대상 희토류 원소들의 K_d 가 1 이하로 확인되어 흡착량이 매우 적은 것을 알 수 있었으며, 고농도 (7 M) 질산 조건에서는 질산-메탄올 부피비에 관계없이 흡착력의 경향($Nd > Sm > Gd > Dy > Yb$)이 일정하게 나타나는 현상을 관찰하였다. 고농도 (7 M) 질산에서 Gd 보다 원자번호가 작은 희토류 원소들의 K_d 는 Yb와 같은 무거운 희토류 원소들에 비해 상대적으로 높은 값을 보여준다 ($Nd_{Kd} = 36.9$, $Yb_{Kd} = 5.9$). 이에 더해 Gd의 K_d 를 기준으로 산출된 가벼운 희토류 원소들의 분리비 (Separation Factor, α)는 1 이상의 값으로 범위 폭이 크게 나타난다 ($\alpha_{(Nd,Sm,Eu)} = 1.3 \sim 5.3$, $\alpha_{(Dy,Yb)} = 0.9$). 따라서 고농도 질산-메탄올 용매 조건에서 음이온교환수지 컬럼 용리법을 이용한 가벼운 희토류 원소들의 순수 분리가 가능할 것으로 판단된다.

PT-070 [원자력/방사선]

Analysis of Tritium Generation according to Operation Conditions and Management System of Tritium in HANARO

Hoon-Jo Cho^{*}, Kwang-Young Lee, Ho-Young Choi

Korea Atomic Energy Research Institute
^{*}Corresponding author: chj1869@kaeri.re.kr

HANARO, a multi-purpose research reactor, uses a reflector as heavy water to obtain high neutron flux. At this time, Tritium is produced by a nuclear reaction between neutrons and deuterium. Tritium is inhaled into the body in the form of water or vapor, which is likely to cause internal exposure problems. Tritium is unstable, causing β -ray decay and a half-life of 12.32 years. In addition, since tritium spreads to other regions, thorough management is required.

In the paper, the tritium management and treatment method being performed in HANARO were analyzed. Also, Tritium concentration values in Rx and RCI measured by the bubbler collection analysis method and continuous monitoring method performed in HANARO were compared and analyzed. The operating cycle was selected for the recently operated test operation (20.10.13~20.10.28) and the concentration of tritium was analyzed according to thermal power conditions (0, 15, 30 MW).

The results are shown in Table 1. Both methods increased with increasing thermal power. The continuous monitoring method has a higher concentration of tritium than the bubbler collection analysis method. There is a difference between the two methods. The bubbler collection analysis method measures only tritium collected in water after passing air in the form of bubbles in water. However, the continuous monitors are measured with parts of noble gas as well as tritium. Currently, operators are constantly monitoring and analyzing both methods and stably managing the concentration of tritium according to the thermal power operation.

Table 1. The concentration of Tritium according to thermal power condition at RCI and Rx

	Continuous Monitoring Method		Bubbler Collection Analysis	
	RCI	Rx	RCI	Rx
0 MW	30,843 bq/m^3	2,964 bq/m^3	15,033 bq/m^3	734 bq/m^3
15 MW	99,000 bq/m^3	3,022 bq/m^3	49,829 bq/m^3	1,707 bq/m^3
30 MW	127,667 bq/m^3	3,105 bq/m^3	68,100 bq/m^3	2,376 bq/m^3

PT-071 [원자력/방사선]

**Optimization of operating parameters of aerosol generator
for uranium particle swipe samples**

**Hyun Young Kim^{*}, Hwan Lee, Cheong Won Lee, Eun Hee Kwon,
Jung-Youn Choi, Haneol Lee, Hyun Ju Kim**

Korea Institute of Nuclear Nonproliferation and Control (KINAC)

^{*}Corresponding author: hykim33@kinac.re.kr

Analysis of nuclear materials in environmental samples has been an effective verification method to detect undeclared nuclear materials and activities in safeguards. In case of environmental particle analysis, there was no standard swipe or planchet sample containing uranium particles which characteristics are under control. The standard sample can be applied to validate analytical procedures and equipment as quality control materials. Therefore, the necessity of manufacturing uranium particle standard samples which contains the controlled characteristics such as particle size, number, concentration, and enrichment has been raised.

For this purpose, an aerosol generator (3450 Vibrating Orifice Aerosol Generator) was applied to make swipe sample containing uranium particles. The equipment generates monodisperse aerosol in size of 1 to 200 μm from materials solution using an orifice that constantly vibrate and disturb the liquid jet. In the present study, control parameters of aerosol generator including orifice size, dilution air flow, drying column height, and frequency were tested to derive the optimized conditions of equipment for generating aerosol. In addition, 8 preliminary swipe sample was prepared using standard uranium solution (SRM 3164) under the optimized condition, and MMXRF(monochromatic micro x-ray fluorescence) analysis was conducted to confirm the concentration and distribution of the uranium on the swipe.

As a results, The optimal operating conditions were 50% ethanol as a dilution solvent, 60 ml of syringe size, 70 ml/h of feed rate, 20 kHz of frequency, 60 cm of drying column, 80 L/min of dilution air flow, and 20 μm of orifice diameter. The most critical parameters to control the aerosol size and distribution were the orifice diameter and the frequency. MMXRF results showed 293.18 ± 14.25 cps and $12,891.53 \pm 630.43$ ng in total uranium contents of a swipe (10×10 cm^2). The swipe images and 4.86% RSD in total cps indicates that the relatively uniform swipe samples can be obtained. The generated uranium aerosol size and the expected particle size was calculated as 123 μm and 2.3 μm , respectively.

PT-072 [원자력/방사선]

Alpha-emitting source preparation for ^{210}Po determination in biological samples using extraction chromatography and spontaneous deposition

Hyeon-Woo Lee*

Department of NORM Analysis, Korea Institute of Nuclear Safety

*Corresponding author: hwlee@kins.re.kr

^{210}Po , emits a high alpha energy(E_α : 5.304 MeV), is ubiquitously existed in all environments including the Earth's crust, atmosphere and hydrosphere as a result of decay of ^{222}Rn . ^{210}Po has a relatively long half-life of 138.4 days among naturally occurring polonium isotopes and has the properties of being well absorbed by mineral surfaces, particulates and colloids. As a tracer, ^{210}Po plays an important role in confirming the behavior of polonium in the environment in various fields such as environmental science, marine chemistry, and geology. In addition, many studies have also been conducted from a radiological point of view, because when ^{210}Po enters the human body through drinking water, ingestion of food and smoking, it becomes bioaccumulation and causes continuous internal exposure. In particular, it is important to obtain the radioactivity concentration of polonium in biological samples using a proven method, since the activity values are used as basic data for the evaluation of human exposure dose according to food-chain. Alpha spectrometry is the major method for analysis of ^{210}Po , and it is important to make the alpha-emitting source thin, flat and homogeneous by separating only pure polonium, since interfering substances or nuclide may affect the alpha measurement.

In this study, an alpha-emitting source was prepared for the analysis of ^{210}Po in various biological reference samples and the experimental process consisting of extraction chromatography and spontaneous deposition was verified. The solid samples added with ^{209}Po as a yield tracer were treated by acid digestion to extract nuclide into solution. The target nuclide was purified and separated by extraction chromatography using Sr-resin, and the behavior of polonium was confirmed according to the change in loading solution condition. After separation, a laboratory-made polonium deposition kit equipped with a high purity silver disc was placed in the elution solution, and polonium was collected by optimized spontaneous deposition method. The alpha-emitting source was measured using an alpha spectrometer, and the activity concentration in samples were calculated based on recovery rate of the tracer, and the result was compared with the reference value.

PT-073 [표준]

Physical Properties of Drying Lacquer Films From Different Producer

Hye Hyun Yu, Jihye Lee, Yeonhee Lee*

한국과학기술연구원 특성분석센터

*Corresponding author: yhlee@kist.re.kr

The lacquer sap has been used for thousands of years as coating materials and adhesives in Asian countries because of outstanding physical properties of dried lacquer films. The lacquer sap is polymerized at high humidity circumstances by the reaction of oxidation catalyst, laccase. After the polymerization, the lacquer films have high durability for thousands of years by suppressing the oxidation with urushiol polymer and restoring the damaged layer with the other layers below. However, the drying process of lacquer is influenced by surroundings and the components which are different by the producer. So, the physical properties of the lacquer films from various producers according to the drying time were observed to evaluate the drying degree with analytical techniques.

The research was conducted with conventional testing methods and analytical techniques to analyze different lacquer films from Korea, Japan, China, Vietnam, Myanmar, and CNSL. The samples were prepared by applying the lacquer blended turpentine oil with the ratio of 1:1 on the slide glasses and kept in the humidity chamber at 70~80% RH, and room temperature. Firstly, the drying time was measured by the drying time recorder based on the criteria of touch free (TF), dust free (DF) and hardened dry (HD). Next, the conventional testing methods such as pencil hardness, cross-cut was conducted over drying time. Additionally, the physical properties measured with AFM, nanoindenter, and 90° peel tester referred as analytical techniques. Lastly, the physical properties estimated with various methods were comparatively analyzed with the results of drying time recorder to correlate the drying degree with the physical properties.

PT-074 [표준]

Performance Evaluation of the developed Mini-Automated Weighing System

김정은^{1,3}, 이진복², 김진석², 양인석^{1,3}, 홍기룡^{2,*}

¹과학기술연합대학원대학교 측정과학과, ²한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀,

³한국표준과학연구원 열역학온도팀

*Corresponding author: khong@kriss.re.kr

인증표준물질은 우리나라 산업 전반에 측정표준으로 보급되어 활용되고 있다. 특히 산업이 고도화됨에 따라 고순도 가스 및 미량의 가스상 불순물 분석을 위한 저농도 인증표준물질의 필요성이 대두되고 있다. 저농도의 가스상 인증표준물질은 중량법을 이용하여 제조 하고 있으나, 목표하는 저농도에 도달하기 위해 많은 희석단계가 필요하고, 이에 따라 시간, 시료 및 실린더 등 소비되는 자원이 많다. 이를 개선하기 위해 이전 연구에서 '미니 실린더용 자동 무게 측정 장치'를 개발하였다. 개발된 장비의 분해능, 무게 측정의 반복성 및 재현성 등을 고려한 장비의 불확도는 0.05 % (상대확장불확도, $k = 2$) 수준이었다.

본 연구에서는, 해당 장비를 이용하여 N₂ 중 CO 100 μmol/mol 수준의 일차표준가스 4병을 1-step으로 희석하여 제조하였다. 또한, 제조된 4병의 일차표준가스는 GC-FID/Methanizer를 사용하여 병 간 일치성을 확인하였으며, 중량법 불확도 및 분석 불확도를 포함한 제조 불확도는 0.08 % (상대확장불확도, $k = 2$) 내에서 4병 모두 일치하는 결과를 얻었다. 최종적으로, 제조된 일차표준가스를 이용해 국제비교에 활용한 시료(CO 100 μmol/mol in N₂)와 비교분석함으로써 개발된 미니실린더용 자동무게측정장치의 성능평가를 하였다. 본 장비는 향후 저농도 인증표준가스 제조에 활용하여 기존의 중량법 제조 절차 및 불확도를 개선할 수 있을 것으로 기대한다.

PT-075 [표준]

Analysis of trace-level impurities in hydrogen for preparing primary reference gas mixtures for impurity measurement in pure hydrogen

**Baigali Tsogt^{1,2}, Ji Hwan Kang¹, Dong Min Moon¹, Jin Seog Kim¹, Dal Ho Kim¹,
Kiryong Hong¹, Yong Doo Kim¹, Seok-Young Oh² and Sangil Lee^{3,4,*}**

¹Gas Metrology Group, Division of Chemical and Biological Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science (KRISS),

²Department of Civil and Environmental Engineering, University of Ulsan,

³Division of Chemical and Biological Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science (KRISS),

⁴Science of Measurement, University of Science and Technology

*Corresponding author: slee@kriss.re.kr

Emissions from fossil fuel combustions contribute to increased atmospheric carbon dioxide concentrations leading to climate change. Hydrogen has emerged as a new promising alternative fuel to order to reduce greenhouse gas emissions and then mitigate global climate change. Recently, hydrogen fuel cell system, such as backup power generations and road vehicles, have been commercialized at a continually increasing rate. In order to operate fuel cell system efficiently and safely, it is required to check the quality of pure hydrogen because impurities even at trace levels in hydrogen can severely damage the fuel cell. The quality specifications (ISO 14687) of pure hydrogen have been developed to prevent the performance loss of fuel cells. It is essential to develop traceable accurate gas standards, which are mixtures of impurities simulating a contaminated pure hydrogen, to evaluate whether the quality requirements are satisfied. In order to develop traceable gas standards, it is prerequisite to analyse impurities and determine the purity of commercially available pure hydrogen which is used as the matrix gas for the standards. In this study, eight components (argon, helium, nitrogen, carbon monoxide, carbon dioxide, methane, ethane, and dimethyl sulfide) of the impurities specified ISO 14687 in hydrogen were determined using multiple gas chromatographs with different detectors such as flame ionization detector (FID), FID coupled with methanator, cryogenic pre-concentrator with FID, and thermal conductivity detector. In addition, iso-pentane, which was unexpectedly found as an impurity during the analysis of dimethyl sulfide, was also quantified. The purity of hydrogen was determined with its associated uncertainty based on the results of impurity analysis.

PT-076 [표준]

**고순도 가스의 불순물 분석을 위한
3 $\mu\text{mol/mol}$ 수준의 CO, CO₂, CH₄ in N₂ 일차표준가스 개발**

유제이^{1,2}, 문동민¹, 이진복¹, 김운중², 홍기룡^{1,*}

¹한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀, ²한남대학교 화학과,

*Corresponding author : Khong@kriss.re.kr

가스분석 기술은 우리나라 산업 전반, 특히 반도체, 원자력 발전, 에너지산업, 식품 및 환경산업 등에 기본 인프라 구축을 위해 반드시 필요한 핵심 기술이다. 특히 산업의 고도화에 따라 고순도 가스 및 미량의 가스상 불순물 분석을 위한 표준물질 및 관련 분석 기술의 필요성은 증가하고 있다. 하지만 국내·외 가스분석 관련 산업체에서 표준가스, 고순도 가스 및 특수가스 등의 생산을 위해 가스분석을 수행하고 있으나 품질관리에 애로사항이 많아 관리가 미흡한 실정이다. 특히 고순도 질소 및 헬륨의 경우, 생산성 악화로 인해 품질관리가 어려운 상황이며, 고순도 가스 생산업체에서 생산되는 고순도 원료가스의 순도가 균일하지 않아 표준가스 제조용 순수가스의 품질관리가 필수적이다. 이에 본 연구에서는 국내·외 가스분석 기술 및 생산기술 향상, 그리고 품질관리를 위한 고순도 가스의 순도분석용 일차표준가스를 개발하였다.

본 연구에서 개발된 일차표준가스는 고순도 질소의 불순물로 존재할 수 있는 일산화탄소(CO), 이산화탄소(CO₂), 및 메탄(CH₄)을 3 $\mu\text{mol/mol}$ 수준의 농도로 중량법을 이용하여 제조하였다. 특히 기존 표준가스의 중량법 제조에 사용되었던 10 L 실린더 자동무게측정 시스템 외에 저농도 표준가스의 중량법 제조를 위해 새롭게 개발된 75 mL 미니실린더 자동무게측정 시스템을 이용하여 표준가스 제조 절차 및 불확도 수준을 향상시켰다. 최종적으로 개발된 질소 중 3 $\mu\text{mol/mol}$ CO, CO₂, CH₄ 일차표준가스의 물질량 분율은 각각 3.29 $\mu\text{mol/mol}$, 3.18 $\mu\text{mol/mol}$, 3.25 $\mu\text{mol/mol}$ 이며 각각의 제조불확도는 상대확장불확도로 0.3 % ($k=2$, 신뢰의 구간 95 %) 이다. 향후 개발된 일차표준가스를 이용하여 기체크로마토그래피(gas chromatograph) 분석에서 사용되는 질소 운반기체의 순도분석에 응용할 예정이다.

PT-077 [법과학]

문서 중 유성볼펜 잉크의 비손상 식별을 위한 전사-액체추출
표면분석-모세관 전기영동 분석법

Seung-Hoon Bahng¹, Sunkyung Jeong² and Doo Soo Chung^{2,*}

¹Defense Institute of Forensic Science, Criminal Investigation Command, Seoul 04383, Korea

²Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea

법과학에서 문서감정은 중대한 비중을 차지하고 있으며, 필적 감정과 함께 잉크의 물리/ 화학적 분석법은 객관적 법적 증거로 활용된다. 문서의 손상을 줄이기 위해 분광학적 방법이나,[1] 국소 손상 화학분석법을 활용하고 있으나,[2] 고미술품, 역사적 문서, 결정적 증거 문서 등과 같은 경우에는 국소적 손상도 문제가 된다. 그러므로 문서에 사용된 잉크의 종류 및 작성 시기를 조사하려면 우선 비손상 채취 화학분석법이 절실하게 요구된다. 최근 국외 사례로 이온교환 수지와 ethylene vinyl acetate (EVA)로 만든 전사필름을 사용해 고미술품 및 유품 등에 접촉시켜 표면성분들을 전사 (blotting)하여 원본의 물리적 손상 없이 화학적 성분을 분석한 연구가 보고되었다.[3]

본 연구진은 문서 작성에 사용된 잉크를 전사필름으로 채취(blotting)하고, 위치별 화학분석을 수행하고자 한다. 유성 볼펜의 소수성 성질의 잉크는 유기용매에 잘 이온교환 수지가 함유되지 않은 단순한 EVA 조성의 필름만으로도 수 분간 원본에 밀착시키면 원본의 물리적 손상 없이 글씨 잉크성분을 전사하여 채취 가능함을 확인하였다. 전사한 후 필름은 최소량의 용매로 효율적으로 잉크 성분을 용출해 낸 후, CE와 연동하여 분석 가능하였다. 이러한 blotting-LESA-CE 기법은 새로운 비손상 화학적 표면 분석법을 제공할 것이며, CE 외에 간단한 TLC 외에 다양한 분석기기와의 연동 가능할 뿐만 아니라, 보존 가치가 큰 다양한 시료에 대해 적용 영역을 넓힐 수 있다. 이로써 실제 시료 원본을 최대한 보존하면서 충분히 분석이 가능한 조건을 구현하였다.

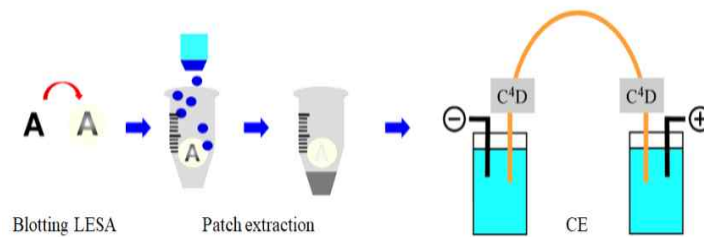


그림. Blotting LESA-CE

참고문헌

- [1] M. Claybourn and M. Ansell, Using Raman Spectroscopy to solve crime: inks, questioned documents and fraud, *Sci. Justice* 40, 261 (2000)
- [2] D. Djozan, T. Baheri, G. Karimian and Masomeh Shahidi, Forensic discrimination of blue ballpoint pen inks based on thin layer chromatography and image analysis, *Forensic Sci. Int.* 179, 199 (2008).
- [3] P.G Righetti, G. Zilberstein and A. D'Amato, What Sherlock sorely missed: the EVA technology for cultural heritage exploration.(2019). What Sherlock sorely missed: the EVA technology for cultural heritage exploration, *Expert Review of Proteomics* 16, 533 (2019).

PT-078 [법과학]

**Structure Analysis of Isotopomers of ^{35}Cl and ^{37}Cl in 2-Chloropyridine
Cation : Cation Spectroscopy and Franck–Condon Simulation**

Yu Ran Lee¹ and Chan Ho Kwon^{2,*}

¹Forensic Chemistry Division, National Forensic Service

²Department of Chemistry and Institute for Molecular Science and Fusion Technology, Kangwon National University

Email: urain94@korea.kr and chkwon@kangwon.ac.kr

Pyridine substituted with a nitrogen atom in benzene was known as a constituent of bioactive compounds as well as a precursor exposing the complicated excited state dynamics. 2-Chloropyridine (2-CP) has received significant attention, due to the substitution effect of a chlorine atom on the highest occupied molecular orbital (HOMO) of pyridine. However, the isotope effect of ^{35}C or ^{37}Cl regarding the adiabatic ionization energy and the cationic vibrational structure of 2-CP was not explored yet owing to the experimental difficulty. To elucidate the substitution and isotope effects of a chlorine atom on the HOMO and cationic vibrational structure of pyridine, we measured one-photon vacuum ultraviolet mass-analyzed threshold ionization (VUV-MATI) spectra of 2-CP isotopomers. Based on the 0–0 band in the MATI spectrum of 2-CP with ^{35}Cl , the adiabatic ionization energy was determined to be 9.4743 ± 0.0005 eV ($76\,415 \pm 4$ cm⁻¹) with similar value for ^{37}Cl . The measured MATI spectra could be analyzed by Franck–Condon simulations and spectral correlation between the two isotopomers. It revealed that the MATI spectra of 2CP display the most intense 0-0 bands unlike pyridine cation, which indicates little geometrical change upon ionization. In addition, we observed the appearance of the out-of-plane ring bending modes, implying pyridine ring distortion. Consequently, the warped structure with C₁ symmetry of cationic 2-CP should be induced by the electron removal from the HOMO consisting of the p orbital in the pyridine ring.

PT-079 [법과학]

Application of fragmentation patterns and fragment ion structures for the screening selective androgen receptor modulators (SARMs) adulterated in the seized dietary supplements using LC-Q-TOF/MS

**Nam Sook Kim, Hwan Seong Choi, Na Young Lim, Ji Hyun Lee,
Jin Ho Kim and Sun Young Baek***

Center for Advanced Analysis, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation,
Republic of Korea

*Corresponding author: stepany9838@korea.kr

Recently, the global markets for dietary supplements advertised as muscle strengthening efficacies have been constantly popular in the sport athletes. However, some cases on illegal adulteration of unauthorized compounds like the selective androgen receptor modulators (SARMs) to improve their pharmacological efficacies have been often reported. The SARMs have similar properties to anabolic-androgenic steroids as synthetic derivatives of testosterone with efficacies for building muscle and side effects such as liver damage, and sexual dysfunction. So far, there are not pharmaceutical products related to the SARMs clinically approved. In addition, it has been prohibited to use the SARMs in sports since January 2008 by the World Anti-Doping Agency (WADA) Prohibited List., and the products including SARMs purchased directly from overseas are banned in South Korea. The reason is why the SARMs also have several serious side effects such as heart attack, liver damage and others. Therefore, it is necessary to rapidly screen and confirm the compounds adulterated in some dietary supplements with their accurate analytical information. In this study, we selected total 10 compounds such as andarine, ostarine, RAD-140, and etc. based on the previous reports. We analyzed the fragmentation pattern of product ions from each compound using LC-Q-TOF/MS and then predicted their fragment ion structures. A X-bridge C₁₈ column, a fragmentor energy at 175 eV and an optimized collision energy ranged from 1 to 50 eV for each compound were applied to LC-Q-TOF/MS analysis. The obtained analytical information including their fragmentation patterns and structures were applied to analysis of the seized dietary samples. In conclusion, the results will be useful for the preemptive prevention of illegal dietary supplements.

※ This research was supported by a grant (21201MFDS306) from Ministry of Food and Drug Safety in 2021.

PT-080 [법과학]

Method development and validation for quantification of SR9009 in horse blood using liquid chromatography–tandem mass spectrometry

Young Beom Kwak^{1,3}, Jundong Yu^{1,*}, Ki Young Jang², Hye Hyun Yoo^{3,*}

^{1,*}Racing Laboratory, Korea Racing Authority, ²Veterinary Dept, Korea Racing Authority,

^{3,*}College of Pharmacy, Hanyang University

*Corresponding author: jundong@kra.co.kr, yoohh@hanyang.ac.kr

A novel liquid chromatography–tandem mass spectrometric method (LC–MS/MS) was developed and validated for the quantification of SR9009 in horse blood using testosterone-d3 as the internal standard (IS). Chromatographic separation of analytes was achieved using an Acquity UPLC HSS C18 (2.1 × 150 mm, 1.8 μm). The mobile phase containing 5 mM ammonium formate (pH 3.0) and acetonitrile in 0.1 % formic acid (50:50, v/v) was used at a flow rate of 0.25 mL/min. The column effluent was detected by Qtrap 6500 quadrupole mass spectrometer using electrospray ionization and monitored by multiple reaction monitoring with positive mode. The precursor to product ion transitions of m/z 438.2→124.9 and m/z 292.2→109.1 were used to measure the analyte and IS, respectively. The assay demonstrated a good linear dynamic range of 0.5–2000 ng/mL for SR9009 in horse blood, with coefficient of determination (r^2) of =0.9965. The values for intra-day precisions of SR9009 were ≤3.8% with the accuracies ranged from 90.6% to 112.5%. The chromatographic run time was 12 min, making it possible to achieve a high throughput analysis. This method was used as a bio-analytical tool to quantify blood SR9009 concentrations in thoroughbred horse.

PT-081 [법과학]

비지도학습적 인공지능망을 이용한 법과학적 토양 분류

이충식*

국방부조사본부 과학수사연구소 약독물화학과

*Corresponding author: chj35@gmail.com

토양은 범죄현장과 증거물 사이의 상관관계에 대해 중요한 정보를 제공할 수 있다. 토양을 구성하는 물질들은 광물입자들, 탄산칼슘과 결정성염 같은 화학 침전물, 식물과 동물 구성 물질들, 곤충 껍질, 토양 미생물 등으로 다양하다. 토양의 법과학적 감정은 중광물, 경광물, 산화물, 유기물질, 동위원소, 꽃씨, 규조류, 유전자 등 토양 구성성분을 비교하거나 입자크기분포, 색상, 밀도분포 같은 물리적 특성을 비교할 수 있다. 이 연구는 대표적인 토양유기물인 지방산과 리그닌, 토양광물의 무기물 원소성분과 CIELAB에 근거한 색상 측정값을 비지도학습 딥러닝의 한 종류인 오토인코더(autoencoder)를 적용하였다. 오토인코더는 텐서플로우(tensorflow)를 가진 오픈소스 인공지능망 라이브러리 케라스(keras)를 사용하여 파이썬(python)에서 실행하였다. 측정된 데이터 특성에 따라 유기물과 무기물 성분은 시료량의 차이를 보정하기 위하여 제곱합의 제곱근(root sum of squares)로 각각 정규화하였고, 색상은 Min-Max 정규화를 적용하여 데이터 전처리를 수행하였다. 오토인코더는 인공지능망에 기초한 차원감소 방법중 하나이며, 입력변수에 대한 가중치 영향을 직접 확인할 수 있는 단일층 오토인코더를 구성하였다. 입력층은 49개, 차원축소의 병목층(bottleneck)인 은닉층은 9개로 구성하였다. 오토인코더는 입력데이터를 압축하는 인코더(encoder)와 압축데이터를 출력데이터로 재구성(reconstruct)하는 디코더(decoder)로 구성되고 역전파(backpropagation)를 사용하여 입력데이터와 재구성된 출력데이터 사이에 차이가 최소화되도록 최적화된 인코더 가중치(weights)와 디코더 가중치를 얻도록 훈련되었다. 초모수(hyper parameter)로 선형 및 비선형 활성화 함수를 적용하여, 정확도(accuracy)와 오차(MSE)를 비교하였다. 이 연구결과, 활성화 함수 linear, tanh와 elu의 정확도는 각각 0.987, 0.988, 0.988로 유사한 결과를 나타내었다. 또한 은닉층 특징(feature)에 대하여 계층적 군집분석(hierarchical cluster analysis)을 이용하여 토양을 군집화하였다. 인코더의 가중치는 은닉층 특징을 생성하는 입력변수의 영향력을 설명할 수 있다. 오토인코더의 가중치와 PCA의 loading을 비교한 결과, PCA보다 오토인코더에서 입력변수들이 차원축소된 특징들에서 더 다양한 영향을 주는 것을 확인하였다. 오토인코더는 딥러닝 중에서 비지도학습적 군집화와 패턴인식 특성을 가지기 때문에, 법과학에서 토양뿐만 아니라, 석유류, 잉크, 고무, 페인트, 고분자 등을 분류하고 유사성을 비교하는데 중요한 역할을 할 수 있을 것이다.

PT-082 [법과학]

화재잔류물의 GC-MS 분석을 통한 인화성 물질 검출 여부 판단 자동화를 위한 랜덤포레스트 기반 전문가 시스템 알고리즘

박치현^{1,*}, 박우용¹, 전수경¹, 이수민¹, 이준배²

¹국립과학수사연구원 대전과학수사연구소, ²국립과학수사연구원 대구과학수사연구소

*Corresponding author: pch0938@korea.kr

화재 잔류물에서의 인화성 물질의 사용 여부는 화재 사건에서 방화의 의도성 여부를 판단하는 중요한 지표로서, 휘발유, 등유, 경유, 유기용제류, 양초 등이 주로 사용되는 것으로 알려져 있다. 그러나 화재 현장의 높은 온도로 인한 인화성 물질의 변성 및 소실과, 연소 작용으로 인하여 발생한 다양한 물질들에 의하여 화재 잔류물에서 인화성 물질의 존재 여부를 판단하는 것은 상대적으로 높은 숙련도를 필요로 하고 있다.

인화성 물질 판단에 가장 널리 사용되는 분석 방법은 GC-MS로, 일반적으로 방화에 사용되는 인화성 물질 다수의 조성을 분리하여 확인하는 것이 가능하다. 인화성 물질의 판단은 SPME (Solid Phase Microextraction) 혹은 활성탄을 이용한 저비점 성분의 흡착, 디클로로메탄이나 디에틸에테르를 사용한 고비점 성분의 추출을 통해 이루어지며, 이를 통해 얻어지는 GC-MS 데이터에서 파악할 수 있는 지표 물질의 존재로부터 존재하였을 인화성 물질에 대한 분석자의 의사추론을 통해 분류된다.

인화성 물질의 존재 여부 판단에 사용되는 의사결정도식은 이진 데이터로부터 분석을 자동화하기 위한 알고리즘을 도출하는 것에 유용하게 사용될 수 있으나, 상기한대로 화재 잔류물의 경우 물질의 연소 및 증발로 인해 특정 물질의 존재 여부를 기반으로 하는 의사결정나무(Decision Tree)를 일차원적으로 적용할 경우 낮은 성능을 보이게 된다. 의사결정나무의 본질적인 한계인 순차분류에 의한 자유도 상실과 과적합 문제를 해결하기 위하여 사용되는 랜덤포레스트 솔루션은 앙상블을 활용하여 분류를 위한 데이터 접근 방향이 고정되지 않으며, 이로 인하여 전체 모델의 성능 손실이 억제된다.

본 연구에서는, 화재 잔류물의 GC-MS 데이터로부터 인화성 물질의 검출 여부 판단을 자동화하기 위한 일반적인 데이터의 처리법을 고찰하고, 데이터 기반으로 인화성 물질을 자동으로 분류하는 랜덤포레스트 기반 모델을 고안하였다. 또한, 랜덤포레스트의 주요 변수 추출방식을 이용하여 해당 모델이 실제 인화성 물질을 중요하게 판단하여 예측을 수행함을 확인하였다.

PT-083 [법과학]

최루 스프레이의 사용 여부 판단을 위한 성분 검출 및 분석 사례연구

박우용^{1,*}, 박치현¹, 전수경¹, 주현경², 김경민²

¹국립과학수사연구원 대전과학수사연구소, ²국립과학수사연구원 서울과학수사연구소

*Corresponding author: wooyongp@korea.kr

최루 스프레이는 총포·도검·화약류 등의 안전관리에 관한 법률 제2조 4항에 따라 사람의 활동을 일시적으로 곤란하게 하는 최루(催淚), 또는 질식 등을 유발하는 작용제를 분사할 수 있는 기기로 정의된다. 시중에 판매되는 최루 스프레이는 상대방을 단시간 효과적으로 무력화 할 수 있기 때문에 방위 행위를 위하여 판매가 허가되어 있으나, 정당방위가 인정되지 않는 호신 이외의 용도로 타인에게 사용하는 것은 범죄에 해당된다. 이를 막기 위하여 최신의 최루 스프레이는 사용시 높은 경보음 등을 발생시켜 오용을 차단하는 등의 수단을 도입하고 있으나, 사용되는 물질이 저렴하며 구조가 간단한 특성상 최루 스프레이의 오용 사례는 지속적으로 발생하고 있다.

이에 해당하는 사례의 예시로서는 피의자가 피해자의 안면부 등의 신체에 직접적으로 최루 스프레이로 추정되는 물질을 분사하여 피해자를 위협하거나 행동을 제한하는 경우, 피해자의 물건 등에 분사하여 피해자에게 불안을 조성하는 경우 등이 존재한다. 이러한 경우에 수사 단계에서 피의자 및 피해자의 피부와 범행 당시 입고 있던 의류, 최루 스프레이가 분사되었을 것으로 생각되는 사물의 표면 등에서 최루 스프레이의 사용 여부를 확인하기 위하여 채증이 이루어진다.

최루 스프레이에 대표적으로 사용되는 것은 고추로부터 추출되는 천연 캡사이신(Capsaicin), 겨자나 고추냉이로부터 추출되는 알릴이소티오시아네이트(Allyl isothiocyanate), 합성 캡사이신으로 널리 알려진 PAVA(Pelargonic acid vanillylamide) 등의 성분 및 해당 성분들의 유도체들로 알려져 있다. 이러한 물질들을 채증된 증거물로부터 검출하기 위하여 고상미량추출법과 용매추출법을 이용한 GC-FID 및 GC-MS 분석법이 사용된다.

본 연구에서는 최루 스프레이 내지 최루액이 연루되었거나 연루된 것으로 추정되었던 사건 사례에서 GC-FID 및 GC-MS를 사용해 최루 스프레이의 대표적인 성분 및 그 유도체, 용매로 사용되는 메탄올 등을 검출함으로써 최루 스프레이의 사용이 확인되었던 분석 사례에 대한 결과와 함께 해당 결과로부터 추후 최루 스프레이의 사용 여부 판단을 위한 분석 방법의 표준점을 제안하였다.

PT-084 [법과학]

Use of ethyl glucuronide and ethyl sulfate as a marker of distinction of ethanol source in postmortem blood

조영훈^{1,*}, 이준배¹, 고정아¹, 박민주¹, 김현지², 권미아²

¹대구과학수사연구소 독성화학과,

²국립과학수사연구원 화학과

*Corresponding author: JoYH1114@korea.kr

서론: 사후 부패 시 박테리아, 효모, 부패 등 내부적인 요인에 따라 에탄올이 자체적으로 생성될 수 있기 때문에 사망 전 음주 (알코올) 여부를 판단하는데 어려움이 있을 수가 있다. 이를 구분하기 위한 부패 지표로서 노르말프로필알코올 (n-propanol, *n*-PrOH) 생성 비를 고려하여 판단하고 있으나, 광범위할 뿐만 아니라 그 정확성에 대한 정보가 불명확 할 수 있다. 이를 해결하기 위한 음주 대사 (metabolome) 지표로서 에틸글루쿠로나이드 (ethyl glucuronide, EtG)와 에틸설페이트 (ethyl sulfate, EtS)를 이용하여 그 특이성 및 감도의 장점을 통해 법과학에서 응용되고 있다.

목적 및 분석: 본 연구 사례 (case of postmortem)는 사망 전 음주 또는 사후 에탄올 생성 여부를 정확성을 알기 위한 방법으로 혈액에서 EtOH와 *n*-PrOH는 HS-GC/FID, EtG와 EtS는 LC-MS/MS로 분석하였다.

결과: Table 1 결과에서 No. 1와 2는 사후 부패로 인해 생성된 EtOH로 판단하였다. No. 3은 음주 대사 지표로서 EtG, EtS가 음주 여부 기준 (0.09 mg/L, 0.03 mg/L) 이상으로 검출되는 것으로 사망에 이르기 전 음주를 하였으며, 특히 이 사례에서는 며칠 동안 반복적으로 자주 술을 마셨을 가능성이 매우 높은 것으로 의심되었다.

결론: 사후 혈액에서 법과학적으로 음주 또는 부패에 따른 에탄올 생성 여부를 정확히 구분할 수 있는 EtG와 EtS를 통상적인 (routine) 분석 방법으로 연계할 필요가 있겠다.

Table 1. Concentration of alcohols(EtOH, *n*-PrOH), EtG and EtS in postmortem blood

No.	EtOH(g/L)	<i>n</i> -PrOH(mg/L)	EtOH/ <i>n</i> -PrOH	EtG(mg/L)	EtS(mg/L)
1	0.20	LOD	NA	LOD	LOD
2	0.72	21	34.3	LOD	LOD
3	LOD	NA	NA	2.97	1.33

1 case: 해상표류 (NA in *n*-butanol), 2 case: 하천 발견, 3 case 방(독거)

LOD(low of detection)

NA not available

PT-085 [법과학]

An experimental analysis of the use of the CFK equation in predicting carboxyhemoglobin (COHb) formation

Yuna Kim^{*}, Min-Hui Son, Yu Ran Lee, Mia Kwon

^{*}Forensic Chemistry Division, National Forensic Service

^{*}Corresponding author: siyusang@korea.kr

Carbon monoxide (CO) is recognized as a toxic gas and the toxicity relates to its high affinity for hemoglobin, producing carboxyhemoglobin (COHb). The Coburn-Forster-Kane (CFK) Equation is an established model of COHb kinetics during CO exposure. However, disadvantages of its use are many of variables and the fact that value of the variables must in turn be obtained from other equations. So, the CFK solution tends to over- or under-predict COHb levels in various forensic scenes and situations.

Recently, in Korea, as CO poisoning patterns by portable butane heaters in vehicles or tents during outdoor activities such as car camping have increased, the application of the CFK model for this CO exposure scenario was reviewed through the simulating experiment for the toxicological issues.

Two different single burner radiant heaters equipped without an oxygen (O₂) depletion sensor and a hatchback style vehicle (RENAUT CLIO, 1,146L, 4.1m x 1.7m x 1.4m) were tested in this work. After 70 minutes of turning on two butane heaters in the closed vehicle, both heaters were exhausted and the concentrations of O₂ and CO became 14.7 % and 1,070 ppm, respectively. The predicted COHb by CFK correlation curve is *ca.* 60 % but the observed COHb in postmortem blood of two victims (an in 40s and a 4-year- old) were 74 % and 73 %, respectively. The observed COHb was higher than the predicted level and these results demonstrated both victims were in a worse situation than were expected. It appears that this insufficient prediction results from the misapplication of the assumption values in the lung when synergistic effects of the depletion of O₂ and butane co-exposure after exhausted are considered, and model parameters based on CO variations alone are inadequate for this accident pattern.

PT-086 [법과학]

염료 동일성 판단을 위한 기기분석법 비교

Comparison of instrumental analysis for determining dye identification

이준배^{1,*}, 조영훈¹, 고정아¹, 박민주¹, 권미아²

¹국립과학수사연구원 대구과학수사연구소, ²국립과학수사연구원 화학과

*Corresponding author: pajlee@korea.kr

색상은 색이 갖는 상징적 의미를 통해, 별도의 글이나 문구 없이도 의미를 전달할 수 있는 강력한 수단이 된다. 아울러 삶의 방식과 문화가 다양해지고 화학 합성기술과 함께 소재산업이 발전함에 따라 여러 가지 목적의 색상에 대한 요구가 제기되면서, 현대사회에서 색상은 시각에서 인지하는 감각 이상을 의미하게 되었다. 이에 따라 진보된 색감을 얻기 위해 여러 가지 염료가 개발되어 실생활에 적용되고 있다. 그러나 고유 목적의 염료제조에 따른 제조사간 기술적 분쟁 또한 발생되고 있는 실정이다. 본 사례에서는 서로 다른 제조사에서 만든 빨간색과 노란색 및 파란색 계열의 염료의 색상과 분자구조에 대하여 여러 분석기기를 통하여 비교분석 하였다.

우선, 색차계를 통한 색상의 비교를 시행하였고 이어 TLC를 통한 분리조작과 UV/Vis spectrum을 비교 하였다. 아울러 Py-GC/MS를 통한 열분해산물에 대한 스크리닝과 soft ionization method인 MALDI-TOF/MS (Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization Mass Spectrometry) 및 ESI-MS (Electrospray Ionization Mass Spectrometry)를 통하여 각각에 대한 molecular ion과 fragment ion들을 파악하고 이들 ion들에 대해 DESI (Desorption Electrospray Ionization)을 통한 분석을 시행하였다. 그러나 이들 분석방법은 색상비교나 분자량 분포 등에 대한 스크리닝은 가능하였으나 동일성에 대한 직접적인 정보를 얻을 수 있는 분자구조에 대한 정보를 얻기에는 한계가 있을 수밖에 없었다. 따라서 NMR (Nuclear Magnetic Resonance) spectroscopy를 이용한 비교분석을 시행하였으며 이들에 대한 분석결과의 해석을 통하여 이미 얻은 분자량에 대한 정보와 함께 각각의 염료에 대한 동일성여부를 판단할 수 있었다. 염료와 같이 복잡한 구조의 화합물에 대한 단순한 비교분석은 언급된 UV/Vis, Py-GC/MS, MALDI-TOF/MS, ESI-MS 및 DESI 등 여러 가지 기기분석 방법 가운데 NMR에 의한 분석결과가 가장 신속하고 유용하며 강력한 결과를 얻을 수 있음을 확인하였다.

PT-087 [일반]

폴리우레탄 및 키토산 복합 폼에 함유된 키토산 확인에 관한 연구

A study on the qualitative analysis of chitosan in polyurethane foam coated with chitosan using Pyrolysis-GC-MS

박광서¹, 최은경^{1,*}

Kwang Seo Park, Eun Kyung Choe^{*}

¹한국생산기술연구원 환경규제기술센터

*Corresponding author: ekchoe@kitech.re.kr

키토산(poly-β-1,4-N-D-glucosamine)은 게, 새우 등의 갑각류가 가지고 있는 성분인 키틴(poly-N-acetyl-D-glucosamine)을 인체 내에서 흡수하기 위해 탈아세틸화 시켜 얻어낸 천연 고분자 물질이다. 키토산의 주쇄인 polysaccharide ring의 관능기 중 아미노기는 금속 및 생체재료와 착물을 형성할 수 있는 능력을 가지고 있고, 수분에 대한 강한 친수성과 함께 킬레이팅 능력을 보유하고 있어 식품, 의약품, 산업폐수 처리용 응집제, 섬유 제조 등의 분야에서 용도 범위가 확대되고 있다. 폴리우레탄 폼은 창상 부위에 분비물을 흡수하고 상처를 보호하는 용도로 알려져 외과적 상처의 드레싱 등의 목적으로 활용되는데, 천연 고분자인 키틴/키토산으로부터 제조되는 상처 치료용 폴리우레탄 폼은 기존의 제품에 비해 상처 치료 효과가 월등하고, 유해 화합물질과 중금속 흡착능력이 있어 제독 효과를 가질 수 있다는 특징을 갖는 것으로 알려진 바 있다.

키토산이 코팅된 폴리우레탄 폼 내에 키토산이 고르게 함유되었음을 확인하기 위하여 시료는 폴리우레탄 프리 폴리머를 발포하여 제조된 폴리우레탄 폼과 이 폴리우레탄 폼의 표면에 키토산 용액을 코팅한 폼, 그리고 키토산 파우더로 각각 나누어 준비하였다. 키토산이 일반적인 유기 용매에 잘 녹지 않기 때문에, 고분자를 열분해하는 Py-GC-MS 시스템을 이용하여 열분해된 생성물을 통해 확인하였다. 열분해 온도는 키토산의 열분해가 완전히 마치는 약 500 °C로 설정하였을 때, saccharide group과 아미노기(-NH₂)가 열적으로 안정화된 고리형 화합물인 pyridine ($m/z = 79$), pyrazine ($m/z = 80$), pyrrole ($m/z = 67$), 2-methyl-2-imidazoline ($m/z = 84$) 그리고 4-hydroxyquinazoline ($m/z = 146$) 등이 검출되었다. 500 °C는 폴리우레탄 폼 자체를 열분해할 수 있을 정도의 높은 온도이므로 폴리우레탄의 큰 매질 효과가 관찰되었으나, 질량 분석기의 EIC (Extracted Ion Chromatogram)를 활용하여 키토산이 코팅된 폴리우레탄 폼 내에 존재하는 물질이 키토산의 열분해 화합물과 포함하고 있는 결과를 나타내어 키토산이 잘 코팅되었음을 확인하였다.

PT-088 [일반]

바이오항공유 활용을 위한 나무 유래 열분해오일의 용매별 액액분리 구성성분 연구

전화연^{1,2}, 박조용¹, 김재곤^{1,*}

¹한국석유관리원 석유기술연구소 ²*고려대학교 환경공학과

*Corresponding author: jkkim@kpetro.or.kr

급격한 기후 변화에 대응하여 온실가스 배출 저감 또는 감축, 전환 기술은 다른 연료분야에서는 활발히 연구 중이며 최근에는 항공유에서도 이러한 움직임이 일어나고 있다. 2018년 항공기에서 연료 사용으로 배출되는 이산화탄소는 전세계 배출량의 2.4%, 수송연료 기준 12%로 계산되고. ICAO는 CORSIA를 통해 온실가스 감축을 계획하고 있고 여러 방안 중 하나로서 지속가능 연료인 바이오연료의 활용이 연구되고 있고 이러한 바이오항공유는 현재 활발히 연구되고 있다. 본 연구과제에서는 기존에 ASTM에 등록된 바이오항공유가 아닌 나무 열분해오일 기반의 바이오항공유를 업그레이딩 하기 위한 유럽 품질 기준인 EN 16900에 따라 발열량 등 14항목을 만족하는 열분해오일 원액을 확보하여 각기 다른용매(Hexane, Ether, Chloroform)을 통해 액액분리를 수행한 결과 클로로포름(chloroform)에서 가장 높은 수율을 나타내었다. 또한 최종적으로 액액분리된 시료를 GC-MS TOF(Time of Flight)로 분석한 결과 열분해오일 원액에 많이 포함된 아세트산(acetic acid)는 줄어들고 페놀(phenol)류, 프로펜(propene) 및 퓨라논(furanone) 등으로 구성되어 있는 것을 파악하였고 이를 탈산소화한 시료를 분석하였을 때 기존 Jet A-1이 C7~C16으로 구성되어 있는것과 달리 C5~C10으로 구성되어 있어 이는 휘발유의 구성과 흡사하여 저분자물질의 축합이 필요한 것으로 판단된다. 또한 구성성분은 Cycloparaffin이 57%, Iso-paraffin이 10%, n-Paraffin이 25%, Olefin이 7%, Aromatic이 0.1%미만으로서 기존 항공유와는 비교되는 물성을 가지고 있고 산소함량이 높아 추가적인 공정이 필요할 것으로 판단된다. 최종적으로는 나무 유래 열분해오일에서 생산된 바이오항공유를 항공유와 혼합하여 사용하려면 리그닌(lignin) 등 고비점물질을 추출공정을 통해 제거하는 한편 시료의 지속적인 증류성상 측정 혹은 SIMDIS 측정을 통하여 추후 업그레이딩 공정 시 탄소 침적 및 현존검 품질기준 초과를 막을 수 있을 것으로 판단된다.

PT-089 [일반]

**Laser desorption/ionization time of flight mass spectrometry
(LDI-TOF-MS)를 이용한 OLED 분석**

이석열^{1,*}, 성경희¹, 오윤석², 김민기², 신동진²

¹LG Display, ²ASTA Inc.

*Corresponding author: lsr@lgdisplay.com

OLED (Organic light emitting diodes)는 유기물이 자체 발광하는 소자로서 TV, 휴대폰 등 각종 가전기기에 광범위하게 사용되고 있으며, OLED 제품의 품질 향상을 위해 OLED 재료/공정에서 다양한 분석기들이 사용되나, 구조와 재료 복잡성으로 지속적인 분석법 개발이 필요하다.

OLED는 Heterostructures의 유기 박막으로 (10~30nm) Secondary ion mass spectrometry (SIMS), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS)에서 분석이 제한적이며, Infrared spectroscopy (IR)는 광에 의한 영향과 금속인 Cathode를 제거해야 되는 어려움, Liquid chromatography mass spectrometry (LC-MS)와 Nuclear magnetic resonance (NMR) 등은 Solvent에 용해 시 발생 될 수 있는 Degradation의 영향으로 분석의 제약이 있다.¹⁾

Laser desorption/ionization time of flight mass spectrometry (LDI-TOF-MS)는 Solvent의 전처리 과정에서 발생할 수 있는 Degradation을 방지하는 등 기존 분석법과는 다르고, OLED 적층 구조에서 mass-to-charge (m/z) ratio 측정으로 개별 성분의 검출이 가능, 공정에서 발생할 수 있는 다양한 이물 또는 재료 변성과 오염 성분 등의 분석에도 유용한 기술이다. 또한 Laser focus system 적용으로 Beam size 약 5 μm 로 기존의 분석법에서 분석하기 어려웠던 국소 영역의 분석 / Image mapping으로 mass 성분의 분포 확인이 가능하다.

본 연구에서는 Solvent의 영향이 없는 직접 분석, 국소영역 분석이 가능한 Image mapping, 그리고 기존의 분석 기법인 SIMS와 LC-MS 보다 분석시간과 Data 해석에서 장점인 LDI 분석기법에 대해서 보여주고자 한다.

1) S. scholz, K. walzer, K. Leo, *Adv. Funct. Mater.*, 2008, 18, 2541-2547.

PT-090 [일반]

유기 에어로졸 입자의 점성도(viscosity) 측정

송영철^{1,*}

^{1,*}한국화학연구원 화학분석센터

*Corresponding author: ycsong@kRICT.re.kr

Organic aerosol particles are known to often absorb/desorb water continuously with change in gas phase relative humidity (RH) without crystallization. Indeed, the prevalence of metastable ultraviscous liquid or amorphous phases in aerosol is well-established with solutes often far exceeding bulk phase solubility limits. Particles are expected to become increasingly viscous with drying, a consequence of the plasticizing effect of water. We report here measurements of the variation in aerosol particle viscosity with RH (equal to condensed phase water activity) for a range of organic solutes including alcohols (diols to hexols), saccharides (mono-, di-, and tri-), and carboxylic acids (di-, tri-, and mixtures). Particle viscosities are measured over a wide range (10^{-3} to 10^{10} Pa s) using aerosol optical tweezers, inferring the viscosity from the time-scale for a composite particle to relax to a perfect sphere following the coalescence of two particles. These component viscosities are consistent with the conclusion that the viscosity of α -pinene SOA is most likely in the range 10^5 to 10^8 Pa s.

PT-091 [일반]

Establishment of analytical method for five allergenes in Sanitary Napkins

심희정¹, 김종환^{1,*}, 안지영¹, 조유진¹, 서종수¹

¹안전성평가연구소 경남분소 환경화학연구그룹

*Corresponding author: jjong@kitox.re.kr

Atranol, chloroatranol, evernic acid, (+)-usnic acid and atranorin are known as chemicals causing contact allergy. There are several research papers about analysis of some of these compounds from lichen extracts or perfumes. In this study, we optimized simultaneous determination method for atranol, chloroatranol, evernic acid, (+)-usnic acid and atranorin from sanitary napkins using ultrahigh-performance liquid chromatography with tandem mass spectrometry (UHPLC-MS/MS). Using unscented sanitary napkin in which these compounds were not detected, matrix-matched calibration curves were plotted. The linear ranges for chloroatranol, evernic acid, (+)-usnic acid and atranorin were 50-1000 ng/g ($r^2 = 0.9988-0.9998$) and for atranol were 10-200 ng/g ($r^2 = 0.9997$) from unscented sanitary napkin matrix. The accuracy of the method was checked by recovery results and the precision of the method was based on the relative standard deviations (RSDs) of a set of three replicates. The mean recoveries of 5 allergenes were 86.0–109.8 % and RSDs were within 11.5%. It is considered that this new approach for simultaneous determination of five allergenes validated by UHPLC-MS/MS can be applied to the commercially available sanitary napkins.

PT-092 [일반]

**액체크로마토그래피 질량분석기를 이용한 비스페놀 3종과
프탈레이트 6종의 다성분 동시분석법 확립**

신민철¹, 이승민, 김종환*

¹안전성평가연구소 환경화학연구그룹

*Corresponding author: jjong@kitox.re.kr

내분비계장애물질은 환경에 노출된 화학물질이나 환경 내에 존재하는 물질이 생체 내에 들어와 내분비계에 정상적인 대사기능을 방해하는 물질이며, 쉽게 분해되지 않고 체내 지방 및 조직에 농축되는 특성이 있다. 대표적인 물질 중 비스페놀류와 프탈레이트류는 플라스틱 가소제로 주로 사용되며, 식품을 조리하기 위한 기구 및 포장 용기 등을 통해 오염되는 것으로 알려져 있다.

본 연구에서는 주로 지방에 축적되는 물질의 특성을 고려하여 식품 조리에 많이 사용되고 있는 옥수수기름 중 비스페놀 3종(Bisphenol A, Bisphenol F, Bisphenol S)과 프탈레이트 6종(Benzyl butyl phthalate, Dibutyl phthalate, Diamyl phthalate, Bis(2-ethylhexyl) phthalate, Dicyclohexyl phthalate, Diisobutyl phthalate)의 동시분석법을 검증하였다. 분석법 검증으로 특이성, 시스템 적합성, 직선성, 정확성 및 정밀성(일내 변동(Intra-day variations), 일간 변동(Inter-day variations)) 그리고 안정성 항목을 평가하였다. 액체크로마토그래피 질량분석기에서 프탈레이트 6종은 0.1-10.0 ng/mL, 비스페놀 3종은 0.1-5.0 ng/mL의 농도범위를 정량한계로 설정하였으며, 직선성의 상관계수는 0.99 이상으로 우수하였다. 정확성 및 정밀성 또한 $100 \pm 20\%$, RSD $< 20\%$ 의 기준에 적합하였고 9종의 물질은 실온조건에서 최소 7일 동안 안정한 것으로 확인을 하였다. 본 연구를 통해 확립된 프탈레이트류와 비스페놀류의 다성분 동시분석법은 앞으로 식품 및 생활환경제품의 유해물질 분석법에 효과적으로 활용될 수 있을 것으로 보인다.

PT-093 [일반]

**Synergistic Effect of Collagen Scaffold Loaded
A Biomaterial With Hemostatic Function**

Yoon Sook Na, So Hee Jang, Ryun Seung Kim, Dong Hoon Kwak*

DenHouse Co.,Ltd.

*Corresponding author: velvety7@naver.com

Collagen scaffolds have been widely used in tissue engineering due to several excellent properties. However, the low mechanical strength and osteoinductivity of collagen limit its wider applications in bone regeneration field. By incorporating different biomaterials, properties such as structural stability, porosity, osteoinduction, and bone formation of the collagen matrix can be greatly improved. In this study, we successfully constructed a composite of thrombin and a collagen scaffold *in vitro* and it was shown that numerous porous structure existed in collagen thrombin complex scaffold. When exposed to blood, it was confirmed that collagen scaffold structure stability maintained and transplanted either the composite or collagen scaffold alone into bone loss area in animal models, and compared their effects. At 4- and 8-weeks days after transplantation of collagen scaffold containing thrombin, bone repair is significantly increased compared with collagen scaffold alone. These results suggested that collagen and thrombin scaffold is useful in bone regeneration to increase the structural stability and osteoinduction. This work was supported by the Technology development Program (S2846569) funded by the Ministry of SMEs and Startups(MSS, Korea).

PT-094 [일반]

Development of wavelength-dependent three-dimensional light-sheet-based super-resolution microscopy

Yingying Cao¹, Seong Ho Kang^{1,2*}

¹Department of Chemistry, Graduate School, Kyung Hee University, Korea

²Department of Applied Chemistry and Institute of Natural Sciences, Kyung Hee University, Korea

Three-dimensional light-sheet super-resolution microscopy (3D LSRM) was developed, which combined wavelength-modulation and astigmatism imaging method. Instead of fluorescence molecules, anisotropic plasmonic nanoparticles with photostable scattering were used as imaging probes. A cylindrical lens was inserted into the imaging pathway to make the point spread function of scattering image elliptical. With slicing the gold nanorods at 10 nm interval step and fitting by 3D Gaussian equation, their center coordinates could be super-localized in 3D with high spatial and axial resolution. In addition, the 2D and 3D orientation of anisotropic nanoparticles were determined by polarization-based superlocalization and reconstructed by least-squares algorithm and a lab-made least cubic algorithm. This 3D LSRM imaging technique was a reliable and useful for 3D non-fluorescence super-resolution imaging.

PT-095 [일반]

어류에서 농약류(esfenvalerate, triclosan)와 PAHs 7종 동시분석법 개발

최경윤¹, 신호상^{2,*}

¹공주대학교 환경과학과, ^{2,*}공주대학교 환경교육과

*Corresponding author: hshin@kongju.ac.kr

산업 활동이 고도화되고, 생활편의를 위해 수많은 화학물질을 사용·유통함에 따라 다양한 수질오염 물질들이 하천으로 유입되고 있다. 이러한 수질오염물질들이 하천에 유입됨에 따라 수생태계에 악영향을 주고 있다. 또한 수질오염물질들은 먹이사슬에 따라 생물축적이 되고 있어, 피해는 누적되고 있다. 이러한 수생태계에 미치는 영향을 평가하고 모니터링하기 위해서는 수질오염물질의 분석법 개발이 필요하다. 따라서 본 연구에서는 어류의 농약류 2종과 다환방향족탄화수소류(PAHs) 7종을 동시분석하는 분석법을 개발하였다. 어류에서 오염물질을 디클로로메탄과 아세토니트릴로 추출하여 SPE로 클린업을 하고, 지방을 제거하여 GC-MS/MS로 분석하였다.

농약류와 PAHs의 정량한계는 0.01~0.07 µg/kg 이었고, 직선성은 0.991 이상이었다. 회수율은 53.0~72.1 %이었으며, 정확도는 81.9~109 %범위 안이었고, 정밀도는 14.3 % 이내이었다.

어류에서 농약류와 PAHs 동시분석의 가장 큰 어려운 점은 지방제거이다. 본 실험에서도 지방을 최대한 제거하였으나, 완벽한 제거에는 어려움을 겪었다. 향후 지방제거방법을 개선하면 더욱더 미량분석이 가능할 것으로 판단된다. 또한 이 분석법은 향후 위해성평가와 같은 영향평가 및 모니터링에 활용될 것으로 생각된다.

PT-096 [일반]

Analysis of flavor additives added to Capsules in Cigarettes and Heat-not-Burn tobacco products

Kyeong-Yun Choi¹, Ho-Sang Shin^{2*}

¹Department of Environmental Science, Kongju National University,

^{2*}Department of Environmental Education, Kongju National University

*Corresponding author: hshin@kongju.ac.kr

Flavor additives have been contained in the capsules in filter of capsule cigarettes. These flavor additives are inhaled by the consumer when they bite the filters to break the capsules. The WHO proposed a prohibition on the addition of flavor agents in tobacco products through the Framework Convention on Tobacco Control (FCTC). However in Korea, regulations on flavor additives in tobacco products are inadequate. In addition, it is necessary to investigate the flavor additives of capsules in Heat-not-burn tobacco products (HTP). Therefore, this study compared the analyzed flavor additives in the capsules of Heat-not-burn tobacco products and capsule cigarettes on the market in Korea. In the procedure, the capsule was broken in methylene chloride to extract flavor additives, which were analyzed directly using GC-MS. Flavor additives were grouped into flavor categories and compared.

Among 109 flavor additives were detected, 80 flavors were found in both cigarettes and HTP. The total amount of flavors was 5.43 µg/capsule in HTP, and 4.45 µg/capsule in cigarettes. In HTP, 1.2 times more were detected than cigarettes. Also, when comparing flavor additives by categories, cooling/minty was detected the most in HTP (70.4 %) and in cigarette (74.1 %), followed by fruity (8.52 %), caremellic (7.25 %) in HTP and green (9.71 %), fruity (3.94 %) in cigarettes.

The flavor additives are added into capsules in order to reduce the harshness of cigarette smoke, facilitate the inhalation, and induce the smoking, with consumer's preferred flavors. Therefore, it is necessary to have active regulations on the flavor additives in the capsule.

PT-097 [일반]

**Optimization of asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF)
for size characterization of nanocellulose**

Jin Wook Kim, Meiyu Zhang, Wang Da, Jae Hyun Kim, Jaeyeong Choi and Seungho Lee[★]

Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

Nanocellulose is known as the most readily available natural polymer on earth that can be obtained on plant cell walls via mechanical or chemical treatment. It is highly transparent, reproducible, biodegradable and biostable. Recently, due to its high thermal stability, high mechanical strength and high hydrophilicity, nanocellulose has been in the limelight as an environmentally friendly new material with high functionality.

Nanocellulose is usually better dispersed than microcellulose, and can significantly improve the mechanical strength of macromolecules in more efficient way. It is expected that the size of the nanocellulose will affect its physical properties.

There are a few methods for sizing of nano materials including the dynamic light scattering (DLS), scanning electron microscopy (SEM), and asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF). In this study, AsFIFFF was used to measure the size and the size distribution of nanocellulose. AsFIFFF can separate particulate material over a wide range from 10 nm to 100 μ m, and, compared to chromatography methods, AsFIFFF allows easier selection of the solvent. However, to obtain reliable results from AsFIFFF, a number of parameters influencing AsFIFFF separation need to optimized.

In this study, we have optimized several AsFIFFF parameters such as the cross-flow rate, channel flow rate, carrier liquid composition, and the type of the membrane for the better separation of nanocellulose.

PT-098 [일반]

Investigation of effect of dioxybenzone (a UV filter) contents on size of solid lipid nanoparticle (SLN) using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF)

Miyeon Park, Meiyu Zhang, Wang Da, Jae Hyun Kim, Jaeyeong Choi and Seungho Lee

Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

Solid lipid nanoparticle (SLN) has recently been used as a colloidal carrier in cosmetics for controlled release of ingredients such as UV filters, improving chemical and physical storage stability, and improving skin occlusion. Studies showed that the UV protection effect of UV filters encapsulated in SLN is influenced by the size of SLN.

This study aims to study the dependence of UV protection effect on the size of SLN by asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) coupled with photodiode array (PDA) detector. The conditions of AsFIFFF such as the cross-flow rate and carrier composition were optimized.

In this study, the size of SLN was adjusted by controlling the ratio of the lipids, Tween 80 (dispersing agent), and dioxybenzone (UV filter).

Results suggested that AsFIFFF is a suitable technique for characterizing the size of SLN. The channel flow rate of 1.0 mL/min and the cross-flow rate of 4.0 mL/min were chosen. Among the tested mobile phases, distilled water, 0.03% (w/v) SDS, 0.038% (w/v) CTAB and 0.025% (w/v) Tween 80, distilled water was proved to provide the best separation. The UV protection effect tends to decrease as the size of the SLN increases.

PT-099 [일반]

Development of a method for determining lamellarity of lipid vesicles using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS)

Binnam Kang, Meiyu Zhang, Wang Da, Jae Hyun Kim, Jaeyeong Choi and Seungho Lee*

Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

Lipid vesicle is widely used for drug delivery due to its hollow structure and low toxicity. They are classified as multilamellar vesicle (MLV) and unilamellar vesicle (ULV) according to the number of lipid bilayers. Lamellarity affects the size distribution and stability of lipid vesicles as well as the encapsulation efficiency and the drug release kinetics. It is thus necessary to develop a methodology for identifying the lamellarity of lipid vesicles.

In this study, we proposed a method for distinguishing MLV and ULV using asymmetric flow field-flow fractionation coupled with a multi-angle light scattering detector and differential refractometer (AsFIFFF-MALS-dRI). The AsFIFFF-MALS-dRI provides the rms radius, hydrodynamic radius and the molar mass. The molar masses from AsFIFFF-MALS-dRI were compared with those calculated from the size of the lipid vesicles to determine the lamellarity of lipid vesicles.

Results showed that the lamellarity of lipid vesicles is affected by the extruder flow rate and the lipid concentration. The AsFIFFF-MALS-dRI provided a useful tool for determining the lamellarity of lipid vesicles. This method should be useful for the quality control of lipid vesicles in the fields such as drug delivery applications.

PT-100 [일반]

Label-free impedimetric sensor based on electropolymerized molecularly imprinted polymer for determination of luteolin.

이돈희, 이원용*

연세대학교 화학과

*Corresponding author: wylee@yonsei.ac.kr

Simple, rapid and effective electropolymerized molecularly imprinted polymer(e-MIP) sensor has been developed by electrochemical impedance spectroscopy. e-MIP based impedimetric sensor was developed by electropolymerization of β -cyclodextrin(β -CD) in the presence of luteolin on glassy carbon electrode surface for sensitive detection of luteolin. The experimental parameters, including polymerization conditions, template extraction after polymerization, influence of pH were all optimized. The present e-MIP sensor can selectively capture the target luteolin from sample solutions through specific interaction between the e-MIP on the sensor surface and luteolin. Therefore, the present polymerized β -CD can be used as a receptor for luteolin as an alternative to specific antibodies or aptamers. The selective binding of luteolin to the β -CD polymer on the fabricated e-MIP sensor has led to the increase in the electron transfer resistance which has been directly monitored by electrochemical impedance spectroscopy in the presence of 5.0 mM $K_3Fe(CN)_6/K_4Fe(CN)_6$ (1:1, v/v) redox couple. The luteolin imprinted polymers using β -CD as functional monomer have provided highly stable and effective binding cavities for luteolin.

PT-101 [일반]

Determination of Capsaicin based on $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ Electrogenerated Chemiluminescence

Sang Jung Lee, Won-Yong Lee*

Department of Chemistry, Yonsei University

*Corresponding author: wylee@yonsei.ac.kr

The spicy taste we feel when we eat is related to the chemical called capsaicinoids. The capsaicinoids are generally structures with vanillylamide and hydrophobic fatty acid, and there are 11 types, of which capsaicin and dihydrocapsaicin make up the majority. Capsaicin, as well as food ingredients, has been shown to have beneficial effects in the body such as anti-cancer activity, antioxidant effects, fat burning, and pain relief. Then the development of analytical methods for detecting and quantifying capsaicin has become important in the pharmaceutical field beyond the food industry. Research papers on electrochemical methods to detect capsaicin have been published steadily over the last decade. This is because the electrochemical method is low in cost, has a simple detection system, and can detect capsaicin with high sensitivity. All the electrochemical analysis so far have been methods of confirming the current value or impedance value through the direct oxidation/reduction reaction of capsaicin. In this study, we will propose a new analytical method to detect capsaicin by $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ -ECL using capsaicin as a co-reactant. The detection method proposed through this study is very simple method that uses bare GCE without modification of the electrode surface, and can be measured in a solution phase by mixing analyte with $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ solution without pre-concentration process. Through experiments, we confirm the electroanalytical properties of the capsaicin- $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ -ECL sensor, and actual application by a real sample test.

PT-102 [일반]

레이저 유도 플라즈마 분광 분석법을 이용한 코코피트 배양토의 원소 분석 방법 연구

장진실¹, 최한범¹, 송지연¹, 서지훈¹, 오재민¹, 주신영¹, 이찬호¹, 이용훈^{1,2,*}

¹목포대학교 화학과, ²*목포대학교 화학과, 유·무기소재 및 천연물 분광화학 분석센터

*Corresponding author: yhlee@mokpo.ac.kr

코코피트는 원예용 상토로 버려지는 코코넛의 껍질에서 유기질을 추출하여 만들어지는데 양분도 풍부하고 친환경적이라는 장점이 있다. 따라서 최근 코코피트는 농업 및 원예 산업 현장에서 널리 사용되고 있는 추세이다. 작물이 재배되는 토양의 성분은 작물의 영양 및 독성 성분에 직접적인 영향을 주기 때문에 원소 조성 분석이 매우 중요하다. 전통적인 원소 분석법은 시료 전처리 과정이 복잡하고 분석 장비의 가격이 비싸서 농업 현장에서 실용적으로 활용되기 어렵다.

레이저 유도 플라즈마 분광법(Laser-Induced Breakdown Spectroscopy, LIBS)은 시료 전처리 과정에서 강산 등 시료 전처리용 시약을 사용하지 않고, 짧은 시간에 여러 원소들을 동시에 분석할 수 있어서 보다 친환경적이고 실용적인 장점이 있다. 본 연구에서는 LIBS를 이용하여 코코피트 배양토의 성분 원소들을 확인하고, 원소 분석을 하는데 필요한 표준물질을 제작하여 보았다. 2년간 작물을 키우는데 사용된 코코피트 배양토를 볼밀을 이용하여 혼합분쇄하고 펠렛으로 가압 성형하여 LIBS 스펙트럼을 얻고, 스펙트럼에 관찰된 방출선들로부터 C, Mg, Si, Ca, Mn, Fe, Al, K, Rb, Sr, Cr, Li, Na, Zn, Cu, 15 가지 원소들이 포함되어 있는 것을 정성적으로 확인하였다. 이 원소들 가운데 Mn를 대상으로 LIBS를 이용하여 정량 분석을 하는데 필요한 표준물질을 제작해 보았다. LIBS 분석을 할 때에는 펄스 레이저를 고체 시료 표면의 ~100 μm 정도의 좁은 영역에 집속 시켜 마이크로 플라즈마를 생성하여 광 방출 스펙트럼을 얻기 때문에 표준물질의 균질성이 매우 중요하다. Mn이 거의 포함되어 있지 않은 코코피트 배양토에 염화 망가니즈(II)를 첨가한 후, 볼밀을 이용하여 균질한 파우더를 얻었다. 이 파우더를 가압성형 하여 표준물질 펠렛을 제작하였다. 볼밀로 균질화하는 시간을 달리하여 균질한 표준물질을 얻는데 필요한 조건을 확인하였다. 시료의 균질성은 403 nm 부근에서 관찰되는 Mn I 방출선의 세기 분포를 이용하여 확인하였다.

본 연구를 통해서 정립된 균일한 표준물질 제작 방법은 향후 작물이 성장하는데 필요한 원소들 뿐만 아니라 Cr 등의 독성 원소의 LIBS 분석을 위한 표준물질 제작에 활용될 계획이다.

PT-103 [일반]

**Reliable profiling of short-chain fatty acids in human plasma
by hot injector derivatization of SPME fiber**

Youlee Kim¹, Wonwoong Lee², Jongki Hong^{1,*}

¹College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea

²College of Pharmacy, Woo Suk University, Wanju-gun 55338, Korea

*Corresponding authors: jhong@khu.ac.kr

Short-chain fatty acids (SCFAs), the major end products of fermentation of dietary fibers by gut microbiota, change their levels in a biological system reflect the progress of various diseases. A convenient and sensitive detection method is needed to profile SCFAs in limited and complex biological samples. However, determination of SCFAs in biological samples is limited due to their easy loss during sample workup, high volatility and hydrophilicity, and the coexistence of interference. In this study, we developed a feasible method for the analysis of SCFAs in human plasma by GC-MS combined with flash heater derivatization on SPME fiber. Extraction of SCFAs from plasma sample was successfully performed by SPME method. After SPME process, the surface of fiber was coated with silylation reagents such as MSFTA and MTBSTFA. SCFAs can be derivatized with silyl reagent desorbed from coated fiber in a high temperature GC injector; flash heater derivatization (FHD). This noble method was optimized according to pH, salt addition, absorption time and temperature for SPME process, kind of fiber types and silylation reagents, and amount for FHD process. The combination of SPME and FHD can provide effective and efficient means to both identify and quantify SCFAs in plasma with complex matrices. The proposed method will be useful for the determination of SCFAs and other volatile compounds in a variety of biological samples and for the clinical diagnosis of various diseases.

Keywords: Short chain fatty acid, Flash heater derivatization, GC-MS

PT-104 [일반]

Pattern-based analysis of *Gardenia jasminoides Ellis* by High-performance liquid chromatography-diode array detector

Sung-hyun Jeon¹, Sang Beom Han*

Department of Pharmaceutical Analysis, College of Pharmacy, Chung-Ang University

*Corresponding author: hansb@cau.ac.kr

Recently, as the use of herbal medicines around the world increases, the importance of systematic management of herbal medicine ingredients is increasing. In this study, the pattern-based method of analyzing gardenia was developed by high-performance liquid chromatography-diode array detector (HPLC-DAD). The separation of gardenia was performed by using C18 column. The mobile phase was composed of (A) 0.1% acetic acid in water and (B) 0.1% acetic acid in acetonitrile and a detector was set at 270 nm. Analytical method validation was performed following South Korea Ministry of Food and Drug Safety (MFDS) to set the ingredient profile of herbal medicines guideline for specificity, repeatability, intermediate precision, coefficient correlation. This method is expected quality control of *Gardenia jasminoides Ellis*. This research was supported by a grant (19172Herbalmedicine192) from Ministry of Food and Drug Safety in 2020.

Keywords : *Gardenia jasminoides Ellis*; HPLC-DAD; Pattern-based;

PT-105 [일반]

High performance single drop microextraction in-line coupled with capillary electrophoresis for trace analysis of NSAIDs in human urine

**Joseph E. Valdez^{1,2}, Natalia Miękus^{1,3}, Joon Yub Kwon¹, Wooyong Kwon¹,
Tomasz Bczek³, and Doo Soo Chung^{1,*}**

¹Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea

²Department of Natural Sciences, College of Arts and Sciences, Nueva Vizcaya State University, Bayombong, Nueva Vizcaya, 3710, Republic of the Philippines

³Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Medical University of Gdańsk, Al. Gen. J. Hallera 107, 80-416 Gdańsk, Poland

A high-performance version of three-phase direct immersion (DI) single drop microextraction (SDME) in-line coupled with capillary electrophoresis (CE) with an impressive sample cleanup and preconcentration power for sensitive analysis of analytes in a complex matrix was extensively investigated. All the major and minor details are described to provide an easy-to-follow and user-friendly protocol. Its powerful extraction efficiency was demonstrated using non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) such as ketoprofen (KTP), ibuprofen (IBU), and naproxen (NAP) in standard and real (human urine) samples as model analytes. Analytes in an acidified donor phase were preconcentrated into the basic acceptor drop, yielding enrichment factors (EFs) of 1580 ± 15 , 960 ± 18 , and 1610 ± 12 for KTP, IBU, and NAP, respectively, in standard samples ($n = 3$). On the other hand, the application of the method to human urine samples yielded EFs of 970 ± 14 , 340 ± 13 , and 950 ± 10 for KTP, IBU, and NAP, respectively ($n = 3$). The limits of detection were 5–16 nM (1–3 $\mu\text{g/L}$) for standard samples and 10–50 nM (2–10 $\mu\text{g/L}$) for real samples. Our high performance three-phase DI-SDME-CE is quite promising for the determination of low concentrations analytes like NSAIDs in complex sample matrices.

Keywords:

Capillary electrophoresis · Nonsteroidal anti-inflammatory drugs · Urine · Sample pretreatment · High Performance Single drop microextraction

PT-106 [일반]

**Liquid extraction surface analysis-capillary electrophoresis/dual C⁴D
of small ions on a lithium battery anode surface**

Sunkyung Jeong¹, Byung-Hee Choi², Jonggeol Kim², Hee-Sun Yun² and Doo Soo Chung^{1,*}

¹Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea

²LG Chem Research Park, Yuseong-gu, Daejeon 34122, Korea

Due to the strong electroosmotic flow (EOF) from the negatively charged inner wall of a fused silica capillary, analytes in CE migrate in order of cations, neutrals, and anions under an electric field of normal polarity. However, for most inorganic ion analyses, either only cations or only anions are analyzed. It is because small inorganic ions have high electrophoretic mobilities, which are proportional to the charge/size ratios, and their detection times can be very long if their electromigration and the EOF are in the opposite directions. In the worse cases, highly mobile ions migrate against the EOF and cannot be detected.

To analyze both cations and anions on a solid surface with a single run of a reasonable detection time, two contactless capacitively coupled conductivity detectors (C⁴D) were placed on a single capillary, one near the inlet, and the other near the outlet. After performing liquid extraction surface analysis (LESA) of a solid surface using the inlet of a coated fused silica capillary having a weak but reversed EOF to extract surface materials directly, the extracts were pushed with pressure and placed between the two C⁴Ds. When a reverse electric field is applied across the capillary, the cations and anions migrated in the opposite directions, and were quickly detected with the C⁴D located in each direction. The ionic composition of a lithium battery anode surface was investigated by this LESA-CE/2C⁴D.

PT-107 [일반]

Headspace microextraction using a single bubble coupled with capillary electrophoresis

Xamy Noulorsaytour and Doo Soo Chung[★]

Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea

Headspace (HS) extraction is a powerful sample pretreatment technique for volatile organic compounds (VOCs) in a complex matrix. Recently, in-tube microextraction (ITME) coupled with capillary electrophoresis (CE) was developed for HS extraction of VOCs in a complex sample matrix such as red wine. Here, we present single bubble microextraction (SBME) using a bubble hanging to the capillary inlet immersed in a sample donor solution as a HS of sub microliter volume (200 nL). The analytes evaporated to the bubble were extracted into the acceptor phase through the capillary opening, then electrophoresis of the enriched extract was carried out. Since the bubble volume was much smaller than conventional HS volume (1 mL), it was filled with the evaporated analytes quickly and the analytes could be enriched much faster compared to conventional HS-ITME. Since the extraction mechanism of SBME is identical to that of ITME, the extraction conditions (donor phase, acceptor phase, acceptor volume, and dynamic extraction) for three chlorophenols, 2,4,6-trichlorophenol (TCP), 2,3,6-TCP, and 2,6-dichlorophenol (DCP) were investigated through HS-ITME, and the optimal conditions were applied to SBME. Under the optimal HS-SBME conditions of 25°C for 5 min, the enhancement factors for 2,4,6-TCP, 2,3,6-TCP, and 2,6-DCP were 53, 46 and 51, respectively, and the LOQs value obtained by monitoring the absorbance at 214 nm were about 10 ppb, much lower than 200 ppb, the World Health Organization guideline for the maximum permissible concentration of 2,4,6-TCP in drinking water. The developed method was proven to be a sensitive, automated, and efficient for determination of volatile and semi-volatile compounds in real samples.

Key words. Headspace (HS); In-tube microextraction (ITME); Single bubble microextraction (SBME)

PT-108 [일반]

**Efficient extraction of intact proteins from polyacrylamide gel
by using ammonium sulfate**

정신희, Jalaludin Iqbal, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Top-down proteomics is a powerful strategy to obtain the complete protein sequence and to locate and characterize post-translational modifications. Furthermore, the time-consuming protein digestion required for bottom-up methods is eliminated. In top-down proteomics, intact proteins are analyzed by a mass spectrometer without prior digestion of the proteins to peptides. Polyacrylamide gel electrophoresis, which is an easy and cost-effective way to prefractionate protein mixtures into individual proteins depending on their size, is a technique widely used in biochemical experiments and has the potential to be effective in sample fractionation for top-down mass spectrometry analysis. However, it is difficult to extract prefractionated intact proteins from the gel. In general, expensive specialized laboratory equipment is required to extract intact proteins from the gel. In this study, we used a new extraction solution mixture of 100 mM ammonium sulfate and 0.1 % (v/w) sodium dodecyl sulfate for a successful extraction of proteins from the gel. One-dimensional gel separation was first applied to bovine serum albumin, which was extracted by using the new extraction solution mixture. One-dimensional gel separation was applied again to the extracted albumin to check the efficiency of the first extraction. The intensity of protein bands was efficiently quantified by image J. Quantitative analysis showed that the proteins were efficiently extracted from the gel.

PT-109 [일반]

Surface analysis of Printed Circuit Board with SEM-EDS

김연수¹, 서지형¹, 손영구^{1,2}, 김정권^{1,2,*}

¹충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터,

²충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Scanning electron microscopy-Energy dispersive X-ray spectroscopy (SEM-EDS) produces images by detecting various signals that derives from electron-sample interactions. The signals contain information about the surface topography and chemical composition of materials down to a few microns. In this reason, SEM-EDS can be applied to various fields such as material science, biology, nano technology, forensic, semiconductor industry and so on. Among of them, semiconductors are inseparable items from everyday life.

In this study, we analyzed the surface of printed circuit board (PCB) part from computer memory card with SEM-EDS. The results obtained using SEM-EDS provided much more information for PCB than using SEM only. As a relatively simple and non-destructive analytical technique, SEM-EDS was efficient in confirming the chemical composition on the surface of PCB.

PT-110 [대학원생 구두 & 포스터]

Analysis of aging related human body odor using GO;PANI/ZNRs/ZIF-8 coated wire-INME method followed by GC/MS

Sehyun Kim, Sunyoung Bae*

Department of Chemistry, Seoul Women's University

*Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

Human body odor gives information about skin aging, sexual activities, and health status. Interactions between eccrine, sebaceous, apocrine gland and skin bacteria are the dominant factors of human body odor. Headspace-solid phase microextraction (HS-SPME) has been generally used as the in-vivo method, which collects body odor directly from the skin. However, this method has disadvantage that it is difficult to sampling body odor directly from skin and the fiber can be easily damaged. In this study, headspace in-needle microextraction (HS-INME) using graphene oxide; polyaniline/zinc nanorods/zeolitic imidazolate framework-8 (GO;PANI/ZNRs/ZIF-8) adsorbent followed by gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS). Target compounds such as 2-nonenal, benzothiazole, hexyl salicylate, α -hexylcinnamaldehyde, and isopropyl palmitate were selected as key indicators. The adsorbent was sequentially synthesized by electrodeposition, cyclic voltammetry, and chemical interaction. The mole ratio of reactants and HS-INME condition were optimized using the design of the experiment (DOE) method. Physicochemical characterizations were investigated. The proposed method was validated including limit of detection (LOD), limit of quantitation (LOQ), recovery, and reproducibility. Finally, standard compounds spiked on the artificial skin were analyzed by the proposed method to confirm that it could be used as the in-vivo sampling method for aging related human body odor.

Keywords: Age-related body odor, GO;PANI/ZNRs/ZIF-8, INME, in-vivo sampling, CV

PT-111 [대학원생 구두 & 포스터]

Effective determination of nicotine enantiomers from e-liquids and biological fluids using dispersive liquid-liquid microextraction(DLLME)

Seung Hoon Song and Seung-Woon Myung*

Department of Chemistry, Kyonggi University, Suwon 16227 Korea

*Corresponding author: swmyung@kyonggi.ac.kr

Nicotine is stimulant and potent alkaloid, It usually extracted from tobacco plant, but these nicotine can also be obtained through chemical synthesis. In the case of natural nicotine, the content of (S)-nicotine is overwhelmingly higher than that of (R)-nicotine. The synthetic nicotine is generally used in the production of E-liquid to called "Tobacco Free Nicotine" (TFN). In the absence of a selective synthesis process, synthetic nicotine is synthesized as a racemic compound in a 1:1 ratio. in this study, To analyze the nicotine enantiomers, we use dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME), and compared the efficacy of enantiomers GC and chiral HPLC for the analysis of nicotine. To develop a suitable DLLME method, the parameters were optimized(pH, type, ratio and volume of extraction solvent and dispersive solvent, type and quantity of salt, and temperature). The LODs were 0.11 $\mu\text{g/mL}$ and 0.17 $\mu\text{g/mL}$ for the (S)- and (R)- enantiomers, respectively. The LOQs were 0.3 $\mu\text{g/mL}$ and 0.44 $\mu\text{g/mL}$, respectively. The optimal calibration range was between 0.3–18 $\mu\text{g/mL}$ and 0.44– 4.4 $\mu\text{g/mL}$, respectively, and the correlation coefficient (r^2)was0.9978–0.9996. The intra-day accuracy was 79.9–110.6%, and the precision was 1.3–12.0%. The inter-day accuracy was 87.8–108.0%, and the precision was 4.0–12.8%. E-liquid and biological fluids(urine and saliva) were analyzed using the established method.

PT-112 [대학원생 구두 & 포스터]

Headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis/mass spectrometry for short chain fatty acids from a real sample

권준엽¹, 정두수^{1,*}

¹서울대학교 자연과학대학 화학부

*Corresponding author: dschung@snu.ac.kr

Short chain fatty acids (SCFAs) are volatile and hydrophilic organic acids, causing environmental stink. SCFAs are metabolites from organisms' corpse, feces, and byproducts. Analyzing SCFAs reveals not only stink's identity but also the sources. Without derivatizing the SCFAs, headspace in-tube microextraction using the acceptor plug placed inside the separation capillary inlet tip was coupled in-line with of capillary electrophoresis (CE) for sample cleanup and enrichment. The effects of increasing extraction temperatures and agitating the sample were also investigated. For further sensitivity enhancements using a sensitive detector, CE/electrospray ionization triple quadrupole mass spectrometer with a flowthrough microvial interface (FMI) was used. Although the SCFAs are difficult to undergo fragmentation, pseudo multiple reaction monitoring, in which the molecular ions are selected and monitored by the first and third quadrupoles to reduce noise, was employed for sensitive determination of the SCFA composition.

PT-113 [대학원생 구두 & 포스터]

전기 유도 플라즈마 분광법을 활용한 부유 바이러스 전파의 실시간 탐지

양준호¹, 여재익^{1,*}

¹*서울대학교 기계항공공학부

*Corresponding author: jjyoh@snu.ac.kr

2020년 3월, 우한에서 발생한 COVID-19 바이러스는 공식적으로 전염병으로 분류가 되었으며, 그 결과 많은 사람들은 마스크 착용을 생활화 하였으며, 자가 격리와 같은 감염을 예방하기 위한 강력한 조치를 취했습니다.

코로나 바이러스는 오랫동안 공기 중 전파는 가능하지 않다고 알려져 있었습니다. 그러나 다양한 연구 결과에 따르면 바이러스가 공기를 통해 전염될 수 있으며 상당한 시간 동안 공기 중에 살아남을 수 있다고 주장합니다. 본 연구에서는 전기 유도 플라즈마 분광법을 사용하여 실시간으로 바이러스의 공기 중 전파를 특성화하였습니다. 바이러스의 이동 거리 및 측정 시간에 따른 농도 변화를 조사하여, 전파의 위험성을 평가할 수 있는 방법을 고안하였습니다. 결과적으로 본 연구를 통하여 공기 중 바이러스 전파의 실시간 탐지를 수행하고 실시간 모니터링을 수행하기 위한 benchmark를 제공할 수 있습니다.

PT-114 [대학원생 구두 & 포스터]

**미세먼지 실시간 원인 분류를 위한 딥러닝을 이용한 전기 유도
플라즈마 방출광 신호 학습**

박상훈¹, 양준호¹, 여재익^{1,*}

¹*서울대학교 기계항공공학부

*Corresponding author: jjyoh@snu.ac.kr

미세먼지의 해로운 영향에 관해 국제적인 관심이 커지면서 미세먼지 ($PM < 10\mu m$)에 대한 정확한 분류와 예측의 중요성이 증대하고 있습니다. 또한, 미세먼지의 근원지를 파악하는 것은 환경 재난을 막는 것만큼 인간의 건강을 보호하는 데 매우 중요한 역할을 합니다.

그러나 기존의 방식들은 위성 카메라에 의해 포착되는 대기의 흐름에 의존하거나 크고 비싼 실험 장비 기반의 지엽적인 측정인 경우가 대다수입니다. 이에 본 연구진은 딥러닝 기법을 기반으로 공기 중 부유물질 검출에 효과적인 전기 유도 플라즈마 분광법(SIPS)을 결합하여 미세먼지의 근원지를 식별하는 방법을 제안합니다. SIPS는 화학적 전처리 없이 실시간 정성 및 정량 분석이 가능하며, 화학적 안정성과 민감성을 갖춘 분광 방식입니다. 최종적으로 본 연구에서는 Convolutional neural network 기법의 하나인 DenseNet을 통해 미세먼지 식별을 진행했고, 뛰어난 성능 (>98%)을 바탕으로 새로운 플라즈마 분광법의 데이터 분석 기법으로써 가능성을 제시합니다.

PT-115 [대학원생 구두 & 포스터]

Insights into the sampling methods of carbonyl compounds released from mainstream smoking

Sol Han¹, Sang-Hee Jo², Ki-Hyun Kim^{1,*}

^{1,*}Department of Civil & Environmental Engineering, Hanyang University,

²Radiation Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute

*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

Cigarette contains more than 7,000 kinds of toxic and harmful constituents. Among them, carbonyl compounds including formaldehyde and acetaldehyde are known as carcinogenic substances that can cause respiratory and cardiovascular diseases. According to the World Health Organization (WHO) Standard Operating Procedure for Intense Smoking of Cigarettes, cigarette samples are burned using an automatic cigarette smoking machine to collect harmful constituents in mainstream smoke. Accordingly, carbonyl compounds are to be captured in an impinger filled with a 2,4-dinitrophenylhydrazine (DNPH) solution and derivatized for the analysis by HPLC/UV or DAD detector. The automatic smoking machine has the advantage of collecting standardized mainstream smoke by burning cigarette samples evenly, but it may not be easy to access due to high cost. To find an alternative method, we studied a variety of methods to efficiently collect mainstream smoke for the analysis of 10 carbonyl compounds (e.g., formaldehyde, acetaldehyde, acetone, acrolein, propionaldehyde, crotonaldehyde, butyraldehyde, benzaldehyde, isovaleraldehyde, valeraldehyde) in mainstream smoke by varying the volume collected per puff (Puff volume): (1) Collecting mainstream smoke directly into the DNPH cartridge by connecting the cigarette filter-DNPH cartridge-syringe in series (Cartridge: CT), (2) Collecting mainstream smoke through the cigarette filter into the syringe; subsequent dilution of this sample with nitrogen gas in a polyester aluminum bag for the final DNPH cartridge sampling (Bag to cartridge: BC), and (3) Collecting mainstream smoke in DNPH solution through the impinger filled with DNPH solution for quantitation for carbonyls (Impinger to syringe: IS). The possibility of effective collection of carbonyl compounds in the mainstream without the use of smoking machine was evaluated for each carbonyl compound.

인명색인

ㄱ		김석원	PT-041	김형민	PT-039
강남구	PT-043	김석원	PT-042	김형민	PT-041
강병만	PT-069	김선조	PT-039	김형민	PT-042
강성구	SYM VI-03	김선지	SYM VI-02	김혜영	PT-050
강성훈	PT-050	김선혜	SYM VII-01	김혜영	PT-051
강성훈	PT-051	김선혜	PT-057	김혜진	Luncheon S
강은비	PT-013	김성남	SYM VII-01	L	
강희채	PT-050	김소영	PT-058	남상호	Core Facility
강희채	PT-051	김아람	PT-010	R	
고영환	PT-012	김아람	PT-011	류태인	SYM I -03
고정아	PT-084	김연수	PT-109	M	
고정아	PT-086	김용현	SYM VI-01	문동민	PT-076
곽병만	PT-056	김운중	PT-076	문종화	PT-067
구명주	PT-056	김유곤	PT-015	B	
권미아	PT-084	김윤석	PT-013	박광서	PT-087
권미아	PT-086	김재곤	PT-088	박광재	PT-003
권상세	SYM II-01	김정권	PT-044	박미정	PT-050
권성원	Core Facility	김정권	PT-108	박미정	PT-051
권성원	PT-039	김정권	PT-109	박민주	PT-084
권성원	PT-040	김정석	PT-069	박민주	PT-086
권성원	PT-041	김정은	PT-074	박범성	PT-013
권성원	PT-042	김정은	PT-013	박상준	PT-003
권영진	PT-006	김종범	PT-010	박상훈	GO-05
권영진	PT-012	김종범	PT-011	박상훈	PT-114
권용재	PT-005	김종서	SYM III-04	박서연	PT-047
권준엽	GO-03	김종환	PT-091	박소정	PT-047
권준엽	PT-112	김종환	PT-092	박양순	PT-068
김건한	PT-062	김주애	SYM VI-03	박용근	Luncheon S
김경민	PT-083	김주양	PT-016	박우용	PT-082
김규태	SYM VII-01	김주훈	SYM IX-04	박우용	PT-083
김근완	PT-059	김지선	PT-064	박은영	SYM V -04
김동철	PT-003	김진석	PT-074	박재일	PT-069
김동환	SYM I -01	김진영	SYM III-03	박재형	PT-015
김만구	PT-006	김진원	SYM VII-01	박조용	PT-088
김만구	PT-008	김찬식	SYM I -03	박종수	PT-056
김만구	PT-012	김태완	SYM VII-02	박종택	PT-004
김미경	PT-062	김학현	SYM VII-01		
김민기	PT-089	김현우	SYM VII-02		
김병갑	PT-004	김현지	PT-084		
김병권	SYM IX-03	김현철	SYM IV-04		

박준호	PT-006	여재익	PT-114	이진복	PT-074
박준호	PT-008	오윤석	PT-089	이진복	PT-076
박치현	PT-082	오재민	PT-102	이찬호	PT-102
박치현	PT-083	원종은	PT-056	이충식	PT-081
박한오	Special S	유제이	PT-076	이현선	PT-050
박효진	SYM I -03	유제화	PT-003	이현선	PT-051
방한열	PT-056	유종신	SYM III-03	이현주	PT-006
배제현	SYM IX-02	유지수	PT-013		
백동재	SYM V -04	유지아	PT-064	ㄱ	
		윤상준	PT-039	장진실	PT-102
人		윤상준	PT-041	장한별	PT-044
서영덕	SYM VII-02	윤수향	PT-010	전문환	PT-004
서인수	Luncheon S	윤수향	PT-011	전상미	SYM IX-04
서정기	PT-062	윤영욱	SYM I -03	전수경	PT-082
서종수	PT-091	윤지현	PT-039	전수경	PT-083
서지형	PT-109	윤지현	PT-040	전향량	PT-050
서지훈	PT-102	윤혜은	SYM VI-02	전향량	PT-051
성경희	PT-089	이광렬	SYM VI-03	전화연	PT-088
손영구	PT-109	이광희	PT-015	정두수	GO-03
손주희	SYM VI-02	이돈희	PT-100	정두수	PT-112
송영철	PT-090	이동규	PT-042	정세훈	PT-057
송지연	PT-102	이동길	SYM VII-01	정세훈	PT-058
신동진	PT-089	이두연	SYM I -03	정슬기	SYM VI-02
신명철	SYM V -03	이미옥	SYM VIII-04	정신희	PT-108
신민철	PT-092	이미혜	SYM VI-03	정인일	PT-043
신우석	PT-010	이상민	PT-004	정재학	PT-016
신우석	PT-011	이상신	PT-010	정헌상	PT-004
신채호	SYM VII-02	이상신	PT-011	조민규	SYM VI-02
신현지	PT-005	이석열	PT-089	조민철	PT-010
신호상	PT-095	이선명	PT-064	조민철	PT-011
심희정	PT-091	이선엽	PT-010	조상준	Luncheon S
		이선엽	PT-011	조영훈	PT-084
o		이수민	PT-082	조영훈	PT-086
안지영	PT-091	이승민	PT-092	조용선	SYM VII-01
안해준	SYM VII-03	이용훈	PT-102	조유진	PT-091
양인석	PT-074	이원용	PT-100	조윤제	SYM I -03
양정환	PT-057	이윤희	PT-058	조지미	PT-050
양준호	GO-04	이은구	PT-040	조지미	PT-051
양준호	GO-05	이재광	SYM VII-01	조태훈	SYM IX-04
양준호	PT-113	이재석	PT-069	조혜륜	PT-068
양준호	PT-114	이주연	SYM III-03	주신영	PT-102
여재익	GO-04	이준배	PT-082	주영원	SYM IX-04
여재익	GO-05	이준배	PT-084	주옥정	PT-043
여재익	PT-113	이준배	PT-086	주현경	PT-083

大		Chang-Hee Kang		PT-019	F	
최경윤	PT-095	Chang-Hee Kang	PT-020	Farzana Binte Rafique	PT-029	
최기인	SYM VII-03	Chang-Seon Myung	PT-022	Farzana Binte Rafique	PT-030	
최기정	PT-062	Cheol Woon Jung	PT-036	Farzana Binte Rafique	PT-031	
최세현	PT-003	Cheong Tae Kim	PT-023	František Foret	PT-032	
최은경	PT-087	Cheong Won Lee	PT-071			
최임성	PT-005	Cheong-Weon Cho	PT-022	G		
최임성	PT-006	Chi Hye Chung	PT-028	Gao Dan	PT-023	
최임성	PT-008	Chong Woon Cho	PT-023	Gi-Hyeon Chae	PT-048	
최임성	PT-012	Chong Woon CHO	PT-024	Gwang Min Sun	SYM IV-02	
최한범	PT-102					
ㅎ		D		H		
하지원	PT-059	Da-Hey Jin	PT-060	Hana Cho	SYM IV-02	
한상범	PT-047	Da hye Jin	PT-055	Haneol Lee	PT-071	
한홍현	PT-058	Dae-Hwan Lim	PT-017	Hee Soo Pyo	PT-014	
허승헌	SYM VII-03	Daeyoung Jeon	PT-001	Hee-Kyung Kim	SYM IV-03	
현승민	PT-012	Da-Hye Jin	PT-053	Hee-Sun Yun	PT-106	
홍기룡	PT-074	Da-Hye Jin	PT-054	Hekap Kim	PT-007	
홍기룡	PT-076	Dal Ho Kim	PT-075	Ho Seok Lee	SYM VII-04	
홍길환	PT-012	Danbi Won	PT-028	Hoang Anh Nguyen	PT-033	
홍수정	PT-008	Dohyun Han	SYM III-02	Hoang Anh Nguyen	PT-034	
홍승태	SYM II-02	Donghoon Han	SYM IX-01	Hoon-Jo Cho	PT-070	
황세원	SYM VIII-04	Dong Hoon Kwak	PT-093	Ho-Sang Shin	PT-018	
황승울	SYM I -03	Dong Min Moon	PT-075	Ho-Sang Shin	PT-096	
황은영	PT-010	Dong-jin Kang	PT-052	Ho-young CHOI	PT-065	
황은영	PT-011	Dong-Jin Kang	PT-053	Ho-Young Choi	PT-070	
황희연	SYM III-03	Dong-Jin Kang	PT-054	Huy Truong Nguyen	PT-041	
		Dong-Jin Kang	PT-055	Hwan Lee	PT-071	
		Dong-Jin Kang	PT-060	Hwan Seong Choi	PT-079	
		Doo Soo Chung	PT-032	Hye Hyun Yoo	PT-080	
		Doo Soo Chung	PT-077	Hye Hyun Yu	PT-073	
		Doo Soo Chung	PT-105	Hyejin An	SYM VIII-02	
		Doo Soo Chung	PT-106	Hyeon-Woo Lee	PT-009	
		Doo Soo Chung	PT-107	Hyeon-Woo Lee	PT-072	
		Duc Thanh CHU	PT-024	Hyeonwoo Yu	PT-049	
				Hye-Ryun Cho	SYM IV-03	
				Hyeyoon Kim	SYM III-02	
				Hyeyoung Jung	SYM VI-04	
A		E		Hyojin Kim	PT-002	
Anca Raluca Muresan	PT-029	Eun Goo Lee	PT-034	Hyo-Sun Yang	PT-019	
Anca Raluca Muresan	PT-030	Eun Hee Kwon	PT-071	Hyo-Sun Yang	PT-020	
Anca Raluca Muresan	PT-031	Eun Kyung Choe	PT-063	Hyun Ju Kim	PT-071	
		Eun-Hee Chang	PT-052	Hyun Namgoong	SYM II-04	
		Eun-Young Ahn	PT-027	Hyun So Cho	PT-022	
		Euo Chang Jung	SYM IV-03			
B						
Baigali Tsogt	PT-075					
Binnam Kang	PT-099					
Bong Chul Chung	SYM V -02					
Boyeon Bae	PT-028					
Byung-Hee Choi	PT-106					
Byungjoo Kim	PT-049					
C						
Chan Ho Kwon	PT-078					

Hyun Young Kim	PT-071	Ji Hyun Lee	PT-021	Ki-Hyun Kim	PT-017
Hyun-A Kim	PT-048	Ji Hyun Lee	PT-079	Ki-Hyun Kim	PT-115
Hyung Min Kim	SYM V -01	Ji Sun Lee	PT-063	Kiin Choi	SYM VII-04
Hyunjee Kim	SYM I -04	Jihye Kim	Leco수상강연	Kiryong Hong	PT-075
I		Jihye Lee	PT-073	Kishore B. Dasari	SYM IV-02
Inseon Hwang	PT-026	Ji-Hye Lee	PT-053	Kisoon Dan	SYM III-02
Inseon Hwang	PT-028	Ji-Hye Lee	PT-054	Kiwan choi	PT-049
J		Ji-Hye Lee	PT-060	Kwang Seo Park	PT-063
Jaehak Jung	Tutorial S	Jin Ho Kim	PT-079	Kwang-Hoon Kong	PT-048
Jae Hyun Kim	PT-097	Jin Hyeok KIM	PT-022	Kwang-Young Lee	PT-070
Jae Hyun Kim	PT-098	Jin Seog Kim	PT-075	Kyeong-Yun Choi	PT-018
Jae Hyun Kim	PT-099	Jin Wook Kim	PT-097	Kyeong-Yun Choi	PT-096
Jaehong Jin	PT-046	Jinho Kim	PT-021	Kyoung Heon Kim	PT-014
Jae-Min An	PT-052	Ji-Yeon Eom	PT-060	Kyoungsoo Kim	SYM IX-01
Jae-Min An	PT-053	Jong Seong KANG	PT-022	Kyung Tae KIM	PT-022
Jae-Min An	PT-054	Jong Seong Kang	PT-023	kyungsu Park	PT-046
Jae-Min An	PT-055	Jong Seong KANG	PT-024	kyungsu Park	PT-061
Jae-Min An	PT-060	Jonggeol Kim	PT-106	M	
Jae-Min Oh	PT-045	Jonghwa Jin	SYM III-01	Meiyu Zhang	PT-045
Jaeyeong Choi	PT-045	Jongki Hong	SYM V -02	Meiyu Zhang	PT-097
Jaeyeong Choi	PT-097	Jongki Hong	PT-025	Meiyu Zhang	PT-098
Jaeyeong Choi	PT-098	Jongki Hong	PT-103	Meiyu Zhang	PT-099
Jaeyeong Choi	PT-099	Joon Yub Kwon	PT-032	Mia Kwon	SYM I -02
Jalaludin Iqbal	PT-108	Joon Yub Kwon	PT-105	Mia Kwon	SYM I -04
Je Hyun Bae	SYM IX-01	Joonho Park	SYM III-02	Mia Kwon	PT-085
Jee-Soo Lee	SYM III-02	Joseph E. Valdez	PT-105	Michael V. Mirkin	SYM IX-02
Jeong A Choi	PT-055	Jundong Yu	PT-080	Mihee Kim	PT-002
Jeong-A Choi	PT-052	Jung-Min Song	PT-019	Min Ho Yoon	PT-022
Jeong-A Choi	PT-053	Jung-Min Song	PT-020	Min-Hui Son	SYM I -02
Jeong-A Choi	PT-054	Jung-Youn Choi	PT-071	Min-Hui Son	PT-085
Jeong-A Choi	PT-060	Jun-Oh Bu	PT-020	Minsoo Noh	SYM VIII-01
Jeongae Lee	PT-014	K		Miyeon Park	PT-098
Jeonghyeon Ryu	PT-009	Ke Li	PT-026	Moon-Woo Seong	SYM III-02
Jeongmi Lee	PT-026	Ke Li	PT-027	Myung Chul Lim	SYM IV-02
Jeongmi Lee	PT-027	Ke Li	PT-028	N	
Jeongmi Lee	PT-028	Khandoker Asiqur Rahaman	PT-029	Na Young Lim	PT-079
Ji Hwan Kang	PT-075	Khandoker Asiqur Rahaman	PT-030	Na-Hee Jung	PT-048
Ji Hye Han	PT-021	Khandoker Asiqur Rahaman	PT-031	Nam Sook Kim	PT-021
Ji Hye Lee	PT-055	Ki Young Jang	PT-080	Nam Sook Kim	PT-079
		Ki-Hyun Kim	GO-06		

Narae Kang	SYM III-01	Seung Hoon Song	GO-02	Tai Kyu Lee	SYM VII-04
Natalia Miękus	PT-105	Seung Hoon Song	PT-111	Thu Thi Hoai Mai	PT-007
Nguyen Hoang Anh	PT-035	Seunghee Lee	SYM VIII-02	Tomasz Bczek	PT-105
Nguyen Hoang Anh	PT-036	Seungho Lee	PT-045		
Nguyen Hoang Anh	PT-037	Seungho Lee	PT-097	W	
Nguyen Hoang Anh	PT-038	Seungho Lee	PT-098	Wang Da	PT-045
Nguyen Hoang Anh	PT-039	Seungho Lee	PT-099	Wang Da	PT-097
Nguyen Phuoc Long	PT-041	Seung-Hoon Bahng	PT-077	Wang Da	PT-098
Nguyen Phuoc Long	PT-042	Seung-Woon Myung	GO-02	Wang Da	PT-099
O		Seung-Woon Myung	PT-111	Wansik Cha	SYM IV-03
Oh-Seung Kwon	PT-029	Si-Wook Jang	PT-048	Won Seck Jeong	PT-023
Oh-Seung Kwon	PT-030	So Hee Jang	PT-093	Won-Hyung Kim	PT-019
Oh-Seung Kwon	PT-031	So Yeon Kim	SYM III-02	Won-Hyung Kim	PT-020
P		Sol Han	GO-06	Wonwoong Lee	SYM V-02
Phuoc Long Nguyen	PT-033	Sol Han	PT-115	Wonwoong Lee	PT-025
		Soomin Kim	SYM I-04	Wonwoong Lee	PT-103
		Songhie An	SYM I-04	Won-Yong Lee	평인상 수상강연
		Suel hye Hur	PT-052	Won-Yong Lee	PT-101
		suhyun Kim	PT-046	Woo Seok Yoon	SYM VII-04
		Sun Jo Kim	PT-035	Woojae Lee	SYM I-04
		Sun Jo Kim	PT-036	Woonhee Kim	PT-028
		Sun Jo Kim	PT-038	Woo-taek LEE	PT-065
		Sun Young Baek	PT-021	Woo-taek LEE	PT-066
		Sun Young Baek	PT-079	Wooyong Kwon	PT-105
		Sung Won Kwon	PT-033	X	
		Sung Won Kwon	PT-034	Xamyong Noulorsaytour	PT-107
		Sung Won Kwon	PT-035	Y	
		Sung Won Kwon	PT-036	Yeanwoong You	Early Bird S
		Sung Won Kwon	PT-037	Yelin Lee	SYM VI-04
		Sung Won Kwon	PT-038	Yeonhee Lee	PT-073
		Sung-Hee Lee	PT-053	Yeonjae kim	SYM III-02
		Sung-Hee Lee	PT-054	Yingying Cao	PT-094
		Sung Hee Lee	PT-055	Yong Doo Kim	PT-075
		sunghwa Choi	PT-046	Yong-hwi KIM	PT-065
		Sunghwa Choi	PT-061	Yong-hwi KIM	PT-066
		Sung-hyun Jeon	PT-104	Yong-Hyeon Yim	SYM IV-01
		Sung-Jun Lee	PT-048	Yong-Hyeon Yim	SYM IV-02
		Sunkyung Jeong	PT-077	Yong-Sik Youn	PT-053
		Sunkyung Jeong	PT-106	Yong-Sik Youn	PT-054
		Sunyoung Bae	SYM VI-04	Yong-Sik Youn	PT-055
		Sunyoung Bae	GO-01	Yong-Sik Youn	PT-060
		Sunyoung Bae	PT-110	Yoon Sook Na	PT-093
		T		Youlee Kim	PT-103
		Tae-Hyeong Kim	SYM IV-03	Youmie Park	PT-027
		Taejoon Park	SYM II-03	Young Beom Kwak	PT-080
		Tae Jung KIM	PT-022		

Young Cheol Yoon	PT-033
Young Cheol Yoon	PT-034
Young Cheol Yoon	PT-035
Young Cheol Yoon	PT-037
Young Cheol Yoon	PT-038
Young Ho KIM	PT-022
Young Jae Joo	PT-014
Younghoon Jo	SYM I -04
Young-Hoon Jo	SYM I -02
Yu Li Liu	PT-026
Yu Li Liu	PT-028
Yu Ran Lee	PT-078
Yu Ran Lee	PT-085
Yua Kang	PT-028
Yuli Liu	PT-027
Yun Ju Kim	PT-063
Yuna Kim	SYM I -02
Yuna Kim	PT-085
Yun-Hee Lee	SYM VIII-03
Yuri Lee	PT-046
yuri Lee	PT-061

사단법인 한국분석과학회 임원 명단

- **명예 회장:** 박금식
- **고문:** 김만구, 김연제, 김영만, 김영상, 김원호, 김일광, 김진석, 김태승, 김택제, 문동철, 박만기, 박성우, 음철현, 이광우, 이광필, 이석근, 이승호, 이종해, 조남준, 최덕일, 하재호
- **회장:** 정두수
- **감사:** 명승윤, 이진숙
- **수석 부회장:** 강종성
- **부회장:** 권미아(법과학), 권성원(학술), 권오승(약학), 김기현(환경), 김우성(식품/농화학), 김정권(총무), 김태욱(화학), 김혁년(산학연), 배선영(화학), 송규석(표준/원자력/안전), 신선경(여성분과), 신호상(환경), 이원용(화학), 이재형(홍보), 이정애(환경), 팽기정(편집), 한상범(재무), 홍종기(약학)
- **발전 동력위원회:** 김진석(위원장), 이덕희(부위원장), 강창희, 김남이, 김문해, 김종혁, 김효진, 박용남, 선일식, 이성희, 이용문, 이창선, 정민환
- **이사:** 강성호(학술), 공광훈(학술), 길효식(홍보), 김원석(기획), 김윤석(홍보), 김주훈(총무간사), 김지혜(조직), 김현주(조직), 김훈주(조직), 김희갑(환경), 나동희(학술), 남궁현(홍보), 노예철(학술), 류재정(재무), 박경수(조직), 박성관(홍보), 박종호(학술간사), 박준호(기획), (기획), 백승훈(기획), 서금희(홍보), 송준명(재무), 안장혁(식품/농화학), 유혜현(학술), 윤정기(조직), 유혜온(학술), 이군택(학술), 이상일(조직), 이성협(홍보), 이정미(재무), (식품/농화학), 이창열(홍보), 이학수(기획), 임흥빈(조직), 장혜원(총무간사), 정세훈(기획), 정영림(재무), 정의창(조직), 정재학(조직), 조건(총무간사), 조성찬(조직), 최기인(학술), 최기환(사무총장), 최용욱(조직), 최은경(재료/섬유), 표재성(학술), 표희수(식품/농화학), 한정희(홍보), 황승율(기획)
- **편집위원회**
 위원장: 팽기정
 부위원장: 박종호
 위원: 권오승, 김기현, 김남이, 김병주, 김정권, 김주훈, 김진영, 김현욱, 김희갑, 배선영, 오한빈, 유혜현, 이군택, 이수연, 이정미, 장혜원, 표재성, B. Gale, S. Williams, L. Nilsson, G. Hempel, T. J. Schmidt, F. Foret, C. Sonne, R. C. Brown, M. Masár, T. Tsugoshi, J. Lin, J. Jakmunee

제66회 한국분석과학회 춘계 학술대회 초록집

2021년 05월 10일 인쇄	발행	사단법인 한국분석과학회
2021년 05월 14일 발행	학회 본부 (04144)	서울시 마포구 마포대로 127, 1603호 (공덕동, 풍림VIP텔)
발행인: 정두수		전화: +82-(0)2-701-8661 팩스: +82-(0)2-701-8662 E-mail: koanal88@naver.com Home page: http://www.koanal.or.kr
편집인: 권성원		
	인쇄	한림원 서울시 중구 퇴계로 20, 51길 1303 (오장동, 넥서스 타워) 전화: +82-(0)2-2273-4201 팩스: +82(0)2-2266-9083 Home page: http://www.hanrimwon.co.kr

CK CHEMCOKOREA



시료 전처리 자동화 장비 SamplePrep

- 농, 축산물 중 잔류농약 전처리 자동화
- QuEChERS 전처리 자동화
- 의약품 전처리 자동화
- HPLC/UPLC 연결가능



미량의 샘플을 쉽고 간편하게 농축 Smart Evaporator

- DMSO, DMF, NMP, 물 등 고비점 용매를 간편하게 농축
- 사용용기 그대로 농축
- 범핑현상 Zero
- C1, K4, C10 등 다양한 모델 가능

효율적인 시료 분획, 정제, 탈염, 농축 Conveni Prep

- 수산물 중 탈염 및 중금속 제거
- 흡착제를 이용한 시료 분획, 정제, 농축, 건조



Agilent 소모품의 새로운 선택
바이오스펙크롬



BIOSPECHROM

L a b o r a t o r y s o l u t i o n s

바이오스펙크롬(주)는 고객과 더불어 발전하고, 협력업체와 함께 성장하는 상생을 목표로 대한민국 과학산업 발전에 기여하는 실험실 분석 솔루션의 선두주자가 되고자 합니다

2016년 부터 Agilent Technologies사와 함께한 실험 분석 소모품 공식대리점으로서 다양한 컬럼, 바이알, 실험 분석 소모품부터 여러 분석 환경에 필요한 실험기초장비까지 고객 실험 환경에 알맞은 맞춤형 솔루션을 제공합니다.



T. 02-898-3352 F. 0303-3445-3360 E. bsc_info@biospechrom.com

경기도 의왕시 이미로 40, 9층(포일동) 인덕원 아이티밸리 C동 913호

Web. www.biospechrom.com

의약생산센터

OASIS[®] 사업

Open-Analysis/API,
Solid and Injection drug Service

(분석, 원료, 고형제, 주사제의 열린 서비스)

: 생산 및 분석지원을 원하는 기업에게 오아시스가 되고자 함



생 산

- 의약품 생산 공급 (완제 및 원료의약품)
- 공정개발 (Process development)
- 제제연구 (Formulation study)

분 석

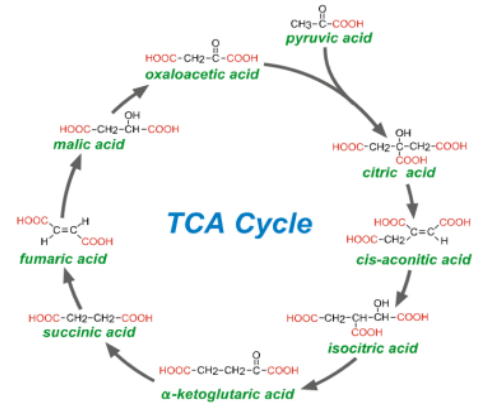
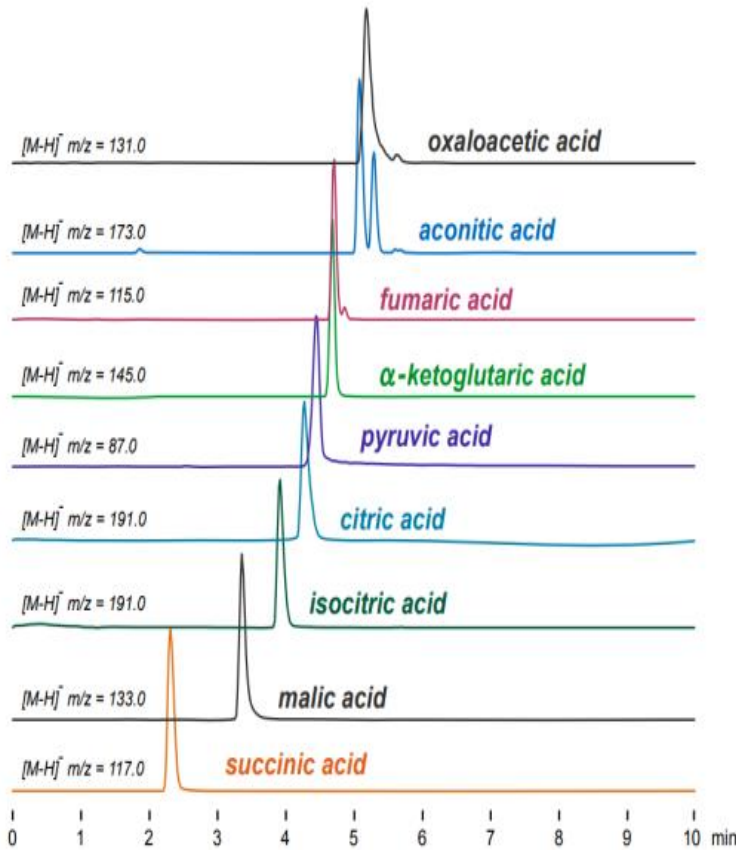
- 분석법 개발 및 지원
- 안정성 시험 (유효기간 설정, 재시험 기간 설정, 시판 후 안정성 시험 등)
- 품질관리 (QC, Quality Control)
- CMC (Chemistry, Manufacturing, Control) 작성 지원

- **고형제** _ 정제(단일정, 다중정), 캡슐제
- **주사제(세포독성항암제)** _ 바이알, 동결건조 바이알
- **원 료** _ 100L 반응기, 결정화기
- **분 석** _ 분석법 및 밸리데이션 (기시법 설정, 특이성, 정밀성, 완건성 등) 이화학 시험 (중금속, 확인, 제제균일성, 비교용출 등) 안정성 시험 (장기보존, 가속, 중간조건, 가속, 시판 후 안정성시험 등) 미생물 시험 (무균, 미생물 한도, 엔도톡신 균등정 등) 인허가 지원 (GMP컨설팅, CTD작성, 인허가컨설팅)

Intrada Organic acid



- Organic acid LC-MS analysis without any derivatization
- Ideal for carboxylic acids and other anions
- Full general organic acid screens within 10min
- One-minute analyses possible on high-throughput columns
- 3µm spherical pure silica / specialized stationary phase for organic acid (IEX mode, NP mode)



Intrada Organic Acid, 150x2mm

A: ACN / water / HCOOH = 10 / 90 / 0.1

B: ACN / 100mM HCOONH₄ = 10 / 90

0%B (0-1min)

0-100%B (1-7min)

100%B (7-10min)

0.2mL/min, 37°C

MS (ESI, SIM, Negative)

5µL (100µg/mL with 0.1% HCOOH)

"고객과 함께 하는 피크만에스피"

- ✓ HPLC system 및 column 판매
- ✓ HPLC 분석조건 상담 및 실험 지원
- ✓ 교육 지원 (기초부터 심화 내용 까지)

OSAKA SODA

Shodex™

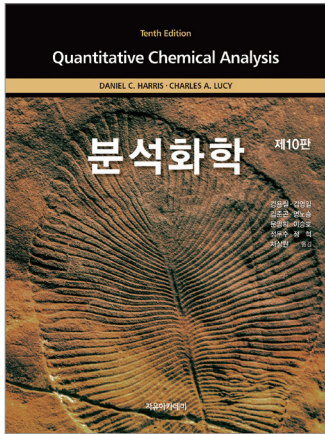
Imtakt

02-577-5982

031-790-4149

www.peakmansp.co.kr

주소: 경기도 하남시 조정대로 150 아이테크 오렌지존 657 ~ 659 호



Harris 분석화학 제10판

원서 정보

역 자: 이승호 외
출판년도: 2021년
쪽 수: 1092쪽
ISBN 9791158082932

Quantitative Chemical Analysis 10/e
출판년도: 2020년
쪽 수: 833쪽
ISBN 9781319324506

Harris 최신분석화학 제5판



역 자: 이승호 외
출판년도: 2013년 쪽수: 624쪽
ISBN 9788973385973

원서 정보

Exploring Chemical Analysis 5/e
출판년도: 2012년 쪽수: 630쪽
ISBN 9781429295765

분석화학



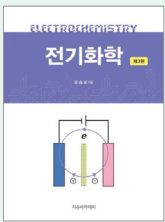
저 자: 박기민
출판년도: 2017년
쪽 수: 544쪽
ISBN 9791158081577

핵심 분석화학



저 자: 박기민
출판년도: 2018년
쪽 수: 448쪽
ISBN 9791158082062

전기화학 제3판



저 자: 오승모
출판년도: 2019년 쪽수: 332쪽
ISBN 9791158082222

영문판 정보

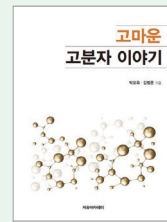
Electrochemistry 3/e
출판년도: 2020년 쪽수: 342쪽
ISBN 9791158082765

전기화학: 기초와 응용



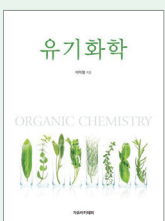
저 자: 백운기, 여인형
출판년도: 2021년
쪽 수: 496쪽
ISBN 9791158082994

고마운 고분자 이야기



저 자: 박오옥, 김범준
출판년도: 2021년
쪽 수: 512쪽
ISBN 9791158082963

유기화학



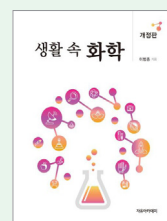
저 자: 이덕형
출판년도: 2020년
쪽 수: 960쪽
ISBN 9791158082635

쉽게 풀어쓴 유기화학



저 자: 고광운
출판년도: 2021년
쪽 수: 344쪽
ISBN 9791158082888

생활 속 화학 개정판



저 자: 이범중
출판년도: 2021년
쪽 수: 432쪽
ISBN 9791158082833

INNOVATION, TRANSFORMATION.

과학과 혁신을 통해 담배시장의 변혁을 주도하여
‘담배연기 없는 미래’를 실현하겠습니다.



PHILIP MORRIS
한국필립모리스(주)



2020 국가브랜드대상 외국계 기업 부문 수상
2020년 9월



아태지역 우수 고용주 인증 획득
2020년 1월



충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터

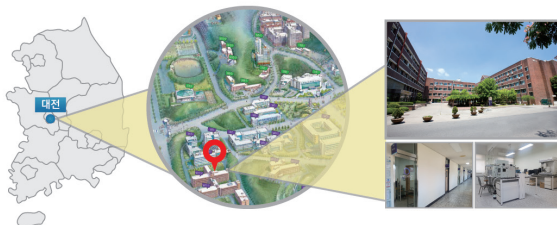
CNU CHEMISTRY CORE FACILITY

교육부 지정 핵심연구지원센터(Core-Facility)



센터소개

화학물질특성분석 핵심연구지원센터는 충남대학교 소속 화학 분석 장비를 활용하여 현미경, 표면분석기, 분광학장비, 질량분석기, 크로마토그래피장비 등 다양한 분석 장비를 이용하여 각종 화학 물질의 특성을 효과적으로 분석하는 솔루션을 제공하고 있습니다.



주요장비소개



MALDI 질량분석기



ESEM-EDS



이온트랩질량분석기



GC-MS (Shimadzu)



GC-MS (Agilent)



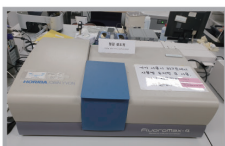
동시열분석기



휴대용 질량분석기



UV-visible 분광기



형광광도계



HPLC (Waters)



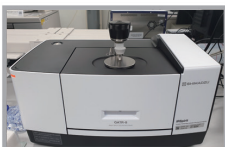
HPLC (Shimadzu)



비표면측정장치



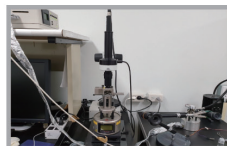
XRD



FT-IR 분광기



FT-IR 분광기



주사탐침현미경



마이크로플레이트리더



마이크로파 반응기



고압증기멸균기



GPC

분석의뢰 안내

분석예약 : <https://www.zeus.go.kr/cloud/cnucof>

분석문의 : 042-821-6263 (대표전화), cnucof@cnu.ac.kr (대표이메일)

센터주소 : (34134) 대전시 유성구 대학로 99 충남대학교 기초2호관 (W11-2) 2239호





화학분석 지원

유해물질분석 지원

위해성평가기술 지원

화학물질규제대응 지원

Regulatory Chemical Analysis & Risk Assessment Center

환경규제기술센터 유해물질·화학분석공용실험실

한국생산기술연구원 환경규제기술센터는 고가의 화학분석장비 및 전문분석인력을 갖추고, 화학분석지원이 필요한 중소기업의 밀착지원과 규제 유해물질의 분석이 필요한 중소기업의 신속한 지원을 목표로 하는 분석기술 지원센터입니다.
또한 화평법 위해성 평가 및 REACH eSDS(확장된 물질안전보건자료), 미국 OSHA 기준 및 국내 산업법에 따른 MSDS 작성이 필요한 기업에게 맞춤형 기술지원을 제공하고 있습니다.



주요 장비

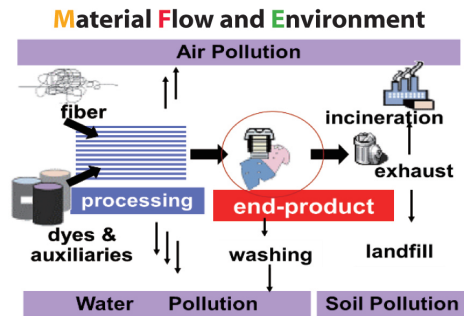
- 분광분석 장비 : UV-Vis, FT-IR
- 열분석 장비 : TGA, DSC, TGA-IR
- 분리분석 장비 : GC-MS (SQ, TQ), GC-ECD, GC-FID, Py-GC-MS, TD-GC-MS, HS-GC-MS, HPLC-DAD-FLD, HPLC-DAD-RID, LC-MS (SQ, TQ), GPC, IC, IC-MS, Combustion-IC
- 원소분석 장비 : ICP-OES, AAS, OEA

유해물질 분석 항목

- 유해물질 제한지침(RoHS) 대응 분석 항목
중금속(Pb, Cd, Hg, Cr(VI)), 난연제(PBBs, PBDEs, HBCDDs, TCEP), 프탈레이트(DIBP, DBP, BBP, DEHP), PAHs, Halogen free, Bisphenol A 등
- 섬유제품 함유 유해물질 분석 항목
pH, 폼알데하이드, 염소화페놀(PCP/TeCP/OPP), NP/NPEOs, 중금속(8종)/Cr(VI), 알레르기 염료, 유해아민, 잔류용매, PFCs, 프탈레이트, 유기주석화합물, 유기 캐리어, PAHs 등

주요 업무

- 유기·무기·고분자화합물의 정성·정량 및 구조 분석
- 기업의 신규 제품 개발 및 개발제품 평가에 필요한 분석
- 케미컬 및 제품 국산화를 위한 대상 제품 분석 및 종합해석
- Trouble shooting : 제품 불량 및 공정 중 사고 해결
- 모기업 납품을 위한 제품 품질 평가/관리를 위한 분석
- 물질 등록을 위한 물질 확인 및 동질성 분석
- 도시광산(순환자원) 내 유가 금속 함유량 분석
- 기업 애로사항의 신규 유해물질 분석법 개발 및 분석 지원



2021년 환경규제대응 분석 실습 교육 안내

국가인적자원개발 컨소시엄 사업
전략분야: **국내외 환경규제 대응 교육훈련**
운영기관: **한국생산기술연구원**

- 모집 인원 : 과정보당 10~13명(선착순)
- 교육 시간 : 14~15시간(2일)
- 실시 횟수 : 과정보당 2~3회/년
- 신청 요건 : 고용보험 납부기관 근무자

2021년 교육 과정명

상세사항은 www.ecolab.re.kr 참조
(홈 > 주요업무 > 교육 및 세미나)

1. GC-MS를 활용한 유해물질 분석 기초 실무
2. LC-MS를 활용한 유해물질 분석 기초 실무
3. ICP를 활용한 중금속 분석 실무
4. RoHS II 규제 유해물질 분석 실무
5. 화평법 대응을 위한 화학물질 위해성 평가 실무



서울대학교 농업생명과학대학 농생명과학공동기기원

National Instrumentation Center for Environmental Management (NICEM)
College of Agriculture and Life Sciences, Seoul National University

토양오염 / 먹는물 분석센터

토양 및 수질시료 특성분석
토양오염도검사 · 먹는물 법적검사
토양정밀조사 · 토양정화검증 · 토양환경평가
지하수 영향조사 · 지하수 모델링
농산물 잔류농약 안전성 검사

환경위해성평가센터

오염물질의 자연기원 입증
위해성평가 계획 수립
국내 및 국제규정에 따른 위해성평가
위해도 기반 오염부지 관리체계 구축
환경분야 기술개발·제도개선 관련 기획연구

환경표준물질센터

표준물질 생산 :
토양 무기분석용 인증표준물질
토양 유기분석용 정도관리 표준물질
토양 숙련도 시험 프로그램 운영

토양환경 분야 특수목적 시험분석 서비스

토양 및 지하수 유류오염 정밀분석

- Pegasus 4D GCxGC-TOFMS system (LECO)
- ChromaTOF 소프트웨어 활용 True Signal Deconvolution 및 Automated Peak Find
- Petroleum Fingerprinting & Forensics :
C8~C40 PIANO Group Classification/
TPH Fraction (EPH & VPH)
- 오염원인자 확인을 위한 산화방지제 (antioxidant) 분석
- GC-C-IRMS 활용 개별 탄소안정동위원소 비율 ($\delta^{13}C$ ‰) 분석

다양한 토양 중금속 시험분석

- LC-ICP-MS를 활용한 중분류 :
As(무기비소: As^{3+} , As^{5+} / 유기비소: DMA, DMAA, AB),
Cr(Cr^{3+} , Cr^{6+})
- 중금속 용출시험 : SBRC, TCLP, SPLP 방법 등
- 국제표준방법에 의한 중금속 분석 :
ISO 11466, ISO 12914, ISO 11047,
ISO 16772, ISO 22036, EPA-3051,
EPA-3051A, EPA-3052 등

토양 표준물질 판매

- 인증표준물질 :
중금속 (NICEM-CS003)
- 정도관리 표준물질 :
휘발성유기화합물 (NICEM-QS106)
석유계총탄화수소 (NICEM-QS206)
벤조(a)피렌 (NICEM-QS306)



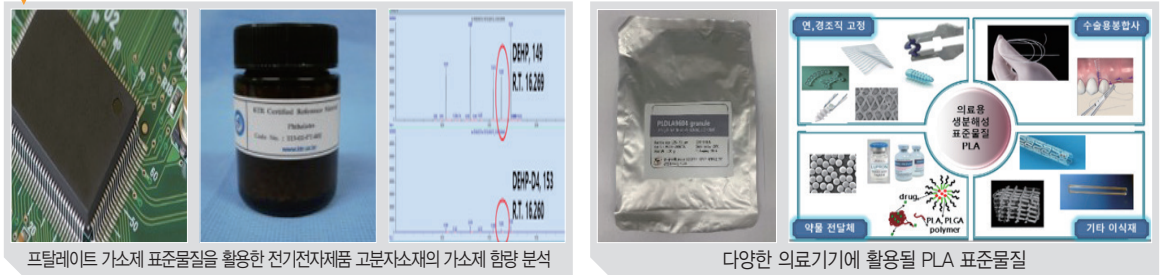
화학·환경·바이오 분야 표준물질(Made in Korea)이 보급됩니다

- 사업개요** 국가기술표준원 주관하에 국내 산·학·연 협업을 통해 화학·환경·바이오 산업에 필요한 표준물질의 국산화
- 사업범위** 균질도, 불확도, 안정성평가 등을 통한 화학·환경·바이오 분야 15개 표준물질 개발 및 보급
- 보급시기** 2021년 하반기

01 표준물질의 역할 및 기대효과



02 화학·환경·바이오분야 표준물질 활용 예



03 2020~2021년 화학·환경·바이오 분야 개발 예정 표준 물질

- | | | |
|---------------------------|---------------------------------|------------------------------|
| 01 _ 불화수소 표준가스 | 07 _ 냄새유발물질 표준물질 | 12 _ 시멘트 화학분석 및 중금속 분석용 표준물질 |
| 02 _ 사불화규소, 포스핀, 디보란 표준가스 | 08 _ 윤활유 중금속 측정용 표준물질 | 13 _ 의료용 생분해성 고분자 표준물질 |
| 03 _ 염소계 난연제 분석용 ABS 표준물질 | 09 _ 석탄재 유해중금속 표준물질 | 14 _ 미생물 분석용 표준균주 표준물질 |
| 04 _ 브로민 분석용 PE 표준물질 | 10 _ 전자재료용 고분자 소재의 브롬계 난연제 표준물질 | 15 _ 크리형 화장품 표준물질 |
| 05 _ 발열량 측정용 표준물질 | 11 _ 세포독성 평가용 고분자 표준물질 | |
| 06 _ 과불화합물 분석용 표준물질 | | |

※ 각 분야에 필요한 표준물질 수요조사를 받고 있습니다.

문의처 한국화학융합시험연구원 정혁 수석 TEL 02) 2092-3623 E-MAIL hyuk@ktr.or.kr



WHOSE TRIPLE QUAD
CAN GIVE YOU
15% MORE TIME?



SIMPLE: PERKINELMER.

Qsight™는 식품안전, 환경테스트, 산업적 연구와 분석 등 광범위한 응용분야에서 LCMSMS가 줄 수 있는 핵심 기술과 솔루션을 간결하고 사용하기 쉬운 디자인으로 제공합니다.

- ▶ 농약잔류허용기준과 관련한 PLS시스템에 완벽한 대응이 가능합니다.
- ▶ Online SPE 시스템과 결합하여 과불화 화합물을 ppt농도로 분석 가능합니다.
- ▶ 특허받은 이온소스 기술로 오염을 원천적으로 차단합니다.

Qsight LCMSMS는 시간의 가치를 여러분께 돌려드립니다.

KRICT 한국화학연구원 화학분석센터

과학기술 발전과 삶의 질 향상에 기여하는 글로벌 화학분석센터

연혁 · History



REACH 대응 원스톱 분석지원

물질분류

- 유기물질
- 무기물질
- 고분자물질
- 다성분물질
- 나노물질

물질시험

구성원소 확인	분자구조 확인	순도 평가	불순물 분석
EDS	IR, UV/Vis	ICP	NMR
XRF	NMR	LC, LC-MS	IC
EA	TA	GC, GC-MS	ICP-MS
ICP	XRD	IC	KFT
	MS	IC	MS

물질확인

물질확인 보고서

물리화학적 특성확인

물질의 상태

- 해리상수
- 점도
- 산화성
- 폭발성
- 인화성
- n-옥탄올을 분배계수

물용해도, 녹는점, 어는점, 끓는점, 증기압, 상대밀도, 입도분석

주요장비 및 분석의뢰 안내

※ 각 연락처 대표번호 끝자리 기재 (042-860-****)

X-선·전자현미경 분석	분리·질량 분석	분광·유기원소·열 분석	무기원소·수분 분석	물리·화학적 특성분석
TEL 7715 / 7723	TEL 7713 / 7714	TEL 7720 / 7726	TEL 7718 / 7719	TEL 7717





사단
법인 **한 국 분 석 과 학 회**
THE KOREAN SOCIETY OF ANALYTICAL SCIENCES