



# 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

The 67th Biannual Conference of The Korean Society of Analytical Sciences

2021. 11. 18.(목)~19.(금) 강화 에버리치호텔









67 회























국립환경과학원





(주)성문시스텍



KRISS 한국표준과학연구원 인중표준물질 (CRM)



한국산업기술시험원



**SEODO** 



















# 국내 유일의 사중극자 질량분석기 제조 전문기업 영인에이스



실시간 온라인 모니터링 시스템과 Mobile Lab을 통해 청정 대기 환경 분석 솔루션을 제공합니다.



### 충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터 **CNU CHEMISTRY CORE FACILITY**



#### 센터소개

솔루션을 제공하고 있습니다.





### 주요장비소개

















HPLC (Waters)























마이크로파 반응기

### 분석의뢰 안내

분석 예약: http://www.zeus.go.kr/cloud/cnucof

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

센터 주소 : (31434) 대전광역시 유성구 대학로 99 충남대학교 자연과학대학 4호관 (W11-2) 239호





### 대한민국에는 한국분석과학기술원이 있습니다

"과학의 새로운 방향은 새로운 개념보다 훨씬 더 자주 새로운 도구에 의해 시작됩니다. 개념 중심의 혁명의 효과는 오래된 것들을 새로운 방식으로 설명하는 것입니다. 도구 중심의 혁명의 효과는 설명해야 할 새로운 것을 발견하는 것입니다.

Freeman dysor

측정과 분석은 종합 전문 과학이며, 과학의 과학입니다. 첨단 분석기기를 수출할 때 진정한 과학 선진국이 됩니다.

### 고급 종합 분석컨설팅 - 유기·무기·고분자·표면·구조 분석

- 분석 설계: 개별 연구프로젝트 또는 종합연구개발계획의 화학분석 설계 및 운영 자문
- 종합분석: Reverse-Engineering 또는 문제 해결을 위한 종합 분석 대행
- 성분·구조 분석: 소재나 부품의 성분 및 구조 등 전문적인 분석 및 분석 결과의 해석
- 최적 분석기법 선정을 포함한 전략 수립
- 분석장비 도입 및 활용(렌탈, 용역) 전략 검토 및 자문
- 분석장비 활용 전문인력 교육 및 훈련(전문분석인력 평가 포함)
- 분석실험실 운영 계획: 시설·장비 유지관리, 연구 소모품 관리, 발생폐기물 관리
- 분석실험실 평가: 연구인력, 시설, 안전 포함한 실험실 운영의 효율성 및 안전성 평가

### 분석과학 전문교육

- 체계적인 기본 분석교육 (정확도, 정밀도, 유효숫자, 불확도)
- 분리분석, 분광분석, 질량분석, 표면분석, 전기화학분석, 전자현미경분석
- 일반 기기분석: 연구프로젝트, 종합연구개발계획의 기기분석 설계 및 운영 자문
- 고급 기기분석: 최첨단 분석장비 구성 및 활용 자문

### KASTI MOU 체결 시 제공 서비스

- 임직원 교육
  - 국내 최고의 강사진에 의한 분석과학 관련 맞춤형 교육·훈련 실시(1~2회)
  - 중소, 벤처 기업 CEO, 임직원을 위한 경영 교육

### 연<mark>구장비</mark> 개발 및 국내외 마케팅 지원

- 국가 연구장비개발 R&D 사업 발굴 및 공동 연구참여 기획
- 공공 R&D 및 기업 차원의 장비연구개발과제 공동 참여
  - 장비개발 기획(시장, 기술 조사를 통한 개발 목표 및 전략 수립)
  - 장비개발 참여(부품, 시제품, 완제품 성능 평가 및 비교 시험)
- 개발연구장비 성능 평가 및 마케팅 지원
  - 국가 공인 시험기관을 통한 장비 성능 평가 및 비교시험 성적서 확보 지원
  - 시험연구 결과를 국내외 학술지 게재 및 학술대회 발표
  - 개발 연구장비의 마케팅 전략 개발 및 홍보 지원
  - 해외 연구장비 홍보(전시, 학회발표 등) 컨설팅 및 지원

### **한국<mark>분석과학기술원 특강</mark> -** KASTI 명사

- 임직원리더십과 조직문화 / 김용환박사
- 기업의 지속가능성과 ESG 경영 / 진대현박사
- 첨단연구실험실 설계와 운영 / 이덕희박사
- 분석컨설팅
  - 기업, 기관의 분석업무 관련 전문가 자문(1~2회)
- KASTI Newsletter
  - 분석 분야 Insight를 제공하는 KASTI 와 고객의 소통채널(월 1회)
- 분석과학 분야 고급 소통 지원
  - 분석과학 및 연구장비 산업 관련 학, 연, 산, 관과의 폭 넓은 소통 지원



### **Brief History**

○ 2016년 (사)한국분석과학회에서 '분석과학의 육성과 발전'을 주제로 '과학의 과학' 분석과학을 국가차원에서 강화하고 연구장비산업 육성의 필요성이 제기됨

2019년 소·부·장 산업 경쟁력 강화 필요성 제기와 함께 (사)한국분석과학회와 (사)한국연구장비
 산업협회 공동 협력하여 분석기술자문단 구성

) 2020년 지속적 분석과학역량 강화 및 연구장비산업 육성을 위해 한국분석과학기술원(KASTI) 설립

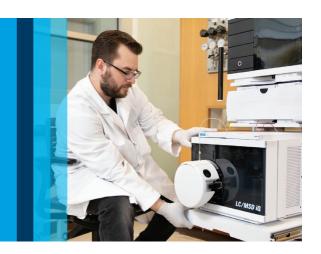
#### People

- 김혁년 (이학박사, 한국분석과학회 부회장, 전 LG디스플레이 분석팀장) 대표이사
- 정두수 (이학박사, 서울대교수, 한국분석과학회장) 대표이사
- 이덕희 (보건학박사, 전 영인그룹사 대표이사, 전 한국연구장비산업협회장) CMO
- 진대현 (경영학박사, 전 이컨설팅 대표이사) CFO
- 김용환 (농학박사, 서울대 농생명대 교수, 전 LG팜한농 대표이사) CTO
- 김만구 (공학박사, 한국분석과학회 고문, 강원대교수) CTO
- 김태승 (이학박사, 한국분석과학회 고문, NICEM책임연구원) CTO
- 서용찬 (공학박사, 한국환경분석학회 부회장, 인도네시아 UNPAR 대학 교수) CTO
   KASTI 전문, 자문위원 및 고문단 50여명 (한국분석과학회 임원, 연구장비산업협회 임원 등)

### 한국분석과학기술원

## 더 정확한 결과를 얻기 위한 Tech Refresh 프로그램

스마트, 통합 Agilent LC/MS systems



#### Tech Refresh 프로그램 할인을 받아보세요.

DAD 검출기를 많은 경우에 익숙하게 사용하고 있지만, 다이오드 어레이 검출 방법으로 매번 답을 얻을 수는 없습니다. 또한 결과가 모호할 경우에는 더 많은 시간과 비용이 소모되고, 때로는 어려움에 처하기도 합니다.

고객님의 실험실 장비에 질량 검출기를 추가하면 새로운 차원의 결과를 얻으실 수 있습니다.

Agilent InfinityLab LC/MSD iQ와 Agilent 1260 Infinity II LC 시스템으로 구성된 스마트, 통합 Agilent LC/MS 시스템은 고객님의 실험실에 새로운 차원의 결과를 제공합니다.

Agilent InfinityLab LC/MS iQ 시스템은 필수 질량 검출 기능을 제공하여 화합물을 신속하게 확인하고 크로마토그래피로 분석되지 않은 화합물에 대해서도 UV 검출기보다 더 높은 특이성과 선택성을 제공합니다. 제약, 학술, 화학, 식품 산업 등에서 Agillent iQ single quadrupole 질량 분석기는 분석 결과에 신뢰성을 더해 드립니다. 또한 모든 사용자 기술 수준에 맞게 설계되었고, InfinityLab 포트폴리오와 함께 작동하도록 최적화되어 워크플로를 간소화 합니다.

- 분자량 정보로 화합물을 빠르게 식별하고 UV 결과에 확실성, 명확성 및 확신을 더합니다.
- OpenLab 크로마토그래피 데이터 시스템 소프트웨어에 질량 검출을 추가하여 직관적으로 분석할 수 있어 분석 작업을 간소화합니다.
- 최적의 MS 분석 조건을 자동으로 설정하는 Auto Acquire 모드로 분석법 설정 시간을 단축합 니다
- 가동 중지 시간을 최소화하기 위해 장비 상태를 자동으로 추적하여 서비스가 필요한 시기를 예측합니다.
- Agilent 1260 및 1290 Infinity II LC 시리즈를 위한 컴팩트한 스택형 설계로 공간을 절약합니다

#### 프로모션 적용 기간

Tech Refresh 프로그램 할인으로 초기 비용을 절감하고 실험실 생산성을 높일 수 있습니다. promo code 1608(한국)

지금 연락해 보세요.

Agilent 담당에게 문의하거나, 아래 웹사이트를 방문하실 수 있습니다.

explore.agilent.com/gain-confidence

DE.5341550926

This information is subject to change without notice.

© Agilent Technologies, Inc. 2020 Published in the USA, March 24, 2020 5994-1830EN



Agilent InfinityLab LC/MSD iQ with the 1260 Infinity II Prime LC in the InfinityLab Flex Bench MS.





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



2020 국가브랜드대상 외국계 기업 부문 수상 2020년 9월



아태지역 우수 고용주 인증 획득







# 화학·환경·바이오 분야 표준물질(Made in Korea)이 보급됩니다

국가기술표준원 주관하에 국내 산·학·연 협업을 통해 화학·환경·바이오 산업에 필요한 표준물질의 국산화

균질도, 불확도, 안정성평가 등을 통한 화학·환경·바이오 분야 15개 표준물질 개발 및 보급

2021년 하반기

### 표준물질의 역할 및 기대효과



### 화학 · 환경 · 바이오분야 표준물질 활용 예





### 2020~2021년 화학·환경·바이오 분야 개발 예정 표준 물질

- 01 불화수소 표준가스
- 02 \_ 사불화규소, 포스핀, 디보란 표준가스
- 03 염소계 난연제 분석용 ABS 표준물질
- 04 \_ 브로민 분석용 PE 표준물질
- 05 \_ 발열량 측정용 표준물질
- 06 과불화합물 분석용 표준물질
- 07 냄새유발물질 표준물질
- 08 \_ 윤활유 중금속 측정용 표준물질
- 09 석탄재 유해중금속 표준물질
- 10 \_ 전자재료용 고분자 소재의 브롬계 난연제 표준물질
- 11 세포독성 평가용 고분자 표준물질
- 12 시멘트 화학분석 및 중금속 분석용 표준물질
- 13 의료용 생분해성 고분자 표준물질
- 14 \_ 미생물 분석용 표준균주 표준물질
- 15 크림형 화장품 표준물질

※ 각 분야에 필요한 표준물질 수요조사를 받고 있습니다.

문의처 한국화학융합시험연구원 정혁 수석 TFI 02) 2092-3623 E-MAIL hyuk@ktr.or.kr

### thermo scientific



### With next-level productivity and performance

Laboratory needs for productivity never cease to grow. Advance your quantitative workflows to meet these demands with the next-level performance and productivity of the Thermo Scientific™ TSQ™ Plus portfolio of triple quadrupole mass spectrometers. Address current and future challenges with enhanced acquisition speed, sensitivity, and operational simplicity—all combined with proven robustness and reliability. Easy calibration, intuitive software, and predefined method templates ensure users of all skill levels obtain high-confidence results.



Thermo Scientific™ Vanquish™ Horizon UHPLC system and Thermo Scientific™ TSQ Altis™ Plus triple quadrupole mass spectrometer



Thermo Scientific™ Vanquish™ Flex
UHPLC system and Thermo Scientific™
TSQ Quantis™ Plus triple quadrupole
mass spectrometer



Thermo Scientific™ Vanquish™ Core
HPLC system and Thermo Scientific™
TSQ Fortis™ Plus triple quadrupole
mass spectrometer

Find performance at

#### thermofisher.com/AdvancedQuantitation





### SPE 자동화 시스템





#### SPE-03

- · 8-Samples in parallel
- · Sample Volume: 0.5 ~ 4,000ml
- 2 fraction per sample
- Flow rate : 0.5 ~ 100ml/min
- •5인치 터치스크린 인터페이스
- ·Bottle 자동 세척 기능



#### VIVACE™ DUO

- \*Sample Volume: 0.5 ~ 30ml
- 2 fraction per sample
- Flow rate: 0.5 ~ 65ml/min
- •5인치 터치스크린 인터페이스
- \*Sample Vial 자동 세척 기능

### HPLC / GC 컬럼 / SPE 카트리지





다양한 고정상으로 광범위한 적용 가능

#### HPLC 컬럼

- •고순도의 균일한 실리카
- •높은 분리 성능
- ·다양한 분야의 실험에서 사용 가능
- •높은 화학적, 기계적 안정성



고온 고압 조건에서도 안정적인 분리능

#### GC 컬럼

- \*고온 조건에서 뛰어난 안정성을 가지는 컬럼
- •우수한 내구성으로 긴 수명
- ·고온에서도 낮은 Bleed



균일한 실리카 사용으로 최상의 분리성능

#### SPE 카트리지

- '고순도, 다양한 고정상
- \*뛰어난 재현성과 회수율
- \*1ml 부터 150ml 까지 다양한 용량
- '여러 SPE 기기 호환 가능





### ■ 목 차 ■

초대의 글	. 1
학술대회 운영 공지 사항	2
2021년도 추계 학술대회 프로그램	3
포스터 발표 목록	···· 7
[초 록]	
든 ., 점심 세미나 ···································	25
특별 강연 ······	· 27
· 심포지엄 강연	
 수상강연	· 87
Early Bird Seminar	91
SK 머트리얼즈 소개	
PI급 구두 강연	. 95
포스터 발표	
 환경	98
의약품/화장품	125
식품/농학	157
무기/재료	178
원자력/방사선	186
표준	200
법과학	
일반	216
대학원생 구두 & 포스터	250
[기타 안내 사항]	
한국분석과학회 임원 명단 한국분석과학회 임원 명단	258

### 초대의 글

한국분석과학회 회원 여러분 안녕하십니까? 코로나 19의 방역 지침이 완화될 것으로 기대하며 제67회 한국분석과학회 총회 및 2021년도 추계 학술대회를 11월 18일(목)과 19일(금)에 인천시의 전폭적인 지원을 받아 강화도의 에버리치 호텔에서 개최합니다. 서울역/강화도 셔틀 버스도 예약제로 운영됩니다. 정부의 지침보다 더욱 조심스럽게 방역에 만전을 기할 것이며 포스터 발표는 옥외에서 진행됩니다. 학술대회 App을 이용하여 보다 편리하게 학술대회 정보를 찾고 참여하실 수 있습니다.

뿐만 아니라, 이번 추계 학술대회에는 참가 기념품, 후원 기업에서 제공하는 '랜덤 박스', 돌발 퀴즈 및 푸짐한 경품 행사, 그리고, 금요일 오후의 강화도 필드 트립이 준비되어 있습니다. SK Materials 통합분석센터를 비롯한 많은 기업/기관의 소개 행사도 진행합니다. 활발하고 심도 있는 학술 활동과 아울러 회원 간 네트워킹, 구인/구직의 장이 될 것입니다.

분석과학회 웹사이트에 올려질 관련 정보에 많은 관심 부탁드립니다.

2021년 11월 사단법인 한국분석과학회 회장 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		
		단되미	사전 등록비	당일 등록비	
정회원	일반	30,000원	100,000원	120,000원	
(6외권	학생	20,000원	60,000원	80,000원	
비회원	일반		150,000원		
미외권	학생		100,000원		

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

#### 2) 구두 발표

- 발표자에게 배정된 시간은 학술상 수상 강연 및 스페셜 세션 30분, 심포지엄 및 PI급 구두 20분, 대학원생 구두 발표 6분입니다.
- 구두발표는 실시간 발표 혹은 제출된 녹화 동영상 상영(원활한 진행을 위해서 동영상 제출 권장)
- 녹화 동영상 상영 시에도 상영 후 온라인을 통한 질의응답 있으니 연사분의 참석 요청
- 구두발표 동영상(제출 동영상 혹은 당일 녹화분)은 학회 기간 후, 한달간 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

- MP4 파일(PPT 1 페이지 내로 작성요청, 1-5분 음성녹음)
- PDF 파일(PPT 파일 내용과 동일)
- 2021년 11월 05일까지 각 부여된 포스터 번호와 함께 koanal88@naver.com 으로 발송
- 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 2편을 선정하여 2021년 춘계 학술대회에서 시상할 예정입니다.

#### 4) 기타 자세한 사항은 아래로 문의바랍니다

- 학회 사무실 담당 강미경: 02-701-8661

# 2021년도 추계 학술대회 프로그램

11월18일(목)	Α	В	С		
10:30-	등록 및 포스터 게시				
12:00-12:40	점심 세미나 -영인크로매스-				
12:40-13:00		Coffee Break			
13:00-14:20	SYM 1 화학	SYM 2 원자력/표준/안전	SYM 3 표준물질		
14:20-14:30		Coffee Break			
14:30-15:50	<b>SYM 4 산학분과</b> -Bio 분석기술의 최신동향-	- SYM 5 약학	SYM 6 분자진단 -분자특성 진단기술의 동향-		
	LECO 젊은 분석과학자상 수상강연		<b>특별 강연</b> -연구장비 산업 혁신 성장 전략-		
15:50-16:50	포스터 (홀수 발표) (야외)				
16:50-17:30	SYM 7 대학원생 구두	SYM 8 젊은 분석과학자	SYM 9 참여업체 소개		
17:30-18:00	지올 분석과학상 수상 강연				
18:00-18:10	Coffee Break				
18:10-18:40	총회				
11월19일(금)	Α	В	С		
08:30-09:00	Early Bird Seminar -워터스 코리아-				
09:00-09:40	09.00-09.40	09:00-11:00	09:00-09:20 PI급 구두 강연		
	SK Waterials	SYM 11. (환경) -환경 중 비표적분석	09:20-11:00		
09:40-11:00	SYM 10 법과학	(Nontarget analysis) 동향-	SYM 12 ICP-MS		
11:00-12:00	포스터 (짝수) (야외)	연구장비 육성관련 간담회	포스터 (짝수) (야외)		
12:00-12:30	경품권 추첨 및 폐회				
12:30- 강화도 Field Trip (사전 신청자만 참여 가능)					

11월 18일	Α	В	С		
12:00-12:40	점심 세미나				
	좌장: 공민진(영인크로매스)				
12:00-12:40	Today's K-Chromatograph, "The introduction of ChroZen Family" 한현석(영인크로매스)				
12:50-13:00	Coffee Break				
13:00-14:20	Symposium 1 화학	Symposium 2 원자력/표준/안전	Symposium 3 표준물질		
	좌장: 배선영(서울여자대학교)	좌장: 이상일(한국표준과학연구원)	좌장: 이재형(한국화학융합시험연구원)		
13:00-13:20	Electrochemical reduction of CO <sub>2</sub> to CO using Ag-Zn bimetal catalysts deposited on polypyrrole-coated electrode 조아라(강원대학교)	Production and analysis of radioisotopes 박정훈(한국원자력연구원)	13:00-13:15 <b>반도체 공정관리용 사불화 규소(SiF4), 포스핀 (PH3)및 디보란(B2H6) 표준가스 개발 및 보급</b> 김병문(한국표준과학연구원)		
13:20-13:40	생물학적 응용을 위한 기능성 나노 입자: 유사효소 효과 및 검침에의 응용 최진실(한밭대학교)	A purity determination procedure for the establishment of metrological traceability in inorganic analysis 이종화(한국표준과학연구원)	13:15-13:30 <b>염소계 난연제(SCCP) 분석용 ABS 상용표준 물질 개발</b> 송석호(한국건설생활환경시험연구원)		
13:40-14:00	13:40-14:00 비소오염토양의 인체위해도 저감을 위한 철산화물 원위치 합성 및 장기 안정성 평가 안진성(세명대학교)	Preparation of beverage CRMs for the analysis of food additives in KRISS	13:30-13:45 RoHS II 규제대응을 위한 브롬계 난연제 및 프탈레이트 동시 함량분석용 ABS 인 증표준물질 개발 이준태(한국산업기술시험원)		
		안성희(한국표준과학연구원)	13:45-14:00 <b>브로민 정량 분석용 폴리에틸렌 인증표준 물질 개발 및 보급</b> 권덕준(한국화학융합시험연구원)		
14:00-14:20	,	Development of certified reference materials for the determination of 5-methyltetrahydrofolate in spinach and	14:00-14:15 <b>과불화합물(PFCs)분석용 인증표준물질 개발에</b> 대한 연구 김재우(KOTITI)		
	electrical quality of powder-type graphene materials 이하진(서울여자대학교)	kimchi cabbage 형석원(한국표준과학연구원)	14:15-14:30 수질 중 냄새물질, Geosmin, 2-MIB 분석을 위한 인증표준물질 개발 김윤석(K-Water)		
14:20-14:30	Coffee Break				
14:30-15:50	Symposium 4 Bio 분석기술의 최신동향	Symposium 5 약학	Symposium 6 분자특성 진단기술의 동향		
	좌장: 김혁년(한국분석과학기술원)	좌장: 홍종기(경희대학교)	좌장: 남궁현(코오롱인더스트리)		
14:30-14:50	BT의 발전을 견인하는 분석과학의 기술혁신 박상열(한국표준과학연구원)	Metabolic profiling and investigation of the antitumor effects with metabolomic and lipidomic approach for PP242 using UPLC-MS 정병화(한국과학기술연구원)	종이 기반 미세유체칩의 색변환 정량화를 위한 원심광학시스템 연구 김상효(가천대학교)		
14:50-15:10	<b>백신마이크로니들의 안정성 그리고 효능 분석</b> 박정환(가천대학교)	New insights into in vivo toxicity of natural deep eutectic solvents guided by toxico-metabolomics investigation 이정미(성균관대학교)	Metabolomic profiling analysis for biomarker discovery in human disease 황금숙(한국기초과학지원연구원)		
15:10-15:30	<b>인공지능을 이용한 전기화학분석</b> 장지환((주)유케어트론 연구소)	Drug metabolite identification using MS-based molecular networking 유혜현(한양대학교)	<b>기능성 나노물질 기반의 광-전기화학적 분석 연구</b> 김주훈(경희대학교)		
15:30-15:50	[LECO 젊은 분석과학자상 수상강연]	Determination of the metabolic alterations of short-chain	[특별 강연] 좌장: 서인수(한국기초과학지원연구원)		
	Analytical science and technology in the safety assessment of hazardous substances in pharmaceutical products and discovery of bioactive natural products 백승훈(아주대학교)	fatty acids and TCA cycle intermediates in human plasma with gastric disorders using GC-MS/MS 이원웅(우석대학교)			

### 2021년도 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

15:50-16:50	포스터 (홀수) (야외)							
16:50-17:30	Symposium 7 대학원생 구두발표	Symposium	8 젊은 분석과학자	Symposium 9 참여업체 소개				
	좌장: 최기환(한국표준과학연구원)		좌장: 이원웅(우석대학교)		좌장: 이정애(한국과학기술연구원)			
16:50-16:54	장거리 이동 오염원 평가를 위한 PM2.5 구성성분 정량분석 이채연(한국원자력연구원, 충남대학교)	16:50-17:10		16:50-16:56	[Silver Sponsor] 써모피셔사이언티픽코리아			
16:54-17:59	A study on the distribution characteristics of microplastics introduced into the water system from the paint on the Gongjicheon Stream trail 박소영(강원대학교)			16:56-17:02	[Silver Sponsor] 레보딕스(주)			
17:59-17:03	Identification of thymosin β4 in-vitro metabolites with synthesized standards Khandoker Asiqur Rahaman(KIST)		대사체 분석을 통한 암대사의 이해 및 항암타겟 발굴	17:02-17:08	[Silver Sponsor] (재)한국화학융합시험연구원			
17:03-17:07	Study on effect of sample preparation on structure and size distribution of exudate gums using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS)					강윤표(서울대학교)	17:08-17:11	[Bronze Sponsor] 워터스코리아
17.07 17.11	Meiyu Zhang(한남대학교) Size characterization and quantification of TiO <sub>2</sub> and SiO <sub>2</sub>						17:11-17:14	[Bronze Sponsor] 뷰키코리아
17:07-17:11	in food matrix by sedimentation field-flow fractionation (SdFFF) and relative techniques Wang Da(한남대학교)			17:14-17:17	[Bronze Sponsor] 충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구 지원센터			
17:11-17:15	Simultaneous analysis of multi-component lipids by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry 이혜진(덕성여자대학교)	17:10-17:30	Mass spectrometry imaging of formaldehyde-fixed paraffin-embedded clinical samples via chemical decrosslinking of peptide hormones 이동규(중앙대학교)	17:17-17:20	[Bronze Sponsor] 주식회사 오디랩			
17:15-17:19	Simultaneous determination of 37 lipids metabolites and Bio-profiling in human serum by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry 이지선(덕성여자대학교)			17:20-17:23	[Bronze Sponsor] 한국산업기술시험원			
17:19-17:23	UVC-lamp sterilization of <i>Bacillus atrophaeus</i> spores on glass and tile			17:23-17:26	[Bronze Sponsor] (주)유엠씨사이언스			
	장한별(충남대학교)			17:26-17:29	[Bronze Sponsor] 시마즈사이언티픽코리아			
17:30-18:00	지올 분석과학상 수상강연							
	좌장: 김진석(한국표준과학연구원)							
17:30-18:00	대한민국에서의 분석과학과 연구장비산업 이덕희(한국분석과학기술원)							
18:00-18:10	Coffee Break							
18:10-18:30	총회							

11월 19일	А		В		С	
08:30-09:00	Early Bird Seminar					
	좌장: 김태욱(한경대학교)					
08:30-09:00	Waters Cyclic Ion Mobility의 원리와 응용사례 소개 최도영(워터스 코리아)					
09:10-09:40	SK Materials	09:00-11:00	Symposium 11 환경 중 비표적분석 (Nontarget analysis) 동향	09:00-09:20	PI급 구두 강연	
	좌장: 강종성(충남대학교)		좌장: 허유정(국립환경과학원)		좌장: 이진숙(한국산업기술시험원)	
		09:10-09:30	Non-Target screening: A powerful tool for	09:00-09:20	환경규제(RoHS, REACH) 대응 위한 국	
	SK머티리얼즈의 소재 산업(반도체, Display, Battery) 분석기술		selecting environmental pollutants		제표준 및 CRM 개발 협력 사례 소개	
09:10-09:40	개발 방향		이정애(한국과학기술연구원)		정재학(한국분석과학연구소)	
	강선영(SK머트리얼즈)	09:30-09:50	LC-orbitrap MS를 이용한 하천수 중 미량유기오 염물질의 non-target 분석	09:20-11:00	Symposium 12 ICP-MS	
			이인정(국립환경과학원)		좌장: 김혁년(한국분석과학기술원)	
09:40-11:00	Symposium 10 법과학	09:50-10:10		09:20-09:40	Off axis ion optics study in the ICP(Inductively Coupled Plasma)-MS(Mass Spectrometer) using ion lens simulation 강성원(영인에이스)	
	좌장: 박세연(서울과학수사연구소)		전준호(창원대학교)		Characteristics of the inductively	
09:40-10:00	The study of fingerprint degradation and composition according to aging(II) 김남이(광주과학수사연구소)			09:40-10:00	coupled plasma inside the interface lens system measured by the Langmuir probe 우주(영인에이스)	
10:00-10:20	Phenoxyethanol의 함량 및 비율을 통한 문서의 작성시기           추정의 타당성 검토           성태명(대전보건대학교)	10:10-10:30	표적/추정분석 결과의 통계기법 적용 이혜리(국립환경과학원)	10:00-10:20	Correlation method for high speed size determination of nanoparticles using ICP-MS 임흥빈(단국대학교)	
10:20-10:40	Analysis of phenothrin and span80 on fire debris to determine a fire caused by bug sprays 정진미(부산과학수사연구소)	10:30-11:00		질의응답 및 종합토론	10:20-10:40	lon transmission probability through a quadrupole mass filter depending on initial ion condition and rod misalignment 장규하(한국원자력연구원)
10:40-11:00	Forensic glass analysis: A collaborative exercise and case studies 곽성신(국립과학수사연구원)			10:40-11:00	Real time analysis of VOC gases by Ion Molecule Reaction Mass Spectrometer (IMR-MS) 이남석(영인에이스)	
11:00-12:00	포스터 (짝수) (야외)	연구장비 육성관련 간담회(좌장: 이승수 과학기술정보통신부 ) 포스터 (짝수) (야외)				
12:00-12:30	경품권 추첨 및 폐회					
12:30-		강	화도 Field Trip (신청자만 참여 가능)			

### 포스터 발표 목록

\*: 교신저자, (밑줄): 발표자

#### 환경: P-001 ~ P-027

#### P-001 도심 미세먼지 중 미세플라스틱의 정성 및 정량 분석

Qualitative and quantitative analysis of microplastics in urban Particulate Matters  $\underline{1 ext{LE}}^1$ , 김주양 $^1$ , 정재학 $^1$ \*,임용현 $^2$ 

1★한국분석과학연구소, 2한국표준과학연구원

#### P-002 GC-MS와 GC-VUV를 이용한 먹는물 중 휘발성유기화합물분석법 비교연구

<u>강혜림</u>★, 고혁준, 김은정, 강경구 제주특별자치도개발공사 R&D혁신센터

#### P-003 Multi-omics platform assessing toxicity of different types of polystyrene nano-particles

Mina Kim<sup>1</sup>, Hyung Min Kim<sup>1</sup>, Nguyen Phuoc Long<sup>2</sup>, Jung Eun Min<sup>1</sup>, Nguyen Hoang Anh<sup>1</sup>, Sun Jo Kim<sup>1</sup>, Sang Jun Yoon<sup>1</sup>, Sung Won Kwon<sup>1</sup>\*

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Seoul National University, <sup>2</sup>Research Institute of Pharmaceutical Sciences, Seoul National University

### P-004 Alterations in lipid metabolism after acute and chronic exposure to nano-polystyrene in Caco-2

<u>Suk Won Kim</u><sup>1</sup>, Sun Jo Kim<sup>1</sup>, Cheol Woon Jung<sup>1</sup> and Sung Won Kwon<sup>1,2,★</sup>

<sup>1</sup>서울대학교 약학과, <sup>2,★</sup>서울대학교 종합약학연구소

### P-005 Development of analytical method for metals and metalloids in electronic cigarette using ICP-MS

<u>Hyoung-Joon Park</u>, Seok Heo, Minkyoung Lee, Minsoo Kim, Changyong Yoon and Sunyoung Baek\* Center for Advanced Analysis, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety

# P-006 Development of analytical methods for determining 3-hydroxy fatty acids and muramic acid in environmental samples using GC-MS and LC-MS

Yoon-kyung Han, Gieun Hong, Yun-Cheol Na\*

Western Seoul Center, Korea Basic Science Institute, 150 Bugahyeon-ro, Seodaemun-gu, Seoul, 03759, Republic of Korea

#### P-007 Monitoring of Ticks in Hangang ecological Park

Chae Kyu Hong\*, Yae Jun Son, Hee Soon Kim, Young Hee Oh

Department of Infectious Disease Research, Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

#### P-008 석탄재(Coal Fly ash) 중 유해중금속 분석을 위한 인증표준물질 개발에 관한 연구

김남준¹,★, 이준희¹, 정창석¹, 김홍석¹, 정민종¹, 곽주현¹, 이재형²

1한국화학융합시험연구원 화학환경연구소, 2한국화학융합시험연구원 소재부품연구소

- P-009 열분해 방법(Py-GC/MS)을 이용한 미세플라스틱 정성 및 정량분석 방법 연구 <u>장한솔</u>, 이효영, 박선구, 김재우\* (사)KOTITI시험연구원
- P-010 XRD-XRF 연계 분석을 이용한 미세먼지 내 중금속이 포함된 상분석 및 발생원 규명 <u>김성철</u>, 이병현, 박영선, 원성옥\* 한국과학기술연구원 특성분석센터
- P-011 Suspect and non-target screening of emerging substances in four major river of Korea

  Young Jae Joo<sup>1,2</sup>, Hee Soo Pyo<sup>1</sup>, Kyoung Heon Kim<sup>2</sup>, and Jeongae Lee<sup>1,\*</sup>

  Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology

  Department of Biotechnology, College of Life Sciences and Biotechnology, Korea University
- P-012 Temporal Variability of Atmospheric Radon-222 Concentrations at Gosan Site of Jeju Island

  Jung-Min Song<sup>1</sup>, Hyo-Sun Yang<sup>1</sup>, Won-Hyung Kim<sup>1</sup>, Chang-Hee Kang<sup>1,\*</sup>, S. Chambers<sup>2</sup>

  <sup>1</sup>Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

  <sup>2</sup>Australian Nuclear Science and Technology Organisation
- P-013 Size Determination of Iron Oxide Nanoparticles Using Modified Single Particle ICP-MS 실지민<sup>1</sup>, 임흥빈<sup>2,★</sup>

  1,2,★단국대학교 화학과
- P-014 Improved extraction of lipids from Atlantic salmon tissues and quantitative determination of fatty acids using GC-MS

<u>Thi Hoai Thu Mai</u><sup>1</sup>, Aram Jo<sup>1</sup>, Hyerim Kim<sup>1</sup>, Seoyoon Choi<sup>1</sup>, Jaeseok Choi<sup>2</sup>, Hekap Kim<sup>3</sup>,★

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kangwon National University

<sup>2</sup>Environmental Research Institute, Kangwon National University

<sup>3</sup>School of Natural Resources and Environmental Science, Kangwon National University

P-015 Gas chromatographic determination of volatile N-nitrosamines in water after modification to fluorine-containing derivatives

Thi Hoai Thu Mai<sup>1</sup>, Hekap Kim<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kangwon National University

<sup>2</sup>School of Natural Resources and Environmental Science, Kangwon National University

P-016 Determination of gaseous and particulate N-nitrosamines in the atmosphere using gas chromatography coupled with electron capture detection

Thi Hoai Thu Mai<sup>1</sup>, Hekap Kim<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kangwon National University

<sup>2</sup>School of Natural Resources and Environmental Science, Kangwon National University

P-017 판상 건축자재 절단면으로부터 방출되는 휘발성 오염물질 평가를 위한 시험방법 개발 – 절단면 의 밀봉 비율과 방법에 따른 방출특성 평가

박준호<sup>1</sup>, 홍수정<sup>1</sup>, 최임성<sup>2</sup>, 김만구<sup>1,\*</sup>

1강원대학교 환경융합학부 에코환경과학전공, 2(주)아람기술이앤지

P-018 냄새 원인 물질 규명을 위한 GC/FID/FPD/ODP 개발

유환민, 서은빈, 김만구\*

강원대학교 환경융합학부

#### 2021년도 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

P-019 **극한상황에 적용 가능한 다목적 원격 시료 채취장치의 성능평가** <u>김여정</u>, 김만구\*

강원대학교 환경융합학부

P-020 Development of highly sensitive analytical method for measuring predictive biomarkers of preterm birth using HS-GC-MS/MS and LC-MS/MS

<u>Ji-Youn Lee</u>, Sun Koung Joung, Sang Beom Han\*

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

P-021 Influence of channel thickness and flow rate on fractionation efficiency (FE) of a middle-scale full feed depletion mode-SPLITT fractionation (FFD-SF)

<u>SuJong Lee</u>, Meiyu Zhang, Da Wang, Jaeyeong Choi and Seungho Lee Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

P-023 공정 제어 및 관리를 위한 실리카 연속 모니터링 시스템 전문환, 정헌상\*, 박종택, 김병갑, 이상민 (주)씨맥 기업부설연구소

P-024 가구용 구성재와 원부자재의 방출특성 상관성 비교 <u>최임성</u><sup>1</sup>, 이현주<sup>1</sup>, 권영진<sup>1</sup>, 박준호<sup>2</sup>, 김만구<sup>2,\*</sup> <sup>1</sup>아람기술이앤지(주), <sup>2</sup>강원대학교

P-025 온도영향을 반영한 건축자재의 오염물질 방출특성에 관한 연구 <u>현승민</u><sup>1,\*</sup>, 홍길환<sup>1</sup> 고영환<sup>1</sup>, 김만구<sup>2</sup>, 권영진<sup>3</sup>, 최임성<sup>3</sup> <sup>1,\*</sup>한국산업기술시험원, <sup>2</sup>강원대학교, <sup>3</sup>아람기술이앤지(주)

P-026 환경분야 시험·검사기관의 숙련도 시험 및 현장평가 소개 <u>황종연</u>, 이혜리, 고상호, 이진주, 김지혜, 전수아, 김효경, 박창희, 허유정, 신선경\* 국립환경과학원 환경기반연구부 환경측정분석센터

P-027 환경분야 시험·검사기관 정도관리 제도 소개 <u>황종연</u>, 이혜리, 고상호, 이진주, 김지혜, 전수아, 김효경, 박창희, 허유정, 신선경\* 국립환경과학원 환경기반연구부 환경측정분석센터

#### 의약품/화장품: P-028 ~ P-059

P-028 Comparison of chemical constitutions between the original and enhanced bioactive rich fraction of black chokeberry fruits using chemical analytical methods

Rustam RUSTAMOV, Chong Woon CHO, Dan Gao, Hyung Min KIM and Jong Seong KANG\* 충남대학교 약학대학

P-029 Effect of anti-hair loss activity of *Thuja orientalis* leaf extracts and a GC-FID analytical method of them for quality control

<u>Won Seok JEONG,</u> Chong Woon CHO, Jin Hyeok KIM, Dan GAO, Hyung Min KIM, and Jong Seong KANG\* 충남대학교 약학과

P-030 Quantitative analysis of main compounds and impurities in sulfur hexafluoride and octafluoropropane products using GC-BID

<u>Chong Woon CHO</u>, Farha Ive MOONMOON, Jin Hyeok KIM, Dan GAO, Hyung Min KIM, and Jong Seong KANG\* 충남대학교 약학과

P-031 Effect of anti-melanogenesis activity extracts purified from *Pueraria lobata* Stem, and an HPLC-UV method for the quality control of its cream products

 $\underline{Dan\ GAO}^1$ , Chong Woon Cho $^1$ , Rustam Rustamov $^1$ , Cheong Tae Kim $^2$ , Won Seok Jeong $^2$ , and Jong Seong Kang $^{1, \bigstar}$ 

1,★충남대학교 약학대학; 2㈜알엔에스

P-032 LC-MS/MS method for analysis of *N*-acetylneuraminic acid in antler extracts using porous graphitic carbon column

Duc Thanh CHU, <u>Chong Woon CHO</u>, Hyung Min KIM and Jong Seong KANG\* 충남대학교 약학대학

- P-033 Evaluation of *Morus alba* leaf extracts after bioconversion for development of anti-diabetic agent <a href="Ive Farha MOONMOON">Ive Farha MOONMOON</a>, Jin Hyeok KIM<sup>1</sup>, Tae Jung KIM<sup>1</sup>, Kyung Tae KIM<sup>2</sup>, Young Ho KIM<sup>1</sup>, Cheong Won CHO<sup>1</sup>, Hyung Min KIM<sup>1</sup>, Jong Seong KANG<sup>1,\*</sup>

  1,\*\*충남대학교 약학과, <sup>2</sup>동의대학교 바이오응용공학부 식품공학전공
- P-034 Development of analytical method for standardization of EG product (natural scalp tonic)

  <u>Jin Hyeok KIM</u>, Chong Woon CHO, Hyung Min KIM and Jong Seong KANG\*
  충남대학교 약학대학
- P-035 Sensitive analysis of alpelisib using liquid chromatography-tandem mass spectrometry in plasma and application to pharmacokinetic study

Seop-Lee<sup>1,2</sup>, Kyeong-Ryoon Lee<sup>1</sup>, Yoon-Jee Chae<sup>3</sup>, Jung-woo Chae<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Laboratory Animal Resource Center, Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology, <sup>2,\*</sup>College of Pharmacy, Chungnam National University, <sup>3</sup>College of Pharmacy, Woosuk University

P-036 Preparation and characterization of size and sun protection factor (SPF) for solid lipid nanoparticles (SLNs) using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) and relative techniques

Miyeon Park, Meiyu Zhang, Da Wang, Jaeyeong Choi and Seungho Lee Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

P-037 Determination of chlorogenic acid in Lonicera japonica extracts by HPLC

Ki Baek Park<sup>1</sup>, Jung In Seo<sup>1</sup>, Ye jin Kim<sup>1</sup>, Won Jin Ah<sup>1</sup>, Hye Hyun Yoo<sup>1,\*</sup>
<sup>1</sup>Department of Pharmacy, Hanyang University

P-038 The new quantitative method of sphingosine-1-phosphate after dephosphorylation with hydrogen fluoride

<u>Seo-Hyeon Jung</u>, Hee-Jung Kim, Maftuna Shamshiddinova, Shokhid Gulyamov, Yong-Moon Lee\* College of Pharmacy, Chungbuk National University

P-039 Anaylsis of falsified drugs by Raman spectroscopy

<u>Woo-Hyun Bae</u><sup>1</sup>, Shokhid Gulyamov<sup>1</sup>, Yong-Moon Lee<sup>1,★</sup>

<sup>1,★</sup>College of Pharmacy, Chungbuk National University

P-040 Evaluation of the skin sensitization potential of aroma compounds using the direct peptide reactivity assay linked (Q)SAR programs

Jisu Ryu, Yong-Moon Lee,\*

College of Pharmacy, Chungbuk National University

P-041 LC-MS/MS analysis of elevated ceramides by inhibition of SphK1 in IMQ-induced psoriasis mouse model

<u>Shokhid Gulyamov</u><sup>1</sup>, Maftuna Shamshiddinova<sup>1</sup>, Hee-Jung Kim<sup>1</sup>, Seo-Heon Jung<sup>1</sup>, Yong-Moon Lee<sup>1,\*</sup>
<sup>1</sup>College of Pharmacy, Chungbuk National University

P-042 Lipidomics Appoach in diagnosing Crohn's Disease and Ulcerative Colitis; A Systematic Review Jihyun Yoon<sup>1</sup>, Eun Goo Lee<sup>1</sup>, Sung Won Kwon<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>서울대학교 약학대학

P-043 Steroidomics for the Prevention, Assessment, and Management of Cancers: A Systematic Review and Functional Analysis

<u>민영진</u><sup>1</sup>, Nguyen Hoang Anh<sup>1</sup>, Nguyen Phuoc Long<sup>1</sup>, 김선조<sup>1</sup>, 윤상준<sup>1</sup>, 김형민<sup>1</sup>, 권성원<sup>1,★</sup>
<sup>1</sup>서울대학교 약학대학

P-044 Simultaneous analysis of nitrosamines by headspace-GC-MS combined with inhibition of nitrosation by using nitrite scavenger

<u>Su Hyeon Hwang</u><sup>1</sup>, Chaeyoung Seo<sup>1</sup>, Minsun Jeong<sup>1</sup>, SangIn Lee<sup>1</sup>, Jongki Hong<sup>1,\*</sup>

1,\*College of Pharmacy, Kyung Hee University

P-045 Metabolomic study on organic acids, fatty acids, and amino acids in plasma samples of mice with lipopolysaccharide-induced sepsis

<u>Songjin Oh</u><sup>1</sup>, Moongi Ji<sup>1</sup>, Byeongchan Choi<sup>1</sup>, Jonghye Yun<sup>1</sup>, Jae-Hyun Park<sup>1</sup>, In Duk Jung<sup>2</sup>, Man-Jeong Paik<sup>1,★</sup>

¹,\*순천대학교 약학과, <sup>2</sup>단디바이오

# P-046 Simple high-performance liquid chromatography method for the quantification of pralidoxime chloride using chaotropic mobile phase additives

Bohyun Shin¹, Hyung-seung Kim,² Sang Beom Han¹,★

<sup>1,\*</sup>Department of Pharmaceutical Anaylsis, College of Pharmacy, Chung-Ang University, <sup>2</sup>Division of Forensic toxicology and chemistry, Defense Institute of Forensic Science, Ministry of National Defense

### P-047 Chemical profiling of herbal medicines by HPLC-UV and HPLC-ELSD for quality control

Se Hee Hong, Sang Beom Han\*

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

#### P-048 Identification of Microplastic in Eye drop by Raman spectroscopy

<u>조수아</u>1, 김효진\*

1동덕여자대학교 약학과

### P-049 Development of HPLC analysis method for detection of prohibited dyes in Permanent make-up ink

<u>Jun Hyoung Kim</u>, You Kyung Kim, In Suk Woo, Hyung Il Kim and Sun Young Baek\*

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

Republic of Korea

# P-050 A study on the improvement of test method for mycotoxin - Method validation of HPLC-FLD for aflatoxins in Cinnamomi cortex

<u>이성미</u>, 이영선, 이철현, 조수열\* 식품의약품안전평가원 생약연구과

#### P-051 Development of Electrochemiluminescence-based Anti-drug Antibody Detection Assays

<u>Ha-Rim Seo</u>, Philyoung Lee, Min-Young Lee, Jae Hyeon Yoon, Kyungsoo Ha\* New Drug Development Center, Osong Medical Innovation Foundation

#### P-052 A Study on Heavy Metal Concentrations of Color Cosmetics in Korea Market

<u>Chae Man Choi</u>, Ae Sook Park, Su Un Kim, Young Joo Lee, Min Jung Kim, Ji Young Kim, Yoon Hee Kim, Myeong Sook and In Sook Hwang

Department of Food & Medicine, Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

#### P-053 Monitoring of Preservatives in Cosmetics for Children

Myung-sook Lee\*, Su-un Kim, Chae-man Choi, Ae-sook Park, Yun-hee Kim and In-sook Hwang Department of Food and Drug, Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

#### P-054 Monitoring of main ingredients in functional cosmetics

<u>Su Un Kim</u>\*, Chae Man Choi, Ae Sook Park, Young Ju Lee, Min Jung Kim, Myeong Sook Lee and In Sook Hwang

Department of Food & Medicine, Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

# P-055 For quantitative analysis of MIT/CMIT in household chemical products Standard material development research

역태호¹,★, 성누리, 박지민, 홍원표 한국화학융합시험연구원

#### P-056 Analysis of Bisphenol A in Medicine Vinyl Bag Samples by Freezing Filteration

Hyub Kim

ASC, Department of Medicine Quality Analysis

# P-057 Isolation and structure elucidation of sageretizanin, novel flavonoid glycoside from the fruit of *Sageretia theezans* Brongn (Rhamnaceae)

<u>Yeon Woo Jung</u><sup>1</sup>, Hanna Cha<sup>1</sup>, Wonsik Jeong<sup>1</sup>, Ji Eun Lee<sup>1</sup>, Dong Woo Han<sup>1</sup>, GwangHun Park<sup>2</sup>, Youngki Park<sup>2</sup>, Sang-Hyun Koh<sup>2</sup>, Chun Whan Choi<sup>1</sup>, and Seong Su Hong<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Bio-Center, Gyeonggido Business & Science Accelerator (GBSA), <sup>2</sup>Forest Medicinal Resources Research Center, National Institute of Forest Science

#### P-058 Phytochemical constituents from the leaves of Sageretia theezans Brongn

<u>Hanna Cha</u><sup>1</sup>, Yeon Woo Jung<sup>1</sup>, Wonsik Jeong<sup>1</sup>, Ji Eun Lee<sup>1</sup>,Dong Woo Han<sup>1</sup>, Gwang Hun Park<sup>2</sup>, Youngki Park<sup>2</sup>, Sang-Hyun Koh<sup>2</sup>, Chun Whan Choi<sup>1</sup>, and Seong Su Hong<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Bio-Center, Gyeonggido Business & Science Accelerator (GBSA), <sup>2</sup>Forest Medicinal Resources Research Center, National Institute of Forest Science

#### P-059 Isolation and structure of new β-carboline alkaloids from Silene seoulensis

<u>Changon Seo</u>, Seong Su Hong, Jin Gwan Kwon, Yongmun Choi, Jin Kyu Kim\* Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator

#### 식품/농학: P-060 ~ P-096

## P-060 Studies on chemical constituents and method validation of Rutin from *Sambucus nigra* L. (Elderberry)

<u>Changon Seo</u>, Jin Gwan Kwon, Woo Jung Kim, Yongmun Choi, Myung-Jin Song, Jin Kyu Kim\* Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator

#### P-061 LC-MS method for screening of glycidol fatty acid esters in processed oils

Seo Mi Suk and Woo Jung Kim\*

Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator

# P-062 Determination of mineral contents in soybean paste, soy sauce and red pepper paste by region using ICP-OES and ICP-MS

<u>Dongwon Seo</u><sup>1,★</sup>, Junyoung Lee<sup>1</sup>, Jisu Park<sup>1</sup>, Suhyun Koh<sup>1</sup>

1,★Food Analysis Research Center, Korea Food Research Institute

# P-063 Analysis of macro and micro mineral contents in hot pots and stews using ICP-OES and ICP-MS

Dongwon Seo<sup>1,★</sup>, Suhyun Koh<sup>1</sup>, Jisu Park<sup>1</sup>, Junyoung Lee<sup>1</sup>

<sup>1,★</sup>Food Analysis Research Center, Korea Food Research Institute

- P-064 식품 중 중금속(납) 분야 국가표준실험실 구축을 위한 측정불확도 추정
  - 김나은, 박예슬, 이지안, 이화정, 구용의\*
  - 식품의약품안전처 식품의약품안전평가원 오염물질과
- P-065 Simultaneous determination of Trichothecene mycotoxins in food using liquid chromatography coupled with tandem mass spectrometry
  - <u>Ji-Hyun Park</u>, Minji Choi, Young woon Kang, Hwa Jeong Lee, Yong Eui Koo<sup>⋆</sup>
  - Food Contaminants Division, Food Safety Evaluation Dept, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety, 187, Osongsaengmyeong 2-ro, Heungdeok-gu, Cheongju, 28159, Korea
- P-066 Determination of Ni in hydrogenated fat-used food and chocolate-based products by microwave-assisted digestion with a single reaction chamber and subsequent ICP-MS analysis Ye-Seul Park<sup>1</sup>, Jian Lee<sup>1</sup>, Hui-Yeong Seong<sup>1</sup>, Hwa-Jeong Lee<sup>1</sup>, Yong Eui Koo<sup>1,\*</sup>
  Food Contaminants Division, Food Safety Evaluation Dept., National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety, 187, Osongsaengmyeong 2-ro, Osong-eup, 28159
- P-067 Occurrence and risk-assessment of tropane alkaloids in grains and infant foods in Korea

  Su-jin Oh<sup>1</sup>, Songyi Han<sup>1</sup>, Su kyung Jang<sup>1</sup>, Hwa-jeong Lee<sup>1</sup>, Yong-oui Koo<sup>1,\*</sup>

  <sup>1</sup>Food Contaminants Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety
- P-068 Multi-residue analysis of 63 pesticides in livestock products using GC-MS/MS

  <u>Eun-Ji Park</u>\*, Nam Young Kim, So Ra Park, Yong-hyun Jung, Gui-Im Moon

  Pesticide and Veterinary Drug Division, National Institute of Food and Drug Safety

  Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety
- P-069 Development of an analytical method for Nitrapyrin and 6-CPA in agricultural products with GC-MS/MS and LC-MS/MS
  - <u>Sun Young Gu</u>\*, Jung Mi Lee, Su Jung Lee, Hye-Sun Shin, Sung Eun Kang, Young-hyun Jung, and Gui Im Moon
  - Pesticide and Veterinary Drug Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety
- P-070 Metabolomic study of organic acids and amino acids in pre- and post-milling barley by gas chromatography-tandem mass spectrometry

Byeongchan Choi<sup>1</sup>, Moongi Ji<sup>1</sup>, Songjin Oh<sup>1</sup>, Mi ja Lee<sup>2</sup>, Man-Jeong Paik<sup>1,\*</sup> <sup>1,\*</sup>순천대학교 약학과, <sup>2</sup>국립식량과학원

- P-071 Monitoring of heavy metals contamination in agricultural products at abandoned mine area <a href="Eun-hee Chang">Eun-hee Chang</a>,\*\*, Mi-jeong Gwon, Hwang-ran Hwang, Eun-mo Jeong <a href="Gyeongbuk Provincial Office">Gyeongbuk Provincial Office</a>, National Agriculture Products Quality Managemenet Service
- P-072 Comparison of phenolics compounds between healthy and viroid-infected grapes in Korea

  Nguyen Bao Tan<sup>1</sup>, Thi Phuong Duyen Vu<sup>1</sup>, In Sook Cho<sup>2</sup>, Young Ho Kim<sup>1</sup>, Hyung Min Kim<sup>1</sup>,

  Jong Seong Kang<sup>1,\*</sup>
  - <sup>1</sup>College of Pharmacy, Chungnam National University, Daejeon 3414, Korea
  - <sup>2</sup>Department of Horticultural and Crop Environment, National Institute of Horticultural and Herbal Science, RDA, Wanju 55365, Korea

## P-073 Analysis in phenolic contents between healthy and viroid-infected apples using HPLC-PDA-ESI-MS/MS

Ninh Khac Thanh Tung<sup>1</sup>, Thi Phuong Duyen Vu<sup>1</sup>, In Sook Cho<sup>2</sup>, Kyung Tae Kim<sup>3</sup>, Seo Young Yang<sup>1</sup>, Young Ho Kim<sup>1</sup>, Hyung Min Kim<sup>1</sup>, Jong Seong Kang<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Chungnam National University, Daejeon 3414, Korea

<sup>2</sup>Department of Horticultural and Crop Environment, National Institute of Horticultural and Herbal Science, RDA, Wanju 55365, Korea

<sup>3</sup>Dong-Eui University, Busan 47340, Korea

# P-074 Screening and quantitative analysis of plant-growth regulators from metabolites of microorganisms by using QuEChERS and LC-MS/MS

Jeongeun Kim, Jueun Kim, Chul Won Lee\*

Department of Chemistry, Chonnam National University

# P-075 Establishment of simultaneous analysis method for Indole acetic acid, Abscisic acid, and Jasmonic acid in bacteria using HPLC-MS/MS

Myeonghan Yoo, Jueun Kim, Chul Won Lee\*

Department of Chemistry, Chonnam National University

#### P-076 Research on Hazardous Materials in Fishery Products in Busan Area

<u>Jiyoon Lee</u>\*, Hocheol Yun, Hyeonjeong Kwon, Eungung Jeong, Hyunnho Cho, Dayoung Kim, Seongju Lee, Jung-mi Kang

Busan Metropolitan City Institute of Health and Environment, Food Analysis Team

## P-077 Discrimination of the geographical origin of soybean products using energy dispersive XRF spectrometry and NIR spectroscopy

<u>김남훈</u>\*, 조주연, 박주현, 장미라, 김애경, 유인실, 황인숙

서울시보건환경연구원 식품의약품부

#### P-078 Changes in major components of royal jelly depending on harvest times

<u>Eun-hee Kim</u>\*, Jeong-sook Lee, Hee-jeong Jeong, Yun-hee Kim, Jung-hyun Park, Yae-jae Shin, Ju-sung Park, In-sook Hwang and Yong-seung Shin

Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

### P-079 Molecular weight distribution analysis of fish collagen using gel permeation chromatography (GPC)

Hee-Jin Yoo<sup>1,2</sup>, Duck-Hyun Kim¹ and Kun Cho<sup>1,3</sup>★

<sup>1</sup>Center for Research Equipment, Korea Basic Science Institute (KBSI), <sup>2</sup>Department of Chemistry, Sogang University, <sup>3</sup>Bio-Analytical Science, University of Science and Technology (UST)

# P-080 Method Development for the Analysis of Fenitrothion and Malathion in Food by Isotope Dilution Mass Spectrometry

Kebede G. Mekete<sup>1,2</sup>, 안성희<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>University of Science and Technology, <sup>2</sup>한국표준과학연구원

#### 무기/재료: P-081 ~ P-088

P-081 분석기기를 활용한 광물 판별 방법 간의 차이 및 상호 보완 최은철, 구민호\*, 성미나, 노을, 손형석 한국광해광업공단

P-082 **텅스텐 광물 중의 Si 정량** 고경수, <u>정봉근</u>\*, 허환기, 김행운 한국광해광업공단

P-083 자동차용 알루미늄 판재의 규소 분석 방법에 관한 연구 박태창<sup>1,\*</sup>, 고경수<sup>2</sup>, 윤순모<sup>1</sup>, 정봉근<sup>2</sup>, 서용기<sup>1</sup> <sup>1,\*</sup>현대제철 재료분석팀, <sup>2</sup>한국광물자원공사 광물분석팀

P-084 국내 멜레크기 합성다이아몬드 유통현황 및 분석연구 이보현\*, 이영주 서울주얼리지원센터(SJC) 감정연구소

P-085 LA-MC-ICPMS를 이용한 괘불탱에 사용된 안료의 납 동위원소 분석 <u>정연중<sup>1</sup>.\*</u>, 김숙주<sup>1</sup>, 한기운<sup>1</sup>, 김효진<sup>1</sup>, 김소진<sup>2</sup>, 이은우<sup>2</sup> <sup>1</sup>.\*한국기초과학지원연구원 환경분석팀, <sup>2</sup>국립문화재연구소 보존과학연구실

P-086 화학공정 최적화를 위한 256채널 다중 전극 소자 기반 딥러닝 활용방안에 관한 연구 김보경<sup>1</sup>, 최헌진<sup>1,\*</sup> <sup>1</sup>연세대학교 신소재공학과

P-087 습식 기기분석을 위한 동합금 상용표준물질 개발 <u>김동인</u>\*, 이용현, 김현정 한국화학융합시험연구원 소재부품연구소

 P-088
 연소 적외선 흡수법을 이용한 SiC계 내화물의 Total 및 Free Carbon 분석을 통한 SiC 정량분석

 한홍현¹, 김소영², 정세훈²\*

1포항산업과학연구원 분석인프라섹션, 2★포항산업과학연구원 분석평가연구센터

#### 원자력/방사선: P-089 ~ P-102

P-089 Comparison and Analysis of Neutron Detectors used in HANARO and Korea Standard Nuclear Power Plant

<u>Hoon-Jo Cho</u>\*, Kwang-Young Lee, Ho-Young Choi Korea Atomic Energy Research Institute

P-090 Analysis of Nuclides Generated From Defective Fuel

Tae-Ho Kim\*, Ho-Young Choi, Hoon-Jo Cho

Korea Atomic Energy Research Institute

P-091 플루토늄 연대측정을 위한 pg급 극미량 아메리슘 동위원소 및 정량 분석

<u>박난희</u>\*, 정근호

한국원자력연구원 환경:재해평가연구부

P-092 The analysis about correlation with change of hot water system thickness during the HANARO reactor operation cycle and reactor pool surface radiation

Yong-hwi KIM\*

Korea Atomic Energy Research Institute

P-093 Change of gaseous radioactive waste amount generated from HANARO reactor during the reactor operation cycle and contemplating the safe guide

Yong-hwi KIM\*

Korea Atomic Energy Research Institute

P-094 실리카겔을 첨가하여 Mo의 열이온화질량분석 시 단일필라멘트와 이중필라멘트 사용에 따른 Mo 검출세기 비교

박양순\*, 이재석, 조혜륜

한국원자력연구원 방사성물질화학분석실

P-095 모의 금속시료 대상 휘발성 요오드 분리특성

강병만★, 천경진, 박재일

한국원자력연구원 방사성폐기물 화학분석센터

P-096 원자력발전소 증기발생기 슬러지 성분원소 분석

이승천\*, 이재석, 조혜진, 박재일

한국원자력연구원 방사성물질화학분석실

P-097 중성자방사화분석과 WD-XRF 측정을 이용한 미세먼지 시료 내 원소 정량 분석법 개발 한보영<sup>1,\*</sup>, 문종화<sup>1</sup>, 남용현<sup>1</sup>, 김지석<sup>1</sup> <sup>1</sup>한국원자력연구원 융복합양자과학연구소 하나로이용부

P-098 Screening determination of nuclear material distribution and contents on swipe samples using MMXRF

 $\underline{\mathsf{Hyun}\;\mathsf{Young}\;\mathsf{Kim}}^{\bigstar}\text{, Cheong\;\mathsf{Won}\;\mathsf{Lee},\;\mathsf{Jeonghyeon}\;\mathsf{Ryu},\;\mathsf{Jung}\text{-}\mathsf{Youn}\;\;\mathsf{Choi},\;\mathsf{Haneol}\;\;\mathsf{Lee},$ 

Hyun Ju Kim

Korea Institute of Nuclear Nonproliferation and Control (KINAC)

P-099 Optimization of method for uranium standard particle samples using SEM and Nano-manipulator

Hyun Ju Kim<sup>1</sup>, Hwan Lee<sup>2</sup>, Hyun Young Kim<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Korea Institute of Nuclear Nonproliferation and Control (KINAC)

<sup>2</sup>LG Chem R&D Campus(Daejeon)

P-100 중성자 및 감마선 동시측정 시스템을 활용한 핵종분석방법 고찰

진동식1,\*, 홍용호1, 이재근1, 정영석1

1엔이티(주) 부설공학연구소

P-101 식품 중 방사성 베타핵종 테크네튬-99 시험법 확립을 위한 연구

박찬종<sup>1,\*</sup>, 김태희<sup>1</sup>, 안태현<sup>1</sup>, 이근영<sup>1</sup>, 구용의<sup>1</sup>, 이교철<sup>2</sup>, 이용진<sup>2</sup>

1\*식품의약품안전평가원 오염물질과, <sup>2,</sup>한국원자력의학원 방사선의학연구소 RI응용부

P-102 정밀기체질량분석기를 사용한 소비재 품목 내 방사성물질 함유량 분석

김정은<sup>1</sup>, 김봉기<sup>2</sup>, 김민준<sup>2</sup>, 양인석<sup>3</sup>, 이진복<sup>4</sup>, 김진석<sup>4</sup>, 홍기룡<sup>4,★</sup>

<sup>1</sup>과학기술연합대학원대학교 측정과학과, <sup>2</sup>한국원자력안전기술원 산업방사선평가실, <sup>3</sup>한국표준과학연구원 열역학온도팀, <sup>4,\*</sup>한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀

#### 표준: P-103 ~ P-108

## P-103 Development and certification of bifenazate diazene reference material using mass balance method

<u>Young Hoon Kim</u><sup>1</sup>, YuHui Son<sup>1</sup>, Chan-yang Lee<sup>1</sup>, Jeong Ju Moon<sup>2</sup>, Uijeong Park<sup>1</sup>, Heesun Yu<sup>1</sup>, Jae-hyuk Han<sup>1</sup>, Hongjun Jang<sup>1</sup>, Hyoungsu Kim<sup>1,\*</sup>, Dongjoo Lee<sup>1,\*</sup>, Seung-Hoon Baek<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy and Research Institute of Pharmaceutical Science and Technology (RIPST), Ajou University, Suwon 16499, Republic of Korea,

<sup>2</sup>Department of Molecular Science and Technology, Ajou University, Suwon 16499, Republic of Korea

#### P-104 중수소 및 수소 기체 중 수소동위원소 정량분석법

장진우<sup>1,2</sup>, 김정은<sup>3</sup>, 이진복<sup>1</sup>, 김진석<sup>1</sup>, 이진홍<sup>2</sup>, 홍기룡<sup>1★</sup>

<sup>1</sup>한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀, <sup>2</sup>충남대학교 대기, 폐기물, 에너지학과 <sup>3</sup>한국표준과학연구원 열역학온도팀

#### P-105 GC-FID/Methanizer를 이용한 고순도 질소의 순도분석법 개발

유제이<sup>1,2</sup>, 문동민<sup>1</sup>, 이진복<sup>1</sup>, 김운중<sup>2</sup>, 홍기룡<sup>1</sup>\*

1한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀, 2한남대학교 화학과

#### P-106 브로민 정량 분석용 폴리에틸렌 인증표준물질 개발 및 보급

<u>권덕준</u><sup>1</sup>, 방양석<sup>1</sup>, 허기영<sup>1</sup>, 염태호<sup>1</sup>, 이용현<sup>1</sup>, 박지민<sup>1</sup>, 홍원표<sup>1</sup>, 이희진<sup>1</sup>, 김형기<sup>1</sup>, 박정애<sup>1,\*</sup>  $^{1,*}$ 한국화학융합시험연구원

#### P-107 염소계 난연제 Tris(2-chloroethyl)phosphate 분석용 ABS 상용표준물질 개발

손현화<sup>1</sup>, 이진숙<sup>1</sup>, 차진선<sup>1,\*</sup>

1한국산업기술시험원 재료기술센터

#### P-108 ICP-OES와 ICP-MS를 이용한 고순도 산화이트륨의 화학 분석 방법 최적화

Optimization of methods for chemical analysis of impurities in yttrium oxide using ICP-OES and ICP-MS

최연지, 손현화, 이현아, 이진숙, 이연숙\* 한국산업기술시험원 재료기술센터

#### 법과학: P-109 ~ P-118

### P-109 소변 중 쿠에티아핀, 리스페리돈, 아리피프라졸 및 올란자핀 LC-MS/MS 분석결과를 이용한 ROC 곡선기반 판정기준값 설정

<u>김선영</u>, 이현수, 신동원, 서승일, 정재철, 김진영\*

대검찰청 디엔에이·화학분석과

#### P-110 제련소 근로자의 사후 전혈에서 9 종의 유해중금속농도 비교 연구

김경민\*, 김유나, 권미아

국립과학수사연구원 법과학부 화학과, 강원도 26460, 대한민국

# P-111 Assessment of postmortem gas distribution and cause of death in two low-level exposure cases to explosive gas

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

\*Chemistry Division, National Forensic Service

#### P-112 부식방지를 위한 보일러 배관 약품처리 여부 규명

이준배<sup>1,\*</sup>, 조영훈<sup>1</sup>, 고정아<sup>1</sup>, 박민주<sup>1</sup>, 권미아<sup>2</sup>

1국립과학수사연구원 대구과학수사연구소 독성화학과, 대구

2국립과학수사연구원 화학과, 원주

#### P-113 Analysis of carbon monoxide in postmortem spleen specimens by GC-TCD

Miyeon Lee<sup>1</sup>, Mia Kwon,<sup>1</sup> Hyun Jee Kim<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Forensic Chemistry Division, National Forensic Service, Wonju, Republic of Korea

# P-114 Simultaneous analysis of 12 selective androgen receptor modulators (SARMs) adulterated in the dietary supplements using LC-ESI-MS/MS and LC-Q-TOF/MS

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

# P-115 A Case of Industrial Accident Death due to Exposure to Tetramethylammonium Hydroxide(TMAH)

<u>Bokyoung Gong</u>, Hyun Kyoung Ju, Su Hyeon Lee, Sung Hee Ahn, Min Jin Lee, Ji-Sook Min, Seh Youn Park\*

Forensic Toxicology and Chemistry Division, Seoul Institute, National Forensic Service, Seoul, Republic of Korea

### P-116 화재 사고 현장에서의 휘발유 검출 지표 탐색을 위한 외부 노출시간에 따른 모의 화재 잔류물의 조성 분석

박치현\*, 박우용, 전수경, 이수민

국립과학수사연구원 대전과학수사연구소

# P-117 Evaluation of measurement uncertainties in the determination of cobalt from racehorse urine and plasma

Junhyuk Jeon, Yong Duk Lee, Jundong Yu<sup>★</sup>

Korea Racing Authority

## P-118 In vitro metabolism study of anamorelin in human liver microsomes using molecular networking on GNPS platform

Young Beom Kwak<sup>1,2</sup>, Yong Duk Lee<sup>1</sup>, Jungdong Yu<sup>1,\*</sup>, Hye Hyun Yoo<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Racing laboratory, Korea Racing Authority, Gwachon, Republic of Korea

<sup>2</sup>College of Pharmacy, Hanyang University, Ansan, Republic of Korea

#### 일반: P-119 ~ P-152

P-119 Surface analysis of Integrated Circuit Chip with SEM-EDS and XRD

김연수¹, 서지형¹, 장한별², 홍성만², 손영구¹,², 김정권¹,²★

<sup>1</sup>충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터, <sup>2</sup>충남대학교 화학과

P-120 Quantification of limonene in citrus peel oil

서지형<sup>1</sup>, 김연수<sup>1</sup>, 손영구<sup>1,2</sup>, 김정권<sup>1,2</sup>★

<sup>1</sup>충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터, <sup>2</sup>충남대학교 화학과

P-121 Urinary exosome isolation using multiple cycles of centrifugation

Iqbal Jalaludin, 김정권\*

충남대학교 화학과

P-122 C-terminal modification of peptides after microwave-assisted weak acid hydrolysis of proteins

장세은, 이크발, 김정권\*

충남대학교 화학과

P-123 A binary matrix to observe a broad range of peaks in matrix-assisted laser desorption/ ionization-mas spectrometry

황효진, Igbal Jalaludin, 김정권\*

충남대학교 화학과

P-124 Analysis of disaccharide isomers using GC-MS

임진아<sup>†</sup>, Iqbal Jalaludin, 김정권\*

충남대학교 화학과

P-125 MALDI-MS analysis of disaccharide isomers using graphene oxide matrix with different cation agent

권도경, Iqbal Jalaludin, 김정권\*

1충남대학교 화학과

P-126 Efficient extraction of intact proteins from polyacrylamide gel by using triethylamine hydrogen sulfate and syringe filter

정신희, Jalaludin Iqbal, 김정권\*

충남대학교 화학과

P-127 Sterilization of Bacillus atrophaeus spores by liquid phase of ozone

노소정<sup>1</sup>, 장한별<sup>1</sup>, 임진아<sup>1</sup>, 조은아<sup>2</sup>, 최수훈<sup>2</sup>, 김정권<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>충남대학교 화학과, <sup>2</sup>충남대학교 환경공학과

P-128 A New Approach for Time-dependent Cancer Volatiles Profiling via Isotope-labeling

<u>Kyongjin Moon</u><sup>1</sup>, Dong-Kyu Lee<sup>2</sup>, Euiyeon Na<sup>1</sup>, Seongoh Park<sup>3</sup>, Jeong Hill Park<sup>1,2</sup>, Johan Lim, Sung Won Kwon<sup>1,2</sup>★

1서울대학교 약학대학, 2서울대학교 종합약학연구소, 3서울대학교 통계학과

P-129 Meta-metabolomics: comparison of meta-analysis using public untargeted metabolomics data Young Cheol Yoon<sup>1</sup>, Hoang Anh Nguyen<sup>1</sup>, Phuoc Long Nguyen<sup>1</sup>, Sung Won Kwon<sup>1\*</sup> 1서울대학교 약학과

P-130 LC-MS/MS approach for multiple cardiovascular drugs profiling in dried blood spot <u>정철운</u><sup>1</sup>, 김형민<sup>1</sup>, 권성원<sup>1,\*</sup> 서울대학교 약학과<sup>1,\*</sup>

P-131 Capillary electrophoresis/dual C<sup>4</sup>D of various lithium salts on a lithium battery anode surface Sunkyung Jeong<sup>1</sup>, Byung-Hee Choi<sup>2</sup>, Jonggeol Kim<sup>2</sup>, Hee-Sun Yun<sup>2</sup>, and Doo Soo Chung<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea

<sup>2</sup>LG Chem Research Park, Yuseong-gu, Daejeon 34122, Korea

P-132 Headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis mass spectrometry for complex samples <u>권준엽¹</u>, 정두수¹.★

¹서울대학교 자연과학대학 화학부

P-133 Investigation of identifying method for lamellarity of lipid vesicles by asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS)

Binnam Kang, Meiyu Zhang, Da Wang, Jaeyeong Choi and Seungho Lee\*

Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

P-134 Study on the effect of size of cellulose on properties of blended polymer film (SBR with cellulose)

<u>Jin Wook Kim</u>, Meiyu Zhang, Da Wang, Jaeyeong Choi, and Seungho Lee\* Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

P-135 Development of Simutaneous Analysis Method for 13 Volatile Organic compounds (VOCs) in E-cigarettes by HS-GC-MS

Kyeong-Yun Choi<sup>1</sup>, Ho-Sang Shin<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kongju National University,

<sup>2,★</sup>Department of Environmental Education, Kongju National University

P-136 Development of Simutaneous Analysis Method for 41 Carbonyl compounds in E-cigarettes by Headspace Gas Chromatography-mass spectrometry

Kyeong-Yun Choi<sup>1</sup>, Ho-Sang Shin<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kongju National University,

<sup>2,★</sup>Department of Environmental Education, Kongju National University

P-137 Method Development of Wood Volatile Organic Compounds Analysis using HS-INME Coated with GO;PANI followed by GC/MS

<u>Sehyun Kim</u><sup>1</sup>, Jinyoung Park<sup>2</sup>, Daeun Lee<sup>2</sup>, Hyesu Lee<sup>2</sup>, Sunyoung Bae\*, Dongsun Lee\* Department of Chemistry, Seoul Women's University

P-138 Activated porous carbon derived from black tea waste for supercapacitor electrode

Hojong Eom<sup>1</sup>, Joo Young Kim<sup>2</sup>, Sunyoung Bae<sup>2,★</sup>, Inho Nam<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Advanced Materials Engineering, Chung-Ang University

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Seoul Women's University

P-139 Accurate Determination of Short-Chain Fatty Acids and TCA Cycle Intermediates in Human Plasma by GC-MS/MS Combined with Lyophilization and Derivatization

You Lee Kim<sup>1</sup>, Wonwoong Lee<sup>2</sup>, Chung So Hyeon<sup>1</sup>, Jongki Hong<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea

<sup>2</sup>College of Pharmacy, Woosuk University, Wanju 55338, Korea

#### P-140 Structure analysis of anti-enterovirus 71 polysaccharide from the root of Sanquisorba officinalis

Minyeong Kim<sup>1</sup>, Jiye Park<sup>1</sup>, Ju Yeup Kim<sup>1</sup>, Yong Jin You<sup>2</sup>, Ye-jin Choi<sup>1</sup>, Hye-Jin Park<sup>1</sup>, Seo-Hyeon Mun<sup>3</sup>, Myounghai Kwak<sup>4</sup>, Hyun-Jeong Ko<sup>3</sup>,★, Seung-Hoon Baek<sup>1</sup>,★

<sup>1</sup>College of Pharmacy and Research Institute of Pharmaceutical Science and Technology (RIPST), Ajou University, Suwon 16499, Republic of Korea,

<sup>2</sup>Department of Molecular Science and Technology, Ajou University, Suwon 16499, Republic of Korea, <sup>3</sup>Department of Pharmacy, Kangwon National University, Chuncheon 24341, Republic of Korea, <sup>4</sup>Plant Resources Division, National Institute of Biological Resources, Incheon 22689, Republic of Korea

#### P-141 LC-UV/MS를 이용한 노닐페놀에톡실레이트와 알러지성 분산염료 동시분석 연구

Simultaneous analysis of NPEOs and Allergenic Disperse Dyes by using LC-UV/MS 이규성, 권정민, 최충열, 전진경 롯데중앙연구소

P-142 Quasi-complete laser-ablation sampling of dry residues on the laser-patterned silicon wafer 박 정<sup>1</sup>, Sandeep Kumar<sup>1,2</sup>, 남상호<sup>1,2</sup>, 이용훈<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1,★</sup>목포대학교 화학과, <sup>2</sup>목포대학교 유무기 소재 및 천연물 분광화학 분석센터

#### 디스플레이 소재용 철-니켈 합금 상용표준물질개발 P-143

홍진영<sup>1</sup>, 한상원<sup>1</sup>, 홍창기<sup>1</sup>, 정준호<sup>1</sup>, 홍종욱<sup>1</sup>, 임광수<sup>1</sup>, 김지민<sup>1</sup>, 정현주<sup>1,\*</sup> <sup>1,\*</sup>한국화학융합시험연구원

#### 몽골 알타이 시베트 하이르한 유적 옛사람 뼈의 DNA 분석 P-144

조은민\*, 김수연, 김윤지

국립문화재연구소 보존과학연구실

#### P-145 출토 옛사람 뼈와 치아의 DNA 분해지수 및 정량 비교 연구

김윤지\*, 김수연, 조은민

국립문화재연구소 보존과학연구실

#### PCR 기법을 적용한 고고유적지 출토 동물뼈의 종 동정 P-146

김수연\*, 조은민, 김윤지

국립문화재연구소 보존과학연구실

#### P-147 A Proteomics Approach for the Human milk-derived Glycated Peptides using LC-MS/MS

Seong-Hyeon Cho¹, Jong-Moon Park¹, Hookeun Lee¹, Jun Hwan Song², Nam Mi Kang³,★ <sup>1</sup>College of Pharmacy, Gachon university, hambakmoe-ro, Incheon, 21936, Republic of Korea <sup>2</sup>Department of Pediatrics, Soon Chun Hyang University, Suncheonhyang-gil, Cheonan, 31151, Country

<sup>3</sup>Department of Nursing, Konkuk Univeristy, Chungwondaero, Chungju, 27478, Republic of Korea

#### A Preliminary Study of Lipid Profiles of Human Transient Breast Milk P-148

Young Soo Keum<sup>1</sup>, Ji Woo Yu<sup>1</sup>, Nam Mi Kang<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Crop Science, Konkuk University, 1 Hwayang-Dong, Kwanjin-Gu, Seoul, Korea <sup>2</sup>Department of Nursing, Konkuk University, 268 Chungwon-daero Chungju-si Chungcheongbuk-do, Korea

# P-149 Analysis Quality of Methanol, Formaldehyde, Fluorescent Bleaching Agents, Methylisothiazolinone, and Cloromethylisothiazolinone on Commercial Wet Wipes for Food Restaurants

<u>Chang-ho Han</u><sup>1</sup>, So-young Jung\*, Bu-Chuhl Choi, Si-Jung Kim, Jae-hoon Cha, and In-sook Hwang <sup>1</sup>Department of Food and Drug, Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

# P-150 Structure Analysis of Low-molecular weight mannogalactofucans derived from *Undaria* pinnatifida and Anticancer activity

Woo Jung Kim

Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator

#### P-151 염소계 난연제 정량 분석을 위한 전처리법 연구

A study on pretreatment for quantitative analysis of chlorine-based flame retardants  $\underline{\text{8E환}^1}$ , 박광서 $^1$ , 정재학 $^2$ , 김주양 $^2$ , 조영달 $^{1,\star}$ 

1.★한국생산기술연구원 환경규제기술센터, 2한국분석과학연구소

#### P-152 Evaluation of the hazard index of mercury and arsenic residues in pet food

<u>Seung-Hwa Lee</u>\*, Hyejeong Yun, Yeong-Jun Seon, Hyunjeong Cho, and Seong-Hee Hong Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

#### 대학원생 구두 & 포스터: P-153 ~ P-160

#### P-153 장거리 이동 오염원 평가를 위한 PM2.5 구성성분 정량분석

이채연<sup>1</sup>, 임종명, 김현철, 이진홍<sup>2,★</sup>

1한국원자력연구원 원자력환경실, 2★충남대학교 환경공학과

# P-154 A study on the distribution characteristics of microplastics introduced into the water system from the paint on the Gongjicheon Stream trail

<u>So Young Park</u>, Hyo Jeong Choi, Dong Hyun Kim, A Ram Cho, Sang Hui Hwang, Hye Bin Kim, Man goo Kim\*

Department of environmental science, Kangwon National University

#### P-155 Identification of thymosin $\beta 4$ in-vitro metabolites with synthesized standards

<u>Khandoker Asiqur Rahaman</u><sup>2,3</sup>, Anca Raluca Muresan<sup>2,3</sup>, Hophil Min<sup>1</sup>, Junghyun Son<sup>1</sup>, Min-Jung Kang<sup>2,3</sup>, and Oh-Seung Kwon<sup>1,2,★</sup>

<sup>1</sup>Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea,

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

<sup>3</sup>Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul 02792, Republic of Korea

P-156 Study on effect of sample preparation on structure and size distribution of exudate gums using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS)

Meiyu Zhang<sup>1</sup>, Jaeyeong Choi<sup>1</sup>, Da Wang<sup>1</sup>, Lars Nilsson<sup>2</sup>, and Seungho Lee<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Hannam University, South Korea

<sup>2</sup>Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden

P-157 Size characterization and quantification of TiO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub> in food matrix by sedimentation field-flow fractionation (SdFFF) and relative techniques

Da Wang<sup>1</sup>, Meiyu Zhang<sup>1</sup>, Jae-Min Oh<sup>2</sup>, Jaeyeong Choi<sup>1</sup> and Seungho Lee<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

<sup>2</sup>Department of Energy and Materials Engineering, Dongguk University, Republic of Korea

P-158 Simultaneous analysis of multi-component lipids by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry

이혜진, 윤혜란\*

덕성여자대학교 약학대학 생의약분석실

P-159 Simultaneous determination of 37 lipids metabolites and Bio-profiling in human serum by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry

이지선, 윤혜란★

덕성여자대학교 약학대학 생의약분석실

P-160 UVC-lamp sterilization of Bacillus atrophaeus spores on glass and tile

장한별¹, 임진아¹, 김정권¹,★

1,★충남대학교 화학과

# 점심 세미나

#### 점심 세미나

# Today's K-Chromatograph, "The introduction of ChroZen Family"

<u>한현석</u><sup>1</sup>, 백종웅<sup>2,★</sup>

¹영인크로매스 국내사업부, ²,\*영인크로매스
\*Corresponding author: mkt@youngincm.com

영인크로매스는 국내 최초로 HPLC(고성능 액체 크로마토그래프)를 개발하고, 지속적인 연구 수행으로 GC(기체 크로마토그래프) 및 Mass Spectrometer(질량 분석기)를 제조하여 분석기기의 국산화를 선도하고 있는 기업으로 30여 년의 기술 축적과 노하우를 통해 최고의 국산 분석기기와 기술을 세계 50여개국가에 수출하여 크로마토그래프 누적 판매 수 6,000대를 돌파하였으며, 첨단 분석기기 회사로서의 위상을 한층 높여나가고 있습니다.

국제 공인시험 인증기관 및 국가 연구소로부터 성능을 평가받았으며, 다수의 특허기술 보유 및 신기술 실용화 대상, 장영실상, 우수디자인 등의 수상을 통해 기술력과 디자인의 우수함을 인정받았으며, 2021년에는 1990년 8월 영국 농림수산식량부에서 시작한 시험기관 비교숙련도 프로그램으로써 30여 년간 진행된 가장 공신력 있는 식품 및 수질환경 분야 숙련도 평가시험으로 자리 잡고 있는 FAPAS(국제비교숙련도 시험)에 국내 분석기기 업계 최초로 참가하여 최상위권의 분석결과 도출로 인증서를 획득하였습니다. "ChroZen TQ/MS"의 성능은 물론 자사 응용지원 능력을 입증할 수 있는 계기를 마련하여 향후 잔류농약 안전성검사기관에 FAPAS 인증 관련 컨설팅 및 비교 실험을 제공할 수 있게 되었습니다.

또한, 신제품 "ChroZen GC"의 종합성능·내구성·내환경성·안전성에 대한 전반적인 신뢰성을 평가받을 수 있는 "R-mark"(신뢰성 인증 마크)를 획득하여 브랜드 이미지와 함께 수요자의 만족도를 평가하는 데 중요한 기술을 획득한 국내기업으로서의 능력을 갖출 수 있게 되었습니다.

영인크로매스는 24시간 내 고객지원 서비스를 도입하여 빠른 서비스를 제공하고, 경제적이고 효율적인 서비스 부품 사용을 통한 유지관리 비용 절감으로 고객의 만족을 최대로 높이기 위하여 끊임없이 노력하고 있습니다. 또한, 국산 분석기기 뿐만 아니라 세계 유수 기업의 제품(총 유기탄소 분석기, 원자 흡광 광도계, 소모품 등)들의 공급을 통하여 국내 과학기술 서비스 산업의 발전에 기여하고 있으며 식품, 화학, 제약, 환경 등 다양한 산업분야에 필요한 가스 시료, 잔류 용제, 비타민, 아미노산 등 20여 개의 전용 분석 시스템을 개발하여 고객의 요구에 특화된 응용 솔루션과 복잡한 시료 전처리 방법부터 컬럼선택 및 최적의 분석 조건 설정, 신뢰성 있는 데이터 확보까지 전 과정에 대한 솔루션을 제공합니다.

# 특별 강연

#### 특별 강연

#### 연구장비산업 혁신성장전략 소개

#### 이진환1★

1과학기술정보통신부

\*Corresponding author: neuroz@korea.kr

연구장비 산업 육성을 통한 글로벌 과학강국 진입 및 과학기술일자리 창출

① 맞춤형 투자를 동한 핵심 기술 역량 확보
② 국내 수요를 충족시키고 세계에서 경쟁 가능한 연구장비 개발
③ 제도 마련 및 협력 플랫폼 구축을 통한 신뢰기반 생태계 조성



# Symposium 1

-화학 분야-

#### SYM1-01

# Electrochemical reduction of CO<sub>2</sub> to CO using Ag-Zn bimetal catalysts deposited on polypyrrole-coated electrode

#### 조아라★

강원대학교 화학과 \*Corresponding author: arajo@kangwon.ac.kr

Electrochemical conversion of CO<sub>2</sub> into value-added materials is important strategy due to the enormous contribution of CO<sub>2</sub> to the global warming. We constructed bimetallic electrocatalysts of Zn and Aq on a polypyrrole-decorated carbon paper (CP/PPy) electrode for improved electrochemical reduction of CO<sub>2</sub> into CO and suppressed water reduction into hydrogen gas. The bimetal catalysts with different atomic ratios between Zn and Ag are produced by galvanic replacement with Ag onto the CP/PPy/Zn electrode. The reaction selectivity of electrochemical CO<sub>2</sub> reduction to CO at CP/PPy/Zn/Ag is obviously improved compared to those of single metal catalyst with suppressing the hydrogen evolution reaction (HER). The PPy interlayer between the catalysts and carbon paper is utilized to reduce hydrophobicity of the electrode, so to make effective electrodeposition of Ag and Zn to the CP electrode and to suppress HER at the electrodes. Herein, we propose Zn:Ag bimetal composites produced on PPy surfaces as a CO-selective electrocatalyst with an appropriate \*COOH binding energy, while an optimal composition of the Zn:Ag catalysts are suggested by electrochemical and physicochemical analyses. We experimentally confirmed that the atomically mixed Ag-Zn in the bimetal catalysts showed the enhanced CO<sub>2</sub> reduction activity than each metal single catalysts. The developed electrocatalyst results in approximately 70% of maximum Faradaic efficiency and maximum current density of 8.6 mA/cm<sup>2</sup> for the CO<sub>2</sub> reduction reaction to CO in saturated 1 M KHCO<sub>3</sub> aqueous solution.

SYM1-02

#### 생물학적 응용을 위한 기능성 나노 입자: 유사효소 효과 및 검침에의 응용

#### 최진실

한밭대학교 화학생명공학과 \*Corresponding author: jinsil.choi@hanbat.ac.kr

Nanomaterial-based enzyme mimetics (nanozymes) have attracted significant interest because of their lower cost and higher stability compared to natural enzymes. In this study, we focused on improving the enzymatic properties of metal induced N-doped carbon dots, which are one of the nanozymes of interest, and their applications for sensory systems. For this purpose, Mn(acetate)<sub>2</sub> were introduced in the synthesis synthetic step of N-CDs and their influence on the enzymatic properties of N-CDs was investigated. Their chemical structure was analysed through infrared spectroscopy and X-ray photoelectron spectrometry; the results suggests that Mn ion lead to the variation in the population of chemical bonding of in N-CDs, whereas they were not incorporated into N-CD frameworks. This structural change improved the enzymatic properties of Mn-induced N-CDs (Mn:N-CDs) compared to N-CDs when the color change of a 3,3',5,5'-tetramethylbenzidine/H2O2 solution was examined with the existence of Mn:N-CDs and N-CDs. Based on this enhanced enzymatic property, a simple colorimetric sys-tem with Mn:N-CDs was used for the detection of γ-aminobutyric acid, which is an indicator of brain-related disease. Therefore, we believe that Mn:N-CDs will be an excellent enzymatic probe for the colorimetric sensor system.

SYM1-03

### 비소오염토양의 인체위해도 저감을 위한 철산화물 원위치 합성 및 장기 안정성 평가

#### 안진성\*

\*세명대학교 바이오환경공학과
\*Corresponding author: jsan@semyung.ac.kr

본 연구에서는 비소오염토양의 인체위해도 저감을 위한 철산화물 원위치(in situ) 합성의 적용성을 평가하였다. 결정질 철산화물(crystalline iron oxides) 주입 기반의 기존 비소오염토양 안정화 공법이 토양 내 비소의 경구 생물학적접근성(oral bioaccessibility)을 저감시키기 어려웠던 이전 연구결과에 착 안하여, 비결정질 철산화물(amorphous iron oxides)의 원위치 합성 과정에서 토양 내 비소와 구조적 결합(structural incorporation)을 이루고, 나아가 비소의 생물학적접근성이 저감되도록 유도하였다. 비 소오염토양 내 비결정질 철산화물의 원위치 합성이 진행되도록, 토양 중량 대비 2%의 Fe(NO3)3와 30%의 물을 주입하고, NaOH를 이용하여 pH를 7 수준으로 조절한 후, 1일간 반응시켰다. 안정화 효 과를 평가하기 위해, solubility/bioavailability research consortium (SBRC) 방법과 Wenzel의 5단계 연 속추출방법을 사용하였다. 비결정질 철산화물의 원위치 합성을 유도한 경우, 교환 가능한 비소(1-2단 계)의 대부분이 비결정질 철산화물과 수반된 비소(3단계)의 형태로 전환되었으며, SBRC 방법으로 평가 된 생물학접근성 또한 유의하게 저감되었다. X-선 흡수분광(X-ray absorption spectrometry; XAS) 분석 결과, ferrihydrite 및 schwertmannite가 원위치에서 형성된 주된 비결정질 철산화물임이 확인되었다. 형성된 비결정질 철산화물-비소 결합물의 장기적 안정성을 확인하기 위해, 안정화시킨 토양을 5개월간 보관 후, 동일하게 SBRC, 5단계 연속추출 및 XAS 분석을 실시하였다. 그 결과, goethite의 비율이 증 가함과 동시에 결정질 철산화물과 수반된 비소의 비율이 증가함을 확인하였고, 이는 시간이 지남에 따라 형성된 비결정질 철산화물이 결정화(crystallization)되어 감을 의미한다. 비소의 SBRC 추출 농도 또한 추가적으로 감소하여 철산화물의 결정화가 비소의 안정화를 증가시킴을 확인하였다. 원위치 합 성 유도 시 CaO를 중화제로 사용할 경우, yukonite 및 arseniosiderite와 같은 calcium iron arsenate가 생성됨이 XAS 분석을 통해 확인되었는데, 이러한 화합물은 인체 위 모사 조건을 견디지 못하고 비소 를 용출시켰기 때문에, 원위치 철산화물 합성 시 적절한 중화제의 선택이 매우 중요함을 확인하였다.

#### 2021년도 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

#### SYM1-04

# Elucidation of an intrinsic parameter for evaluating the electrical quality of powder-type graphene materials

### 이하진\*

★서울여자대학교 화학·생명환경과학부

\*Corresponding author: hajinlee@swu.ac.kr

A test method for evaluating the quality of powder-type graphene products, such as reduced graphene oxide and graphene flakes, was developed. The pelletizer was selected for a sampling tool, which enables us to formulate the product as a measurable sample. Various parameters were measured from the pelletized sample in order to elucidate the best parameter for representing the quality of the graphene products in terms of their electrical properties. Based on the analysis of 4-probe measurement data on the pelletized sample, the best intrinsic parameter is volume resistivity (or volume conductivity) rather than resistivity (or conductivity). Additionally, the possible modification of a sample before and after the pressurization was investigated by electron microscopy and Raman spectroscopy. No significant modification was observed. The volume conductivity in the two types of the graphene was different from their individual conductivities by one order of magnitude. Based on the results of X-ray photoelectron spectroscopy and Raman spectroscopy measurements, the volume conductivity of the graphene samples was governed by the oxygen content in the sample. Our achievements will promote the effective use of powder-type graphene materials for further applications.

#### References

- 1. H.-J. Lee, J.S. Kim, K.Y. Lee, K.H. Park, J.S. Bae, M. Mubarak, and H. Lee, Sci. Rep. 9, 557 (2019).
- 2. IEC TS 62607-6-1:2020 Ed. 1.0 Nanomanufacturing Key control characteristics Part 6-1: Graphene-based material Voleme resistivity: four probe method. IEC (International Electrotechnical Commission) 2020.

# Symposium 2

-원자력/표준/안전-

#### 2021년도 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

#### SYM2-01

#### Production and analysis of medical radioisotpes

#### 박정훈

한국원자력연구원 가속기동위원소개발실 parkjh@kaeri.re.kr

Medical radioisotopes (RI) are divided into diagnosis and therapy depending on the energy of extinction. Diagnostic radioisotopes emit gamma rays with characteristics to penetrate substances, allowing them to image their location in vivo, and therapeutic radioisotopes kill cancer cells by emitting beta rays or alpha rays with particle characteristics. Diagnostic RI is mainly produced using cyclotron and can be used as  $^{1}$ PET and  $^{2}$ SPECT in medical fields. PET RI has a higher resolution than SPECT RI due to annihilation radiation from positron. On the other hand, therapeutic RI have mainly two kind of things. One is beta emitters which have a low linear energy transfer (LET) of 0.2 keV/mm and a path length of 1 to 10 mm and beta emission may reach throughout the tumor and surrounding healthy tissue. The other, alpha emitters have a high LET (80-100 keV/ $\mu$ m) and a path length of 50 to 90  $\mu$ m, which corresponds to a few cell diameters. Medical radioisotopes have been produced by cyclotron and Reactor. Accelerated particles have been irradiated on target materials which is converted into radioactive isotope through nuclear reaction. It is separated by chromatography and confirmed radionuclidic purity with HPGe detector.

<sup>1</sup>PET: Positron Emission Tomography

<sup>2</sup>SPECT : Single Photon Emission Computed Tomography

#### SYM2-02

# A purity determination procedure for the establishment of metrological traceability in inorganic analysis

#### 이종화<sup>1</sup>

¹,\*한국표준과학연구원 무기분석표준그룹 \*Corresponding author: jongwhalee@kriss.re.kr

정량 분석에서는 농도를 정확히 알고 있는 표준 용액 등의 교정용 물질을 사용하는 것이 필수적이다. 최상위의 교정용 물질을 만들기 위해서는 순도가 엄밀하게 결정된 고순도 물질이 필요하다. 하지만 한 물질의 순도를 엄밀하게 결정하는 것은 쉽지 않다. 본 발표에서는 무기 분석 분야에서 유도결합 플라스마 질량분석법(ICP/MS)과 글로우방전 질량분석법(GDMS)을 활용하여 물질의 순도를 결정하는 절차를 소개한다. 유도결합 플라스마 질량분석법을 활용한 절차를 개발할 때의 관건은 시료의 높은 기질 함량으로 인한 기질 효과와 장비 신호의 드리프트라는 실험적 문제를 해결하는 것이었고, 측정 절차를 세세히 확립하여 측정 중 인적 오류를 최소화하며 실험이 효율적으로 이루어질 수 있게하는 것이었다. 글로우방전 질량분석법을 활용할 때의 관건은 외부 자료를 활용할 때의 신뢰성을 충분히 확보하는 것이었다. 본 연구에서 수립한 순도 결정 절차는 추후 내부 심의를 거쳐 국내 무기 분석 분야의 교정등급체계를 확립하는 데 활용될 것이다.

Quantitative chemical analysis requires the use of calibration materials, such as standard solutions, with accurately known concentrations. For preparing primary calibration materials, a high purity material is necessary for which the purity is rigorously determined. However, rigorous determination of the purity of a material is not simple. In this presentation, a purity determination procedure in inorganic analysis based on inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP/MS) and glow discharge mass spectrometry (GDMS) is introduced. Central to the development of the ICP/MS procedure was to resolve the matrix effect and instrumental drift issues arising from the high matrix contents of samples, and to provide detailed prescriptions so that human errors are minimized and the experiments can be performed efficiently. Central to the development of the GDMS procedure was to ensure sufficient reliability of data obtained from other laboratories. The purity determination procedure established in this study will be subjected to an internal review process to be used in the establishment of the national calibration hierarchy in inorganic analysis.

SYM2-03

## Preparation of beverage CRMs for the analysis of food additives in KRISS

#### <u>안성희¹,★</u>

<sup>1</sup>한국표준과학연구원, \*Corresponding author: sahn@kriss.re.kr

Beverage certified reference materials (CRMs) were prepared in Korea Research Institute of Standards and Science (KRISS). The target analytes were food additives, sorbic acid, benzoic acid, methyl and propyl *p*-hydroxybenzoate in two kinds of commercial beverages. The certified values were determined by isotope dilution liquid chromatography mass spectrometry (ID-LC/MS). In this presentation, the method for the preparation of stable and homogeneous CRMs as well as the method development for certified values will be shown. These CRMs have around 1 % of relative standard deviation between bottles showing that means the CRMs are homogeneous. The stability monitoring has performed and the data for stability monitoring will be shown. In addition, KRISS had participated in the international comparison, Asia Pacific Metrology Programme Supplementary Comparison (Determination of Mass Fraction of Benzoic Acid, Methyl Paraben and n-Butyl Paraben in Soy Sauce) for international harmonization of the values determined in KRISS as a National Metrology Institute in Korea.

#### 2021년도 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

#### SYM2-04

# Development of certified reference materials for the determination of 5-methyltetrahydrofolate in spinach and kimchi cabbage

### 형석원\*, 이준희

한국표준과학연구원 첨단유기분석팀
\*Corresponding author: swhyung@kriss.re.kr

Certified reference materials (CRMs; KRISS CRM 108-05-010, 108-05-011) for the determination of 5-methyltetrahydrofolate (5-Me-THF) in spinach and kimchi cabbage were developed. The vegetables were freeze-dried, pulverized, sieved, V-mixed, and bottled. Determination of 5-Me-THF was conducted by isotope dilution ultra-performance liquid chromatography/mass spectrometry (ID –UPLC/MS) using randomly selected 10 bottles. A trienzyme method was adopted to release 5-Me-THF monoglutamate from the matrix bound polyglutamated one by treatments with protease for 1 h at 37 °C and the mixture of  $\alpha$ -amylase and rat sera (conjugase) for 16 h at 37 °C. The CRM candidates were monitored on 5-Me-THF at 25 °C for 7 days, -20 °C for 1 month, and -70 °C for 5 and 13 months to observe short-term and long-term stabilities. Both CRM candidates were stable under most monitoring conditions. The certified values of the CRMs were (16.93  $\pm$  0.73) mg/kg and (11.66  $\pm$  0.25) mg/kg for spinach and kimchi cabbage, respectively. The CRMs developed in this study are expected to be used in fields that require accurate measurement of related nutrients.

# Symposium 3

-표준물질-

### 반도체 공정관리용 사불화 규소(SiF<sub>4</sub>), 포스핀(PH<sub>3</sub>)및 디보란(B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>) 표준가스 개발 및 보급

김병문, 오상협, 김선우, 정진상, 김광섭

한국표준과학연구원 가스분석표준그룹
\*Corresponding author: bmkim@kriss.re.kr

반도체 공정관리용으로 사용되고 있는 사불화규소, 포스핀 및 디보란 혼합가스는 Epitaxy(얇은 박막 결정을 성장시키는 과정), Etching(식각공정), 이온주입, Doping(조절된 양의 불순물 도펀트를 반도체에 넣는 과정)용으로 사용되어 반도체 품질에 중요한 역할을 하지만 일부 특수가스 업체에서 생산하고 있 으나 소급성 있는 표준물질은 사용하고 있지 않다. 표준물질 수요자가 부정확하거나 잘못된 표준물질을 사용하는 경우가 많아 측정의 신뢰도가 저하되고 궁극적으로는 원가상승, 공산품의 품질수준의 저하 등 많은 문제점을 야기하고 있다. 이와 같은 문제점을 해결하기 위해 반도체회사에 소재를 공급하는 업체 에서 공정관리용으로 사용되고있다. 사불화규소, 포스핀 및 디보란 표준가스를 개발 절차에 따라 사불화 규소 10 μmol/mol, 포스핀 100 μmol/mol 및 디보란 100 μmol/mol을 최종목표로 개발하고 국제표준물 등록센터(COMAR) 등록 및 산업체에 보급하고자 한다. 본 과제의 개발대상 제품에서 사불화규소는 불화 수소(HF)의 순도분석용이므로 10 μmol/mol의 비교적 저농도로 제품 농도를 설정하였으며, 포스핀과 디 보란은 반도체 공정에서 이온주입, doping, epitaxial 성장 등에 사용되는 공정가스의 농도 확인용이므로 100 µmol/mol 농도 수준으로 제품 농도를 설정하였다. 설정한 제품 농도보다 고농도의 표준가스는 연구 진 행 과정에서 개발이 완료되므로 과제 종료 후 보급이 가능하다. 표준가스 제조에 사용되는 실린더는 10 L 용량의 알루미늄 합금 고압가스용 실린더를 사용 하였이며, 용기의 내면 상태는 Super Cleaning(1.0 Micro Rmax)급으로 내면 처리를 안해도 사용이 가능하고, 밸브의 재질 및 규격은 현재 산업체에서 사용 되는 규격을 고려하여 진행하였다. 또한 시판되고 있는 일본산 상용표준물질의 불확도 수준은 3~5%이 며, 개발 예정인 3종 가스의 목표 불확도는 3% 이하이므로 향상된 성능의 제품을 개발하고자 한다.

### 염소계 난연제(SCCP) 분석용 ABS 상용표준물질 개발

송석호\*, 노인철, 이훈

한국건설생활환경시험연구원
\*Corresponding author: ysong@kcl.re.kr

난연제는 전자제품 및 가전제품의 수명을 증가시키기 위하여 열 저항을 증가시키고, 내화 특성을 향상시켜 제품의 내부 및 외부 부품에 절연 기능을 제공하는데 사용 되고 있으며, 플라스틱과 같은 가연성 소재에는 난연제가 필수적으로 첨가되는데 유기성 난연제 중 다수가 유해물질로 분류된다. 현재규제되고 있는 난연제는 브롬계 난연제의 일부인 PBBs 와 PBDE 이며, 염소계 난연제인 단쇄염화 파라핀(SCCP, short-chain chlorinated paraffins) 에 대한 규제가 강화되고 있다. 최근 국내 기업 및 환경 규제로 제품 내 0.1 % 이하의 농도로 규제가 시행되고 있으며, 열 저항과 내화 특성을 향상시키는 것이필수인 전기 전자제품 생산기업에서는 자체적인 가이드 라인을 만들어 관리 중에 있으나 정확한 분석을 위한 표준물질이 없는 실정이며 이에 대한 대비가 필수적이다.

한국건설생활환경시험연구원에서는 국내외 환경 규제 및 측정 신뢰성을 향상시키는데 활용이 가능한 플라스틱 수지(ABS, acrylonitrile butadiene styrene copolymer)내 염소계 난연제인 단쇄염화 파라핀 (SCCP) 상용표준물질을 개발 하고 있다.

본 발표에서는 상용표준물질개발에 대한 생산계획, 시험방법의 선정, 표준물질의 농도별 균질성 평가 및 운송간 변화될 수 있는 환경을 고려한 보관의 안정성 평가 등 표준물질 생산과 관련된 절차와 보급에 대하여 보고하고자 한다.

### RoHS Ⅱ 규제대응을 위한 브롬계 난연제 및 프탈레이트 동시 함량분석용 ABS 인증표준물질 개발

이준태<sup>1,\*</sup>, 손현화<sup>1</sup>, 이진숙<sup>1</sup>, 김용훈<sup>2</sup>, 문혜미<sup>2</sup>

<sup>1</sup>한국산업기술시험원 재료기술센터, <sup>2</sup>KOTITI 시험연구원 친환경융합센터 \*Corresponding author: leejt@ktl.re.kr

Polybrominated biphenyl(PBBs), polybrominated biphenyl ethers(PBDEs)는 고분자 소재에 첨가하는 대표적인 브롬계 난연제로 인체 유해성으로 인해 EU의 Restriction of Hazardous substances(RoHS)에 서 사용제한 유해물질로 규제하고 있다. 또한 프탈레이트 가소제는 플라스틱을 부드럽게 하기 위해 첨가되는 물질로 환경호르몬으로 알려져 있으며, 2019년부터 RoHS II에서 브롬계 난연제와 더불어 프 탈레이트 가소제 4종을 추가하여 규제하고 있다. 이에 따라 관련 업계에서는 글로벌 환경규제 대응과 신뢰성 높은 유해물질 평가를 위해 표준물질의 사용이 요구된다. 그러나 현재 국내외 브롬계 난연제 와 프탈레이트 가소제가 동시에 함유된 표준물질은 전무한 실정이다. 따라서 본 연구에서는 전자재료 용 고분자 소재로 널리 사용되고 있는 ABS를 매질로 하여 PBBs 2종(B-003, B-080), PBDEs 2종 (BDE-015, BDE-209), 프탈레이트 4종(DIBP, DBP, BBP, DEHP)를 첨가하여 분석 대상 물질의 함량이 약 0.1 wt%(고농도)와 0.01 wt%(저농도)가 되도록 후보 표준물질을 제조하였다. 제조한 후보 표준물질은 등간격샘플링을 통해 균질성을 평가하였을 때, 상대표준편차 5 % 이하로 균질함을 확인하였다. 또한 고온 (70 ℃), 저온 (-20 ℃)에서의 운송 안정성과 6개월간 장기 안정성을 확인하였다. 미국 표준기술 연구소(NIST)의 SRM® 2258 BDE209 in 2,2,4-trimethylpentane 으로 소급성을 확보한 BDE-209에 대하 여 동위원소희석질량분석법으로 특성값을 부여하였다. 고농도의 인증값은 (996 ± 89) mg/kg, 저농도 의 인증값은 (122 ± 10) mg/kg 이다 (신뢰수준 95 %, k = 2). 이외의 7종의 물질(B-003, B-080, BDE-015, DIBP, DBP, BBP, DEHP)은 고농도 의 경우 각각 506, 94, 889, 810, 873, 913, 871 mg/kg 의 지시값을 얻었으며, 저농도는 각각 55, 11, 100, 95, 97, 109, 101 mg/kg으로 지시값을 얻었다.

#### 브로민 정량 분석용 폴리에틸렌 인증표준물질 개발 및 보급

권덕준1, 방양석1, 허기영1, 염태호1, 이용현1, 박지민1, 홍원표1, 이희진1, 김형기1, 박정애1,\*

¹,★한국화학융합시험연구원 \*Corresponding author: pj0515@ktr.or.kr

전기·전자제품 중 유해물질 규제는 유럽의 RoHS(Restriction of Hazardous Substances Directive, 유해물질 제한지침)과 REACH(Registration, Evaluation, Authorization and Restriction of Chemicals)를 태동으로 각 선진국 및 개발도상국으로 퍼져나가고 있다. 특히, 규제 물질 중 상당수를 차지하는 물질이 브로민(Br) 화합물과 염소(Cl) 화합물임에 따라 국제적으로 할로겐 자체에 대해 규제에 대한 요구가증가해 왔으며, 그에 따라 국제적으로 "할로겐 프리"라는 명칭으로 규제를 시행하고 있다. 이와 같은 할로겐 규제의 증가에 따라 할로겐 분석을 위한 인증표준물질(CRM) 개발의 요구가 증가되어 왔으며, 현재 여러 나라에서 할로겐 CRM을 개발하여 판매하고 있다. 현재 할로겐 분석을 수행하는 국내 시험기관 및 대기업에서는 해외 브랜드의 CRM을 주로 사용하고 있는 실정이며, 그에 따라 해외의존도 감소를 위해 국내 할로겐 분석 전용 CRM 개발의 필요성이 대두되어 왔다.

이 연구는 전기전자제품에 많이 사용되는 폴리에틸렌(Poly Ethylene) 소재를 기반으로 한 브로민 정량 분석용 인증표준물질 개발을 목표로 하였으며, 목표 농도는 고농도 약 1,000 mg/kg, 저농도 약 200 mg/kg로 하였다. 생산계획에서부터 제조, 분석방법의 유효성 평가, 균질성 평가, 안정성 평가 및특성값 및 측정불확도 산출의 일련의 절차를 통해 CRM 후보물질을 개발하였으며, 국제적으로 할로겐 분석에 많이 사용되는 국제 표준 IEC62321-3-2 : 2020 (Determination of certain substances in electrotechnical products – Part 3-2: Screening – Fluorine, chlorine and bromine in polymers and electronicsby combustion-ion chromatography (C-IC))을 사용하였다.

시판되는 고분자 재질의 브로민 인증표준물질을 활용하여 시험방법 유효성 평가를 실시한 결과, 정밀도는 5% 이내, 회수율은 불확도 이내로서 만족한 결과를 나타내었다. 균질성 평가 결과, 고농도 및 저농도 후보표준물질 상대표준편차가 각각 3.5 %, 2.5 %로서 목표치인 5 % 이내로 산출되었으며, 신뢰수준 95 %에서 P-값이 0.05보다 크므로 유의성이 없는 것을 확인하여 충분한 균질성을 확보하였음을 확인하였다. 3주간 단기안정성 평가 결과, 운송온도(-10℃, 45℃)에서 고농도, 저농도 모두 온도간유의성이 없는 것으로 확인되었으며, 6개월간 장기안정성 평가 결과, 고농도, 저농도 모두 P-값이 0.05보다 크므로 장기 안정성이 확보된 것으로 확인하였다. 최종적으로 고농도, 저농도 CRM 후보물질의 인증값 및 확장불확도 값을 산출하였다.

#### 과불화화합물 분석용 폴리에스터 인증표준물질 개발에 대한 연구

김재우<sup>1,\*</sup>, 문혜미<sup>1,2</sup>, 김용훈<sup>1</sup>, 이채홍<sup>1</sup>, 허지선<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>KOTITI 시험연구원, <sup>2,</sup>서울시립대학교 \*Corresponding author: jw\_kim@kr.kotiti-global.com

방수, 방유 특성으로 다양한 산업군에 사용되는 과불화화합물(Per and polyfluoroalkyl substances, PFAS)은 유럽화학물질관리청(The Eurpoean Chemicals Agency, ECHA)에서 고위험성 물질(Substances of Very High Concern, SVHC)목록에 추가되었고 스톡홀름 협약에 따른 잔류성 유기오염물질(Persistent Organic Pollutants, POPs) Annex A (Elimination), Annex B (Restriction)에 등재 되면서 과불화화합물에 대한 관련 산업 내에서 관리가 확대 및 강화되고 있다. 주 사용처인 섬유산업에서 이슈 물질로 대두되면서 섬유제품 내 과불화합물 함량 분석방법이 국제표준(ISO 24640, WD stage)으로 개발 중에 있으나섬유 재질에 대한 과불화합물 인증표준물질은 전 세계적으로 존재하지 않고 있어 폴리에스터 중의 과불화합물 분석용 인증표준물질을 개발하였다.

인증표준물질(Certificated Reference Material, CRM)로부터 소급성 확보를 위해 NMIJ에서 제조된 인증표준물질을 이용하여 Perfluoro-n-octanoic acid (PFOA), Perfluoro octanesulfonic acid (PFOS)는 인증 값을 소급성을 갖지 못하는 Perfluoro-n-hexanoic acid (PFHxA), Perfluorohexanesulfonic acid (PFHxS), Perfluoro-n-decanoic acid (PFDA)는 참고값으로 제공하였다. 후보물질 제조를 위한 매질로 폴리에스터를 사용하였고 과불화합물 5가지 물질을 혼합하여 가공제를 제조한 후, 패딩(padding)에 의한 가공제 부여, 건조(drying), 큐어링(curing)에 의한 가공제의 반응/고착으로 이루어지는 공정을 통해 제조하였다. 최상위 분석법인 동위원소희석 질량분석법(Isotope Dilution-LC/MS)을 이용하여 ISO Guide 35의 절차에따라 그룹 간 일원배치분산분석법(ANOVA)에 의한 병간·병내 균질성을 평가하였으며, 회귀분석을 이용하여 단기안정성, 장기안정성을 평가하였다. 인증표준물질의 불확도 요인을 평가하여 확장불확도 5 % 이내의 정확성이 높은 인증표준물질을 개발하였다.

### 수질 중 냄새물질, Geosmin, 2-MIB, 분석을 위한 인증표준물질 개발

이종찬1, 유지수12, 서영민3, 최종천3, 강진희4, 김윤석1.\*

<sup>1</sup>K-water 수질안전처, <sup>2</sup>국립환경과학원, <sup>3</sup>한국건설생활환경시험연구원, <sup>4</sup>(주)동우환경기술연구원 \*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

최근 하천, 호소 등의 조류에서 생성되는 성분(냄새물질, 독소, 유기물 등)은 상수원 수질 관리 문제로 근래에 관심이 폭증하고 있으며 분석, 제어, 기초연구 등에서 표준물질 수요가 증가하고 있다. 특히 냄새물질인 Geosmin과 2-MIB(2-methylisoborneol)의 두 물질은전 세계에서 일본과 미국 등 일부 국가에서만 생산되고 있다. 대상으로 하고있는 두 물질은 국내에서 수질 분석항목으로 감시항목으로 관리되고 있으며 기후변화에 따른 조류의 발생으로 분석수요가 급증하고 있으나, 아직 국내개발은 안 되고 있는 실정이다.

본 연구에서는 하천에서 발생하는 녹조(남조류)에서 냄새물질을 직접 추출하는 방법 (GC/MS-PFC, 분취용 가스크로마토 그래프 질량분석기)을 사용하여 검토하였으나 대용량 생산이 어려워서 표준물질용으로 대량 생산을 위해서 합성을 시도하여 약 80 mg (혼합물)의 냄새물질 양을 생산하였다. 생산된 냄새물질은 두물질 혼합의 형태로 100 ng/mL수준으로 2 L를 조제하여 2 mL 갈색 앰플에 약 300개정도 분취하여 보관하였다.

인증표준물질개발을 위하여 생산한 냄새물질에 대해서 우선 혼합물의 순도를 계산한 결과, 98.8%를 보여 구매한 CRM(97.0%)과 비교하여도 차이가 없었다. 또한 제조한 표준물질용 앰플들의 병내 병간 균질성과 안정성을 ISO 13528에 준하여 평가하였다. 분산분석결과 두 물질 모두 F비가 F기각치보다 작아서 균질하다고 판단되었다. 장기안정성은 시료 조제 후 약 4개월간 매월 1회 분석을 실시하여 회 귀분석을 통하여 평가하였다. Geosmin과 2-MIB의 확장불확도는 각각 5.6 ng/mL (약 95% 신뢰수준, k=2)와 9.2 ng/mL (약 95% 신뢰수준, k=2)로 평가되었다.

본 연구에서 개발한 표준물질은 특성값이 Geosmin과 2-MIB가 각각 99.6과 117.1 ng/mL로 평가되었다. 생산된 인증표준물질은 RRT시험을 통하여 상용화에 적합성을 평가한 후, 국내 수질분석기관에 보급할 예정으로 향후 시판 및 활용도가 국내외에서 기대된다.

# Symposium 4

-Bio 분석기술의 최신동향-

SYM4-01

#### BT 발전을 견인하는 분석과학의 기술혁신

박상열\*, 양인철, 유희봉

¹한국표준과학연구원 화학바이오표준본부 바이오분석표준그룹

\*Corresponding author: srpark@kriss.re.kr

바이오테크놀로지 (Biotechnbology: BT)는 신성장 동력 산업으로서의 기대감과 함께 생명체인 우 리의 삶의 질을 직접적으로 크게 변화시킬 수 있다는 점에서 큰 관심을 관심을 모으고 있다. 치열하 게 전개되고 있는 BT 연구개발에 있어서 생화학 분석능력의 개선 및 확대는 중요한 성공의 관건으로 작용한다. 이는 BT 연구개발이 1) 'omics'로 대표되는 대량, 고효율 분석 능력, 2) 분석결과 해석의 명 료화, 3) 극미량의 시료량 대응능력 등을 특징적으로 요구하기 때문이다. 이러한 특성에 부합하는 새 로운 생화학 분석기술이 창안되어 적용될 때마다 BT의 비약적 발전이 이루어져 왔다. 따라서 BT 분야 는 분석과학자들에게 흥미로운 기술혁신의 장을 제공하고 있다. 본 연구팀에서 수행하고 있는 2)와 3) 의 특성에 부합하는 분석기술 개발 사례를 소개한다. 먼저 바이오분석 표준 확립의 한 축으로 개발해 온 '단분자 계수 정량기술'은 복잡한 절차의 중합효소연쇄반응 (PCR)을 통해 이루어지는 핵산 정량을 직관적으로 그리고 정밀하게 수행하는 기준분석법이다. 모세관 내 유체 흐름 상에서 상보적 염기서열 의 형광 프로브로 태그된 DNA 또는 RNA를 레이저-여기 형광측정법으로 포착, 계수 정량하는 방법으 로서, 교정이 불필요한 이 분석법을 사용하여 COVID-19 바이러스의 RNA를 정밀하게 정량한 바 있다. 이어 극미량의 바이오 시료에 적용하기 위한 '고감도 UV 흡광분석 장비' 기술 개발 사례를 소개한다. 모세관 시료도입관을 곧장 흡광셀로 사용함으로써, 2 마이크로리터의 시료로 다른 상용 미량 분광 분 석장비에 비해 수십 배 높은 감도가 제공되며, 흡광셀의 구조적 특징을 이용하여 자동분석 기능이 채 용되었다. 초고감도와 자동화에 따른 편의성을 장점으로 하는 독보적 미량시료 분광 분석장비로서 상 용화 개발이 이루어지고 있다.

#### SYM4-02

#### 백신 마이크로니들의 안정성, 안전성 그리고 효능 분석

#### 박정환<sup>1,2</sup>

¹가천대학교 바이오나노학과, ²쿼드메디슨 ㈜

\*Corresponding author: pa90201@gachon.ac.kr

마이크로니들은 백신을 포함하는 생물학적 제제를 전달하는 유망한 약물전달 시스템 중 하나로 간 주됩니다. 백신을 경피 전달을 통해 국부 혹은 전신 면역 효과를 유도하여 백신의 효능을 달성합니다. 마이크로니들은 최소 침습으로 설계되었으며, 생물학적 위험물의 발생을 최소화 하면서 의료 전문가의 도움을 줄이면서 투여가 가능합니다. 따라서 백신을 포함한 자주 투여해야 하는 생물학적 제제의 투여 방법으로 지속적으로 발전하고 있습니다.

마이크로니들을 이용한 백신 투여는 피하 주사바늘을 이용한 기존의 근육주사 또는 피하주사와 달리 피부에 직접 백신을 전달하는 방식으로, 피부는 다른 조직 부위에 비해서 많은 면역 세포가 존재하는 조직 부위로 알려져 있습니다. 마이크로니들은 사용한 백신 접종은 피부의 풍부한 면역 체계를 표적으로 하여 항원을 더 잘 활용하고 우수한 면역 반응을 일으키며 종종 기존 전달 경로에서 요구하는 것보다 낮은 백신 용량을 사용하여 달성됩니다. 그러나 많은 장점과 거의 20년에 걸친 연구에도 불구하고임상 진행중인 마이크로니들 기반의 백신의 수는 현재까지 제한되어 있습니다. 이는 마이크로니들에 대한 안정성, 안정성 그리고 효능에 대한 체계적인 규정이 부족하기 때문입니다.

백신 마이크로니들의 경우 투여 방식은 경피 패치의 형태이지만 효능은 피내 주사의 효능과 같기때문에 이에 대한 안정성, 안정성 그리고 효능에 대한 평가가 백신 제품과 동일한 형태로 이루어지고 있습니다. 또한 백신 마이크로니들의 경우 cGMP환경에서 제조가 되고 있습니다. 원료부터 공정까지 GMP의 기준으로 평가가 되며 안정성 역시 공정중 안정성가 함께 상온 보관 안정성에 대한 평가가 이루어지고 있습니다. 이는 백신 마이크로니들이 고형 제형의 백신을 전달하기 때문입니다. 안전성 역시 패치의 안전성 보다는 주사제제의 안전성 기준에 맞춰서 진행이 되고 있습니다.

본 발표를 통해 백신 마이크로니들의 안정성, 안정성 그리고 효능 평가 항목과 결과를 공유하고자 합니다. SYM4-03

### 인공지능을 이용한 전기화학 분석

김세호¹, 조찬동¹, 박준국¹, 장지환¹.★

1(주)유케어트론 연구소

\*Corresponding author: jhjang@ucaretron.com

전기화학 분석은 바이오 진단 분야, 환경 분야, 배터리 분야, 방식 부식 분야 등에서 분석화학의 주요한 연구 주제가 되어왔다. 연구되어지고 있는 주제들은 용매에서의 산화환원 반응, 표면에서의 흡착 과정, 전자 전달의 동력학과 반응 기전, 이온들의 열역학, 전달 및 산화환원 반응물의 정량화 등을 포함하고 있다.

전기화학 분석 연구를 위해서는 전압과 전류 등을 제어하고 측정하기 위한 potentiostat 및 galvanostat 등의 실험장치가 필수적인데, 이들 장치가 크고 고가이며 실험의 준비 및 데이터의 확보 과정이 번거로워 2010년대 초반부터 세계적인 open potentiostat 연구가 시작되어 작은 크기에 저가의 potentiostat 장치들을 개발하는 연구들이 활발히 진행되어왔다. 최근에는 수많은 연구기관들에서 다양한 형태의 potentiostat들을 발표하고 있고 그 숫자는 10여개 이상에 달하고 있으며 wireless한 데이터 전송 및 임피던스 측정 기능의 추가 등으로 개발 내용이 진화되어가고 있다.

본 연구에서는 자체 개발한 the-state-of-the-art 수준의 초소형 potentiostat 플랫폼을 활용하여 진단하고자 하는 타겟 물질의 정량화 작업을 고도화하였다. 이를 위하여 potentiostat가 가져야하는 저잡음 처리 및 입출력 전압/전류 측정의 고해상도화와 함께, 용이한 데이터 확보를 위한 센서 연결 부위의 단순화, wireless한 측정 결과의 전송, 전송된 측정 데이터의 간편한 처리 도구들을 개발하였다. 이를 통하여 방대한 전기화학 실험측정 데이터의 확보가 용이하게 되었고 머신러닝과 딥러닝 등의 인공지능적인 데이터 처리에 충분한 전기화학 실험 데이터의 확보가 가능하게 되었다.

지금까지 전기화학 측정 데이터의 이용은 예를 들면 chronoamperometry 나 cyclic-voltammetry 같은 방법에서 시간 혹은 전압에 따른 전류변화량과 같은 스펙트럼을 얻었음에도 불구하고, 평형 이후의 평균전류량만을 추출하거나, 피크 전류만을 추출하여 이용하는 제한적인 해석방법에 머물러 있었다, 측정 스펙트럼의 제한적 해석은 온도, 분석물질의 저항, 전극 이중층에서의 non-Faradaic 프로세스 등 다른 변수 효과에 대한 분석을 제약하여 전기화학 분석의 정확성과 유용성 확산에 장애물로 작용하여왔다.

이러한 문제에 대한 해결책을 구하는 실증적안 연구로서, 수십가지 포도당 샘플에 대하여 cyclic-voltammetry 방법으로 스펙트럼을 얻고, Principal Component Analysis (PCA), support vector machine (SVB), Gradient Boosting method (GBM) 등의 머신러닝 방법을 이용하여 새로운 전기화학 해석방법을 시도하였다. 더 나아가 딥러닝을 이용한 전체 스펙트럼의 분석연구를 시도하였다. 본 연구진이 세계 최초\*\*라고 이해하고 있는 전체 스펙트럼의 딥러닝 해석은 머신러닝 방법보다 우수하며, 참 값과 비교하여 98% 이상의 예측력을 나타내고 있을 뿐 아니라, 기존의 Calibration 절차를 생략할 수 있어, 전기화학 바이오 센싱 뿐만 아니라 전기화학 소재 개발 등 다양한 전기화학 분석에 이용될 수 있을 것으로 기대되어진다.

# Symposium 5

-약학 분야-

#### SYM5-01

# Metabolic profiling and investigation of the antitumor effects with metabolomic and lipidomic approach for PP242 using UPLC-MS

Md Mamunur Rashid<sup>1,2</sup>, Hyunbeom Lee<sup>1</sup>, Byung Hwa Jung<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology (KIST) <sup>2</sup>Division of Bio-Medical Science and Technology, KIST School, Korea University of Science and Technology (UST).

★Byung Hwa Jung: jbhluck@kist.re.kr

PP242 is a second generation novel selective ATP-competitive inhibitor of mTOR that displayed promising anticancer activity over several cancer types by inhibiting both the complexes of mTOR (mTORC1 and mTORC2).

In this study, identification of the possible metabolites and evaluation of pharmacokinetic profile of PP242 in rats were studied. Comprehensive metabolomics and lipidomics investigations were also performed in plasma and tumor tissue to reveal the metabolic mechanism in colon cancer xenograft mouse model.

For the metabolite identification, single dose of PP242 was orally administered in Sprague-Dawley (SD) rat and metabolites were identified in plasma, urine and feces. Comprehensive metabolomics and lipidomics investigations were performed in an LS174T cell-induced colon cancer xenograft mouse model after 3 weeks of PP242 treatment. UPLC-tandem-MS was used for pharmacokinetics for PP242 and profiling of identified metabolites. Ultra-performance chromatography-Orbitrap-mass spectrometry (UPLC- Orbitrap-MS) was used for the metabolites identification and metabolomics & lipidomics.

In results, the major biotransformation pathways of PP242 were hydroxylation and glucuronide conjugation. After a single oral administration, the maximum plasma concentration ( $C_{max}$ ) of PP242 was 0.17  $\pm$  0.08  $\mu$ g/mL, while the elimination was moderately fast ( $T_{1/2}$ : 172.18  $\pm$  45.54 min).

According to the metabolomics and lipidomics analysis, metabolic changes due to the effects of PP242 were not significant in plasma. In contrast, metabolic changes in tumor tissues were very significant in the PP242-treated group compared to the xenograft control (XC) group, and revealed that energy and lipid metabolism were mainly altered by PP242 treatment like other cancer inhibitors. Additionally, it was discovered that not only TCA cycle but also fatty acid  $\beta$ -oxidation ( $\beta$ -FAO) for energy metabolism was inhibited and clear reduction in glycerophospholipid was observed. This study reveals new insights into the underlying anticancer mechanism of the dual mTOR inhibitor PP242, and could help further facilitate the understanding of PP242 effects.

#### SYM5-02

# New insights into in vivo toxicity of natural deep eutectic solvents guided by toxico-metabolomics investigation

Dasom Jung, Jae Back Jung, Seulgi Kang, Ke Li, Inseon Hwang, Ji Hoon Jeong, Hyung Sik Kim, <u>Jeongmi Lee</u><sup>1,\*</sup>

> <sup>1</sup>School of Pharmacy, Sungkyunkwan University \*Corresponding author: jlee0610@skku.edu

Deep eutectic solvents (DESs) are formed from two or more components that are capable of hydrogen bonding. Because many constituents of DESs are naturally occurring and of low toxicity, the resulting DESs are often regarded safe. Recent studies reporting DES toxicity led us to systematically investigate the potential toxicity of a variety of DESs of which components are GRAS by FDA. The hydrogen bond donor was varied among organic acids (lactic acid and malic acid), polyols (glycerol, xylitol, and sorbitol), sugars (glucose and fructose), and urea, while the hydrogen bond acceptor was fixed as choline chloride (ChCl). The eight DESs were tested on HepG2 and HEK293T cell lines, and their IC50 values were compared with those of the aqueous solutions of individual components and mixtures. The aqueous mixtures of DES components generally showed lower IC50 than those of the individual components. Moreover, DESs usually exhibited similar to or higher cytotoxicities than the aqueous mixtures. For further in vivo toxico-metabolomics investigation, a DES, namely CU (1:2) consisting of ChCl and urea at 1:2 molar ratio was selected, because it is one of the most commonly applied DESs in diverse areas. Mice were grouped into five classes, each of which underwent oral administration of saline, ChCl, urea, aqueous solution of ChCl and urea, and CU (1:2). The acute oral toxicity was examined from serum, kidney, and liver gas chromatography-mass spectrometrybν chromatography-tandem mass spectrometry-based analysis. Metabolic profiles of the DES-treated mice were generally distinct from those of the other groups. Orthogonal projection to latent structure discriminant analysis allowed us to identify numerous differential metabolites, which imply the association of DES toxicity with oxidative and ammonia stresses. DES-induced oxidative stress was confirmed by superoxide dismutase activity, catalase activity, and malondialdehyde assays. Ammonia stress was evidenced by significantly increased ammonia levels in serum of the DES-treated mice. Ammonia could be produced from heating ChCl and urea and from heating ChCl and organic acids. Taken together, our study suggests that ChCl-based DESs may not be simply considered as pure and safe mixtures. The current presentation is based on our recent publication in Green Chemistry (2021).

#### SYM5-03

#### Drug metabolite identification using MS-based molecular networking

Jun Sang Yu<sup>1</sup>, Kyo Bin Kang<sup>2</sup>, Hye Hyun Yoo<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Hanyang University, <sup>2</sup>College of Pharmacy, Sookmyung Women's University \*Corresponding author: yoohh@hanyang.ac.kr

Recently, molecular networking has been suggested that it has potential as a drug metabolite identification tool, but its effectiveness for drug metabolism studies has not yet been fully characterized. Accordingly, we applied molecular networking to detect drug metabolites and compared the resulting data with those obtained from other strategies using sildenafil citrate as a model compound. The sildenafil metabolites reported previously were successfully identified by molecular networking analysis. Compared with other programs tested, molecular networking analysis detected the metabolites in more convenient and efficient manner while the performance was comparable or better. These results suggest that molecular networking analysis is useful as a powerful and convenient tool for drug metabolism studies.

#### 2021년도 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

#### SYM5-04

## Determination of the metabolic alterations of short-chain fatty acids and TCA cycle intermediates in human plasma with gastric disorders using GC-MS/MS

Wonwoong Lee<sup>1</sup>, You Lee Kim², Jongki Hong²,★

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Woosuk University, Wanju 55338, Korea <sup>2</sup>College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea \*Corresponding author: jhong@khu.ac.kr

Short-chain fatty acids (SCFAs) are produced by bacterial fermentation from dietary fiber, permeate through the intestinal cell membrane, and are distributed in the human body via blood circulation. Since absorbed SCFAs, such as acetic acid, propionic acid, and butyric acid, could introduce into tricarboxylic acid cycle (TCA cycle) in the host cells, the relationships between SCFAs and TCA cycle intermediates might influence to energy metabolism, homeostasis, and numerous disease conditions in the human body. For this reason, the information on profile changes between SCFAs and TCA cycle intermediates is required to unveil pathological mechanisms of intractable diseases including cancers. However, due to different characteristics between mono-carboxylate structured SCFAs and di-/tri- carboxylate structured TCA cycle intermediates, it demands a sophisticated analytical method. Generally, a base pairing method would be effective to decrease loss of volatile SCFAs, whereas high pH level could decrease recoveries of TCA cycle intermediates by base decarboxylation. Therefore, to improve loss of volatile SCFAs and base decarboxylation of TCA cycle intermediates, in this study, a tetra-alkyl ammonium paring method was developed. Based on the optimized ammonium paring method, SCFAs and TCA cycle intermediates were effectively extracted from human plasma without significant loss. Furtheremore, to assess gastric disorders with dysbiosis, alterations of SCFAs and TCA cycle intermediates in human plasma with gastric disorders chromatography-tandem mass spectrometry (GC-MS/MS) analyzed using gas N-methyl-N-tert-butyldimethylsilyltrifluoroacetamide (MTBSTFA) derivatization. This study provides a comprehensive profiling method to determine SCFAs and TCA cycle intermediates in human plasma and would be helpful to discover the etiological mechanisms of gastric diseases based on profiling of host-gut microbiome co-metabolic pathways.

# Symposium 6

-분자특성 진단기술의 동향-

#### 2021년도 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

#### SYM6-01

#### 종이 기반 미세유체칩의 색변환 정량화를 위한 원심광학시스템 연구

#### 김상효

#### 가천대학교 바이오나노학과

종이 기반 미세유체칩은 저렴한 비용, 사용 편의성, 빠른 제조, 안정적인 시약의 건조 등으로 인해현장검사(point-of-care testing)를 위한 매력적인 플랫폼이다. 친수성의 종이 기판은 외부펌프 없이 모세관력으로 유체의 흐름을 가능하게 한다. 왁스 프린팅 기술을 활용한 종이 기판 위의 소수성 채널의 형성은 다양한 유체제어를 쉽게 제공할 수 있다. 종이 기반 미세유체칩은 매력적인 특징들을 소유하고 있으나, 플라스틱 기반 미세유체칩에서 가능한 양방향 유체 제어, 밸브 및 계량과 같은 기능에는 한계가었다. 한편, 랩 온 어 디스크 또는 원심미세유체 플랫폼은 모터의 원심력을 활용하여 채널의 유체를 제어한다. 이는 다양한 유체제어를 쉽게 가능하게 하여 고도로 훈련된 사용자가 없는 POC 응용에 적합하다. 그러나 기존의 원심미세유체 플랫폼에 사용되는 플라스틱 기질은 표적 인식을 위한 프로브의 낮은 밀도 (평탄한 표면)와 고정화의 어려움으로 인해 분석 성능에 제한이 있었다.

이러한 문제를 해결하기 위해서, 본 연구에서는 원심미세유체 플랫폼에 왁스 프린팅 종이 미세유체칩을 통합하여 하이브리드 종이-디스크를 제작하였다. 또한, 하이브리드 종이-디스크 위에서 생물학적 반응의 색 변환을 실시간 모니터링 할 수 있는 초고감도의 원심광학시스템을 개발하였다. 디스크 기판에 3D 다 공성 종이를 통합하고 원심광학시스템의 독특하고 효율적인 검출 원리로 인해 분석 성능은 크게 향상될 수 있었다

#### SYM6-02

# Metabolomic profiling analysis for biomarker discovery in human disease

### **Geum-Sook Hwang**

Integrated Metabolomics Research Group, Korea Basic Science Institute

Metabolomics is the technology of studying, profiling, and fingerprinting metabolites in various physiologic states. This approach has recently demonstrated enormous potentials in many fields such as genotype discrimination, toxicological mechanism, disease processes, and drug discovery. Metabonomic approaches have been used to generate comprehensive biochemical profiles of low molecular weight endogenous metabolites for biofluides and tissue. This metabolic profile is perturbed in a characteristic fashion in disease, toxic process and drug efficacy, and this shift in position can be readily visualized and modeled using chemometric techniques. The metabolic profile of biofluids shows changes of their composition in response to toxic or disease-induced stress due to the system's attempt to maintain homeostasis. These methods constitute a metabolomic approach to study the quantitative metabolic consequences of patho-physiological insult. Understanding the biochemical reason for such a shift in metabolic space leads to the identification of biomarkers of disease or drug efficacy.

<sup>1</sup>H NMR and Mass spectrometry (MS) were used to generate a molecular fingerprint of biofluid or tissue samples, and then pattern recognition technique was applied to identity molecular signatures associated with the specific diseases or drug efficiency. Several metabolites that differentiate disease samples from the control were thoroughly characterized and the metabolic changes in human and animal model were investigated using <sup>1</sup>HNMR and MS. Spectral data were applied to targeted profiling and spectral binning method, and then multivariate statistical data analysis (MVDA) was used to examine in detail the modulation of small molecule candidate biomarkers. The metabolic profiling produces robust models, generates accurate metabolite concentration data, and provides data that can be used to help understand metabolic differences between healthy and disease or drug treated models. Such metabolic signatures could provide diagnostic markers for a disease state or biomarkers for drug response phenotypes, and mechanistic information on cellular perturbations and pathways.

#### SYM6-03

#### 기능성 나노물질 기반의 광-전기화학적 분석 연구

#### 김주훈★

경희대학교 화학과 \*Corresponding author: jkim94@khu.ac.kr

Synthesis of nanoparticles having well-defined small sizes especially less than ~5 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. Characterization and analysis of such tiny particles still remains challenging due to the extremely small dimension of the particles, too. Here, I present two main research topics. The first topic is the synthesis of dendrimer-encapsulated nanoparticles (DENs) and their useful properties for analytical applications. Specifically, we synthesized Pt DENs having different sizes over the range of 1-4 nm, but were fairly uniform and monodispersed in size with subnanometer accuracy. The synthesized Pt DENs exhibited enzyme-mimetic activities such as peroxidase-like and oxidase-like activities. We demonstrated the analytical versatility of the Pt DEN-catalyzed assays based on colorimetry, chemiluminescence, fluorescence (PL), and electrochemiluminescence (ECL). The second topic is unique near-IR ECL of Au nanoclusters (NCs) and PL spectral change of carbon nanodots (CDs). An interesting point is that the near-IR ECL is generated from the Au NCs, of which PL is primarily within the visible wavelength region (i.e., orange color PL). This discovery is significant because it represents an unusual example of near-IR ECL from water-soluble Au NCs exhibiting PL in the visible region, and thus provides a better understanding of the ECL of Au NCs. In addition, the monochromatic PL spectral change of CDs was utilized for a ratiometric PLassay distinuishing Fe(III) and Fe(II) in aqueous media.

#### Reference

- 1. Molla, A.; Lee, H.; Ju, Y.; Choi, J.; Kim, J.\* Dyes Pigm., 2022, 197, 109883.
- 2. Yu, Y.; Ro, H.-J.; Yi, Y.-S.; Cho, T.; Kim, S.I.; Yoon, C.W.; Jun, S.\*; **Kim, J.\*** *Anal. Chem.* **2021**, *93.* 2871.
- 1. An, J.M.; Ju, Y.; Kim, J.H.; Lee, H.; Jung, Y.; Kim, J.; Kim, Y. J.; Kim, J.\*; Kim, D.\* *J. Mater. Chem. B*; **2021**, *9*, 4015.
- 3. Lee, S.B.; Ju, Y.; Lee, Y.; Kim, J.\* Appl. Surf. Sci., 2019, 473, 461.
- 4. Kim, M. M.; Jeong, S.; Song J. K.\*; **Kim, J.\*** *Chem. Commun.*, **2018**, *54*, 2838.
- 5. Kwon, J.; Park, S. K.; Lee, Y.; Lee, J. S.\*; Kim, J.\* Biosens. Bioelectron., 2017, 87, 89-95.
- 6. Lim, H.; Ju, Y.; **Kim, J.\*** *Anal. Chem.*, **2016**, *88*, 4751-4758.

# Symposium 7

-대학원생 구두 발표-

SYM7-01

#### 장거리 이동 오염원 평가를 위한 PM2.5 구성성분 정량분석

이채연<sup>1</sup>, 임종명, 김현철, 이진홍<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>한국원자력연구원 원자력환경실, <sup>2,\*</sup>충남대학교 환경공학과 \*Corresponding author: jinlee@cnu.ac.kr

국내 대도시의 대기 중 미세먼지의 농도는 지속적으로 증가하고 있어 국민 건강에 대한 위협요인으로 작용하고 있다. 잘 알려진 것처럼 미세먼지에 장기간 노출될 경우 호흡기 질환(천식, 호흡곤란), 피부질환(두드러기, 피부염), 안구질환(결막염)의 직접적인 원인이 될 수 있다. 대도시에서의 대기 중 미세먼지의 주요 오염원은 이동오염원(자동차), 산업활동(산업장의 굴뚝 및 소각로)에 의한 것으로 알려져 있으나 외부로부터 유입되는 장거리 이동 오염원의 비중이 역시 크며 계속 증가하고 있다. 중국의급속한 산업화에 따라 1차상 대기오염물질 배출량은 지속적으로 증가하고 있으며, 대기 중에서 물리화학적으로 반응하여 생성되는 2차상 오염물질들이 서해상으로 국내에 유입되어 영향을 미치고 있다. 미세먼지의 장거리 이동을 평가하기 위해서는 수용점에서의 장기간 모니터링을 통하여 미세먼지 내성분의 오염원을 정량적으로 평가하고, 공기 역괘적분석과 같은 기상 모델을 이용하여 분석하는 연구가 필요하다.

본 연구에서는 이러한 장거리 이동으로 영향을 주는 미세먼지의 오염원을 평가하기 위하여 대전과 제주의 2지점에서 각각 2020년부터 Teflon filter와 Quartz filter를 통해 주별 2개의 미세먼지 시료를 채취하였다. 채취된 시료는 ED-XRF, Ion chromatography, EC/OC analyzser, multi-wavelength absorption black carbon 분석기기를 이용하여 각각 미세먼지 중 금속성분, 이온성분, 탄소성분, black carbon을 정량분석하였다. 미세먼지 중 성분원소들의 정량분석 결과를 이용하여 각 지점에서의 분포특성을 평가하였으며, 다양한 통계분석기법을 통해 미세먼지의 오염원과 지리적 위치를 평가하였다.

#### 2021년도 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회

#### SYM7-02

## A study on the distribution characteristics of microplastics introduced into the water system from the paint on the Gongjicheon Stream trail

### So Young Park, Hyo Jeong Choi, Dong Hyun Kim, A Ram Cho, Sang Hui Hwang, Hye Bin Kim, Man goo Kim\*

Department of environmental science, Kangwon National University

\*Corresponding author: mgkim@kangwon.ac.kr

Paint peeling was found on the pedestrian road in Gongjicheon Stream. The peeled paint was introduced into the water system in the form of microplastics, which was discussed as an environmental problem in the local community. The introduced microplastics are a mixture of chemicals that can cause water and ecological health degradation and spread along the Bukhangang River water system to the Hangang River basin. In general, microplastics refer to plastics of 5 mm or less, but in this study, microplastics in the soil were analyzed, and a total of 5 research points were designated based on the size of 2 mm or less to be quantified and qualitatively analyzed.

As a result of quantitative analysis, the particle size of microplastics observed in the soil was 0.000173 mm to 2 mm and 70 near Uiamho Lake in Chuncheon MBC, 13,128 in Gongjicheon Seoksa Bridge, 17,700 between Gongjicheon Toegye Bridge and Namchuncheon Bridge, 8 in Gongjicheon Recreation Area, and 205 at Gongjicheon Gongji Bridge were detected. As a result of the analysis, at least  $1.1\times10^9$  microplastics were calculated based on a maximum particle diameter of 2 mm and a maximum of  $1.5\times10^{17}$  microplastics were calculated based on a minimum particle diameter of 0.000173 mm.

As a result of qualitative analysis, the same IR value was confirmed at all wave numbers except for 1550 /cm to 1200 /cm and 700 /cm. Through IR spectral analysis, matching of OH, NH, NH amide or Aldehydes and Ketones or Ester, NH amines, C=C trans, H-C=C, C=C cis or C-Cl functional group components were confirmed. Qualitative and quantitative analyzes were able to demonstrate the release of microplastics into the surrounding soil.

#### SYM7-03

#### Identification of thymosin \( \beta \) in-vitro metabolites with synthesized standards

Khandoker Asiqur Rahaman<sup>2,3</sup>, Anca Raluca Muresan<sup>2,3</sup>, Hophil Min<sup>1</sup>, Junghyun Son<sup>1</sup>, Min-Jung Kang<sup>2,3</sup>, and Oh-Seung Kwon<sup>1,2,★</sup>

<sup>1</sup>Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea, <sup>2</sup>Division of Bio-Medical Science & Technology, KIST School, Korea University of Science and Technology, Seoul 02792, Korea.

<sup>3</sup>Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul 02792, Republic of Korea

Thymosin β4 is a highly active protein that exerts biological activities such as actin-binding, tissue repair, regeneration, anti-inflammation, and cell maturation. Thymosin β4 has also been listed in WADA prohibited drugs. Based on its biological activities, thymosin β4 undoubtedly has a high potential to be abused by athletes. This study aims to identify metabolites of thymosin β4 in different enzyme-buffer systems, characterize each m/z ion of the detected metabolite in-silico and confirm its structure with the synthesized authentic standards. At first, thymosin \( \beta \) was metabolized with an appropriate buffer system for 22 hours. Then, the samples were collected and analyzed for metabolites by UHPLC-Q-Exactive Orbitrap MS. The metabolites were calculated by in-silico software. Finally, the standards for detected metabolites were custom synthesized and validated through respective TIC, MS, and MS/MS. In this study, we detected 13 new metabolites. 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. Metabolite M1, M5, M7, M11, M12, M13 were confirmed to their synthesized authentic standards, respectively. This study established a method of detection and identification of new peptide metabolites. Remaining further studies by screening these peptides could discover new drug development with the potential of numerous biological activities.

SYM7-04

Study on effect of sample preparation on structure and size distribution of exudate gums using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS)

Meiyu Zhang<sup>1</sup>, Jaeyeong Choi<sup>1</sup>, Da Wang<sup>1</sup>, Lars Nilsson<sup>2</sup>, and Seungho Lee<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Hannam University, South Korea <sup>2</sup>Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden ★Corresponding author: slee@hnu.kr

Exudate gums are widely used as emulsifiers or thickening agents in the food industry. The performance of exudate gums is affected by their physicochemical properties such as molar mass (), molecular size, molecular conformation, protein content, et al. The high polydispersity, large and poor solubility of exudate gums bring challenges to their analysis. Either filtration or centrifugation can be used for preliminary separation of soluble and insoluble parts of the gum. However, their separation efficiency and their effect on the structural changes in gums are still unclear.

In this research, asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS) was used to investigate the effect of the preparation method (filtration or centrifugation) on the size and the conformation of three types of gums (labelled 'GT', 'GA', and 'GK', respectively).

The effect of removal of insoluble and large -populations on the emulsifying property of gums are also evaluated. Results showed that both filtration and centrifugation remove the co-eluted large populations, thus decrease the measured radius of gyration () of the gums. The removal of the large-sized populations and insoluble parts significantly reduced the viscosity of the gum dispersion and the emulsion prepared by the gums, resulting in an decreases in the stability of the emulsions.

### SYM7-05

### Size characterization and quantification of TiO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub> in food matrix by sedimentation field-flow fractionation (SdFFF) and relative techniques

Da Wang<sup>1</sup>, Meiyu Zhang<sup>1</sup>, Jae-Min Oh<sup>2</sup>, Jaeyeong Choi<sup>1</sup> and Seungho Lee<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea <sup>2</sup>Department of Energy and Materials Engineering, Dongguk University, Republic of Korea

 $TiO_2$  and  $SiO_2$  nanoparticles are widely used as food additives. It has been reported that  $TiO_2$  and  $SiO_2$  nanoparticles as food additives may be toxic, possibly causing cancer or other diseases. It is thus necessary to develop effective methods for analysis of physical and chemical properties of  $TiO_2$  and  $SiO_2$  nanoparticles.

Field-flow fractionation (FFF) is a family of analytical tool for separation and characterization of polydispersed nanoparticles. Among the FFF family members, sedimentation field-flow fractionation (SdFFF) is suitable for analyzing nanoparticles based on their sizes and/or densities.

In this study, SdFFF was setup, and was used to perform separation and quantitative analysis of  $TiO_2$  and  $SiO_2$  nanoparticles after mixing with food matrices such as sucrose or casein. This study focuses on quantitative analysis of the nanoparticles mixed in food matrix, and, to some extent, the size change of the nanoparticles in food matrix. Results show that sucrose promotes aggregation of  $TiO_2$ , resulting in an increase in the size of  $TiO_2$  nanoparticles. Casein has essentially no effect on the dispersing of  $SiO_2$  nanoparticles. This study demonstrates that SdFFF is a useful and reliable method for separation and quantitation of food-grade nanoparticles.

### SYM7-06

### Simultaneous analysis of multi-component lipids by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry

### 이혜진, 윤혜란\*

덕성여자대학교 약학대학 생의약분석실
\*Corresponding author: hyeran11@duksung.ac.kr

There is a growing interest in lipid metabolism-related chronic diseases such as asthma, chronic obstructive pulmonary disease to more severe diseases as forms of cancer.

We developed the ultra high performance liquid chromatography–electrospray ionization tandem mass spectrometry (UHPLC-ESI-MS/MS) based analytical method of 40 lipids series (7 omega fatty acids, 3 sphingolipids, 23 glycerophospholipids and 5 neutral lipids) after "dried serum spot" sample preparation. We used "dried serum spot" sample preparation as an alternative method to conventional LLE or (SPE) methods. Developed method included special solvent system (MTBE:MeOH:DDW=3:2:1(v/v/v). After extraction, the lipid analytes were separated on a Acuity UPLC BEH C8 column using 5 mM ammonium acetate in 10% MeOH as mobile phase A and IPA:ACN:MeOH=2:3:5 as mobile phase B at flow rate of 0.35 mL/ min.

The calibration curve showed an excellent sensitivity. Correlation coefficient was 0.9947  $\sim 0.9972$  for omega fatty acids, 0.9976  $\sim 0.9996$  for phospholipids, 0.9987  $\sim 0.9989$  for sphingolipids and 0.9961  $\sim 0.9997$  for Neutral lipids. LOQ was 0.005~0.625 µg/mL for omega fatty acids, 0.00008~0.0025 µg/mL for sphingolipids, 0.00008  $\sim 0.05$  µg/mL for phospholipids, and 0.0006  $\sim 0.1$  µg/mL for neutral lipids. The accuracy and precision showed 88.5 to 109.9%( SD; 1.9 to 10.6%) in intra-day assay and 92.7  $\sim 112.0\%$  (SD; 3.0  $\sim 8.6\%$ ) in inter-day assay for all 40 lpids If clinically applied, this new analytical method will be practically useful with its simple dried serum spot use and excellent sensitivity as lipid biomarkers for monitoring various chronic inflammatory and autoimmune diseases.

SYM7-07

## Simultaneous determination of 37 lipids metabolites and Bio-profiling in human serum by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry

### 이지선, 윤혜란★

덕성여자대학교 약학대학 생의약분석실
\*Corresponding author: hyeran11@duksung.ac.kr

Biometabolites such as bile acids, omega fatty acids, sphingolipids and phospholipids are reported to be related to various inflammatory reactions such as asthma, chronic obstructive pulmonary disease(COPD), rheumatoid arthritis, and inflammatory bowel disease. We developed the ultra high performance liquid chromatography-electrospray ionization tandem mass spectrometry(UHPLC-ESI-MS/MS) based analytical method of 37 lipids metabolites(6 bile acids, 5 omega fatty acids, 2 sphingolipids, and 24 phospholipids). This method was applied to the asthma patients (n=25) and healthy controls(n=25). Statistical analyzes were performed using partial least squares discriminant analysis(PLS-DA), t-test, fold change test to effectively discriminate whether there was a difference in the concentrations of metabolites in normal and asthma groups. The result of PLS-DA showed that 16 metabolites have statistical significance with p-value <0.05. Eleven metabolites (DOCA, SPH, LPC16:0, LPC18:3, LPC18:2, LPC18:1, LPC18:0, PC32:2, PC36:4, PE36:3, PE36:2) showed significance at p-value < 0.05, 5 metabolites (UDCA, CA, CDCA, LPE18:1, LPE18:0) showed significance at p-value < 0.01. 4 metabolites (SPH, LPC 18:3, LPC 18:0, PC 32:0) had concentration difference of asthma and normal more than 1.5 times in fold change test. The probability of correctly diagnosing asthmatic and normal patients with significant metabolites was measured using random forest. The probability of diagnosing asthma was 88% in 22 asthma patients, and the probability of diagnosing normal in normal people was 84%. We confirmed that two groups were significantly different in metabolic bio-profiling and concentration. Asthma-related metabolites identified in this study will provide alternative diagnostic methods or diagnostic biomarkers by quantifying metabolites from serum in healthy normal and asthmatics patients.

### SYM7-08

### UVC-lamp sterilization of Bacillus atrophaeus spores on glass and tile

장한별1, 임진아1, 김정권1,\*

<sup>1,\*</sup>충남대학교 화학과 \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Ultraviolet-C (UV-C) radiation (100-280 nm) is a disinfection method to kill or inactivate microorganisms such as viruses, bacteria, and other pathogens. In this study, UVC-lamp sterilization of *Bacillus atrophaeus* on glass and tile was investigated. *Bacillus atrophaeus* spores were diluted with  $10^6$  CFU/mL in PBS buffer and  $50~\mu$ L of spore solution was loaded on a  $1\times1$  cm glass piece or vitrified ceramic tile. After the sample was dried overnight, UVC-lamp irradiated on a each sample with 1 hr. Then, the sample was desorbed using a razor blade and repeated pipetting of  $50~\mu$ L PBS containing 0.2% Tween 20. The desorbing solution was spreaded on agar plate, and incubated for 24 h at 37 °C. As a result, bacteria appeared in UVC-lamp sterilization using glass piece, but all bacteria were killed in UVC-lamp sterilization using tiles. Sterilization of UVC-lamp using glass. In further research, we plan to reduce the UVC-lamp irradiation duration to confirm the tendency of sterilization effect on tile.

## Symposium 8

-젊은 분석과학자-

SYM8-01

### 대사체 분석을 통한 암대사의 이해 및 항암타겟 발굴

### 강윤표1,★

¹,★서울대학교 약학과 \*Corresponding author: yunpyo.kang@snu.ac.kr

Cysteine은 Glutathione, CoA, Taurine, Fe-S, 단백질 등 주요한 생체 물질들의 전구체로써, 암세포가 생존하는 데에 반드시 필요한 아미노산임. 본 연구는 기존에 알려져 있지 않았던 폐암세포의 Cysteine 대사를 이해하고, 이를 기반으로 암세포의 Cysteine 대사를 타겟하는 새로운 메커니즘을 밝혀 항암제 개발의 기반을 닦고자 하였음.

따라서 폐암세포에서 Cysteine 대사와 연관된 대사체의 양을 분석하기 위하여 폐암세포 모델에 Metabolomics 분석법을 적용하였고, 또한 Cysteine 대사와 연관된 대사체 변화의 흐름을 규명하기 위하여 동위원소 표지 대사체 추적기법 (Stable isotope labeled metabolite tracing) 을 적용하였음.

이를 통해서 폐암세포에서 Cysteine 대사효소인 CDO1이 Sulfite를 생성하여 Cysteine의 주요 공급원인 세포외부의 Cystine을 분해시켜 세포사멸을 촉진킴에 따라 대부분의 폐암세포가 CDO1의 발현을 매우 저해시키고 있다는 사실을 확인하였음. 이후 Cysteine 공급의 저해를 통한 폐암세포의 사멸 메커니즘을 이해하고자 세포외부의 Cystine 공급을 저해하였을 때에 발생하는 대사체의 변화를 폐암세포에서 확인하였음. 그 결과 Cystine 공급 저해 시 활성산소 독성을 저해하는 Glutathione의 합성이 줄어들었을뿐만 아니라 세포에 Glutamate가 축적되어 세포사멸이 발생한다는 사실을 확인하였음. 뿐만 아니라 기존에 Glutathione을 합성한다고 알려진 대사효소인 GCLC가 gamma-glutamyl-peptide를 만들면서 glutamate 독성을 줄여 암세포의 세포사멸을 저해한다는 사실을 새롭게 규명하였음. 그러므로 암세포에 Cysteine의 공급을 줄임과 동시에 GCLC 저해제를 투여한다면 효과적인 암세포사멸을 촉진시키는 새로운 항암 메커니즘으로 작용할 수 있음을 밝혔음.

### SYM8-02

### Mass spectrometry imaging of formaldehyde-fixed paraffin-embedded clinical samples via chemical decrosslinking of peptide hormones

### Dong-Kyu Lee<sup>1,★</sup>

1,\*College of Pharmacy, Chung-Ang University \*Corresponding author: leedk@cau.ac.kr

Mass spectrometry imaging is an emerging technique providing an important insight into chemical profiles varied by cellular heterogeneity in the biological systems. The region-specific ionizations in an untargeted and unlabeled manner support multiplexed biomolecular imaging together with molecular capabilities of mass spectrometry. The unique range of molecular detection from endogenous to exogenous molecules could supplement the prevalent biological imaging based on immunohistochemistry. However, mass spectrometric ionization has a limited application to biobanked tissue specimens preserved in standard formaldehyde fixation which blocks the ionizable moieties of analytes. To expand the sample availability to biobanked clinical tissues, we developed the chemical decrosslinking reaction that restores the ionizable moiety by removing the formaldehyde-induced crosslinks or derivatives. Hydroxylamine hydrochloride in acidic tris(hydroxymethyl)aminomethane with heating was found to reverse the methylene crosslinking between model peptides in vitro. Among amino acid moieties affected by formaldehyde fixation, arginine, lysine and cysteine demonstrate best performance in procedure leading to the retrieval of peptide detection in the treated samples. This treatment was also compatible with formaldehyde-fixed pancreas and successfully enables the detection of glucagon, insulin and pancreatic polypeptides localized in the  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -cells of the islets of Langerhans. Described approach will enable a mass spectrometric investigation of large sets of clinical specimens preserved at tissue banks.

# Symposium 10

-법과학-

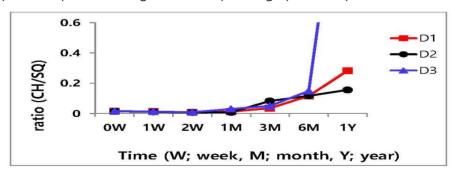
### SYM10-01

### The study of fingerprint degradation and composition according to aging(II)

Nam Yee Kim<sup>1,\*</sup>, Jong Shin Park<sup>1</sup>, Woo-Yong Park<sup>2</sup>, Geum Mun Nam<sup>1</sup>, Sang Cheol Heo<sup>1</sup>, Ji Eun Jung<sup>1</sup>, Jihyuk Kim<sup>1</sup>, Hee Sook Kim<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Gwangju Institute of National Forensic Service <sup>2</sup>Daejon Institute of National Forensic Service <sup>3</sup>Crime Scene Investigation, Seoul metropolitan Police Agency

The latent fingerprint is one of the most important evidences for individualization at a crime scene. As crime becomes more intelligent, it is becoming increasingly important to determine when a latent fingerprint was deposited. This study was designed by modeling a real crime. There was a crime in which dozens of pottery pieces packed in polystyrene boxes and stored in an underground warehouse were stolen. A latent fingerprint developed in a polystyrene box at the crime scene by emulsion black technique, and the suspect was arrested. However, the suspect claimed that I had been hired to transport the pottery to the underground warehouse10 years ago. I've never been there since then. Fingerprint aging was studied by keeping fingerprint samples deposited by volunteers on polystyrene boxes in a dark room. Emulsion black technique (iron oxide) was used for fingerprint development. Even fingerprint samples stored from more than 6 months and up to 2 years were able to identify latent fingerprint. After identification of latent fingerprint by using the emulsion black technique, the sample was used to analyze the components by GC/MS with TMS derivatization for the fingerprint aging. The ratio of cholesterol and squalene(Ch/Sq) as aging indicator was calculated. The ratio was about 0.01 from the initial time to 1 month of storage, but after that, it gradually increased to more than 0.1 after 6 months, and also the absolute amount of cholesterol and squalene were decreased much more than initial time. Applying heat to the fingerprint sample or storing the developed fingerprint sample also affected the aging.



Keywords: forensic science, fingerprint degradation, ageing, emulsion black

### SYM10-02

### Phenoxyethanol의 함량 및 비율을 통한 문서의 작성시기 추정의 타당성 검토

### 성태명\*

` 대전보건대학교 과학수사과

★Corresponding author: sungtm@hit.ac.kr

문서의 작성시기 추정에서 phenoxyethanol(PE)은 볼펜에 높은 비율로 함유되어 있고, 적절한 휘발성과 분석의 용이함으로 인해 PE의 검출을 통해 최근에 작성된 문서인지 여부를 추정할 수 있다. 문서의 글자에서 동일한 필획에서도 잉크시료를 채취하는 부위에 따라 PE의 함량에서 큰 차이가 날 수있는 점을 고려하여, 동일 시료를 2회 연속적으로 분석하여 PE의 함량과 이를 보완할 수 있도록 비율을 함께 고려하여 경과시간에 따른 변화정도를 검토하였다. 실질적으로 문서 작성에 사용된 필기구를 특정할 수 없는 점을 고려하여 다양한 종류의 검정색 볼펜의 획을 직경 1.0 mm의 마이크로펀치로 채취하여 분석시료로 사용하였다. 획에서 PE의 추출은 2 mL 바이알에 플러그 1점을 가운데에 위치시킨다음 100 ℃에서 1시간 가열하여 추출하고, 동일 시료를 다시 100 ℃에서 30분간 가열하여 추출하였다. PE의 검출량은 첫 번째 추출에서는 4개월째부터 거의 level off가 되었으며, 두 번째 추출에서는 2개월 정도에서 level off 되는 경향을 보였다. 비율(ext 1/ext 2)의 비교에서는 보다 명확한 차이를 보였으며, 8개월 정도 될 경우 level off 되는 경향성을 보였으며, 비율은 1개월부터 7개월까지는 약 17~9 정도로 나타났으며, 10개월~24개월 사이에서는 3~4의 비율을 나타내었다.

이를 종합해 보면 시료의 상태에 따라 3개월 또는 7개월 이내의 문서와 1년 이상된 문서의 구별은 가능할 것으로 판단되며, 특히, PE의 분석을 통한 판단은 최근에 작성된 문서를 확인하는 데는 유용하게 활용될 수 있을 것으로 판단되었다.

### SYM10-03

### Analysis of phenothrin and span80 on fire debris to determine a fire caused by bug sprays

Jinmi Jung<sup>1,★</sup>, Siwon Kim<sup>1</sup>, Kiwoong An<sup>1</sup>, Kim Taeheui<sup>1</sup>,
Min-Hui Son<sup>2</sup>, Mia Kwon<sup>2</sup>

1,\*National Forensic Service, Busan Institute,
 2National Forensic Service, Chemical Division
 \*Corresponding author: jjm122@korea.kr

Sometimes unexpected fire accidents happen when they use a bug spray and an electric flyswatter to swat mosquitoes in summer season. The propellant of a bug spray is mainly LPG(liquefied petroleum gas, propane, isobutane and butane) in the aerosol mixture with the active ingredient such as insecticide. The aerosol mist can ignite to form an explosion mixture with oxygen in air and this explosion can be achieved by only one spark by electric flyswatter. Accidents are most likely to occur if LPG and air mixture which is within explosion range come into direct contact with an ignition source, such as a flame, pilot light or spark from electrical appliance that cycle on and off (e.g. refrigerator, air conditioner, vacuum cleaner, electric flyswatter, etc).

Therefore we had to research to find major analyte from evidence (e.g. fire debris) gathered from the scene of these accidents. We collected several kind of commercial bug sprays and looked around their ingredients. Phenothrin and span80 were picked out as analytes because they were included among the several sprays and remained on fire debris, and analyzed by GC-MSD easily. Phenothrin is a cyclopropanecarboxylate ester used as a pyrethroid insecticide and span80(sorbitan monooleate) is one of the nonionic surfactants.

The fire debris was extracted by hexane and carried out transesterification reaction by adding methanolic potassium hydroxide solution and ultrasonication. Then reaction mixure was vaporized with nitrogen and carried out silylation reaction by adding BSTFA and heating. The residue was analyzed by GC-MSD. We confirmed phenothrin and the silylation derivatives of span80(1,4-sorbitan-(TMS)<sub>4</sub> and oleic acid-TMS).

### SYM10-04

### Forensic glass analysis: A collaborative exercise and case studies

### Seongshin Gwak\*, Kiwook Kim, Dongkye Lee, and Mia Kwon

Forensic Chemistry Division, National Forensic Service, Wonju \*Corresponding author: ssgwak@korea.kr

Glass fragments may play an important role to reconstruct crime scenes in various criminal cases including car accidents, theft, and burglaries. The purpose of glass analysis in forensic cases is to examine if glass fragments are present in collected samples from the scene and to determine if questioned glass fragments are originated from the same source as known samples. Recently, there have been an effort for inter-laboratory study between forensic laboratories in worldwide. The first collaborative exercise was performed to evaluate the performance of forensic glass analysis with five laboratories, members of the Asian Forensic Science Network (AFSN) Trace Evidence Working Group (TEWG), managed by the Forensic Chemistry Division at the National Forensic Service (NFS). The aim of this inter-laboratory collaborative exercise is to obtain the reliability and validity of their result, which is important for forensic laboratories. laboratories perform the elemental analysis for the glass collaborative exercise using XRF, SEM-EDS, and/or LA-ICP/MS. After the review of the glass collaborative exercise, some of actual crime cases involving forensic glass analysis will be delivered. With the high discrimination power, LA-ICP/MS is routinely applied for most of cases involving forensic glass analysis at NFS comparing known and questioned glass fragments if both of known and questioned glass fragments are present from evidence collected from the scene.

## Symposium 11

-환경 중 비표적분석 (Nontarget analysis) 동향-

SYM11-01

### Non-Target Screening: A powerful tool for selecting environmental pollutants

### Jeongae Lee\*, Hee Soo Pyo and Bong CHul Chung

Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology

\*Corresponding author: frans@kist.re.kr

An immense number of chemicals is produced, marketed, used by modern society and can be released into the environment through different pathways. Identification and quantitative determination of the emerging substances released into the environment through different pathways is still an analytical challenge for scientists since neither chemical nor spectral databases nor analytical standards are available. Gas and liquid chromatography hyphenated to a variety of accurate mass analyzers based on the use of high-resolution have been used for this purpose. We present an overview of the basic principles, promises and challenges of suspect and non-targeted screening (NTS) approaches current approaches based on high resolution accurate mass spectrometry (HRAMS) analysis, particularly based on software tools for data acquisition and data processing used for the identification of unknown the environmental pollutants. NTS has great potential for treatment assessment and pollutant prioritization within regulatory applications. We would like to introduce the main activities and especially harmonized protocols of the European Human Biomonitoring Initiative.

**keywords:** non-target screening, environmental pollutants, high resolution accurate mass spectrometry, harmonized protocols

#### SYM11-02

### LC-orbitrap MS를 이용한 하천수 중 미량유기오염물질의 non-target 분석

Non-target analysis of organic micropollutants in surface water using LC-orbitrap MS

### 이인정\*, 오진아, 황수민, 윤현정, 박근영, 강태구

국립환경과학원 물환경연구부
\*Corresponding author: ijlee@me.go.kr

산업의 발달과 국민 생활수준의 향상으로 사용하는 화학물질의 양이 크게 증가하면서 환경 중으로 배출되는 양 또한 증가하고 있으며, 이들 물질이 인체나 환경에 미치는 유해성에 대해 관심이 커지고 있다. 최근에는 의약물질이나 과불화합물과 같이 규제되고 있지 않던 신규오염물질(emerging contaminants)들이 하천에서 미량 검출되면서 수많은 유해물질로부터 안전한 수환경을 지키기 위한 효과적인 수질 모니터링 방법이 필요한 실정이다. 기존의 표적(target) 물질을 분석하는 방법으로는 수계에 존재하는 수많은 미지의 오염물질을 찾아내는 데 한계가 있으며, 비교적 최근에 화학구조가 알려져 있지 않은 많은 유해화학물질과 그 대사산물 등을 찾아내기 위해 suspect/non-target screening 방법을 적용하기 시작했다.

본 연구에서는 하천수 중에 존재하는 미지의 오염물질(unknown compounds)을 확인(identification) 하기 위해 분해능(resolution)이 좋은 LC-orbitrap MS와 Compound Discoverer 2.1(Thermo Scientific) 소프트웨어를 이용하여 non-target 분석을 수행하였다. 시료를 분석하여 얻어진 full scan과 MS/MS(ddMS²) 질량스펙트럼을 ChemSpider, mzCloud, mzVault와 같은 화학물질/질량분석 데이터베이스(DB)와 비교하여 분자구조와 물질명을 추정하였으며, 신뢰도를 높이기 위해 *in silico* 예측 fragment 이온과의 매칭비율, 검출빈도, 피크면적 등의 다양한 필터를 적용하여 18종의 물질을 확인하였다. 이러한 과정을 통해 환경 중 존재가 확인된 물질들은 표준물질을 확보하여 정성 및 정량 분석하여 최종적으로 확증(conformation)할 수 있으며, 확증된 물질들은 추가적인 target 분석을 통해 기존의 target 모니터링 자료와 함께 환경기준 설정 등 관리정책을 수립하는데 기초자료로 유용하게 활용될 수 있을 것이다.

SYM11-03

### 추정 · 비표적 분석을 이용한 환경대사체 분석

### 전준호<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>창원대학교 환경공학과 \*Corresponding author: jjh0208@changwon.ac.kr

일상생활과 산업현장에서 사용된 화학물질들은 다양한 경로를 통해 환경으로 유입된다. 이들 중유기화학물질들은 환경매체내에서 물리·화학·생물학적 반응을 거쳐 환경변환산물 및 대사체(e.g., transformation product, TP)로 변모한다. 환경오염물질의 위해성을 정밀하게 평가하기 위해서는 이들의 거동과 TP 존재 확인이 반드시 필요하다. 화학적 구조가 변화된 환경오염물질의 TP를 확인하기 위해서는 고분해능질량분석기(high resolution mass spectrometry)를 이용한 추정 및 비표적 분석 (suspect & non-target screening, SNTS) 기법들이 활용되고 있다. 본 연구에서는 LC-HRMS기반 SNTS 기법을 활용하여 수환경에 존재하는 농약, 의약품, 그리고 산업 화학물질의 TP를 확인하였다. 낙동강수계에 출현하는 대표적인 농약인 tricyclazole은 hydroxylation, S-oxidation, methylation 등의 반응을거쳐 7종의 TP로 변환되었다. 심혈관치료제인 valsartan의 경우 대부분 valsartanic acid 형태로 변환되어 환경에 유입되고 있는 것으로 판단된다. 한편, 과불화물질(poly-/perfluoroalkyl substances, PFAS)의전구체인 telomer alcohols(e.g, 6:2/8:2 FTOH)은 수처리 과정에서 saturated/unsaturated carboxylate 형태의 중간체(intermediates)를 거쳐 PFBA, PFHXA, PFOA 등으로 최종 변환되는 것으로 확인되었다. MS/MS fragment 해석을 통해 확인된 TP 분자구조에 대한 정보는 환경유기오염물질의 거동을 이해하고 환경위해성평가를 위한 기초정보로 활용 할 수 있다.

SYM11-04

### 표적/추정분석 결과의 통계기법 적용

이혜리<sup>1</sup>, 김형섭<sup>1</sup>\*, 서지원<sup>1</sup>, 전다래<sup>1</sup>, 허유정<sup>1</sup>, 신선경<sup>2</sup>

1/\*국립환경과학원 환경측정분석센터, <sup>2</sup>국립환경과학원 환경기반연구부 \*Corresponding author: hsupkim@koera.kr

국내외 국가기관에 의해 등록, 관리, 규제되고 있는 화학물질은 39만 종에 이르는 것으로 알려져 있 으며, 이들 화학물질은 다양한 산업활동 등에 따라 대기, 수질, 토양 등 환경으로 배출되고 있다. 이러 한 다양한 오염물질을 Online-SPE가 연계된 LC-Orbitrap/MS를 이용하여 분석하고, 그 결과를 통계적 기법을 이용하여 해석하고자 하였다. 연구지점은 농업, 산림, 도심 및 축산 등의 영향을 확인할 수 있 는 만경강과 동진강 수계에서 각 9지점씩 총 18지점을 선정하였다. 표적분석에서는 367종(농약류 315 종, 의약물질 52종)의 분석대상물질을 선정하여 Hypersil Gold aQ 컬럼(20 × 2.1 mm, 12 μm)이 장착 된 Online-SPE와 LC-Orbitrap/MS(Q Exactive Plus with Dionex Ultimate 3000-Q)로 분석하였다. 추정 분석은 시료의 질량분석 스펙트럼을 Compound discoverer 프로그램에서 MzClound, MzVault, ChemSpider 라이브러리을 이용하여 물질을 추정하였다. 연구지점에서 3월에서 6월까지의 시료 분석 결과 농약류 107종과 의약물질 25종이 검출되었으며, 검출농도는 정량한계 미만에서 최대 15.7 μg/L 로 검출되었다. 분석대상물질 중 metolachlor, tebuconazole, carbendazim, alachlor 등이 다소 높은 빈 도로 검출되었으며, bromobutide(LOQ ~ 15.7 μg/L), metazosulfuron(LOQ ~ 4.6μg/L), butachlor(LOQ ~ 4.5µg/L)의 농약류가 다른 분석대상물질보다 다소 높은 농도로 검출되었다. 추정분석 결과 melamine(멜라민 exalamide(살균제), furaneol(향료), 수지), metformin(당뇨병 치료제), 6-Hydroxymelatonin(멜라토닌 대사체)가 높은 빈도로 검출되었으며, metformin은 도심의 영향을 받는 전주천에서 다소 높게 검출되었으며, exalamide는 농업지역이 많은 신평천과 원평천에서 다소 높게 검출되었다. 지점과 검출항목과의 관계를 확인하기 위하여 heat map과 군집분석을 수행한 결과, 동진 강 상류와 만경강 상류 지점에서 유사한 결과를 보였으며, 각 지천내 지점이 유사한 결과를 보였다. 이러한 통계기법을 통하여 지점간 관계를 확인할 수 있었으며, 다성분 분석(표적) 및 추정분석의 방대 한 결과를 해석하기 위하여 통계기법이 유용하게 사용될 수 있음을 확인하였다.

# Symposium 12

-ICP-MS-

### SYM12-01

### Off axis ion optics study in the ICP(Inductively Coupled Plasma)-MS(Mass Spectrometer) using ion lens simulation

Sungwon Kang<sup>1</sup>, Ju Woo<sup>2</sup>, Yoon Jin Jeong<sup>1</sup>, Hun Lee<sup>1</sup>, Jin-geun Rhee<sup>1</sup>

<sup>1</sup>YOUNG IN ACE Co., Ltd.,

ICP (Inductively Coupled Plasma) MS (Mass Spectrometer) is a mass spectrometer that is widely used to analyze metal components. ICP MS is an instrument capable of analyzing almost all metal components.

Since ICP MS can detect even trace metal components, the sensitivity needs to be increased. In order to detect mainly the analyte ion components ionized in the input Ar plasma, the method mainly used by other major companies' equipment is equipped with an off-axis ion lens so that the ions passing through the sampler cone mainly pass only the ions through the characteristics of several ion optics. Through an off axis ion lens, ions must then be set to enter a beam approximately parallel to the axial direction of the next lens components.

When entering the collision/reaction chamber, argide components are removed by optimizing the incident position and velocity of ions, and only the most ion components to be analyzed must pass. Through this, the resolution at the detection stage is improved making it possible to detect ions even in trace amounts (tens of ppt to hundreds of ppt).

In this paper, we performed a simulation to find the condition that ions can enter parallel to the axial direction after the off-axis while maximizing the ion transmittance in the off-axis lens. The range of ion incident energy off-axis lens shape, and ion current range were examined through ion lens optics simulation to ensure that ions pass smoothly without colliding with the lens under certain conditions.

#### SYM12-02

### Characteristics of the inductively coupled plasma inside the interface lens system measured by the Langmuir probe

<u>Ju Woo</u><sup>1</sup>, Sung-won Kang<sup>1</sup>, Yoon-jin Jeong<sup>1</sup>, Hun Lee<sup>1</sup>, Hyun-sang Lee<sup>1</sup>, Nam-seok Lee<sup>1</sup>, Jin-geun Rhee<sup>1</sup>

<sup>1</sup>YOUNG IN ACE

Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (ICP-MS) was developed to measure the inorganic compounds. The plasma generated by 27.12 MHz radio-frequency passes through sampler and skimmer cones of sizes  $\varphi 1$  and  $\varphi 0.4$ , respectively. Custom lens system contributes to prevent from contamination of neutral gases and photons in the ICP. The langmuir probe was designed to test the properties of custom lenses. The probe consisted of a single 0.5 mm radius tungsten wire covering  $Al_2O_3$  sleeve and metal support structure. In order to observe the variation of the plasma characteristic corresponding to the position of each lens, metal support structure was designed by each lens position. In this study, the floating potential and ionic saturation current at each lens position were investigated using the current-voltage curve of ICP-MS.

#### SYM12-03

### Correlation method for high speed size determination of nanoparticles using ICP-MS

Jimin Shim, Y. H. Park and H. B. Lim\*

Dept of Chem, Dankook University
\*Corresponding author: plasma@dankook.ac.kr

ICP-MS has a lot of potential to detect nanoparticles owing to its outstanding capability for reliable quantification, size distribution and particle concentration. Recently developed single particle ICP-MS (sp-ICP-MS) has been demonstrated remarkable performance to various fields with limited applications. The limitations are clear in the viewpoints of analytical figures-of-merits, i.e., lack of reliable information such as reproducible size distribution, particularly, for the sizes near quantification limit and low particle concentration, and requirement of many parameters to be experimentally determined or assumed. And those eventually make practical application difficult.

In this concept, the size estimation model was recently developed in our lab and showed excellent demonstration for the nanoparticles of NIST standard Au, and SiO<sub>2</sub>. The model established the correlation of the integrated area of the peak to the cubic of particle radius through the data treatment based on Window Peak Selection and Gauss Fitting. Since the model greatly relies on the trueness of the correlation curve, sample preparation, peak selection, and the fittings are carefully controlled throughout the data handling process. Finally, iron oxide (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) nanoparticle was studied for further proof and practical application to semiconductor process. In summary, the developed method showed reliable performance for high speed analysis of nanoparticles which enable to do on-line monitoring of nanoparticles in the various manufacturing processes.

SYM12-04

### Ion transmission probability through a quadrupole mass filter depending on initial ion condition and rod misalignment

Kyu-Ha Jang<sup>1,\*</sup>, Sangyoon Bae<sup>1</sup>, Young Uk Jeong<sup>1</sup>, Ju Woo<sup>2</sup>, Sung-won Kang<sup>2</sup> and Nam-seok Lee<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Radiation Center for Ultrafast Science, Korea Atomic Energy Research Institute <sup>2</sup>YOUNG IN ACE

\*Corresponding author: kyuha@kaeri.re.kr

A quadrupole mass filter consisting of four parallel rods spaced equidistantly is a principal component of recent mass spectrometers due to the simple schematic and high capability to resolve the mass-to-charge ratio of ionized atoms or other charged particles. In spite of its simple physical geometry and obvious operating principle, ions behavior in the device is very complex to analyze. But it is still necessary to examine the possible degree of deviation from perfect operating conditions in the practical point of view. In this conference, ions transmission probabilities through a quadrupole mass filter will be presented. The probability are calculated with computer simulation at various initial ion conditions such as ion position, ion injection angle, ion velocity distribution and quadrupole mechanical misalignment. These calculated results on tolerance of each parameter will be helpful to improve the performance of quadrupole mass spectrometers.

### SYM12-05

### Real time analysis of VOC gases by Ion Molecule Reaction Mass Spectrometer (IMR-MS)

### 이남석

영인에이스(주) nslee@younginace.com

The importance of VOC gas analyses have rapidly being increased in modern societies with increasing interest for human health.

For the accurate quantitative analyses of trace gases including VOCs, we developed Ion Molecule Reaction Mass Spectrometer (IMR-MS), based on selected ion flow tube technology.

The performances of our ACE1100 IMR-MS have been tested by analyzing some VOC gases such as ethylene, benzene, toluene, etc. We tested dynamic mass range, linearity, precision, accuracy, and so on.

By using our ACE1100 IMR-MS, trace gases can be accurately analyzed in on-site and real time.

# LECO 분석과학자상 수상강연

### LECO 분석과학자상 수상강연

### Analytical science and technology in the safety assessment of hazardous substances in pharmaceutical products and discovery of bioactive natural products

### Seung-Hoon Baek\*

College of Pharmacy and Research Institute of Pharmaceutical Science and Technology (RIPST),

Ajou University, Suwon 16499, Republic of Korea

\*Corresponding author: shbaek@ajou.ac.kr

The safety evaluation of hazardous substances in pharmaceutical products and discovery of bioactive natural products has been the representative two axes of our research for the past 10 years. Analytical science and related technologies has clearly been the central tools in our researches, but considerations for design and use of analytical methods depend on the nature of projects. Because of toxicity and ubiquitousness, trace chemical residues has been the targets of safety evaluation in pharmaceutical and hygiene products. Quantitative chemical analysis for their contents is the first step for risk assessment study. Since the final assessment results impact on the regulatory action and product quality control standards, analytical methods should be established by considering the factors such as reliability of reference materials, acceptable performance characteristics, and measurement uncertainty estimation. Meanwhile, various separation and analytical technologies contributed to discovery and structural analysis of bioactive natural polysaccharides. Size-exclusion and ion-exchange chromatrography are the major purification tools for target polysaccharides from complex matrix of plant extracts. Physiocochemical properties and structure are assessed using HP-GFC, SEM, FT-IR, and NMR analysis. Of note, despite of absence of commercial reference standards, the monosaccharide composition and their pattern of linkage in the macromolecule can be deduced by cheimcal derivatization and GC-MS based identification and quantitation. This presentation discusses diverse applications of analytical technologies in our research group with representative examples.

### Keywords

Analytical science and technology; method validation; measurement uncertainty; safety assessment; structure analysis; polysaccharide

# 지올분석과학상 수상강연

### 지올 분석과학상 수상강연

### 대한민국에서의 분석과학과 연구장비산업

### 이덕희

### 한국분석과학기술원

대한민국은 일본 제국주의 식민지, 이어진 6.25 전쟁으로 인한 폐허 속에서 세계 G7권의 강국으로 변모하였다. 산업화, 민주화를 동시에 성공한 국가를 넘어 스포츠, 문화, 예술의 영역에서도 한국인의 국제적 위상은 놀라울 정도로 변화하였다. 이러한 변화를 가능케 한 것은 어느 한, 두 요인이 아니겠으나 가장 중요한 것을 꼽자면 과학기술에 대한 지속적인 투자였다고 할 것이다. 대한민국은 R&D 총량규모에서 세계 5위, GDP 대비 R&D 투자비율로는 세계 1위다. 문제는 과학기술에 대한 양적 투자로 선진국을 따라잡는데 성공했지만 세계를 선도하기 위한 준비가 부족하다는 점이다. 세계 시장을 주도할 수 있는 제품과 서비스를 만들어 내기 위해서는 과거에는 존재하지 않았던, 누구도 볼 수 없었던, 세계적 독창성이 있는 과학 기술이 뒷받침되어야 한다. 과학의 과학, 과학의 어머니라고 불리는 분석과학, 그리고 미세, 미지의 영역을 분석할 수 있는 새로운 연구장비가 절실하게 필요한 지점이다.

연구장비를 수출할 수 있어야 선진국이다. 무역, 경제, 군사력 등 여러 분야에서 대한민국이 세계 10 위권 이내에 들었지만 연구장비 산업에서는 아직 후진국이다. 해마다 가을이면 노벨상에 대한 기대가 간절하지만 번번이 무산되는 근본적인 이유 중의 하나는 아직 우리는 우리가 새롭게 개발한 연구장비로 분석한 연구성과를 내고 있지 못하기 때문이다. 선진국의 연구 장비를 수입해 연구할 때는 이미 그 장비가 필요해 개발한 선진국의 연구자에 비해 뒤져있기 때문이다. 분석과학 역량도 마찬가지다. 아무리개발 초기의 제품을 수입해 사용한다 하더라도 이미 늦은 상태이며, 아직 개발 단계에 있을 주변 장치와 연구 소모품의 공급이 원활치 않아 충분한 활용에 제약을 받는다. 결국 분석과학 역량의 강화와 연구장비 산업의 육성은 긴밀한 연계 속에서 추진되어야 할 것이다.

그런 측면에서 우리보다 앞선 나라들에서의 연구장비 산업 실태와 전략, 그리고 우리의 현실을 살펴 보고 분석과학과 연구장비산업 혁신의 방안을 모색해본다.

# **Early Bird Seminar**

### **Early Bird Seminar**

### Waters Cyclic Ion mobility의 원리와 응용사례 소개

### 최도영

워터스 코리아

Ion Mobility는 여러 분야에서 널리 쓰이고 있는 분석법으로 질량 분석기와 결합하면 분자의 구조와 m/z에 기반한 분리, 이성질체의 분리, 이온 충돌단면적 (CCS) 측정 등을 통하여 질량 스펙트럼 데이터의 신뢰도를 대폭 향상 시킬 수 있습니다. Cyclic Ion Mobility 장비는 기존의 장비와 다르게 Ion Mobility 공간이 원형을 이루고 있고 샘플의 복잡도에 맞춰 Mobility 분리능을 확장할 수 있습니다. 특히 mobility 를통해 분리한 이온들을 선택하여 저장 하거나 원치 않는 이온을 방출할 수 있고, 선택된 이온을 조각화한 후 Product ion 들을 추가로 mobility 분석을 진행 할 수 있는 Cyclic Ion Mobility 만의 획기적인 기능은 분석의 유연성과 역량을 크게 높일 수 있습니다. 이와 같이 강력한 분리능력과 특이적인 분석모드를 갖추고 있어 다양한 연구분야에서 활용 가능한 Waters의 SELECT SERIES Cyclic IMS 를 소개합니다.

## SK 머트리얼즈 소개

### SK 머트리얼즈 소개

### SK머티리얼즈의 소재 산업(반도체, Display, Battery) 분석기술 개발 방향

### 강선영

### SK 머트리얼즈

반도체, Display, Battery Device 는 공정 미세화에 따른 품질 불확실성 증가에 따라 "소재가 Device Mainstream 의 핵심요소"가 되고 있으며, 소재 단계에서의 극한의 품질관리와 이를 위한 분석기술의 고도화가 요구되고 있다. Device 단계에서 기존에 경험하지 못한 Defect 발생을 사전에 예방하기 위해선 소재 社는 고분해능, 고성능의 분석장비 운영은 물론 지속적인 신규 분석기술 개발을 통해 소재 단계에서의 선제적 품질 제어가 필수적이다. 따라서 정밀 분석기술로의 Depth 와 함께 분석기술간의 융합을 통한 Total 분석 정보의 확보가 요구된다.

SK머티리얼즈는 반도체 Gas 부터 Precursor, Photo 소재와 함께 Display 용 소재인 OLED 를 기반으로 Portfolio 의 확대, 음극재를 시작으로 하는 Battery 全 소재로의 확장을 진행 중이며, 각 소재 분 야에 필요한 고도화된 분석기술을 구축하고 Platform 化 하여 반도체, Display, Battery 소재 전 영역의 전문 분석기술을 내재화 하고 있다

특히 결함의 원인인 초극미량 Metal, Ion 은 물론 Organic Impurity 까지, ppb ~ ppt 수준의 함량 분석과 성분규명 기술을 확보하고 있으며, 단일 분자부터 고분자량 까지의 원료, 제품에 대한 미세구조, 극미량 조성분석의 기술과 함께 복합소재의 조성 별 분리와 성분구조 규명을 병행하여 Total 분석의 완성도를 높이고 있다. 또한 제품이 직접 담기는 용기의 재질, Interaction 등 Metallurgy 와 Chemistry 기반의 종합분석을 통해 Stability 확보는 물론 용기개발까지 진행되고 있다. 따라서 분석기술이 연구개발과 제조기술로 연계되는 Solution 을 제공하고 있다

금번 발표에서는 SK머티리얼즈의 소재 산업(반도체, Display, Battery) 분석기술 보유 현황과 개발 방향을 소개 함으로서 소재 강국으로 나아가는데 있어 분석의 역할과 미래 방향을 논하고자 한다

# PI급 구두 강연

### P I -01

### 환경규제(RoHS, REACH) 대응 위한 국제표준 및 CRM 개발 협력 사례 소개

Introduction to international standards & CRM development cooperation to cope with environmental regulations (RoHS, REACH)

### 정재학1★, 류건영², 김주양1

<sup>1\*</sup>한국분석과학연구소, <sup>2</sup>KOTITI시험연구원 \*Corresponding author: jh3370@naver.com

전기전자/자동차/공산품 등의 수출입시 유해물질 함유 여부 시험성적서에 대한 요구가 강화되었고, 관련 산업에서는 공급망 내 부품 및 완제품에 대한 친환경 제품 인증을 위한 유해물질 시험성적서가 필수적으로 요구된다. 최근 기업의 경우 ESG(환경·사회·지배구조) 경영활동 강화를 위해 플라스틱 폐기물 저감 및 재활용율 향상 등 Post-코로나 시대를 대응하기 위한 기업 움직임은 매우 활발하다. 이에 유해물질 시험방법 국제표준을 개발하는 IEC/TC 111(전기전자제품에서의 환경)에서는 2004년 WG 3을설립한 후 각종 국제환경규제 (RoHS/ELV/REACH) 대응을 위한 시험방법인 IEC 62321-series 표준을 활발히 개발하고 있는 상황이다. 이들 IEC 62321-series 표준은 IEC에서 대표적인 horizontal 표준으로서,각 국가마다 자국의 언어로 부합화 표준개발을 통해 전기전자/자동차/공산품/친환경/재활용 등에서 유해물질 함유 여부에 대한 기준 시험규격으로 채택하였다. 현재 한국 또한 KS C IEC 62321-1 ~ -10 표준 부합화를 완료하였으며,추가로 발간되는 IEC 표준에 대해서도 지속적인 KS 부합화가 진행중이다.현재 한국은 유해물질 시험방법 표준화 그룹인 WG(working group) 3와 JWG(Joint WG) 14(ISO/TC 61(플라스틱)/SC 5와 IEC/TC 111) 에서 공동 작업반장(Convenor)직을 수임하고 있다. 이들 그룹에서 발간 및 개발 중인 표준들은 현재 총 18개이며, 그 중에서 한국이 제안하여 표준기발을 주도한 표준안은 총 9개로, 이 중에서 Halogen, Phthalate, PAHs, HBCDD 물질들은 국제표준으로 발간되었으며, TCEP, BPA, SCCP/MCCP는 현재 한국에 의해 표준 개발(정량 및 스크리닝법)이 진행중이다.

이들 표준개발 과정 중 가장 중요하여 많은 시간이 소요되는 단계는 개발된 시험방법에 대한 IIS(International Inter-laboratory Study)라는 국제실험실간 비교검증이다. 이 결과를 토대로 시험방법에 대해서 표준내 본장(Normative)과 부록(Annex)의 위치가 결정된다. 그러므로 표준개발 시 Method validation 및 IIS를 위해서 정확한 결과값이 존재하는 CRM(RM)이 필요하며, IIS에 사용된 CRM(RM)의 정보는 발간되는 표준 내에 기술되므로 전세계에서 이 시험표준을 사용하는 시험분석자는 우선적으로 기술된 CRM을 활용하게 된다. 특히 한국은 KRISS의 협조로 표준개발에 큰 도움을 받기도 하였으며 현재도 활발하게 협력 중이다. 이는 유해물질/화학분석 분야 국제표준개발 리더십과 동시에 Made in Korea CRM에 대한 대외 국가 브랜드 인지도 향상에도 크게 기여할 것으로 판단된다.

Key words: RoHS, REACH, IEC/TC 111, IEC 62321-series, BPA, SCCP/MCCP, KRISS

### 참고문헌

- 1. 정재학 외, KATS 기술보고서 제102호 (2017.09.30.) "RoHS 2 환경규제대응 표준화 동향"
- 2. https://tc111.iec.ch/tc-activity/test-methods-of-substances/ "IEC/TC 111 Blog"

# 포스터 발표

### P-001 [환경]

### 도심 미세먼지 중 미세플라스틱의 정성 및 정량 분석

Qualitative and quantitative analysis of microplastics in urban Particulate Matters

### 김도운¹, 김주양¹, 정재학¹★,임용현²

1★한국분석과학연구소, 2한국표준과학연구원

\*Corresponding author: jh3370@naver.com

최근 전세계적으로 급증하는 미세플라스틱 연구결과 중에, 북극·에베레스트산 등 플라스틱 사용과 무관한 지역에서도 미세플라스틱이 발견되었는데 이는 미세플라스틱 밀도가 낮고 가벼워 공기를 통해서도 쉽게 이동되는 것을 알 수 있다. 이에 특히 대도시 내에 생활하는 시민들은 호흡하는 공기 중에 미세먼지와 함께 미세플라스틱이 어느 정도 존재하는가에 대한 관심이 매우 크다. 최근 국내 공기 중 미세플라스틱에 대한 연구는 2020년 서울시보건환경연구원 등에서 실내외 공기 및 강우 시료에 대해서 20  $\mu$ m 이상 크기에 대해서 검출결과를 발표하기도 하였다.

본 연구에서는 한국표준과학연구원 미세먼지 CRM 개발 시료(수도권 도심 속에서 샘플링한 평균 10 μm 크기의 미세먼지 시료)를 이용하여 공기 중 미세플라스틱 시험법 개발을 위해서, 분광법(μ-FT-IR, Raman) 및 열분해질량분석법(TED-GC-MS)을 활용한 미세플라스틱 정성/정량분석법을 개발하였다. 도심에서 샘플링된 미세먼지 시료의 특성상, 탄소성 에어로졸로 알려진 탄소성분(유기탄소 또는 원소탄소)등 다양한 유/무기 물질들이 혼합되어 있음에 따라, 미세플라스틱을 덮고 있는 유/무기막 제거를 위한별도의 물리 및 화학적인 시료전처리 과정이 필요함을 확인하였으며, 시료 전처리 방법에 따라서 분광법 간에서도 결과 차이를 존재함을 확인하였다. 본 시험방법에서 측정 입자 크기를 결정할 여과 필터는 17 μm 입경의 Si 재질 filter를 사용하였으며, 여과된 시료에 대해서는 대표적인 미세플라스틱 시험방법으로 사용되는 μ-FT-IR, Raman과 TED-GC-MS를 사용하여 시험결과를 비교하였다. 본 분석에 적합한 시료량은 분광법으로는 0.1 g, TED-GC-MS 방법의 경우에는 0.5 g 이상이 1회 분석에 적정한 시료량으로확인되었다. 이후 추가적인 시료간 균질성/안정성 평가를 통해서 최종적으로는 시판될 KRISS Urban PM CRM 중에 함유된 미세플라스틱의 정성/정량분석 결과를 제공하고자 한다.

한국분석과학연구소는 이외에도 도심 대기 중 강우시료에 대해서는 서울시 도심내 건물 옥상에 마련된 강수 샘플링설비를 통해서 강우 시 이벤트 별로 샘플링하여 미세플라스틱에 대해서 분광법(µ-FT-IR, Raman) 및 TED-GC-MS로 분석진행 중으로, 진행 결과/방향에 대해서 공유하고자 하며, 다양한 환경매질에서 미세플라스틱 정성/정량분석방법을 개발 및 모니터링을 진행할 예정이다.

현재 미세플라스틱 관련 수질분야의 연구논문 대비 시민들이 생활하는 실내 및 실외 대기환경분야 미세플라스틱 연구결과는 아직 부족하므로, 시험방법 개발 및 실태파악을 위한 관련 연구자들의 지속적 인 관심과 연구가 필요한 상황이다.

Key words: microplastics, CRM, PM10, μ-FT-IR, Raman, TED-GC-MS

### P-002 [환경]

### GC-MS와 GC-VUV를 이용한 먹는물 중 휘발성유기화합물분석법 비교연구

강혜림\*, 고혁준, 김은정, 강경구

제주특별자치도개발공사 R&D혁신센터 \*Corresponding author: khr92@jpdc.co.kr

본 연구에서는 가스크로마토그래프를 활용한 먹는물 중 휘발성유기화합물 분석에 있어 검출기 종류에 따른 차이를 비교하고자 하였다. 먹는물수질공정시험기준 「ES 05601. 3c 휘발성유기화합물-헤드스페이스-가스크로마토그래피」를 준용하여 가스크로마토그래피-질량분석기(gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS) 및 가스크로마토그래피-진공자외선분광기(gas chromatography-vacuum ultraviolet spectroscopy, GC-VUV)를 이용한 정도관리를 수행하였으며, 물 속의 휘발성유기화합물을 헤드스페이스법으로 전처리하여 분석에 적용하였다. 대표적 휘발성유기화합물로써 벤젠(benzene), 톨루엔(toluene), 에틸벤젠(ethylbenzene), 메타/파라/오쏘-자일렌(meta/para/ortho-xylene)을 대상으로 표준시료를 사용하였으며, 플루오로벤젠(fluorobenzene) 10  $\mu$ g/L을 내부표준물질로 하여 내부표준법으로 정량분석을 수행하였다. 정도관리를 위하여 방법검출한계(method detection limit, MDL), 정량한계 (detection limit, DL), 검량선의 결정계수(coefficient of determination,  $r^2$ ), 정밀도(precision), 정확도 (accuracy)를 평가하였다.

검량선은 5 ~ 200 μg/L 범위에서 선형 작성하였고, 결정계수는 GC-MS 0.999 ~ 1.000, GC-VUV 0.995 ~ 1.000로 나타났다. 방법검출한계는 GC-MS의 경우 0.379 ~ 0.447 μg/L(메타/파라-자일렌은 합산 0.977 μg/L)로, GC-VUV의 경우 1.661 ~ 4.318 μg/L로 확인되었으며, 정량한계는 GC-MS의 경우 1.206 ~ 1.425 μg/L(메타/파라-자일렌은 합산 3.111 μg/L)로, GC-VUV는 5.290 ~ 13.753 μg/L로 나타났다. 각 성분 30 μg/L에 대하여 GC-MS 이용 정량분석 시, 정확도 100.0 ~ 103.3 %와 정밀도 0.0 ~ 3.3 %로 나타났으며, GC-VUV 이용 시 정확도 93.3 ~ 100.0 %, 정밀도 3.3 ~ 17.9 %로 확인되었다.

위 결과를 통해 GC-VUV 보다 GC-MS 이용 시 상대적으로 낮은 농도까지 양호한 정량 분석이 가능함을 확인하였다. 다만, 메타/파라-자일렌과 같이 질량 스펙트럼에 차이가 없는 이성질체는 GC-MS로구별이 어려웠으며 GC-VUV로는 식별이 가능하였다. 질량분석기는 이온화된 질량 스펙트럼을 측정함으로써 데이터를 수집하므로 이성질체 구별에 어려움이 있으나, 진공자외선분광기는 파장대별 흡광 스펙트럼을 측정하므로 흡광 패턴 비교를 통해 이성질체 식별이 가능하다. 또한, 이러한 측정원리 차이는 진공자외선분광기 이용 시 수분에 의해 생길 수 있는 스펙트럼 방해를 방지하는 것으로 알려져 있다.

위의 결과를 종합할 때, 정량 감도와 정성 탐색의 일부 차이는 있으나 두 검출기 모두 물 속 휘발성 유기화합물 분석에 이용 가능함을 확인할 수 있었다. 본 연구를 통해 먹는물 중 휘발성유기화합물 분석에 관한 GC-VUV 이용 분석법과 공정시험기준에 따른 GC-MS 이용 분석법의 상호보완적 활용이 기대된다.

P-003 [환경]

# Multi-omics platform assessing toxicity of different types of polystyrene nano-particles

Mina Kim<sup>1</sup>, Hyung Min Kim<sup>1</sup>, Nguyen Phuoc Long<sup>2</sup>, Jung Eun Min<sup>1</sup>, Nguyen Hoang Anh<sup>1</sup>, Sun Jo Kim<sup>1</sup>, Sang Jun Yoon<sup>1</sup>, Sung Won Kwon<sup>1</sup>\*

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Seoul National University, <sup>2</sup>Research Institute of Pharmaceutical Sciences, Seoul National University \*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

The toxicity of nano-particles is emerging as a new concern. Despite the increased interest in the risk of nano-plastics, there is no established way to evaluate the effect of nano-plastics to soil organisms by multi-omics approach. In this experiment, a multi-omics platform observing molecular changes in the nano-polystyrene(PS) exposed Caenorhabditis elegans was established. All three different surface types of PS increased the oxidative stress of Caenorhabditis elegans and influenced reproduction and locomotion of them. However, we confirmed that the alteration in metabolome and lipididome of worms varies depending on the type of exposed PS surface. The significant alteration of metabolome was found in PS-N treated group, but few in PS-NH and PS-COOH treated groups. This metabolic disturbance in PS-N treated nematodes is correlated with the transcriptome dysregulation and the expression level of genes related with autophagy and longevity was changed. In conclusion, we developed the multi-omics platform that could prove that PS cause biological disturbance of nematodes. This platform could be applied to the evaluation of soil contamination derived from nano-particles.

This work was supported by the Bio-Synergy Research Project of the Ministry of Science, ICT and Future Planning through the National Research Foundation (NRF-2012M3A9C4048796).

### P-004 [환경]

# Alterations in lipid metabolism after acute and chronic exposure to nano-polystyrene in Caco-2

Suk Won Kim<sup>1</sup>, Sun Jo Kim<sup>1</sup>, Cheol Woon Jung<sup>1</sup> and Sung Won Kwon<sup>1,2,★</sup>

¹서울대학교 약학과, ².\*서울대학교 종합약학연구소 \*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

Comsumption and production of plastics have continously been increased worldwide. Especially, polystyrene is one of the most widely used plastic material nowadays and its accumulation in environment and bio-toxicity is becoming a huge concern. Herein, we performed several cell assays on Caco-2 cells under acute and chronic exposure conditions of nano plastics using 50 nm polystyrene. In acute exposure conditions, 10 and 80 µL/mL of polystyrene were treated for 24 hours, and in chronic exposure conditions, 0.1 µL/mL of polystyrene was treated for more than 1.5 months. Subsequently, we evaluated molecular changes in cells after exposure using metabolomics and lipidomics approaches. We confirmed that acute exposure to nano-polystyrene induces cellular metabolic changes, especially on steroid hormone biosynthesis and arachidonic acid metabolism. Expression levels of transcriptional regulators involved in lipid metabolism such as P-SREBP2 and N-SREBP2 are also significantly increased in acute exposure model. On the other hand, chronic exposure model showed altered fatty acid composition including increased SFAs and MUFAs. Our study suggests we should be alert to either acute or chronic exposure to polystyrene as it may bring about disturbance of lipid homeostasis. Also, further research including larger sample sizes or in vivo models are required to confirm specific pathways and toxic effects of polystyrene in mammallians.

This work was supported by a National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by the Korean government (MSIT) (NRF-2018R1A5A2024425) and the Bio-Synergy Research Project of the Ministry of Science, ICT and Future Planning through the National Research Foundation (NRF-2012M3A9C4048796).

### P-005 [환경]

# Development of analytical method for metals and metalloids in electronic cigarette using ICP-MS

# Hyoung-Joon Park, Seok Heo, Minkyoung Lee, Minsoo Kim, Changyong Yoon and Sunyoung Baek\*

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

\*Corresponding author: pinus19@korea.kr

Electronic cigarette has been considered as a safer alternative to conventional cigarette and the use of e-cigarette was quickly increasing despite uncertainties about their toxicity and health effects. The inhalation of metals and metalloids was associated with serious effects to smokers, including cancer, cardiovascular disease and neurotoxicity. Our purpose of this study was to develop the method to quantify 18 inorganic chemical elements in e-cigarettes using inductively coupled plasma and mass spectrometry (ICP-MS). Linearity of R<sup>2</sup> > 0.99 was secured about within the range of 1 to 20 ng/mL. The limits of quantification were below 6.8 and 98.7 ng/g. All elements showed a recovery of 80.9-119.8%, accuracy of 86.0-104.8%, and precision below 12.3%. The developed method was applied to 25 commercial products that were purchased from retailers in Korea. This analytical method could be suitable for the evaluation of contents of metals and metalloids in e-cigarette.

### P-006 [환경]

# Development of analytical methods for determining 3-hydroxy fatty acids and muramic acid in environmental samples using GC-MS and LC-MS

# Yoon-kyung Han, Gieun Hong, Yun-Cheol Na\*

Western Seoul Center, Korea Basic Science Institute, 150 Bugahyeon-ro, Seodaemun-gu, Seoul, 03759, Republic of Korea

\*Corresponding author: nyc@kbsi.re.kr

Inhalation of air-borne microorganisms containing bacteria, fungi and virus has been associated with the development of respiratory diseases. The microorganisms contain unique compounds not found elsewhere in nature, which can be used as environmental markers. In this study, we aimed to develop methods for detecting the presence of 3-OH FAs and muramic acid as such markers. Samples containing 3-OH FAs and muramic acid were hydrolyzed and esterified by heating at 85°C in 3 M hydrogen chloride solution in methanol overnight. For 3-OH FAs analysis, the hydrolysate was extracted with hexane and purified using silica solid phase extraction. Then the eluents were derivatized by silylation reaction for GC/MS analysis. For muramic acid determination, the hydrolysate in methanolic phase was dried and re-dissolved in methanol twice, followed by LC/MS measurement. Method detection limits, linearities and recoveries were evaluated for those markers. The developed methods suggest the techniques used in this study are sufficient to determine these biomarkers.

## P-007 [환경]

# Monitoring of Ticks in Hangang ecological Park

# Chae Kyu Hong\*, Yae Jun Son, Hee Soon Kim, Young Hee Oh

Department of Infectious Disease Research,

Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

\*Corresponding auther: ckhong1025@seoul.go.kr

The study was conducted for monitoring of presence of ticks around Hangang ecological Park, which is frequently visit-site by citizens and also, confirmed the severe fever with thrombocytopenia syndrome(SFTS) virus. Around 6 spots, we collected 1527 ticks by flagging method, and genetic analysis such as PCR was performed to test whether they have the severe fever with thrombocytopenia syndrome(SFTS). SFTS viruses

were not found in all individuals after PCR test. Some spots where wild ticks were collected a lot, quarantine measures have been recommended for citizens' safety, and we will continue to operate infectious disease-borne tick investigations in the future.

Keywords: ticks, severe fever with thrombocytopenia syndrome(SFTS), Hangang ecological park

## P-008 [환경]

# 석탄재(Coal Fly ash) 중 유해중금속 분석을 위한 인증표준물질 개발에 관한 연구

<u>김남준<sup>1,\*</sup></u>, 이준희<sup>1</sup>, 정창석<sup>1</sup>, 김홍석<sup>1</sup>, 정민종<sup>1</sup>, 곽주현<sup>1</sup>, 이재형<sup>2</sup>

<sup>1</sup>한국화학융합시험연구원 화학환경연구소, <sup>2</sup>한국화학융합시험연구원 소재부품연구소 \*Corresponding author: namjun26@ktr.or.kr

석탄재(Coal Fly ash, 비산재)는 시멘트, 콘크리트, 아스팔트, 비료 등 다양한 분야에서 제품의 원료로서 재활용 되고 있으며, 성토재 및 복토재 등 토양으로서의 재활용도 계속 늘어나는 추세이다. 석탄재의 수입 량 또한 계속 증가하고 있는데, 일본에서 수입되는 석탄재는 품질면에서 국내산 석탄재에 비해 중금속 함량이 높은 실정이다. 현재 국내에는 아직 그 품질을 정확히 분석하기 위한 석탄재를 매질로 한 중금속 표준물질이 부재한 상황이며, 대부분 미국 NIST(National Institute of Standards Technology)에서 제조한 석탄 및 토양을 매질로 하는 중금속 표준물질을 수입하여 사용하고 있다.

본 연구에서는 석탄재를 매질로 중금속 8종(Pb, Cu, Cr, Cd, As, Ni, Zn, Hg)을 첨가하여 저농도, 고농도의 2가지 농도로 미분쇄, 체가름, 혼합의 과정을 반복하여 인증표준물질(CRM, Certified Reference Material)을 제조하였고, 분석기기는 유도결합플라스마 방출분광분석기(ICP-OES), 불꽃원자흡광광도계(AAS), 직접수은분석기(DMA)를 이용하였다. 또한 NIST SRM 1633c(Trace Elements in Coal Fly Ash)를 이용하여소급성을 확보하였고, 일원배치 분산분석을 이용하여 균질성을 확인하고, 특성값 및 불확도를 산출하였다.

본 연구를 통하여 개발된 석탄재를 매질 물질로 하는 8종의 중금속에 대한 인증표준물질은 사용량이 크게 증가하고 있는 국내·외 석탄재 중 중금속 분석에 대하여 신뢰성있는 결과를 도출하는데 크게 도움을 줄 것으로 기대하며, 나아가 환경적인 측면과 국민의 보건을 증진하며, 제품의 규격 적합성 및 품질 향상 등 경제적·산업적인 측면에도 크게 기여할 수 있을 것으로 판단된다.

Key words: 석탄재, 비산재, 중금속, 인증표준물질, Fly Ash, Heavy Metal, CRM Acknowledgement: 본 연구는 "산업기술혁신사업(국가표준기술개발및보급-상용표준물질개발보급사업, 과제번호:20008407)"에 관한 연구 결과임.

### P-009 [환경]

# 열분해 방법(Py-GC/MS)을 이용한 미세플라스틱 정성 및 정량분석 방법 연구

장한솔, 이효영, 박선구, 김재우\*

(사)KOTITI시험연구원 \*Corresponding author: jw\_kim@kr.kotiti-global.com

미세플라스틱은 통상적으로 5 mm 이하 크기의 플라스틱을 뜻하고, 제조 과정에서 첨가된 가소제, 난연제 또는 산화방지제 등이 함유될 수 있다. 또한, 매우 작은 크기로 인해 하수처리 시설에서 잘 걸러지지 않아 수중 생물이 먹이로 오인해 섭취하고 먹이연쇄 과정을 거쳐 인간의 몸속으로 도달할 수 있다. 이러한 이유로 다양한 분야에서 미세플라스틱 분석을 위해 육안 분석, 분광 분석 및 열분해 분석 방법 등이 적용되고 있는데 이중 Py-GC/MS를 이용한 열분해 분석 방법은 N₂ 또는 He 분위기의 무산소 조건에서, 600 ℃ 이상의 고온으로 미세플라스틱을 열분해하여 생성된 열분해 생성물을 크로마토그래피(GC)로 분리 및 질량분석기(MS)로 검출한다. 해당 분석 방법은 파괴 분석법이지만, 크기 및모양과 관계없이 다양한 미세플라스틱에 대한 정성 및 정량분석을 동시에 진행할 수 있는 장점이 있다.

이에 본 연구에서는 미세플라스틱 표준물질을 각각 적절한 용매에 녹여 희석하고 건조한 후, 기기에 주입하는 방법으로 분석법을 확립하였다. 플라스틱 종류별로 고유하게 열분해 되어 생성되는 물질 중상대적으로 강도가 높은 특성 물질을 선정하여 확립한 분석 방법의 유효성 평가를 진행하였다. 이는 "화학적 시험방법의 유효성 확인을 위한 지침"에 제시된 절차에 따라 반복 측정을 통해 작성한 특성물질 검량곡선의 우수한 직선성(R²), 정확도, 정밀도, μg 수준의 낮은 검출한계(LOD) 및 정량한계(LOQ)를 통해 검증하였다. 본 연구 결과를 통해 Py-GC/MS를 이용한 미세플라스틱 열분해 분석법과 다양한 플라스틱에 적용한 결과를 소개하고자 한다.

Key words: Py-GC/MS, 열분해 분석, 미세플라스틱, 정성분석, 정량분석

Acknowledgement: 본 결과물은 환경부의 재원으로 한국환경산업기술원 "미세플라스틱 측정 및 위해성평가 기술개발사업"의 지원을 받아 연구되었습니다. (202000310009)

# P-010 [환경]

# XRD-XRF 연계 분석을 이용한 미세먼지 내 중금속이 포함된 상분석 및 발생원 규명

김성철, 이병현, 박영선, 원성옥\*

한국과학기술연구원 특성분석센터
\*Corresponding author: sowon@kist.re.kr

도시의 미세먼지는 주로 황산염, 질산염과 탄화물, 광물로 구성되어 있고 미량의 무기성분을 포함한다. 그중 중금속은 가장 적은 비중을 차지하지만, 미량으로도 인체에 미치는 영향이 크기 때문에 그조성과 함량, 발생 원인을 밝히는 것이 매우 중요하다. 특히 도시 미세먼지에서 미량의 중금속 성분은다양한 인공 배출원을 추적할 수 있는 근거가 되므로 원소 함량과 더불어 정확한 상(phase)분석이 선행되어야 한다.

본 연구는 미세먼지 내 중금속이 포함된 상분석을 통해 발생원을 조사하기 위하여 KIST 체육관 옥상에 원심력 집진기(cyclone)를 설치하고, 24시간 단위로 미세먼지를 포집하였다. 또한 자동차 배기가스, 브레이크 분진 등 도시 미세먼지 배출원 7종에 대한 미세먼지도 수집하였다. 대기 중 포집 미세먼지는 미량이고 상당 부분 비정질을 포함하고 있어 X-선 회절(XRD)을 이용한 상분석이 매우 어렵다. 따라서 X-선 형광분석(XRF)을 연계 활용하여 Na~U 영역의 원소 함량을 분석하고 이를 바탕으로 XRD 상분석을 시행하였다.

미세먼지 농도가 높지 않은 시기의 시료에서는 Si, K, Fe, Ca, Na, Al 등을 포함하는 광물이 대부분을 차지하고 있으며 비정질 함량이 높았다. 미세먼지 농도가 높았던 시기의 시료에서 XRD 데이터를 이용해 성공적으로 상분석을 할 수 있었고, XRF 결과를 종합하여 발생 원인을 추정하였다.

P-011 [환경]

# Suspect and non-target screening of emerging substances in four major river of Korea

Young Jae Joo¹, Hee Soo Pyo¹, Kyoung Heon Kim², and Jeongae Lee¹,★

<sup>1</sup>Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology <sup>2</sup>Department of Biotechnology, College of Life Sciences and Biotechnology, Korea University \*Corresponding author: frans@kist.re.kr

As society develops, many emerging compounds are produced, and these complex chemical compounds have been polluted to the living environment and can harm to human health. Therefore, it is necessary to regulate and monitor these substances. An integrated workflow based on liquid chromatography coupled to a orbitrap mass spectrometry (LC-orbitrap-MS) was developed and applied to detect and identify suspect and unknown contaminants in four major river of South Korea. In order to identify these compounds, raw water and purified water were pretreated by solid phase extraction and analyzed using LC-orbitrap-MS. The raw data were deconvoluted by aligning the peaks using PROGENESIS QI software. Tentative identifications were initially based on mass accuracy, plausibility of the chromatographic retention time, isotopic pattern and MS/MS spectral interpretation. In the process, data with an ANOVA p < 0.05 and a CV > 30 % were filtered to reduce the number of variables of more than 3,000 to 739. To find out the correlation between the two groups of samples, the data were imported to SIMCA software and the score plot was checked with partial least squares-discriminant analysis. Among them, the variables with the highest VIP and score value were selected, and each variable was ranked by giving a score calculated by abundance and detection frequency. As a result, substances such as pharmaceuticals, solvents, surfactants, emulsifiers, cosmetic materials and metabolic intermediates were searched by the library, and these compounds are known to mainly flow into surface water and affect humans and ecosystems. This study established the NTS methodology, and we plan to monitor the emerging substances and to acquire more data continuously.

keywords: non-target screening, emerging substances, purified water, raw water, LC-orbitrap-MS

P-012 [환경]

# Temporal Variability of Atmospheric Radon-222 Concentrations at Gosan Site of Jeiu Island

Jung-Min Song<sup>1</sup>, Hyo-Sun Yang<sup>1</sup>, Won-Hyung Kim<sup>1</sup>, Chang-Hee Kang<sup>1,★</sup>, S. Chambers<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University
<sup>2</sup>Australian Nuclear Science and Technology Organisation
\*Corresponding author: changhee@jejunu.ac.kr

Radon-222 is a naturally occurring unreactive, radioactive gas that is poorly soluble in water. To a good approximation it is derived solely from ice-free, unsaturated land surfaces (soil and rocks), and its only atmospheric sink is radioactive decay. In conjunction with other radionuclide measurements, such as <sup>210</sup>Pb, radon data provide a useful constraint for the evaluation of air transport models and the identification of global atmospheric conditions. In this study, the ambient background level of atmospheric radon at Gosan Site in Jeju Island was measured using a real-time monitoring system during 2020, in order to evaluate the background level and timely variation characteristics of atmospheric radon. The annual mean radon concentration was 2622±1144 mBg/m³ during the studying period. In seasonal comparison, the order of the mean concentrations was as winter  $(3311\pm3195 \text{ mBq/m}^3)$  > fall  $(3235\pm3106 \text{ mBq/m}^3)$  > spring  $(2307\pm2100 \text{ mBq/m}^3)$  > summer (1732±1606 mBg/m<sup>3</sup>), showing relatively high in winter and low in summer season. The monthly mean concentrations were in the order of Feb > Oct > Jan > Mar > Nov > Dec > Jun > May > Jul > Apr > Aug, resulting that the highest concentration (3536 mBq/m<sup>3</sup>) on February was more than 5.2 times as the lowest (674 mBg/m<sup>3</sup>) on August. Meanwhile the hourly concentrations have increased during the nighttime, showing 2983 mBg/m<sup>3</sup> at around 6 a.m., and relatively decreased during the daytime, showing 2252 mBg/m<sup>3</sup> at around 3 p.m. Based on cluster analyses of air mass back trajectories, the frequencies of air mass moving from The North China continent, The East China continent, the Korean peninsula, and the North Pacific Ocean were 16, 39, 25, 19%, respectively, and the ambient radon concentration (2947 mBq/m<sup>3</sup>) was quite high by the air masses moving from china continent. On the study of continental fetch analysis, the radon concentrations were high when the air mass was moved from the Asia continent to Jeju Island, on the other hand, those values were low when it was moved from the North Pacific Ocean.

P-013 [환경]

# Size Determination of Iron Oxide Nanoparticles Using Modified Single Particle ICP-MS

<u>심지민¹</u>, 임흥빈²,★

<sup>1,2,\*</sup>단국대학교 화학과 \*Corresponding author: plasma1004@gmail.com

One of the most important concerns in the semiconductor production process is particle contamination management. For this, various techniques, such as SEM, TEM, and ICP-MS, have been used in the field. Among them, ICP-MS provides a lot of potential to achieve the purpose since it has outstanding capability for reliable quantification, size distribution and particle concentration determination. Iron oxide particle is one of the frequently observed contaminants in the manufacturing process. Nevertheless, it is difficult to determine it due to severe polyatomic interference and poor sensitivity in ICP-MS.

The size estimation model recently developed in our lab showed excellent correlation of the integrated area of the peak to the cubic of Au particle radius through the data analysis based on Window Peak Selection and Gauss Fitting. In this work, iron oxide (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) nanoparticles was studied for further proof and practical application. Since aggregation was extremely critical for the iron oxide nanoparticles, which deteriorated the accuracy of size determination, the influence of sonication time was seriously evaluated for the sample preparation. As the sonication time increased, the FeNPs were dispersed well in the solution, but their average intensity of the peaks tended to be decreased due to the appearance of many low intensity peaks caused by particle cracking. Therefore, the sonication time was optimized at 15 min for 5 and 10 nm and 5 min for 30 nm of FeNPs. The developed size estimation model showed good correlation of known particle size with corresponding integrated peak area, of which the obtained regression coefficients of R2 were in the range of > 0.9991. The obtained correlation function of  $y = ax^3 + b$  or  $\sqrt[3]{(y - b)} = ax$ , can be used as a tool for fast determination of unknown particles in the process, indicating the great opportunity for on-line monitoring. In order to achieve such a high performance in the production line, blank subtraction and uncertainty of calibration process was inevitably studied, so the developed method can achieve high reliability and eventually apply to control the particle impurities in the semiconductor manufacturing process.

## P-014 [환경]

# Improved extraction of lipids from Atlantic salmon tissues and quantitative determination of fatty acids using GC-MS

Thi Hoai Thu Mai<sup>1</sup>, Aram Jo<sup>1</sup>, Hyerim Kim<sup>1</sup>, Seoyoon Choi<sup>1</sup>, Jaeseok Choi<sup>2</sup>, Hekap Kim<sup>3,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kangwon National University
<sup>2</sup>Environmental Research Institute, Kangwon National University
<sup>3</sup>School of Natural Resources and Environmental Science, Kangwon National University

\*Corresponding author: kimh@kangwon.ac.kr

The aim of this study was to modify and improve the lipid extraction method and optimize derivatization techniques for fatty acids analysis from Salmon tissues. Fresh salmon samples were separated and dried using a freeze-drier, and used as the material to produce lipids. The objective of the research is to evaluate the effect of the different ratio between denaturing solvent and extraction solvent (1:10, 2:10, 3:10 and 5:10), the optimization of extraction solvents (methyl tert-butyl ether and ethyl acetate) for lipid production in salmon tissues and to analyze the amount of fatty acids in the extracted lipids. The distribution of different fatty acids within the lipids was achieved after derivatizing by methanolysis at 60 °C for 5, 10, 20, 30, 60 and 120 min to produce fatty acid methyl esters (FAME). FAMEs from extracted salmon lipids were analyzed by Gas Chromatography - Mass Spectrometry (GC-MS). The results show that the highest yield of produced lipids was with the ratio of 3:10 denaturing solvent to extraction solvent; and the yield of the total lipids obtained by ethyl acetate was higher than MTBE. In twelve salmon tissue samples, the contents of EPA ranged from 0.2 mg/g to 6.5 mg/g; and the contents of DHA ranged from 1.6 mg/g to 37.6 mg/g. The results also demonstrate that salmon tissues contain 12.9 - 37% more polyunsaturated fatty acid (PUFA) in lipid fraction; and the composition of unsaturated fatty acids is more than saturated fatty acids. Statistical analysis indicates that the recovery of fatty acids from tissue samples by the simplified method is significantly higher than that by the traditional method, but there is no difference in relative fatty acid composition between the two methods. This simplified method can significantly save time and materials, and reduce the potentials of sample loss and contamination. In conclusion, our proposed method was effective and fatty acids in the extracted lipids were identified.

### P-015 [환경]

# Gas chromatographic determination of volatile N-nitrosamines in water after modification to fluorine-containing derivatives

# Thi Hoai Thu Mai<sup>1</sup>, Hekap Kim<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kangwon National University
<sup>2</sup>School of Natural Resources and Environmental Science, Kangwon National University

\*Corresponding author: kimh@kangwon.ac.kr

The aim of this study was to refine and develop a method for determination of N-nitrosamines in water using gas chromatography coupled with electron capture detection after derivation to high sensitivity, short analysis time and low cost. The method employed liquid-liquid extraction (LLE) for extraction of nitrosamines in drinking water. NAs were derivatized with the pentafluorobenzensulfonyl derivatives as secondary amines (SAs) after denitrosation with hydrobromic acid-acetic acid to produce the corresponding SAs. The GC-ECD parameters included the inlet temperature, the detector temperature and the makeup gas flow rate, which were optimized to be 280 °C, 300°C, and 30 mL/min, respectively. The extraction efficiency ranges from 83.7 to 100 % for NAs extraction. Calibration curves were linear in the range of 1 to 30 ng/L with the coefficient of determination  $(r^2) > 0.99$ . The method detection limits ranged from 0.57 to 2.27 ng/L for the analytes. The recovery at a concentration of 5 ng/L ranged from 92.9 to 110 %. These results indicate that the proposed method can be satisfactorily applied to the determination N-nitrosamines in drinking water, groundwater and wastewater treatment plants effluent samples.

### P-016 [환경]

# Determination of gaseous and particulate N-nitrosamines in the atmosphere using gas chromatography coupled with electron capture detection

# Thi Hoai Thu Mai<sup>1</sup>, Hekap Kim<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kangwon National University <sup>2</sup>School of Natural Resources and Environmental Science, Kangwon National University \*Corresponding author: kimh@kangwon.ac.kr

The aim of this study was to refine and develop a method for determination of N-nitrosamines in the atmosphere using gas chromatography coupled with electron capture detection after derivatization to high sensitivity, short analysis time and low cost. NAs were derivatized as SAs after denitrosation with hydrobromic acid-acetic acid to produce the corresponding SAs. 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,10min,andmethyl tert-butyl ether (MTBE), respectively. This study was performed to analyze the NAs in the atmosphere for the particle phase and the gaseous phase. Samples were collected from the two sites. A total of 25 samples were collected from June to September in 2021. 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 florisil 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 6 to 42 pg with the coefficient of determination  $(r^2) > 0.99$ . The method detection limits ranged from 2.76 to 8.23 pg for the analytes. The recovery at a concentration of 42 pg ranged from 87.7 to 111% on the particle nitrosamines; and from 82.1 to 103% on the gaseous nitrosamines. The mean concentration of the particulate NDMA, NMEA, NDEA, and NDPA were  $0.6\pm0.06 \text{ pg/m}^3$ ,  $0.5\pm0.02 \text{ pg/m}^3$ ,  $0.78\pm0.05 \text{ pg/m}^3$ , and  $0.84\pm0.05 \text{ pg/m}^3$ , respectively. These results indicate that the proposed method can be satisfactorily applied to the determination N-nitrosamines in the atmosphere.

P-017 [환경]

# 판상 건축자재 절단면으로부터 방출되는 휘발성 오염물질 평가를 위한 시험방법 개발 - 절단면의 밀봉 비율과 방법에 따른 방출특성 평가

박준호<sup>1</sup>, 홍수정<sup>1</sup>, 최임성<sup>2</sup>, 김만구<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>강원대학교 환경융합학부 에코환경과학전공, <sup>2</sup>(주)아람기술이앤지 \*Corresponding author: mgkim@kangwon.ac.kr

건축자재에서 방출되는 휘발성오염물질들은 주로 방출시험 챔버법을 통해 평가된다. 현행 방출시험 챔버법들은 알루미늄 호일이나 테이프 등으로 절단면을 밀봉한 후 자재 표면으로부터 방출되는 휘발성 오염물질을 측정한다. 그러나 휘발성 오염물질은 건축자재의 표면보다 절단면에서 많이 방출되며, 실제 자재를 시공 시 절단면이 노출이 되기 때문에, 절단면의 영향을 고려하지 않고서는 정확한 실내공기질 평가라고 하기 어렵다. 정확한 평가를 위해 건축자재의 표면과 절단면으로부터의 오염물질 방출을 구분 하는, 절단면의 영향을 반영한 시험법이 필요하다. 절단면의 영향을 반영하기 위한 연구로, 절단면 밀봉비율에 따른 휘발성 오염물질의 방출특성을 평가하는 방출 챔버 시험이 이루어졌다. 방출 챔버시험의 조건은 ISO 16000-9를 따랐으며, 시료는 16.5x16.5x18 mm 의 LPM-MDF 를 사용하였다. 시험편 조건은 6가지로, 절단면 밀봉 비율로 나타내었다. 절단면 밀봉에는 알루미늄 저방출 테이프가 사용되었다. 절단면을 밀봉하지 않은 시험편을 밀봉율(Sealing rate) 0 %, 절단면을 밀봉한 면수에 따라 각각 25 %, 50 %, 75 %, 100 %로, 비율로 나타내었고 절단면을 모두 막고 표면 중앙에 1 cm의 구멍을 낸 천공 시험편은 노출된 절단면 비율을 계산하여 95 %로 나타내었다. HCHO와 TVOC를 채취하여 분석하였고, 결과를 방출강도로 나타내었다.

Sealing rate 25 %, 50 %, 75 %, 95 % 시험편의 HCHO는 7일차에서 Sealing rate 0 % 의 방출강도보다 각각 약 1.24배, 1.43배, 2.18배, 3.57배 높게 나타났으며, 28일차에서는 1.23배, 1.59배, 2.28배, 3.16배 높게 나타났다. 또한, 모든 방출기간에서 이와 비슷한 결과를 타내었다. 이는 HCHO의 경우, 절단면을 밀봉할수록 노출된 면으로 내부 오염물질이 더 많이 방출됨을 의미한다. TVOC의 경우는 7일차에서는 1.8배, 1.13배, 0.85배, 2.96배로 서로 다른 방출강도를 나타내었으나, 28일차의 경우, 1.17배, 1.05배, 1.01배, 3.36배로 Sealing rate가 95 %인 천공시료를 제외하고는 비슷한 방출강도 비율을 나타내었다. 이는 14일차 이후부터 비슷하게 나타났다. 이는 TVOC의 경우 14일 이후에는 대부분의 방출이 이루어져 절단면 밀봉율에 상관없이 비슷한 방출강도를 나타냄을 의미하며, 천공 시험편의 경우는 노출된 절단면의 면적이 매우 적고 새로 만든 절단면이기 때문에 방출량이 높아, 강도가 높게 나타난 것으로 사료된다. 따라서, TVOC의 경우는 절단면 밀봉율을 고려하지 않아도 되지만, HCHO의 경우에는 절단면 밀봉율에 따른 영향을 고려해 주어야 할 것으로 판단된다.

절단면의 영향을 반영하는 시험방법 개발을 위해 밀봉 비율에 따른 TVOC와 HCHO의 방출특성을 확인 하는 것 외에, 절단면 밀봉 방법에 따른 방출특성의 자료도 필요할 것으로 판단된다. 현재 자재의 절단면 부하율은 같고 밀봉 방법이 다른 조건의 방출시험이 진행 될 예정에 있다.

# P-018 [환경]

# 냄새 원인 물질 규명을 위한 GC/FID/FPD/ODP 개발

유환민, 서은빈, 김만구\*

강원대학교 환경융합학부
\*Corresponding author. mgkim@kangwon.ac.kr

FID는 모든 유기화합물에 민감하며 일반적으로 탄화수소에 대해서 감도가 가장 높고 MS와 비슷한 패턴을 이용하여 비교할 수 있으며, FPD는 황 화합물에 대하여 선택적으로 높은 감도를 나타내기 때문에 냄새원인 물질인 O, N, S 중 냄새를 많이 발생하는 황 검출에 용이하다. ODP는 사람의 후각을 이용하여 냄새 강도를 나타낼 수 있기 때문에, GC 분리 컬럼의 출구에 시료 분배 장치인 crosspiece를 이용하여 분리된 시료가 세 가지 검출기에 도달하도록 하였다. 그리고 dead volume을 없애기 위해 DUB-1-S(Bulkhead union 1/16 ")을 사용하여 제작하였으며 짧은 컬럼을 사용하여 검출시간을 줄였다.

ODP는 sniffing port, humidifier, ODP 신호기로 이루어져 있으며 1/8" SS Union을 이용하여 OVEN 속 컬럼의 온도와 밖으로 나온 ODP 컬럼의 cooling point를 없애기 위해 열선을 이용하여 이송관을 제작하였다. 그리고 코의 점막의 피로로 인한 건조함을 완화하고자 냄새 감지 강도에 영향을 주지 않도록 humidifier air는 120 ml/min으로 흘려주었다.

각각 검출된 신호는 Autochro Data Module 2대를 이용하여, AUTOCHRO-WIN 프로그램을 통해 FID와 FPD의 크로마토그램과 ODP의 Olfactogram을 모니터에 나타내어 동시 분석할 수 있도록 하였다.

개발된 GC/FID/FPD/ODP를 오래 사용된 마스크의 이취 분석에 적용시켜, 넓은 스펙트럼의 냄새강도를 통해 미지의 이취에 대한 원인 물질 규명과 이를 이용하여 제품의 문제점 개선에 유용하게 사용될수 있을 것이다.

### P-019 [환경]

# 극한상황에 적용 가능한 다목적 원격 시료 채취장치의 성능평가

# 김여정, 김만구\*

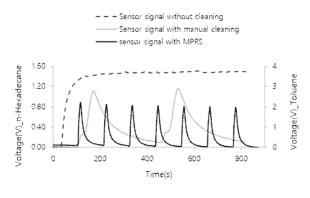
강원대학교 환경융합학부 \*Corresponding author: mgkim@kangwon.ac.kr

화학물질 취급 장소에서의 안전사고, 테러 혹은 화재 등의 극한상황의 현장에서 적용가능한 시료 채취 장치를 개발하였다. 이 장치는 원격 조종을 통해 무인으로 사용할 수 있어야 하고 측정자가 원하는 임의 의 시간과 장소에서 시료 채취가 가능해야 하며 현장 시료의 종류와 농도를 즉각 확인할 수 있는 검출기 를 사용한 시료 도입 등 다목적으로 사용할 수 있게 개발되고 있다.

시료 채취의 원리는 Molecular sieve 5A와 블루투스 송수신 모듈을 이용하는 솔레노이드 밸브를 이용한 에어커튼이다. 검출기로는 반도체식 센서를 이용한다. 전용 프로그램에 입력한 시료의 채취와 차단의 시퀀스에 따라 외부 시료는 센서에 도달하여 검출되거나 에어커튼에 의해 차단된다. 에어커튼을 만드는데 필요한 정제 공기는 별도의 외부 장치 없이 흡입한 외부 시료의 일부를 흡착제를 이용해 재활용하여 사용한다.

이 연구에서는 장치의 성능을 센서의 시간적 분해능 개선과 사용시간의 측면으로 평가하였다. 실험은 극한 상황의 예시로 고농도 상황을 가정하여 수행하였으며 VOCs의 대표 물질로 Toluene과 Hexadecane을 선택하였다. 고농도의 물질이 존재하는 현장에서 센서를 사용할 때, 센서는 고농도의 시료에 의해 포화되어 정상적인 응답 능력이 저하돼 시료 도입 후 정제된 공기로 클리닝을 해주어야 영점을 회복한다. 그러나 현장에서 사람이 직접 정제공기를 제공하기엔 여러 제약이 있다. 이와 같은 시료 측정 방식의 한계점을 다목적 원격 시료 채취장치를 이용하여 개선할 수 있다. 개발한 장치는 기기 자체에서 정제공기를 제공할 수 있으며, 농도에 따라 시료의 유입시간을 조정해 도입되는 시료의 절대량을 조절할 수 있다.

시료도입 절대량 조절과 클리닝 조작으로 센서의 영점 회복시간을 현저하게 단축시킬 수 있었다. 아래그림과 같이 시료에 직접 노출된 센서의 경우 포화되어 연속측정이 불가능했으나 60 s 시료도입과 클리닝단계를 추가하여 영점 회복시간을 300 s로 할 수 있었다. 개발된 장치를 사용하면 시료도입 시간의 조절으로 영점회복시간을 100 s로 줄일 수 있었다. Molecular sieve 5A는 대도심에서의 VOC 허용농도 하에서 약 206시간 가동 시 파과점을 보였으며 이는 곧 장치의 사용시간을 나타낸다. 장치의 규격은 20 cm × 20 cm × 10 cm 로 추후 로봇에 다목적 시료 채취장치를 장착해 극한 상황에서 미지의 화학 물질을 빠르게 감지하고 안전한 사후 처리를 수행할 수 있을 것으로 기대된다.



### P-020 [환경]

# Development of highly sensitive analytical method for measuring predictive biomarkers of preterm birth using HS-GC-MS/MS and LC-MS/MS

# Ji-Youn Lee, Sun Koung Joung, Sang Beom Han\*

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

\*Corresponding author: hansb@cau.ac.kr

The incidence of preterm birth (PTB) is over 10% worldwide. PTB is the second most common cause of neonatal death in the world and the most common cause of sudden infant death in middle- and high-income countries. Environmental factors, including the microbiome, are known to be one of the most important factors in PTB, while maternal and fetal genetics and gene-environment interactions play a clear role in determining gestational age. It is known that the vaginal microbiome dysbiosis affects the metabolite profile of cervicovaginal fluid (CVF) and the gestational period of human pregnancy. Investigation of PTB associated with metabolites of vaginal microbiome dysbiosis has already been reported using nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy. Therefore, in this study, among metabolites of CVF, trimethylamine N-oxide (TMAO) and glycolic acid, which are biotransformation derivatives of trimethylamine produced by bacterial strains, were analyzed by liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS). And alcoholic metabolites (methanol, ethanol and i-propanol) and acetone produced by bacteria were analyzed by headspace-gas chromatography-tandem mass spectrometry (HS-GC-MS/MS). Analytical method validation was performed according to Ministry of Food and Drug Safety (MFDS) guidelines for specificity, linearity, accuracy, and precision. Finally, the developed method was applied to 30 PTB samples and 60 term birth (TB) samples. The method proposed in this study is applied to various CVFs of PTB and TB and is expected to be of clinical help to those who are preparing for pregnancy.

Keywords: PTB (preterm birth), TB (term birth), CVF (cervicovaginal fluid), HS-GC-MS/MS (headspace-gas chromatography-tandem mass spectrometry), LC-MS/MS (liquid chromatography-tandem mass spectrometry)

### P-021 [환경]

# Influence of channel thickness and flow rate on fractionation efficiency (FE) of a middle-scale full feed depletion mode-SPLITT fractionation (FFD-SF)

# SuJong Lee, Meiyu Zhang, Da Wang, Jaeyeong Choi and Seungho Lee

Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

SPLITT fractionation (SF) is a separation technique that can divide a particle sample into two size fractions based on the cut-off diameter ( $d_c$ ). The conventional mode of SPLITT has two inlets, one is for injecting the sample and the other is for introducing the carrier liquid. Both an ISP (Inlet splitting plane) and an OSP (Outlet splitting plane) exist in the conventional mode, which result ins eparation of the sample, producing two fractions: fraction-a (containing particles smaller than  $d_c$ ), eluted from the bottom outlet.

Another mode, which was used in this study, is the full feed depletion mode (FFD). Unlike the conventional mode, there is no inlet for introducing the carrier liquid, and thus there is no ISP in the FFD mode. The advantage of FFD mode is that the sample is not diluted because the carrier liquid is not introduced, which is useful when separating samples with low concentrations such as environmental samples.

Fractionation efficiency (FE) is a measure of the separation performance of SF, and sample recovery shows the efficiency of separation and commercial potential. Previous study using a large-scale splitter-less FFD-SF showed the FE of fraction-a increased as the channel thickness increased, and the FE of fraction-b increased as the flow rate increased.

In this study, a new middle-scale FFD-SF system was setup with the channel length of 30 cm and the channel width of 6 cm, and then the influence of the channel thickness and the inlet flow rate on the separation performance for polyurethane (PU) was investigated. Total flow rates were 60, 80, or 100 mL/min, and the channel thickness was controlled using a Mylar spacer with the thickness of 100, 300, or 500  $\mu$ m, and  $d_c$  was set at 7  $\mu$ m in all experiments.

Results showed that the new middle-scale FFD-SF system presented in this study can be useful for the application of SF for the separation of various micron-sized particles.

# P-022 [환경]

# 이어쌀을 이용한 미세플라스틱 대응형 생분해성 고분자의 가공기술 특성분석에 관한 연구

전병준<sup>1,\*</sup>, 박재민<sup>1</sup>, 선일식<sup>2</sup>

<sup>1</sup>다윈그룹(주), <sup>2</sup>한국화학융합시험연구원 \*Corresponding author: jeuse666@dawin99.com

석유계 플라스틱은 폐기단계에서 대기오염과 수질오염에 이은 제3의 산업공해로 토양과 해양오염의 주범이 되고 있으며 처리소각 시 발생하는 다이옥신 등 유해가스는 인간과 자연 환경에 심각한 위협을 초래하고 있으며 최근 해양에 투기된 플라스틱은 연간 수십만 톤에 달하여 미세플라스틱이 지속적으로 생태계에 축적되면서 먹이 사슬에 따른 인간건강을 크게 위협하고 있는 실정이다. 따라서 국제적으로 선진 각국에서는 포장재 및 식품용기등의 생분해성 플라스틱 사용을 의무화하는 추세이며 실용화도 활발히 추진되고 있다.

한편 국내에서는 쌀 의무수입에 따른 잉여쌀의 재고 및 비축량 증가에 따라 연간 수천억의 관리 비용이 증가되고 있어 경제적인 활용 및 소비가 필요한 시점이다. 이 연구에서는 생분해성 천연소재인 쌀전분, 사탕수수, 카사바등의 곡물유래 물질과 생분해 합성고분자(PLA, PBAT, PBS 등) 및 가소제, 활제, 분산제, 열안정제, 커플링제 등의 첨가제를 조합하여 신규 화합물인 생분해성 고분자 조성물을 개발하는 것으로 생분해성 소재를 전처리한 다음, 생분해성 고분자의 물성보강 및 상용성 증대기술을 적용하고 적용 소재별 원료의 그레이드를 조정하였다. 제조공정에서는 천연물 유래 고분자의 특성 및 적용소재별 분자량, 입도 등을 제어하는 공정단계 이후에 이종간 폴리머의 결합을 유도하는 고속 배합제조 기술을 적용하고 최종 단계에서 고분자 Alloying 및 Grafting 결합을 통한 혼련 복합화 기술을 적용하여 잉여쌀을 이용한 미세플라스틱 대응형 생분해성 고분자의 성형 및 가공기술을 완성하였다. 주요 핵심기술에 대해서는 분자량 및 입도제어, 점성의 강화, 수분제거를 위한 흡착 및 촉매결합에 대한 특성분석 등을 확인하였으며 기존 생분해성 고분자 대비 비교적 저온에서 생분해가 가능함을 확인하였다.

# P-023 [환경]

# 공정 제어 및 관리를 위한 실리카 연속 모니터링 시스템

# 전문환, 정헌상\*, 박종택, 김병갑, 이상민

(주)씨맥 기업부설연구소 \*Corresponding author: cmac2531@gmail.com

최근 그린 뉴딜 정책 시행에 따라 기후 변화 대응 및 저탄소 사회로의 전환에 대한 국민적 관심이 증대되고 있으며, 이에 환경부는 탄소 중립, 기후 변화 대응, 스마트 상수도 관리체계 도입 등을 통하여 환경에 대한 신뢰도 향상을 위해 노력 중이다.

이산화규산은 일반적으로 실리카라고 칭하며 자연계에서 두 번째로 많은 양이 존재하는 물질로 알려져있다. 수중에는 약 30 mg/L 이하의 실리카가 함유되어 있으나 해수에는 1,000 mg/L 이상의 실리카도 함유 될 수 있다.

실리카는 보일러 급수 중 칼슘 성분과 결합하여 규산칼슘을 형성하고 알루미늄 이온과 결합하여 스케일을 형성하며 잔류 경도가 없는 경우에도 실리카 단독으로 석출이 가능한 물질로 실리카 함유량이 많은 스케일의 경우 경질성으로 기계·화학적 방법에 의해 제거가 어려운 특성이 있다. 따라서 보일러, 터빈 등의 기기에서는 실리카의 함유량을 0.005 mg/L 이하로 유지하여야 하며 실시간으로 실리카의 분석이 가능할 경우 장치의 문제 발생 예방 및 대응, 급속한 노후화 등에 보다 효율적인 관리가 이루어질 것으로 판단된다.

실리카 분석기는 수입 제품이 대부분으로 고농도와 저농도 측정 방식으로 구분하며 고농도의 경우실리카와 인을 산성 조건에서 Molybdate 이온과 반응하여 노란색의 화합물을 형성, 이때 형성된 Phosphomolybdic Acid를 제거하기 위해 구연산(Citric Acid)를 첨가 후 잔류 실리카로 발생된 노란색 흡광도를 452 nm에서 측정하여 산출한다. 저농도의 경우 고농도 방법의 확장 개념으로 낮은 농도에서 희미하게 나타나는 노란색 화합물은 Amino- naphthol Sulfonic Acid를 첨가 후 진한 파란색으로 변환하여 원래 샘플에 함유되어 있는 실리카와 직접적으로 비례하여 810 nm 흡광도를 측정하여 농도를 산출하는 방식이다.

본 연구에서는 해외 제품의 분석기 성능은 유지하면서 현장에서 요구되는 기술을 접목한 실리카 연속모니터링 시스템을 개발하였으며, ppb 수준에서의 정확도와 재현성 및 최소검출농도 등을 정량적으로 평가하였다. 실리카 표준시료(HACH Silica Standard Solution 1,000 mg/L, 500 mL, 19449-KR)를 희석하여 측정한 Lab Test 결과 기기의 분석 정확도 97.5% 및 재현성 ±3% 이하 및 최소검출농도 10 ppb로 확인할 수 있었다.

또한 대역통과필터(Band pass filter) 적용을 통한 파장 정확도와 상보성금속산화막반도체(CMOS, complementary metal-oxide-semiconductor) 적용을 통한 대역폭(Bandwidth) 정확도 등을 확인, 실리카 연속 모니터링을 위한 온라인 시약은 특허 출원을 진행 중이다.

본 연구를 통해 실리카 연속 모니터링 시스템 기술개발이 완료되었으며, 향후 발전소 및 반도체 등 Test-bed 운영결과를 바탕으로 국내 및 해외 시장으로의 진출이 가능할 것으로 기대된다.

본 연구는 한국산업단지공단 산업집적지경쟁력강화사업 일환으로 수행되었습니다.

### P-024 [환경]

# 가구용 구성재와 원부자재의 방출특성 상관성 비교

최임성1, 이현주1, 권영진1, 박준호2, 김만구2,\*

<sup>1</sup>아람기술이앤지(주), <sup>2</sup>강원대학교 \*Corresponding author: mgkim@kangwon.ac.kr

현대인들이 거주하는 주거공간에는 다양한 가구들이 사용되고 있으며, 삶의 질이 향상됨에 따라 가구의 종류와 형태도 다양해지며 실내 공간에서 차지하는 비중이 증가하고 있다. 이로 인해 가구에서 방출되는 오염물질이 실내공기질과 인체에 미치는 영향이 커지고 있다. 실내공기질의 효율적인 관리와 개선을 위해서는 가구를 구성하는 원부자재 차원의 관리가 필요하다.

본 연구에서는 소형챔버법을 이용하여 가구용 구성재와 이를 구성하는 원부자재의 방출 특성의 상관성을 비교하였다. 비교에 사용된 시료는 두께 18 mm의 MDF(Medium Density Fiberboard) 제품 (이하 MDF 18T)과 두께 15 mm의 PB(Particle Board) 제품(이하 PB 15T)이 사용되었다. MDF 18T는 18 mm의 MDF 목질상판에 전면 PET 데커레이션시트 마감, 후면 PP 데커레이션시트 마감 처리 후 ABS를 이용해 엣지를 마감 처리되었다. 이를 구성하는 MDF 목질상판재와 PET 데커레이션시트, PP 데커레이션시트, ABS 엣지와 각 마감면에 사용된 3가지 접착제를 비교 시험하였다. PB 15T는 15 mm의 PB 목질상판에 전면과 후면을 PP 데커레이션시트 마감 처리 후 PVC 엣지 마감 처리되었다. 이를 구성하는 PB 목질판상재와 PP 데커레이션시트, 각 마감면에 사용된 3가지 접착제를 비교 시험하였다.

방출시험 결과 MDF 18T는 TVOC 0.133 mg/m²·h, Toluene 0.082 mg/m²·h, HCHO 0.001 mg/m²·h 의 방출강도가 측정되었으며, 원부자재 중 ABS 엣지 마감재가 방출의 주된 오염원으로 확인되었다. PB 15T의 시험결과 TVOC의 방출강도 0.243 mg/m²·h, Toluene 0.126 mg/m²·h, HCHO 0.018 mg/m²·h 이며, 원부자재 중 15 mm PB 목질상판재와 PVC 에지가 방출의 주된 오염원으로 확인되었다.

가구용 구성재와 원부자재의 방출 특성 비교 결과 원부자재 시험을 통하여 가구용 구성재에서 방출되는 오염물질 중 주된 오염원이 되는 원부자재를 정성적으로 선별해 낼 수 있었지만 정량적인 상관관계는 유추 할 수 없는 것으로 판단된다.

### P-025 [환경]

# 온도영향을 반영한 건축자재의 오염물질 방출특성에 관한 연구

현승민1,\*, 홍길환1 고영환1, 김만구2, 권영진3, 최임성3

<sup>1</sup>,\*한국산업기술시험원, <sup>2</sup>강원대학교, <sup>3</sup>아람기술이앤지(주) \*Corresponding author: hyunsm@ktl.re.kr

한국의 고유 건축문화인 온돌방식은 바닥면 또는 벽면의 표면온도를 높여 열이 공기 중 복사를 통해 전달되는 난방방식으로 라디에이터 방식인 공기의 대류를 이용하여 온도를 조절하는 방식보다에너지 효율이 높아 세계적으로 온돌방식의 관심이 증대되고 있다. 그러나 온돌방식의 난방에 의해 바닥재, 바닥장판, 벽지 등 실내공간에서 사용되는 건축자재가 가열되어 시공 초기에는 오염물질 방출량이 증가될 것으로 예상된다. 현재 건축자재 시험방법은 난방 등 온도영향은 고려하지 않고, 항온조건에서 시험하고 있어 온도에 의한 건축자재 방출특성을 확인할 필요가 있다. 또한 온돌식 난방에 직접적인 영향을 받는 건축자재를 대상으로 온도에 의한 영향을 정확하게 예측할 수 있는 평가방식을 도출할 필요가 있다.

건축자재에 온도의 영향을 확인하기 위해 바닥면을 가열하는 방식의 온돌효과와, 챔버 주변온도를 고온으로 유지하는 방식의 온도효과에 대한 방출특성을 비교하였다. 건축자재 온도의 영향을 확인하기 위해 챔버의 분위기 온도를 40℃로 유지하여 7일 후 건축자재의 TVOC 방출량을 확인하였을 때 25 ℃ 항온 조건 대비 305 % 증가되었다. 또한 바닥장판 건축자재의 온돌 효과에 대한 휘발성유기화합물 방출량을 평가하기 위하여 소형챔버 바닥면에 건축자재를 놓고 40℃로 일정하게 가열하였을 때 7일 후 건축자재의 TVOC 방출량은 25 ℃ 항온 조건 대비 441 % 증가되었다. 자재 특성에 따라 온도에 영향에 의한 휘발성유기화합물 방출량을 확인하고자 바닥재(Floor material) 바닥타일(Floor tile), 강마루(Wood) 제품을 대상으로 20L 챔버 바닥면을 가열하여 7일 후 방출량을 확인한 결과, 25℃ 조건에서 방출량 대비 바닥재는 495 %, 바닥장판은 565 %, 강마루는 317 % 증가되었다.

건축자재에 직접 열을 전달하였을 때 단기간 방출강도는 높게 나타나며, 열을 가하였을 때 자재에서 유해물질이 짧은 시간 더 많은 양이 방출됨에 따라 난방 등을 고려하여 온도 변화에 따른 오염물질 방출시험방법에 대한 지속적인 연구가 필요하다.

### P-026 [환경]

# 환경분야 시험·검사기관의 숙련도 시험 및 현장평가 소개

황종연, 이혜리, 고상호, 이진주, 김지혜, 전수아, 김효경, 박창희, 허유정, 신선경\*

국립환경과학원 환경기반연구부 환경측정분석센터

환경분야 사험·검사기관의 정도관리는 환경분야 시험검사등에 관한 법률 시행령 제13조의5 제3항에 따라서 표준시료의 분석 능력을 평가하는 숙련도 시험과 시험·검사기관의 기술인력, 시설, 장비 및 운영능력 등에 대한 실태평가와 이에 관련된 자료를 평가하는 현장평가로 구분된다. 숙련도 시험은 매년 실시하며, 현장평가는 3년 주기로 실시하도록 하고 있다. 숙련도 시험의 항목수는 2021년 기준으로 대기분야 20, 수질분야 28, 먹는물 분야 21, 폐기물 분야 14, 토양 13. 악취 6, 실내공기질 7, POPs 1, 환경유해인자 분야 6개 항목으로 운영되고 있다. 현장평가 위원이 직접 시험실을 방문하여 실시하는 현장평가는 국립환경과학원의 환경분야 시험·검사기관의 정도관리 운영 등에 관한 규정에 따라서 3년 주기로 실시하고있으며, 평가분야는 운영 및 기술분야, 대기, 수질, 먹는물, 폐기물, 토양, 실내공기질, 악취, POPs, 환경유해인자 등 9개 분야로 구성되어 있으며, 분야별 전체 평가 항목수는 1,300개에 이른다.

Key words: 정도관리, 환경시험·검사법, 환경분야 시험·검사기관

### P-027 [환경]

# 환경분야 시험·검사기관 정도관리 제도 소개

황종연, 이혜리, 고상호, 이진주, 김지혜, 전수아, 김효경, 박창희, 허유정, 신선경\*

국립환경과학원 환경기반연구부 환경측정분석센터

환경분야 시험·검사 등에 관한 법률(이하, 환경시험·검사법) 제18조의2(시험·검사기관의 정도관리)에서는 같은 법 시행령 제13조의5(시험·검사기관 등)에서 정하고 있는 환경 분야 시험·검사기관에 대하여 정도관리를 하도록 정하고 있다. 정도관리는 시행령 제13조의5 제3항에 따라서 매년 표준시료의 분석 등력을 평가하는 숙련도 시험과 시험·검사기관의 기술인력, 시설, 장비 및 운영능력 등에 대한 실태평가와이에 관련된 자료를 평가하여 판정하는 현장평가로 구분된다. 숙련도 시험은 매년 실시하며, 현장평가는 3년 주기로 실시하도록 하고 있다. 정도관리는 환경시험·검사법 시행규칙 제17조의2(정도관리심의회 등)에서 정한 위임업무에 따라서 국립환경과학원에서 실시하고 있다. 위임규정에 근거하여 국립환경과학원은 '환경시험·검사기관 정도관리 운영 등에 대한 규정(국립환경과학원 고시)'에 따라서 1,400여 시험실에 대한 정도관리를 실시하고 있다.

Key words: 정도관리, 환경시험·검사법, 환경분야 시험·검사기관

### P-028 [의약품/화장품]

# Comparison of chemical constitutions between the original and enhanced bioactive rich fraction of black chokeberry fruits using chemical analytical methods

Rustam RUSTAMOV, Chong Woon CHO, Dan Gao, Hyung Min KIM and Jong Seong KANG\*

충남대학교 약학대학

\*Corresponding authors: kangjss@cnu.ac.kr

In previous study, Black chokeberry (Aronia melanocarpa, Rosacea family) were reported to have various bioactivities such as antioxidants, anti-cancer activity. Many researchers have studied to prepare the enhanced bioactive rich fraction from berry fruits. However, it has been reported that the previously methods are insufficient to effectively evaluate the enhanced bioactive rich fraction. The purpose of this study is to compare the quality of main components between 50% EtOH extracts as original extracts and the enriched bioactive rich fraction of black chokeberry (ABF ex). Contents of two samples were determined by total anthocyanin contents (TAC), total phenolic contents (TPC), total flavonoid contents (TFC), total carbohydrate contents (TCC), and total organic acid contents (TAOC). Additionally, individual concentrations of phenolic acid and sugars in samples were analyzed by HPLC analysis. As a result, the content of anthocyanins in ABF extracts is higher than 50% EtOH extracts. In addition, TAC in ABF extracts (14% in a sample) was 10 times higher than 50% EtOH extracts (1.3% in a sample). Additionally, sugars (fructose, sorbitol and glucose) were detected in 50% EtOH extracts. However, sugars were not detected in ABF extracts. Phenolic acids such as chlorogenic acid and neochlorogenic acid content are 8 ~ 10 times higher in ABF samples than in 50% EtOH extracts. The result indicates that the overall contents of bioactive compounds in ABF extracts are much higher than the contents in 50% EtOH extracts.

## P-029 [의약품/화장품]

# Effect of anti-hair loss activity of *Thuja orientalis* leaf extracts and a GC-FID analytical method of them for quality control

Won Seok JEONG, Chong Woon CHO, Jin Hyeok KIM, Dan GAO, Hyung Min KIM, and Jong Seong KANG\*

충남대학교 약학과

\*Corresponding authors: kangjss@cnu.ac.kr

Psychological problems caused by hair loss can significantly reduce individual's social role and quality of life. Arborvitae leaves (*Thuja orientalis*) are known to supply nutrients to the scalp and hair which improves hair condition. However, not much study have evaluateed bioactivities of arborvitae leaf extracts (ALE). The purpose of this study is to evaluate anti-hair loss activity of ALE and to develop quality control method using GC-FID. The proliferative capacity of dermal papilla cells and the mRNA expression of Keratin17 was measured to evaluate anti-hair loss activity of ALE. Additionally,  $\alpha$ -pinene was selected as maker compound for the quality control of ALE. Gas chromatography was applied for the quality control of ALE with DB-5 column (30 m x 0.25 mm (I.D.), thickness: 0.25  $\mu$ m). As a result, the capacity of dermal papillary cell proliferation and Keratin 17 expression were increased 19% and 53% higher than control group, respectively. The content of  $\alpha$ -pinene in the ALE was 43.9±0.2 mg/g (%RSD, 0.83%). And, the developed GC analytical method was validated according to the ICH guidelines. In conclusion, ALE extracts showed satisfactory anti-hair loss activity, and the developed GC-FID method could be applied for the quality control of ALE and its products.

## P-030 [의약품/화장품]

# Quantitative analysis of main compounds and impurities in sulfur hexafluoride and octafluoropropane products using GC-BID

<u>Chong Woon CHO</u>, Farha Ive MOONMOON, Jin Hyeok KIM, Dan GAO, Hyung Min KIM, and Jong Seong KANG\*

충남대학교 약학과

\*Corresponding authors: <a href="mailto:kangjss@cnu.ac.kr">kangjss@cnu.ac.kr</a>

Recently, sulfur hexafluoride (SF<sub>6</sub>) and octafluoropropane ( $C_3F_8$ ) in ophthalmology have been used to treat the retinal detachment by pneumatic retinopexy. However, the fatal medical accidents such as blindness have been reported during the treatment of retinal detachment with these gases. Additionally, these gases as medical gases have no regulation for safety management in each country of the world. The purpose of this study is to develop the analytical method and evaluate the content of main compounds and impurities in these gases for the safety management using GC-BID. GC-BID analysis was carried out on two type columns as follows. One was a capillary column for analyzing carbon dioxide, carbon tetrafluoride, and hexafluoroethane as well as two main compounds. The other was two type of the packed column for analyzing hydrogen, oxygen, nitrogen, methane, and carbon monoxide. The developed method for the impurities and main compounds in sample gases was validated according to ICH guidelines. And, the content of main compounds in two gases were not less than 99.99%. Additionally, the impurities of C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> were hydrogen (< 0.666 ppmv), oxygen (8.2 ppmv) nitrogen (22.7 ppmv), methane (< 0.087 ppmv), carbon monoxide (< 0.126 ppmv) and others (< 20.0 ppmv). While, those of SF<sub>6</sub> were oxygen (23.1 ppmv), nitrogen (30.2 ppmv) and others (not more than LODs). The content of all main components and impurities in two gases were suitable in an accordance with inner content criteria. And severe toxic compounds in all two gases were not observed. In conclusion, the content criteria and analytical methods will be useful for the quality control and safety management of impurities and main compound contents in SF<sub>6</sub> and C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> samples.

P-031 [의약품/화장품]

Effect of anti-melanogenesis activity extracts purified from *Pueraria lobata* Stem, and an HPLC–UV method for the quality control of its cream products

<u>Dan GAO</u><sup>1</sup>, Chong Woon Cho<sup>1</sup>, Rustam Rustamov<sup>1</sup>, Cheong Tae Kim<sup>2</sup>, Won Seok Jeong<sup>2</sup>, and Jong Seong Kang<sup>1,★</sup>

¹,\*충남대학교 약학대학; ²㈜알엔에스 \*Corresponding author: <u>kangjss@cnu.ac.kr</u>

Puerariae Radix, the root of *Pueraria lobata*, is a widely used herbal medicine in Asia. Pueraria root is also famous for promoting longevity and used as a royal special food in Japan. In contrast, the P. lobata stem (PLS) is mostly used as the feed of livestock or discarded because its medicinal effect is unknown. Previous studies have demonstrated that the root of *P. lobata* is rich in isoflavonoids with the combined form of glycosides and aglycones, such as puerarin, genistin, daidzin, and daidzein. Therefore, to increase the utilization of the PLS as resources, we investigated its potential as a skin-whitening agent. We found that the developed, enriched PLS extract significantly inhibited melanin production in the 3-isobutyl-1-methylxanthine-induced B16/F10 cells at a concentration of 50 µg/mL. To further confirm the mechanism of the antimelanogenic effect of the enriched PLS extracts, we examined the mRNA expression of tyrosinase, which were suppressed by the extracts. To effective quality control of the enriched PLS extracts, their major chemical constituents were identified by LC-DAD-ESI-MS. Total twelve constituents were identified. In silico analysis, they showed that the main constituents, puerarin and daidzin, had excellent binding affinities to human tyrosinase. Consequently, the enriched PLS extracts can be a potential skin-whitening agent in cosmetics.

## P-032 [의약품/화장품]

# LC-MS/MS method for analysis of *N*-acetylneuraminic acid in antler extracts using porous graphitic carbon column

Duc Thanh CHU, Chong Woon CHO, Hyung Min KIM and Jong Seong KANG\*

충남대학교 약학대학 \*Corresponding author: <u>kangjss@cnu.ac.kr</u>

N-acetylneuraminic acid (Neu5Ac), one of the most common species in sialic acid family, is known to play an important physiological role 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. It has been well known for forming glycol-conjugates such as glycoproteins, glycolipids and glycol glycans. Among the various types of compounds from antlers, Neu5Ac started gain interest owing to its pharmacological activities. Polar properties of Neu5Ac makes it difficult to be analyzed with typical reverse phase chromatography. As an alternative, porous graphite carbon (PGC) is often used for the separation of polar organic compounds since polar compounds can interact with the porous surface of graphite by induced dipole and dispersive forces. In this study, we developed the determination method of Neu5Ac in water extract of antler samples using LC-ESI/MS/MS equipped with PGC column As a result, content of Neu5Ac in alter sample was 0.050±0.004% (%RSD, 8.9%). The developed method was validated with linearity, range, precision, accuracy, limit of detection (LOD), and limit of quantification (LOQ). Collectively, the developed method can be applied for qualitative and quantitative analysis of Neu5Ac in antler samples and their products.

## P-033 [의약품/화장품]

# Evaluation of *Morus alba* leaf extracts after bioconversion for development of anti-diabetic agent

<u>Ive Farha MOONMOON</u><sup>1</sup>, Jin Hyeok KIM<sup>1</sup>, Tae Jung KIM<sup>1</sup>, Kyung Tae KIM<sup>2</sup>, Young Ho KIM<sup>1</sup>, Cheong Won CHO<sup>1</sup>, Hyung Min KIM<sup>1</sup>, Jong Seong KANG<sup>1,\*</sup>

¹/\*충남대학교 약학과, ²동의대학교 바이오응용공학부 식품공학전공

\*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

Morus alba has been widely used as herbal medicines and functional foods for its well known bioactivities, such as antitumor, antidiabetic, and antioxidant activities. Recently, many studies have been reported which improved the bioactivities and function of materials using bioconversion technology such as fermentation by microorganisms and enzymes. Therefore, we applied bioconversion method to M. alba to evaluate enhanced bioactivities. The goal of this study was to develop analytical method to evalutate improved bioactivities and to conduct quality control of bio-converted M. alba leaf products. First, liquid-liquid extraction was performed with water and ethyl acetate to achieve best extraction efficiency and to minimize the solvent matrix effects. The water layer was analyzed by HPLC-DAD-ESI-MS on a C18 column (4.6  $\times$  250 mm, 5  $\mu$ m) with 0.1% formic acid in water (A) and 0.1% formic acid in acetonitrile (B). Flow rate was set as 0.7 mL/min with gradient condition, detection with 320 nm of UV detector, and in room temperature. As a result, five peaks were increased upon bioconversion of M. alba leaves. Among increased peaks, four peaks were identified by comparison of UV spectra and molecular weight with the literature and MS spectrum aquired by LC-MS. It was identified as trans-caffeic acid, morin 3-O-B-D-glucopyranoside, moracin M 3'-O-ß-glucopyranoside, and astragalin. These compounds were well known for bioactivities such as anti-diabetes. Therefore, the increased peaks would help to explain the enhanced bioactivities of enzyme processed M. alba leaves. Collectively, these compounds can be a marker candidates for the quality control of enzyme processed M. alba leaf extracts.

## P-034 [의약품/화장품]

# Development of analytical method for standardization of EG product (natural scalp tonic)

Jin Hyeok KIM, Chong Woon CHO, Hyung Min KIM and Jong Seong KANG\*

충남대학교 약학대학

\*Corresponding Author: Kangjss@cnu.ac.kr

In recent, the number of people having alopecia is increasing steeply by stress. EG product is a natural scalp tonic product using 70% ethanol extract of *Pulsatillae Radix* to prevent and treat alopecia. This study aimed to develop HPLC method with response surface methodology for standardization of EG. Oleanolic acid was selected as a marker compound because of its bioactivity in tonic. In order to avoid matrix effect of product, hydrolysis and liquid-liquid extraction were applied to make analytical sample. Oleanolic acid separated from the matrix n tonic on C18 column with mobile phase consisted of 0.1% formic acid aqueous solution (A) and 0.1% formic acid in acetonitrile (B) with gradient elution (95% B to 99 % B for 8 min and then 99% B for 12 min). The flow rate of 0.5 mL/min, detection wavelength of 200 nm and column temperature of 35 °C were used. The validation result showed good linearity of  $R^2$ =0.9998 within the test range and recovery was more than9 3.5% with a relative standard deviation less than 1.4%. In blind test, oleanolic acid and 70% ethanol extract of Pulsatillae Radix contents in EG002 were 89.0 ± 0.00 µg/mL and 0.10 ± 0.00 µg/mL, respectively. Those of EG003 were 448.70 ± 0.01 µg/mL and 0.10 ± 0.00 µg/mL, respectively. The RSDs of oleanolic acid concentration in EG002 and EG003 were 0.18% and 0.27%, respectively. The developed method can be suitable for standardization of commercial EG product.

Key words: scalp tonic, Pulsatillae Radix, oleanolic acid, standardization, HPLC-UV.

## P-035 [의약품/화장품]

# Sensitive analysis of alpelisib using liquid chromatography-tandem mass spectrometry in plasma and application to pharmacokinetic study

Seop-Lee<sup>1,2</sup>, Kyeong-Ryoon Lee<sup>1</sup>, Yoon-Jee Chae<sup>3</sup>, Jung-woo Chae<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>Laboratory Animal Resource Center, Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology, <sup>2,★</sup>College of Pharmacy, Chungnam National University,

<sup>3</sup>College of Pharmacy, Woosuk University

\*Corresponding author: jwchae@cnu.ac.kr

The use of validated analytical method for quantification of alpelisib would improve reliability of the data from pre-clinical as well as clinical studies. In this study, we developed and validated the method to quantify the concentrations of alpelisib in mouse and human plasma using liquid chromatography-tandem mass spectrometry. Alpelisib and an internal standard (enzalutamide) were separated from endogenous substances using XTerra MS C18 column with a linear gradient of 0.1% formic acid in water and 0.1% formic acid acetonitrile (90%:10%  $\rightarrow$  5%:95%, v/v) at a flow rate of 0.4 mL/min and carryover effect was overcome by flushing the injection loop with 100% methanol. MRM transitions for alpelisib and IS were 442.08>328.10 and 465.07>209.20, respectively, and the calibration curve for alpelisib was confirmed to be linear at the range of 1-2000 ng/mL in both mouse and human plasma. The intra- and inter-day accuracy and precision met the acceptance criteria and significant matrix effect was not observed in plasma. Alpelisib was stable under various storage and handling conditions and dilution integrity was confirmed to provide sufficient quantification range. Finally, this assay was successfully applied to the pharmacokinetic study of alpelisib following intravenous or oral administration to mouse. This method can be utilized to provide valuable information on pharmacokinetics of alpelisib to enlarge its clinical availability.

## P-036 [의약품/화장품]

# Preparation and characterization of size and sun protection factor (SPF) for solid lipid nanoparticles (SLNs) using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) and relative techniques

# Miyeon Park, Meiyu Zhang, Da Wang, Jaeyeong Choi and Seungho Lee

Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

Solid lipid nanoparticles (SLNs) have a particle structure in which a surfactant surrounds a lipid-containing material such as drug or cosmetics. SLNs have some merits that they can be mass-produced in a short period of time and that they can be used as a colloidal carrier in various types of products including cosmetics. It can carry ingredients such as UV filters, improving chemical and physical storage stability, and improving skin occlusion. Studies have shown that the UV protection effectiveness of UV filters encapsulated in SLN is affected by the size of SLNs.

In this study, SLNs of various sizes were prepared by controlling the composition of lipid, surfactant, and UV filter. Then, the sizes of SLNs were characterized by using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with a photodiode array detector (AsFIFFF-PDA). The AsFIFFF conditions were optimized with the channel flow rate of 1.0 mL/min, cross-flow rate of 4.0 mL/min, and the composition of the carrier liquid of water containing 0.02% NaN<sub>3</sub>. Results showed that the SLNs size increases with increasing lipid concentration and decreasing surfactant concentration.

Sunscreen formations were prepared using the SLNs, and the sun protection factor (SPF), a UV protection index, was measured. The SPF tends to increase as the size of SLN decreases. However, the SPF values were relatively low, probably due to prolonged homogenization process during the SLN preparation. It is suggested to shorten the homogenization time.

## P-037 [의약품/화장품]

# Determination of chlorogenic acid in Lonicera japonica extracts by HPLC

<u>Ki Baek Park</u><sup>1</sup>, Jung In Seo<sup>1</sup>, Ye jin Kim<sup>1</sup>, Won Jin Ah<sup>1</sup>, Hye Hyun Yoo<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Pharmacy, Hanyang University

Lonicera japonica and is a medicine to treat enteritis and diarrhea. Lonicera japonica is known to have anti-inflammatory, antibacterial and antiviral effects, and is a plant containing chlorogenic acid, one of its indicator components. Chlorogenic acid has antioxidant and anticancer effects. In this study, we quantified chlorogenic acid, which is an indicator component contained in Lonicera japonica extracts. Lonicera japonica extracts and Bojanggunbitang samples were dissolved in 50% ACN, 2 mg/mL. These sample were analysed by Agilient 1260 HPLC system. The analytical method was achieved on a Xeterra C<sub>18</sub> column (250 x 4.6 mm, 5 μm). The mobile phase consisted of 0.1% acetic acid in DW(A) and acetonitrile(B), gradient elution. As a result, the content of chlorogenic acid in Bojanggunbitang and Lonicera japonica were 0.5 and 3.15%, respectively.

<sup>\*</sup>Corresponding author: yoohh@hanyang.ac.kr

## P-038 [의약품/화장품]

# The new quantitative method of sphingosine-1-phosphate after dephosphorylation with hydrogen fluoride

# Seo-Hyeon Jung, Hee-Jung Kim, Maftuna Shamshiddinova, Shokhid Gulyamov, Yong-Moon Lee\*

College of Pharmacy, Chungbuk National University
\*Corresponding author: ymleefn@gmail.com

Sphingosine-1-phosphate (S1P), one of the sphingolipid metabolites, is a signaling molecule related to various cell processes and has the diverse protective role in many inflammatory diseases. It is important to develop reliable quantitation method for S1P to determine the endogenous level and investigate its functions. Especially because S1P is a minor component in most biological sample, highly sensitive analysis by LC-MS/MS method is required. Main challenge in the S1P quantitation by liquid chromatography system is peak tailing because of the existence of polar phosphate group. In this study, we used hydrogen fluoride (HF) to remove phosphate group in S1P and then analyze the liberated sphingosine by LC-MS/MS.

We optimized dephosphorylation reaction for S1P as reaction time, temperature and hydrogen fluoride concentration. Analytical method is based on LC-ESI-MS/MS for dephosporylated form of S1P and C17-S1P as internal standrad at m/z transition 300.4>282.4 (quantification ion), 300.4>262.4 (qualification ion), 286.3>268.2 (internal standrd). The method was validated with specificity, linearity, range, LOQ, LOD, accuracy, precision and reproducibility.

To confirm our new methods, we analyzed S1P in commercially available serum, fetal bovine serum, fetal calf serum and horse serum. The average levels of S1P is included  $100.02 \sim 284.38$  nM in those serums. Furthermore, we observed plasma and kideny tissue of chronic kidney disease (CKD) mouse model compared to control group. S1P level is increased in CKD kidney tissue but not in plasma.

In conclusion, we developed high sensitive LC-MS/MS quantitation method for S1P by dephosphorylation with HF which can be used for biological samples.

### P-039 [의약품/화장품]

## Anaylsis of falsified drugs by Raman spectroscopy

Woo-Hyun Bae<sup>1</sup>, Shokhid Gulyamov<sup>1</sup>, Yong-Moon Lee<sup>1,★</sup>

1,\*College of Pharmacy, Chungbuk National University \*Corresponding author: ymleefn@gmail.com

Many individuals were exposed unknowingly to risk death or serious injury due to various falsified drugs. Erectile-dysfunction pill is one of the most falsified drugs. (e.g., Viagra<sup>®</sup> and Cialis<sup>®</sup>). The usage of sildenafil is controlled through medical supervision because of its side effects such as headache, dyspepsia, back pain rhinitis, flu syndrome and so on. Due to lower price and easy to buy at internet market, falsified drugs are often preferred.

The purpose of this study by Raman spectroscopy, is to establish the qualitative analysis with the composition of falsified drugs. There are many existing methods which analysis counterfeit drugs. In this study correlation algorithm and CLS (Classical Least Square) method was used. CLS method allows user to quantitative analysis without depend on a calibration procedure with a chemical reference standard.

Sample preparation was composed of few steps. To flatten the surface, tablets were grinded in a mortar about 10 minutes, then made into pellet by using tablet press machine. Finally pellets are made which has radius 8-mm. Pellets are laid under the laser and measured by Raman spectrometer.

To confirm our methods, measurements were conducted on six different areas of a real Viagra  $^{\circledR}$  pellet. Real Viagra  $^{\circledR}$  's labelled assay of sildenafil is 22.7% and experiment result is 20.05%. The sildenafil deviation range was between -4.2% to -1.2%. Relative standard deviation of nine measurement was 6.16% and standard deviation was 1.24%. This result showed that our method validation process was proper for guessing the content of sildenafil citrate in the real Viagra  $^{\circledR}$  pellet. Size of the measurement area was chosen  $300x300~\mu\text{m}^2$ . In this optimization setting, every mapping area has 400 spectra and acquired in 27 minutes. This methodology can be one of the helpful measuring methods because of minimum preparation and intuitive results.

These results were supported by "Regional Innovation Strategy (RIS)" through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Education (MOE).

### P-040 [의약품/화장품]

# Evaluation of the skin sensitization potential of aroma compounds using the direct peptide reactivity assay linked (Q)SAR programs

## Jisu Ryu, Yong-Moon Lee<sup>,\*</sup>

College of Pharmacy, Chungbuk National University \*Corresponding author: ymleefn@chungbuk.ac.kr

Aroma compounds are the commonly detected allergens used in fine perfumes, cosmetics and other household products. When aroma compounds are absorbed through the skin, some compounds may cause allergic contact dermatitis (ACD) as a representative disease caused by skin sensitization, which is part of T-cell-mediated immunotoxicity. Therefore, to evaluate the potential of skin sensitization on aroma compounds is an important process to avoid the skin trouble.

An increasing ethical demand to replace animal experiments resulted in the regulatory requirement in Europe to assess the safety of cosmetic ingredients without testing on animals (EU 2009). In this study, skin sensitization to 38 aroma compounds was evaluated by the direct peptide reactivity assay (DPRA) using HPLC/UV, an animal substitution test developed into a test guideline (TG) in 2015 (OECD 442C). The peptides used in DPRA were cysteine(Ac-RFAACAA\_COOH) and lysine(Ac-RFAAKAA\_COOH) and the loss rate of peptides was evaluated by reacting with the 100 mM test substance for 24 hours and by measuring the reduced peak area at HPLC/UV 220 nm. The independent dataset in the (Q)SAR programs of Toolbox, Derek, and VEGA were combined to determine the skin sensitization potential. The aroma compounds showing obscure criterion either by DPRA or by (Q)SAR programs were determined by a human patch test.

Collectively, 16 aroma compounds were finally classified positive in skin sensitization by the DPRA linked (Q)SAR. This evaluation process provided the high score in selectivity, sensitivity and negative predictability. Therefore, this method will be useful to determine the skin sensitization potential in aroma chemicals used in cosmetics.

These results were supported by "Regional Innovation Strategy (RIS)" through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Education (MOE).

### P-041 [의약품/화장품]

# LC-MS/MS analysis of elevated ceramides by inhibition of SphK1 in IMQ-induced psoriasis mouse model

# Shokhid Gulyamov<sup>1</sup>, Maftuna Shamshiddinova<sup>1</sup>, Hee-Jung Kim<sup>1</sup>, Seo-Heon Jung<sup>1</sup>, Yong-Moon Lee<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Chungbuk National University \*Corresponding author: ymleefn@gmail.com

Psoriasis is a chronic inflammatory skin disease and immune-mediated disease. Several psoriasis animal models have been developed. Sphingolipids have been known to regulate the biological functions and immune cells in skin. In this study, ceramide analysis by LC-MS/MS and inhibition of SphK1 by PF543 in IMQ-induced psoriasis mouse model were investigated.

8-week-old BALB/c mice were housed. The mice were divided into four groups: Vaseline treated control group, imiquimod-treated psoriasis group (IMQ) (3.125 mg/mouse), IMQ plus PF-543 group (1 mg/kg), IMQ plus ethanol group. On the  $10^{th}$  day, mice were sacrificed to collect plasma, spleen, and skins samples.

The ceramides from plasma and back skin samples were extracted by chloroform: methanol (2:1) mixture. The chloroform phase was dried at a vacuum evaporator and the dry residue was reconstituted in 100  $\mu$ l MeOH before injecting into LC-MS/MS. The samples were eluted from CAPCELL PAK MG III C18 column with gradient elution with mobile phase A (10 mM ammonium acetate in water with 0.1% formic acid) and mobile phase B (10 mM ammonium acetate in ACN: PRP-2 (4:3; v/v) with 0.1% formic acid).

After topical application of IMQ during 7 days in psoriasis group, ceramide reduction was observed in comparison to the control group both in plasma and skin samples. Statistically significant increase in the ceramide level was found after application of PF-543 in all fatty acid chain ceramides in back skin samples in comparison to the psoriasis group. On the other hand, in plasma samples, the ceramide level did not show a statistically significant difference between PF-543 and psoriasis group, even it was increased. Ethanol treated group did not demonstrate considerable difference when compared with psoriasis group. Cer24 was moderately found whereas from Cer18 to Cer22 were in a minor quantity.

We concluded that by inhibition of SphK1 by PF-543 could accumulate ceramide in the back skin, while psoriasis group samples' ceramide level was diminished. It can indicate that the PF-543 may improve the psoriasis by inhibition of SphK1 and prevent the dysregulation of ceramide metabolism in psoriatic skin.

P-042 [의약품/화장품]

Lipidomics Appoach in diagnosing Crohn's Disease and Ulcerative Colitis;

A Systematic Review

<u>Jihyun Yoon</u>¹, Eun Goo Lee¹, Sung Won Kwon¹,★

<sup>1</sup>서울대학교 약학대학

\*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

To elucidate the pathogenesis of inflammatory bowel diseases (IBDs) including Crohn's disease (CD) and ulcerative colitis (UC), identifying the underlying etiology of inflammatory bowel diseases is important. CD and UC are conventionally diagnosed based on the clinical evidence. Our review summarized application of lipidomics on novel biomarkers elucidation in IBD. It is the first to apply lipidomics on IBD diagnosis and staging for monitoring IBD progression. As the global incidence of IBD is increasing, the need for our research is considerably high. Applying lipidomics, a subset of omics that focuses specifically on lipid metabolites, can facilitate the identification of biological targets. The use of high-resolution mass spectrometry to detect alterations in lipids can help find the immune system mechanisms in IBD patients. We checked the feasibility of using lipids as IBD diagnosis and monitoring. In specific, we retrieved literature from four databases and extracted lipidomics-related data considering pre-defined criteria. Our research provides insights about pathogenesis and etiology in the molecular level. Instead of protein markers, we suggest to use lipid subclasses for discriminating between the two types of IBD, CD and UC.

### P-043 [의약품/화장품]

# Steroidomics for the Prevention, Assessment, and Management of Cancers: A Systematic Review and Functional Analysis

민영진<sup>1</sup>, Nguyen Hoang Anh<sup>1</sup>, Nguyen Phuoc Long<sup>1</sup>, 김선조<sup>1</sup>, 윤상준<sup>1</sup>, 김형민<sup>1</sup>, 권성원<sup>1,\*</sup>

1서울대학교 약학대학

\*corresponding author: <a href="mailto:swkwon@snu.ac.kr">swkwon@snu.ac.kr</a>

Steroidomics is one of the most powerful analytical technique to find steroid biomarker. Current work conducted a comprehensive systematic review on steroidomics application in clinical field, especially in cancer research. Importantly, we suggest potential pitfalls and recommendations for clinical research based on steroidomics. After thorough screening on literature databases, we retrieved 45 papers that are suitable for our inclusion criteria. They were mostly about cancer risk predication including cancer diagnosis, prognosis, and monitoring after therapeutic intervention. Among all kinds of cancer, prostate cancer was one of the most frequently studied cancer. Dehydroepiandrosterone, estradiol, and cortisol, which were most frequently reported, were altered in at least four different types of cancer. Moreover, estrogen and its metabolites had high correlation with gynecologic cancers. Through pathway enrichment analysis, we found that androgen and estrogen metabolism, steroidogenesis, and androstenedione metabtholism were remarkably affected in cancers. Our analysis revealed that estradiol, dehydroepiandrosterone, cortisol, and estrogen metabolites could act as oncosteroids. Crucial shortcomings of these studies, however, includes an existence of potential confounding factors, small sample sizes, cross-sectional designs, and misuse of statistics. Further well-designed studies are required to empower current findings.

### P-044 [의약품/화장품]

# Simultaneous analysis of nitrosamines by headspace-GC-MS combined with inhibition of nitrosation by using nitrite scavenger

<u>Su Hyeon Hwang</u><sup>1</sup>, Chaeyoung Seo<sup>1</sup>, Minsun Jeong<sup>1</sup>, SangIn Lee<sup>1</sup>, Jongki Hong<sup>1,★</sup>

> 1,\*College of Pharmacy, Kyung Hee University \*Corresponding authors: jhong@khu.ac.kr

N-nitrosamines including N-nitrosodimethylamine (NDMA) are classified as potentially carcinogenic substances in humans by the International Agency for Research on Cancer (IARC). In our previous study, we established solvent free headspace - gas chromatography - mass spectrometry (HS-GC-MS) applying stable - isotope dillution analysis method for determination of nine N-nitrosamines in various active pharmaceutical ingredient (APIs) and drug products. However, we observed huge amount of NDMA in some of drugs such as metformin, nizatidine and ranitidine due to in situ formation exposed to high temperature in HS-GC-MS system. This can lead to overestimation and low reproducibility of NDMA quantification results. To overcome the artefactual formation of NDMA during high temperature GC/MS analysis, we developed a method to prevent NDMA in situ formation in APIs by adding nitrite scavenger that can remove nitrite and nitrate. Nitrite and nitrate present in pharmaceuticals reacts with dimethylamine (DMA) to potentially form artefactual NDMA. In this study, nitrite scavengers were applied to reduce the NDMA in situ formation in API. Among the various nitrosation inhibitors, ascorbic acid, caffeic acid, and cysteine were examined for the prevention of artefactual formation of nitrosamines. For optimization of headspce GC/MS conditions, the type of dilution solvent, each scavenger reagent concentration, spiking capacity, and amount of sample were tested. Established HS-GC/MS method will be useful for accurate quantification of N-nitrosamines in a variety of APIs and drug products to reduce the NDMA in situ formation.

Keywords: *N*-nitrosodimethylamine (NDMA); *N*-nitrosamines; carcinogenic impurity; drug product; HS-GC-MS; nitrosation inhibitors; inhibitionof NDMA in situ formation

## P-045 [의약품/화장품]

# Metabolomic study on organic acids, fatty acids, and amino acids in plasma samples of mice with lipopolysaccharide-induced sepsis

Songjin Oh<sup>1</sup>, Moongi Ji<sup>1</sup>, Byeongchan Choi<sup>1</sup>, Jonghye Yun<sup>1</sup>, Jae-Hyun Park<sup>1</sup>, In Duk Jung<sup>2</sup>, Man-Jeong Paik<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>순천대학교 약학과, <sup>2</sup>단디바이오 \*Corresponding author: paik815@scnu.ac.kr

Sepsis is a deleterious and systemic inflammatory response to infection. Despite advances in treatment, the mortality rate of sepsis remains high and its pathophysiology is not well understood. Thus, in this study, a metabolomic study was conducted for monitoring of metabolite changes and detection of biomarker for early diagnosis in mouse plasma samples of lipopolysaccharide-induced sepsis. Organic acid (OA) and fatty acid (FA) profiling analyses were performed by gas chromatography-tandem mass spectrometry as methoxime (MO)/tert-butyldimethylsilyl (TBDMS) derivatives. Amino acid (AA) profiling analysis was performed by liquid chromatography-tandem mass spectrometry. In this result, 14 OAs, nine FAs, and 34 AAs were determined. In the Mann-Whitney test, four OAs, three FFAs, and 17 AAs were significantly different (P < 0.05). In addition, star graphic pattern showed distorted shapes with characteristic and readily distinguishable patterns for each group. In the multivariate analysis of PCA and PLS-DA, two groups of control and sepsis showed clear separation. The major metabolites to distinguish between the two groups were identified as tyrosine, methionine, serine, proline, and asparagine. Therefore, the present metabolomic study will be useful for the biomarker detection in sepsis.

Keywords: Sepsis, Metabolomics, Profiling analysis, Biomarker, Mass spectrometry

### P-046 [의약품/화장품]

# Simple high-performance liquid chromatography method for the quantification of pralidoxime chloride using chaotropic mobile phase additives

## Bohyun Shin¹, Hyung-seung Kim,² Sang Beom Han¹,★

1,\*Department of Pharmaceutical Anaylsis, College of Pharmacy, Chung-Ang University, <sup>2</sup>Division of Forensic toxicology and chemistry, Defense Institute of Forensic Science,

Ministry of National Defense

\*Corresponding author: hansb@cau.ac.kr

A simple, rapid, and novel method based on high-performance liquid chromatography (HPLC) was developed for the determination of pralidoxime chloride in an antidote autoinjector using chaotropic salt as mobile phase additives. Since pralidoxime chloride is a highly polar compound, the RP-HPLC method without ion-pairing reagent does not retain praridoxime chloride and elutes in the column void time (t<sub>0</sub>), making quantitative analysis difficult. In this study, the retention time of pralidoxime was increased by using a chaotropic salt in the mobile phase, and satisfactory quantitative results were obtained. The capacity factors were compared when using chaotropic salts and room temperature ionic liquids (RTIL), and concentration of additives was optimized to provide adequate retention times. As a result, RP-HPLC analysis was established using NaPF<sub>6</sub>, which has the best retention effect among chaotropic salts, as an additive in the mobile phase. The chromatographic separation was achieved by C18 column (150 mm × 4.6 mm, 5 µm) and UV detection at 270 nm. Analytical method validation was performed to assess linearity, accuracy, precision, recovery and repeatability according to Ministry of Food and Drug Safety (MFDS) guideline. Compared to the current official US Pharmacopoeia (USP) and Korean Pharmacopoeia (KP) methods, the retention time of pralidoxime is increased without the use of ion-pairing reagents in a simple way. In addition, it is an economical and eco-friendly method because the analysis time is short.

Keywords: pralidoxime chloride, antidote autoinjector, chaotropic, HPLC, RTILs (room temperature ionic liquids)

### P-047 [의약품/화장품]

# Chemical profiling of herbal medicines by HPLC-UV and HPLC-ELSD for quality control

## Se Hee Hong, Sang Beom Han\*

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

\*Corresponding author: hansb@cau.ac.kr

Quality control is one of the important factors in the application and development of herbal medicines. Since it is difficult to properly evaluate the efficacy of some herbal medicines through quality control based on marker compounds, a quality control method based on the 'fingerprinting profile' of herbal metabolites has been recently proposed. Therefore, in this study, fingerprinting profile analysis was performed using high-performance liquid chromatography-diode array detector (HPLC-DAD) and –evaporative light scattering detector (HPLC-ELSD) on herbal medicines of Agastachis Herba, Astragali Radix, Atractylodis Rhizoma and Asparagi Tuber. In the case of Asparagi Tuber, no separate peak could be identified with HPLC-DAD, but highly polar compounds were successfully separated and detected using cadenza CX-C18 column (150 X 4.6 mm, 3 µm) by HPLC-ELSD, allowing fingerprinting profile analysis. Chemical profiles for each herbal medicine were performed by selecting representative peaks that are commonly detected in multiple origins. The sum of the selected peaks should be 50% or more of the total peaks, and if there is a large peak that is 30% or more of the selected peaks, the evaluation was performed by excluding or including them separately.

Analytical method validation was performed to satisfy the Ministry of Food and Drug Safety (MFDS) guidelines on specificity, repeatability, intermediate precision, and correlation coefficient among country of origin for the chemical profile of herbal medicines. This research was supported by a grant (19172Herbalmedicine192) from Ministry of Food and Drug Safety in 2021 and it is expected to contribute to the quality control of herbal medicine by maintaining a constant composition and ratio of various compounds contained therein.

Keywords: Agastachis Herba, Astragali Radix, Atractylodis Rhizoma, Asparagi Tube, Chemical profiling, HPLC

### P-048 [의약품/화장품]

## Identification of Microplastic in Eye drop by Raman spectroscopy

조수아1, 김효진\*

<sup>1</sup>동덕여자대학교 약학과 \*Corresponding author: hyojkim@dongduk.ac.kr

미세플라스틱 오염이 모든 영역에서 문제가 되고 있다. 특히 플라스틱 용기의 미세플라스틱 노출이 우려되면서, 인체에 사용되거나 체내로 유입될 수 있는 제품에 대해 미세플라스틱 분석이 다양하게 이루 어지고 있다. 미세플라스틱 분석법은 입자의 크기에 따라 20  $\mu$ m 이상은 주로 적외선 현미경, 20  $\mu$ m 이하는 라만 현미경이 사용되고 있다. 본 연구에서는 각막에 직접 사용하여 미세플라스틱 노출 가능성이 있는 점안액에 포함되어 있는 미세플라스틱을 라만 분광법으로 분석하였다. 실험은 점안액을 0.8  $\mu$ m mesh의 메탈 필터를 사용하여 거른 후, 필터 상에 존재하는 모든 입자를 분석하였다. 점안액 분석 결과, 총 307 개의 입자가 검출되었으며, 이 중 미세플라스틱은 189 개로 확인되었다. 미세플라스틱 중 최대 비율을 차지하는 것은 폴리에틸렌이었고, 검출된 미세플라스틱의 크기는 4-290  $\mu$ m로 다양하게 분포했다. 그 중 적외선 분광법으로 검출이 어렵다고 알려져 있는 1-20  $\mu$ m 크기 범위의 입자는 229 개였다. 따라서 다양한 샘플에서의 미세플라스틱 검출을 위해서는 라만 분광법이 적절히 사용될 것으로 생각된다.

Microplastic contamination is a problem in all possible areas. In particular, as there is concern about exposure of microplastic in plastic container, microplastic analysis is being conducted in various ways for product that can be used or introduced into the body. In the case of microplastic analysis, depending on the size of the particle, an infrared microscope is mainly used for more than 20  $\mu$ m, and a Raman microscope is used for a size of 20  $\mu$ m or less. In this study, microplastic contained in eye drop that are applied to the cornea and possibly exposed to microplastic were analyzed by Raman spectroscopy. In the experiment, after the eye drop was filtered using a 0.8  $\mu$ m mesh metal filter, all particles on the filter were analyzed. As a result of eye drop analysis, a total of 307 particles were detected, of which 189 were microplastic. Polyethylene accounted for the largest proportion among microplastic, and the detected microplastic varied in size for 4-290  $\mu$ m. Among them, there are 229 particles in the 1-20  $\mu$ m size range, which are known to be difficult to detect by infrared spectroscopy. Therefore, it is considered that Raman spectroscopy will be appropriately used for the detection of microplastic in various samples.

### P-049 [의약품/화장품]

# Development of HPLC analysis method for detection of prohibited dyes in Permanent make-up ink

Jun Hyoung Kim, You Kyung Kim, In Suk Woo, Hyung Il 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

Permanent Make-up (PMU) is a procedure that reveals color on the surface by injecting PMU ink into the skin, and is mainly used for eyeliner, eyebrows, lips, and hairline. However, since the dyes is directly injected into the skin in this procedure, side effects such as inflammation, allergy, and pigmentation may appear. In Korea and EU, some dyes that cannot be used in PMU inks are regulated. However, few studies have been conducted to confirm whether or not prohibited dyes are illegally mixed in PMU ink. Therefore, this study tried to develop a high performance liquid chromatography (HPLC) analytical method for 21 dyes that cannot be used in PMU ink. The 21 dyes were analysed by dividing them into group 1 (Acid Red 26, Acid Yellow 36, Disperse Blue 106, Disperse Orange 3, Disperse Orange 37, Disperse Red 1, Disperse Yellow 3, Pigment Red 53, Solvent Orange 7, Solvent Red 24, Solvent Yellow 1, Solvent Yellow 2, Solvent Yellow 3) and group 2 (Acid Green 16, Basic Blue 7, Basic Green 1, Basic Red 1, Basic Red 9, Disperse Red 17, Disperse Yellow 9, Solvent Blue 35). The colours contained in the PMU ink was extracted using methanol/chloroform (70:30, v/v) has been applied for the extraction of these colors from spiked sample of PMU ink. The chromatographic separation was achieved on Zorbax Eclipse XDB-C18 (4.6 mm × 150 mm, 5 µm) within 40 minutes. The mobile phases consisted of 20 mM ammonium acetate in distilled water (A) and acetonitrile/methanol (80:20, v/v) (B). The method was validated for specificity, limit of detection (LOD), limit of quantification (LOQ), recovery, linearity, precision, accuracy, and stability. The LOD and LOQ ranged from 0.0077 to 0.6414 µg/mL and from 0.0231 to 1.9242 µg/mL, respectively. The recovery was 81.00-116.22%, the linearity was more than 0.999, precisions were less than 9.00% (intra-day) and 7.17% (inter-day), accuracies were 81.07-116.44% (inter-day) and 81.52-116.35% (inter-day), and the RSD of stability was less than 8.59%. Therefore, the newly developed method can be used for analysis and monitoring of prohibited dyes in PMU ink.

### P-050 [의약품/화장품]

# A study on the improvement of test method for mycotoxin - Method validation of HPLC-FLD for aflatoxins in Cinnamomi cortex

이성미, 이영선, 이철현, 조수열\*

식품의약품안전평가원 생약연구과 \*Corresponding author: chos219@korea.kr

As most herbal medicines are natural products, mycotoxin might be easily contaminated during the stages of cultivation, harvesting, storage and distribution. For the convenience of testers who use the testing methods suggested in the Korean Pharmacopoeia for quality control of herbal medicines, this study aimed to improve the mycotoxin test method, which is listed on the Korean Pharmacopoeia.

The improved method is developed by referring to mycotoxin test methods provided from foreign official compendiums such as USP, EP, JP, CHP and research papers, etc. The improved method is a simultaneous analysis method using an immunoaffinity column and a high-performance liquid chromatography-fluorescence detector(HPLC-FLD). The herbal medicine used in the present study was the Cinnamomi cortex. Also, the developed method was validated by the AOAC official methods and the validation guideline of drug products suggested from MFDS.

As a result, the detection limits of aflatoxin B1, B2, G1, and G2 in the improved method were 0.1, 0.2, 0.3, and 0.4 ng/mL, respectively, while the quantitative limits were 0.4, 0.5, 0.9, and 1.2 ng/mL, respectively. And the range of recovery rate was 74.2-113.1%, and the range of relative standard deviation was 0.8-8.1%. In this study, the purification process could be improved by using 1% tween-20 solution instead of distilled water when diluting sample extract in the pretreatment process. The values of linearity, specificity, and recovery rate of the improved method in this study were found to satisfy the criteria suggested in the validation guidelines.

Based on the results, we propose the method established in this study as an improved method compared to the mycotoxin method currently listed in the Korean Pharmacopoeia. In addition, the established method is expected to be useful for detecting aflatoxin in herbal medicines containing thick and rich pigments.

<sup>\*(</sup>Corresponding author) E-mail: chos219@korea.kr Tel: +82-73-719-4801

<sup>\*\*(</sup>Acknowledgement) 본 연구는 2021년도 식품의약품안전처의 연구개발비(19171한생약193)로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

### P-051 [의약품/화장품]

# Development of Electrochemiluminescence-based Anti-drug Antibody Detection Assays

Ha-Rim Seo, Philyoung Lee, Min-Young Lee, Jae Hyeon Yoon, Kyungsoo Ha\*

New Drug Development Center, Osong Medical Innovation Foundation \*Corresponding author: kha@kbiohealth.kr

Assays for the detection of anti-drug antibodies (ADAs) against Infliximab (IFX) and Adalimumab (ADL) have been mostly performed using an enzyme-linked immunosorbent assay. However, it was difficult to accurately detect anti-drug antibody due to the low sensitivity of the conventional methods. In this study, we employed the electrochemiluminescence method for quantification of anti-drug antibodies against infliximab and adalimumab in healthy subjects receiving a single and repeated dose injection up to 70 days. Relative light units of cut point for anti-IFX and anti-ADL were 91.4 and 93.2, and the calibration curve interval for anti-IFX and anti-ADL were set from 5 to 2000 ng/mL and 50 to 2000 ng/mL, respectively. Both anti-IFX and anti-ADL analyses were validated. Anti-IFX antibody was detected in one subject at 56 and 70 days, and anti-ADL antibody was detected in four subjects at 28, 56 and 70 days. In conclusion, we successfully developed an improved anti-drug antibody detection assay using an electrochemiluminescence method that could help us learn more about the relationship between immunogenicity and biological effects.

This study was supported by the Bio & Medical Technology Development Program of the National Research Foundation (NRF) funded by the Ministry of Science & ICT (2020M3A9G4048354).

### P-052 [의약품/화장품]

## A Study on Heavy Metal Concentrations of Color Cosmetics in Korea Market

<u>Chae Man Choi</u>, Ae Sook Park, Su Un Kim, Young Joo Lee, Min Jung Kim, Ji Young Kim, Yoon Hee Kim, Myeong Sook and In Sook Hwang

Department of Food & Medicine, Seoul Metropolitan Government Research
Institute of Public Health and Environment
Corresponding auther: chaeman7@seoul.go.kr

The study aimed to provide the fundamental data on the field of cosmetics by comparing heavy metal concentration in terms of domestic/foreign products, types and colors. The study determined the concentrations of lead, cadmium, arsenic, antimony and nickel in cosmetics such as lipstick, lip gloss, lip balm and lip tint. From the period of March to August, 2021, 66 samples were collected from cosmetic stores distributing to the general market. The average metal concentrations were as follows; 0.284  $\mu$ g/g for lead, 0.003  $\mu$ g/g for cadmium, 0.020  $\mu$ g/g for arsenic, 0.004  $\mu$ g/g for antimony, 0.415  $\mu$ g/g for nickel. Also, lip tint is getting higher, 0.490  $\mu$ g/g adolescents compared to adult 0.227  $\mu$ g/g of nickel . Also, when classified by cosmetic age. The highest mean concentrations shown in lip barm were 0.655  $\mu$ g/g of lead and 0.490  $\mu$ g/g of nickel, in adolescents. Arsenic, cadmium, antimony were not detected almost cosmetics.

**Keywords**: color cosmetics, heavy metal, inductively coupled plasma-mass spectrometer (ICP-MS)

### P-053 [의약품/화장품]

## Monitoring of Preservatives in Cosmetics for Children

# Myung-sook Lee\*, Su-un Kim, Chae-man Choi, Ae-sook Park, Yun-hee Kim and In-sook Hwang

Department of Food and Drug, Seoul Metropolitan Government Research Institute
of Public Health and Environment
\*Myung-sook Lee: lightlee@seoul.go.kr

We monitored the content of 7 preservatives (phenoxyethanol (PE), benzoic acid (BA), benzyl alcohol (BAl), methyl paraben (MP), Isopropyl paraben (IPP), methylisothiazolinone (MIT), chloromethylisothiazoline (CMIT)) in 31 cosmetics (n=31) for children by the simultaneous analysis of HPLC in 2020. The detection ranges were as follows;  $0.58 \sim 0.61\%$  (n=3) for PE,  $0.09 \sim 0.48\%$  (n=9) for BA,  $0.60 \sim 0.62\%$  (n=2) for BAl,  $0.01 \sim 0.06\%$  (n=3) for MP. The order of detection rates was cleanser (71%)  $\Rightarrow$ shampoo, rinse (50%)  $\Rightarrow$  lotion, cream (40%)  $\Rightarrow$  bath (33%). At least one of target preservatives was contained in 45% (14/31) of samples and the content of the detected preservatives was within maximam allowed amount established by KFDA. Benzoic acid was used the most frequently in 31 cosmetics for children.

### P-054 [의약품/화장품]

## Monitoring of main ingredients in functional cosmetics

# Su Un Kim\*, Chae Man Choi, Ae Sook Park, Young Ju Lee, Min Jung Kim, Myeong Sook Lee and In Sook Hwang

Department of Food & Medicine, Seoul Metropolitan Government Research
Institute of Public Health and Environment
\*Corresponding auther: suun111@seoul.go.kr

The study was conducted for monitoring of main ingredients in functional cosmetic in Seoul, Korea. About 20 samples were collected in cosmetic shopping mall and the study was targeted only for main ingredients of functional cosmetics. The main ingredients surveyed in this study were adenosine, niacinamide, ethylhexylmethoxycinnamate, ethylascorbyl ether, diethylaminohydorxybenzoylbenzoate and methylenedioxycinnamate. The results were over 90 % of labelled amount. By our results, the functional cosmetics were safe for using in daily basis and the regular quality management should be needed to observe for customers to use everyday routines.

Keywords: functional cosmetics, main ingredients, high performance liquid chromatography (HPLC)

### P-055 [의약품/화장품]

# For quantitative analysis of MIT/CMIT in household chemical products Standard material development research

염태호1,\*, 성누리, 박지민, 홍원표

한국화학융합시험연구원 \*Corresponding author: yeom621@ktr.or.kr

CMIT/MIT(Chloromethylisothiazolinone/Methylisothiazolinone) methyl has been widely used as a powerful preservative in household chemicals. However, regulations are being enforced across households due to strong inhalation toxicity. Related manufacturers need standard materials to check the contents and contents of CMIT/MIT in raw materials and finished products. A reference material must have the same or similar medium as a sample to compensate for the effect of the medium. Surfactants and spices are used as the main ingredients of cleaning agents, and various raw materials such as surfactants, fatty acids, waxes, diluents, preservatives, and spices are used for cosmetics. CMIT/MIT is developed by pro-nuclear attacks and is greatly affected by pH. In this study, the key goal is to create a chemical environment so that CMIT/MIT can exist reliably in cleaning agents and cosmetics media. Currently, CMIT/MIT standard substances in the form of living chemicals are not supplied at home and abroad. KTR is developing cosmetics cream preparation and cleaning liquid CMIT/MIT standard materials as a standard substance production agency and is planning to supply them to industries after 2023.

### P-056 [의약품/화장품]

# Analysis of Bisphenol A in Medicine Vinyl Bag Samples by Freezing Filteration

### **Hyub Kim**

ASC, Department of Medicine Quality Analysis

The bisphenol A (BPA) was determined in medicine vinyl bag sample by gas chromatography followed by *tert.*-butyldimethylsilyl (TBDMS) derivatization method. The bispheol A in medicine vinyl bag sample was dissolved with acetonitrile. Also, freeze filtering method (FFM) at –60°C and subsequent conversion to TBDMS derivatives were used for sensitive analysis. The gas chromatograph/flame ionization detector (GC/FID) analysis method was described for the determination of BPA in medicine vinyl bag samples.

The purpose of this experiment was to investigated the composition for BPA in medicine vinyl bag sample.

When these methods were applied to medicine vinyl bag samples, FFM and TBDMS derivatization will be discussed with QC method of medicine vinyl bag sample.

### P-057 [의약품/화장품]

# Isolation and structure elucidation of sageretizanin, novel flavonoid glycoside from the fruit of *Sageretia theezans* Brongn (Rhamnaceae)

<u>Yeon Woo Jung</u><sup>1</sup>, Hanna Cha<sup>1</sup>, Wonsik Jeong<sup>1</sup>, Ji Eun Lee<sup>1</sup>, Dong Woo Han<sup>1</sup>, GwangHun Park<sup>2</sup>, Youngki Park<sup>2</sup>, Sang-Hyun Koh<sup>2</sup>, Chun Whan Choi<sup>1</sup>, and Seong Su Hong<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Bio-Center, Gyeonggido Business & Science Accelerator (GBSA), <sup>2</sup>Forest Medicinal Resources
Research Center, National Institute of Forest Science
\*Corresponding author: bestgene@gbsa.or.kr

Previous phytochemical and pharmacological studies of the fruit of *Sageretia theezans* (Rhamnaceae) led to the isolation of a small number of anthocyanins and it having antioxidant activity. However, to date, no more study has been carried out to investigate the secondary metabolites from the fruit of *S. theezans*. In this phytochemical research of *S. theezans* fruit led to the isolation of a new flavone glycoside, sageretizanin (1) together with four quercetin derivatives (2 –5), five kaempferol derivatives (6–10), two myricetin derivatives (11 and 12), and four flavanones (13 –16). The structures of the isolated compounds were identified on the basis of their NMR spectroscopic (1H, 13C, DEPT, COSY, HSQC, HMBC, and ESI-MS) data and comparison with literature data. To the best of our knowledge, compounds 7 and 13–16 were obtained from the genus *Sageretia* for the first time. Moreover, compounds 7 and 13 has not been reported in the family of Rhamnaceae. Among them, (-)-aromadendrin-7-O-glucoside (7) was isolated for the second time from natural sources.

#### **Keywords**

Sageretia theezans, Rhamnaceae, kaempferol, myricetin, quercetin, flavanone

### P-058 [의약품/화장품]

## Phytochemical constituents from the leaves of Sageretia theezans Brongn

Hanna Cha<sup>1</sup>, Yeon Woo Jung<sup>1</sup>, Wonsik Jeong<sup>1</sup>, Ji Eun Lee<sup>1</sup>,Dong Woo Han<sup>1</sup>, Gwang Hun Park<sup>2</sup>, Youngki Park<sup>2</sup>, Sang-Hyun Koh<sup>2</sup>, Chun Whan Choi<sup>1</sup>, and Seong Su Hong<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Bio-Center, Gyeonggido Business & Science Accelerator (GBSA), <sup>2</sup>Forest Medicinal Resources Research Center, National Institute of Forest Science \*Corresponding author: bestgene@gbsa.or.kr

Sageretia theezans, commonly known as Chinese bird plum, is an evergreen tender shrub of the Rhamnaceae family. In Korea, it grows along the southern seashore areas, and traditionally the leaves have been used as tea materials. Although *S. theezans* is widely used to create bonsais, it has been used in traditional herbal medicine for the treatment of hepatitis and fevers in Korea and China. *S. theezans* has been reported to show various pharmacological activities for neuroprotective, hepatoprotective and anti-oxidant. However, there have been only a few chemical composition studies of *S. theezans* so far. In this study, phytochemicals (1–11) were isolated from the ethanol extract of *S. theezans* leaves using different chromatographic techniques, and the chemical structures of isolates were elucidated as anthraquinone glycoside (1), five myricetin glycosides (2–6), three quercetin glycosides (7–9), a flavanol (10), and a simple phenolic compound (11) by NMR and mass analysis, and comparison to the literature. To the best our knowledge, compounds 1, 5, and 10 were obtained from the genus *Sageretia* for the first time.

#### **Keywords**

Sageretia theezans, Rhamnaceae, myricetin, quercetin, anthraquinone

### P-059 [의약품/화장품]

### Isolation and structure of new \(\beta\)-carboline alkaloids from \(Silene\) seoulensis

### Changon Seo, Seong Su Hong, Jin Gwan Kwon, Yongmun Choi, Jin Kyu Kim\*

Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator \*Corresponding author: jinkyu90@gbsa.or.kr

The genus *Silene* (family Caryophyllaceae) includes several herbaceous plants, which are primarily distributed in the temperate regions of the Northern Hemisphere of Eurasia and America, and Africa. Some species of this family have been used in traditional folk medicine for the treatment of bronchitis, colds, inflammations, and infections, and have also been used as analgesics, antipyretics, diuretics, and emetics. Furthermore, *Silene* species exhibit a broad range of pharmacological activities, such as antimicrobial, anti-inflammatory, antioxidant, antitumor, antiviral, hepatoprotection, immunomodulatory, and phagocytic activities. Previous phytochemical investigations of the members of this genus have resulted in the isolation of several classes of compounds, which include benzenoids, *N*-containing derivatives, flavonoids, fatty acids, phytoecdysteroids, triterpene saponins, terpenoids, and sterols.

S. seoulensis Nakia is an annual herbaceous plant: it belongs to the Silene genus, and is widely distributed across East Asia, mainly in South Korea. To the best of our knowledge, there has been no report on the phytochemical investigations of S. seoulensis thus far. In this paper, we report the isolation of four new  $\beta$ -carboline alkaloids, called siliendines A-D(1-4), along with three known compounds (5-8), from the EtOH extract of the aerial parts of S. seoulensis using various chromatographic methods, which yielded four new compounds (1-4), as well as two phenolic derivatives (5 and 6), a fatty acid (7), and a flavonoid glycoside (8). The structures of the new compounds were established using multiple spectroscopic approaches, with techniques such as HRESIMS and NMR, which included HSQC and HMBC. The known compounds were identified by comparing their spectra with those of the reported compounds.

### P-060 [식품/농학]

# Studies on chemical constituents and method validation of Rutin from *Sambucus nigra* L. (Elderberry)

# <u>Changon Seo</u>, Jin Gwan Kwon, Woo Jung Kim, Yongmun Choi, Myung-Jin Song, Jin Kyu Kim\*

Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator \*Corresponding author: jinkyu90@gbsa.or.kr

Sambucus nigra L. (European elderberry or black elderberry, Familia Adoxaceae) is a good source of biologically active components, primarily flavonols, phenolic acids and antocyanins. Polyphenols are found in its fruits. Elderberry fruits or flowers are traditionally used because of their diuretic and diaphoretic properties, and in the treatment of viral infections, for example influenza. Many studies confirmed the benefits of *S. nigra* as an antiviral drug but also in the treatment and prevention of diabetes, cardiovascular diseases and cancers. Therefore, elderberry is one of the medicinal plants of particular interest, suitable for pharmaceutical and food purposes.

The *S. nigra* was extracted with hot water for 2 hr. The extract was filtered and dried by freeze dryer. The extracted of each fraction by column chromatography separation (MPLC and prep-HPLC) and HPLC analysis to yield compounds **1-8**. The structures of the isolated compounds were identified by analysis of 1D ( $^1$ H,  $^{13}$ C, and DEPT) and 2D NMR (COSY, HSQC, and HMBC) and mass spectrometry data (MS), along with comparison with those in the literatures. The structures of these compounds were elucidated as tyrosine (**1**), N-(1-Deoxy-D-fructos-1-yl)-L-leucine (**2**), 4-( $\beta$ -D-glucosyloxy) benzoic acid (**3**), N-(1-Deoxy-D-fructos-1-yl)-L-tyrosine (**4**), protocatechuic acid (**5**), L-Phenylalanine (**6**), and 2-Hydroxy-4-(2-hydroxyethyl)phenyl  $\beta$ -D-glucopyranoside (**7**), and rutin (**8**) on the basis of spectral analysis and comparision with literature values. To the best our knowledge, compounds **2-4**, and **7** were obtained from the *S. nigra* for the first time.

HPLC was performed on a Capcell-PAK MG $\Pi$  C18 (4.6 × 250 mm, 5µm) with a gradient elution of 0.1% (v/v) trifluoroacetic acid (TFA) and acetonitrile at a flow rate of 1.0 mL/min at 30°C. The analyte was detected at 355 nm. HPLC was performed by International Conference on Harmonization (ICH) guideline of analytical procedures with respect to specificity, precision, accuracy and linearity. Calibration curve was showed good linearity ( $R^2 = 0.99995$ ). The limites of detection and quantitative were 0.0024 and 0.0072 mg/mL, respectively. Precision of analysis was showed less than 2.0%. Recoveries of quantified compounds ranged from 98.09 to 101.37%. From the above results, we established HPLC method is satisfied for the determination of maker compound in *S. nigra*.

### P-061 [식품/농학]

## LC-MS method for screening of glycidol fatty acid esters in processed oils

### Seo Mi Suk and Woo Jung Kim\*

Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator

Glycidol fatty acid esters are newly identified contaminants mainly existed and detected in refined oils and fats. Since the glycidol esters can be released as glycidol which is a known genotoxic carcinogen in processing steps, a novel method for rapid screening was developed and optimized using UPLC-LTQ-Orbitrap MS. For simultaneous analysis of glycidol fatty acid esters, total ion count in a positive ion mode of atmospheric chemical ionization with a C18 stationary phase using gradient elution was employed. Eight samples of oils comprised of diacyl and triacyl glycerol which represent typical oil processing step were analyzed. Only in deodorization step, glycidol esters were detected in both diacyl glycerol rich portion and triacyl glycerol rich portion. This method could be implemented as a screening method for glycidol derivatives in oil research.

### P-062 [식품/농학]

# Determination of mineral contents in soybean paste, soy sauce and red pepper paste by region using ICP-OES and ICP-MS

<u>Dongwon Seo</u><sup>1,★</sup>, Junyoung Lee<sup>1</sup>, Jisu Park<sup>1</sup>, Suhyun Koh<sup>1</sup>

1,\*Food Analysis Research Center, Korea Food Research Institute \*Corresponding author: dwseo@kfri.re.kr

Soybean paste, soy sauce and red pepper paste are traditional Korean foods and have important nutritional and health significance. In this study, the macro (Ca, Fe, Mg, P, K, Na, Zn, Cu and Mn) and micro (Se, Mo and I) mineral content of soybean paste, soy sauce and red pepper paste was analyzed using ICP-OES and ICP-MS. Standard Reference Material (SRM) 1566b was purchased from National Institute of Standards & Technology in USA. The sample was digested with 8 mL of HNO<sub>3</sub> and 2 mL of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> using the microwave. This solution was cooled and diluted with deionized water. Diluted solution was injected into the inductively coupled plasma optical emission spectrometry (ICP-OES) and the inductively coupled plasma mass spectrometer (ICP-MS) to determine minerals. This method provided good correlation (r>0.9999), limit of detection (<0.06 mg/kg), limit of quantitation (<0.21 mg/kg) and recovery (97.1 ~ 102.3 %) within the test ranges. In case of Na contents in soybean paste, soy sauce and red pepper paste by region were 4397 ~ 5766 mg/100g, 6952 ~ 9151 mg/100g and 2176 ~ 3836 mg/100g, respectively. Fe contents in soybean paste, soy sauce and red pepper paste by region were 2.8  $\sim$  4.0 mg/100g, 0.3  $\sim$  1.5 mg/100g and 1.6  $\sim$  2.6 mg/100g, respectively. Therefore, it seems that the mineral contents could be used as nutritional food ingredient database for national health promotion and Korean standard food composition table. \*This research was supported by a grant (PJ013397022021) from Rural Development Administration.

### P-063 [식품/농학]

# Analysis of macro and micro mineral contents in hot pots and stews using ICP-OES and ICP-MS

<u>Dongwon Seo</u><sup>1,★</sup>, Suhyun Koh<sup>1</sup>, Jisu Park<sup>1</sup>, Junyoung Lee<sup>1</sup>

1,\*Food Analysis Research Center, Korea Food Research Institute \*Corresponding author: dwseo@kfri.re.kr

In this study, the mineral content of hot pots and stews was analyzed using ICP-OES and ICP-MS. Standard Reference Material (SRM) 1849a was purchased from National Institute of Standards & Technology in USA. The sample was digested with 8 mL of HNO $_3$  and 2 mL of H $_2$ O $_2$  using the microwave. This solution was cooled and diluted with deionized water. Diluted solution was injected into the inductively the coupled plasma optical emission spectrometry (Ca, Fe, Mg, P, K, Na, Zn, Cu and Mn) and the inductively coupled plasma mass spectrometer (Se, Mo and I) to determine minerals. This method provided good correlation (r>0.999), limit of detection (<0.06 mg/kg), limit of quantitation (<0.18 mg/kg), inter-day (<10.8 %RSD) and intra-day (<8.1 %RSD) within the test ranges. In case of Na contents in hot pot and stew were 276.2 ~ 364.5 mg/100g and 272.9 ~ 382.7 mg/100g, respectively. Mg contents in hot pot and stew were 11.7 ~ 21.8 mg/100g and 9.9 ~ 62.9 mg/100g, respectively. Therefore, it seems that the mineral contents could be used as nutritional food ingredient database for national health promotion. \*This research was supported by a grant (20162MFD087) from Ministry of Food and Drug Safety in 2021.

### P-064 [식품/농학]

## 식품 중 중금속(납) 분야 국가표준실험실 구축을 위한 측정불확도 추정

김나은, 박예슬, 이지안, 이화정, 구용의\*

식품의약품안전처 식품의약품안전평가원 오염물질과 \*Corresponding author: kye2020@korea.kr

식품 중 중금속(납) 분야 국가표준실험실 구축을 위하여 분석에 영향을 미치는 불확도 요인을 파악하고 측정불확도를 산출하여 분석결과의 신뢰성을 확보하고자 하였다. 측정불확도는 시험과정 중발생 할 수 있는 불확도의 요인들을 추출하고 이에 대한 불확도 값을 산출하여 분석결과의 신뢰성 및 정확성을 향상시키는 것으로, 분석결과의 불확도를 예측하고 감소시킬 수 있는 대안이 될 수 있다. 숙련된 시험원이 공인된 방법으로 분석하더라도 시료 전처리, 기기분석 등의 요소로 인하여 일관된 분석결과를 산출하기는 현실적으로 매우 어려울 수 있다. 이에 따라 식품 중 납 시험결과의 신뢰도를 높이기 위해 시험용액 및 표준용액의 조제과정, 시료 무게 측정, 시료 반복 측정 등 전(全) 과정에서 불확도를 추정하였다. 시험은 납을 함유한 인증표준물질(certified reference material, CRM)을 이용하여 식품공전 9.1.1 납에 따라 분석을 진행하였으며, 전처리 및 기기분석을 통한 정량과정에 대하여 모델 관계식을 설정하였다. 모델 관계식을 이용하여 각각의 불확도 요인에 대한 상대표준불확도(relative standard uncertainty,  $u_r$ ), 합성표준불확도(combined uncertainty,  $u_c$ )를 산출하여 측정불확도를 추정하였다. 합성표준불확도는 검량선 작성:  $u_r$  (CAL), 시료 반복 측정:  $u_r$  (REP), 표준용액 조제:  $u_r$  (STD), 시험 용액 조제:  $u_r$  (V), 시료 무게 측정:  $u_r$  (V) 등의 인자로 추정하였으며, 각 불확도 요인별 자유도 및 기여량을 산출하였다.

### P-065 [식품/농학]

# Simultaneous determination of Trichothecene mycotoxins in food using liquid chromatography coupled with tandem mass spectrometry

<u>Ji-Hyun Park</u>, Minji Choi, Young woon Kang, Hwa Jeong Lee, Yong Eui Koo\*

Food Contaminants Division, Food Safety Evaluation Dept, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety, 187, Osongsaengmyeong 2-ro, Heungdeok-gu, Cheongiu, 28159, Korea

Trichothecenes is a mycotoxin produced mainly by fungi of the genus *Fusarium*. This mycotoxin is largely divided into type A toxin including T-2 toxin, HT-2 toxin and type B toxin including deoxynivalenol, 3-acetyldeoxynivalenol, 15-acetyldeoxynivalenol. In this study, applicable method was established for the determination of 5 mycotoxins of trichothecenes (TCT) in rice, apple, chestnut and coffee using a liquid chromatography coupled with tandem mass spectrometry (LC-MS/MS). Uniformly labeled [ $^{13}$ C] analogues of the target analytes were used as internal standard. In this method, extraction was performed using 84% acetonitrile and purified using solid-phase extraction cartridge. Linearity was confirmed for the TCT in the range of  $10\sim250~\mu g/L$ . Limits of detection and limits of quantification were  $1.66\sim8.33~\mu g/kg$  and  $5\sim25~\mu g/kg$ , respectively. To be specific, the recovery rate of TCT in four representative samples was  $86.83\sim111.15\%$ , the relative deviation was  $0.98\sim12.40\%$ , and the determination coefficient ( $R^2$ ) was  $0.9845\sim0.9999$ . Also, the peak separation of trichothecenes was confirmed. According to this result, accuracy, precision, and specificity of this method satisfied the criteria of method validation in single laboratory.

P-066 [식품/농학]

Determination of Ni in hydrogenated fat-used food and chocolate-based products by microwave-assisted digestion with a single reaction chamber and subsequent ICP-MS analysis

Ye-Seul Park<sup>1</sup>, Jian Lee<sup>1</sup>, Hui-Yeong Seong<sup>1</sup>, Hwa-Jeong Lee<sup>1</sup>, Yong Eui Koo<sup>1</sup>★

Food Contaminants Division, Food Safety Evaluation Dept., National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety, 187,
Osongsaengmyeong 2-ro, Osong-eup, 28159
\*Corresponding author: kye2020@korea.kr

Nickel was a metal that can be present in products containing hydrogenated oils and fats because it is used as a catalyst in the curing process of vegetable oils such as mixed cooking oils, processed oils and fats, shortening, and margarine. In addition, since stainless steel is manufactured by making an alloy of iron with chromium, it can also be eluted from kitchen utensils. In particular, nickel can cause various toxic effects such as respiratory toxicity such as lung and nasal cancer and contact dermatitis when ingested in large amounts.

In this study, an analytical method was established in order to determine nickel in confectionery, bread, and chocolate-based products in South Korea. Sample preparation of microwave-assisted acid digestion was carried out in an eco-friendly manner using diluted nitric acid with a single reaction chamber at high temperature and pressure. Residual carbon content and residual acidity were evaluated for digestion efficiency. Determination of Ni in 100 samples of processed food products was performed by ICP-MS analysis.

The validation of the analytical method was investigated through some performance parameters including specificity, linearity, accuracy, precision, the limit of detection (LOD), and the limit of quantification (LOQ) according to the AOAC guideline. The recovery of Ni was confirmed with an average of 98.5% by using a certified reference substance (CRM) Baby food composite (NIST SRM2383a), and LOD and LOQ were values 0.009 mg/kg and 0.029 mg/kg, other validation items were also within the acceptable range of criteria.

P-067 [식품/농학]

# Occurrence and risk-assessment of tropane alkaloids in grains and infant foods in Korea

<u>Su-jin Oh</u><sup>1</sup>, Songyi Han<sup>1</sup>, Su kyung Jang<sup>1</sup>, Hwa-jeong Lee<sup>1</sup>, Yong-oui Koo<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Food Contaminants Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation,
Ministry of Food and Drug Safety

\*Corresponding author: kye2020@korea.kr

Tropane alkaloids (TAs) are naturally occurring secondary metabolites in plant. Some TAs such as Atropine and Scopolamine are known to cause acute neurotoxicity when consumed over a certain amount in food. Risk assessment studies are being conducted actively in foreign countries, but related research is lacking in Korea. Analysis of 15 TAs using UPLC-MS/MS was conducted with 100 samples including domestic and imported grains (rice, barley, buckwheat, wheat, sorghum, millet) and infant foods (follow-up formulas, baby foods for infants and young children). As a result, 4 low-molecular type of TAs (Tropinone, Pseudotropine, Scopine, 6-Hydroxytropine) and 2 Datura-type (Atropine, Scopolamine) were detected in 4 samples (baby foods for infants and young children, millet, barley, follow-up formula). The detection rate (%) of TAs was baby foods for infants and young children 3 cases (13%), millet 2 cases (20%), barley 1 cases (10%), and follow-up formula 1 cases (8%). The maximum level of Pseudotropine in baby foods for infants and young children was 19.28 μg/kg, 6-Hydroxytropine in follow-up formula was 2.78 μg/kg, Atropine in millet and baby food for infants and young children were 1.23, 0.52 µg/kg respectively. Scopolamine was detected in millet and baby food for infants and young children were 0.57, 0.25 µg/kg respectively. The exposure level of TAs estimated through the average intake of baby foods for infants and young children in 0-2 age groups ranged from  $0.07 \times 10^{-3} \,\mu g/kg$  bw/day (lower bound) to  $0.5 \times 10^{-3}$ μg/kg bw/day (upper bound), lower than ARfD 0.016 μg/kg bw/day(sum of atropine and scopolamine set by EFSA). It is expected that the results of the contamination degree and risk assessment derived from this study will be used as basic data in food safety management policies.

P-068 [식품/농학]

# Multi-residue analysis of 63 pesticides in livestock products using GC-MS/MS

Eun-Ji Park\*, Nam Young Kim, So Ra Park, Yong-hyun Jung, Gui-Im Moon

Pesticide and Veterinary Drug Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety

\*Corresponding author: eunji9352@korea.kr

The aim of this research is to develop a rapid and easy multi-residue analytical method for livestock products (beef, pork, chicken, milk, egg and fat) using gas chromatography-tandem mass spectrometry (GC-MS/MS). To determine multi-residue in livestock products, samples were prepared using QuEChERS (Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged and Safe) based method. Residual pesticides were extracted with acetonitrile followed by addition of anhydrous magnesium sulfate (MgSO<sub>4</sub>) and sodium chloride (NaCl). Then, the extracts were cleaned up using MgSO<sub>4</sub>, octadecyl ( $C_{18}$ ) and primary secondary amine (PSA). The method was validated by evaluating the following parameters: selectivity, linearity, accuracy, precision, limit of detection (LOD) and limit of quantification (LOQ). The matrix-matched calibration curves were constructed using 8 levels (2.5-100 ug/ml) and coefficient of determination ( $r^2$ ) was above 0.98. Average recoveries spiked at three levels (0.01, 0.02 and 0.1 mg/kg) were most in the range of 70~120% and standard deviation values were less than 32%, which is under the Codex guideline (CODEX CAC/GL 40). Therefore, the developed method is suitable and could be usefully used the multi-residue analysis in livestock products.

### P-069 [식품/농학]

# Development of an analytical method for Nitrapyrin and 6-CPA in agricultural products with GC-MS/MS and LC-MS/MS

# Sun Young Gu\*, Jung Mi Lee, Su Jung Lee, Hye-Sun Shin, Sung Eun Kang, Young-hyun Jung, and Gui Im Moon

Pesticide and Veterinary Drug Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation,
Ministry of Food and Drug Safety

\*Corresponding author: gsy0018@korea.kr

An analytical method was developed for the determination of nitrapyrin and its metabolite 6-CPA (6-chloro-picolinic acid) in agricultural products using the QuEChERS (Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged and Safe) method by GC-MS/MS (gas chromatography-tandem mass spectrometry) and LC-MS/MS (liquid chromatography-tandem mass spectrometry). The samples were extracted with 2% formic acid in acetonitrile followed by MgSO<sub>4</sub> (anhydrous magnesium sulfate), sodium chloride, disodium hydrogencitrate sesquihydrate, and trisodium citrate dihydrate. After centrifugation, supernatant layer was cleaned up using d-SPE (dispersive solid phase extraction) such as MgSO₄ and PSA (primary secondary amine) for nitrapyrin. The analytes were quantified and confirmed by using GC-MS/MS with MRM (multiple ion monitoring). For 6-CPA, supernatant layer was purified with a HLB (hydrophillic lipophillic balance) cartridge. The analytes were quantified and confirmed by using LC-MS/MS in positive ion mode with MRM (multiple reaction monitoring). The matrix-matched calibration curves were constructed using six levels, from 0.001 to 0.05 mg/L, and the coefficient of determination was above 0.99. The average recoveries of nitrapyrin at three different concentration levels (LOQ, 10LOQ, and 50LOQ, n=5) were from 79.1 to 109.9% with relative standard deviation (RSD) less than 13.1%. The average recoveries of 6-CPA at three different concentration levels (LOQ, 10LOQ, and 50LOQ, n=5) were from 76.2 to 100.6% with relative standard deviation (RSD) less than 10.2%. This results were satisfied with the criteria ranges requested in the Codex guidelines (CAC/GL 40-1993, 2003) and the Food Safety Evaluation Department guidelines (2016). Therefore nitrapyrin and 6-CPA could be analyzed with a modified method, and the method would be widely available to ensure the safety of residual pesticides in agricultural products.

### P-070 [식품/농학]

# Metabolomic study of organic acids and amino acids in pre- and post-milling barley by gas chromatography-tandem mass spectrometry

Byeongchan Choi<sup>1</sup>, Moongi Ji<sup>1</sup>, Songjin Oh<sup>1</sup>, Mi ja Lee<sup>2</sup>, Man-Jeong Paik<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>순천대학교 약학과, <sup>2</sup>국립식량과학원 \*Corresponding author: paik815@scnu.ac.kr

Barley (Hordeum vulgare), a member of the grass family, is a major cereal grain grown in temperate climates globally. It is the most widely adapted cereal grain species with various nutrients and provided as a peeled form after milling in the market. This milling process is known to cause changes in the nutritional composition and taste of barley as well as metabolite levels. However, metabolomic study between pre- and post-milling barley was not fully understood. Among many metabolites, amino acids (AAs) are essential components of organisms, which play an important role for evaluation of various tastes. In addition, organic acids (OAs) contribute to the flavor of foods. Thus, in this study, metabolomic study of OA and AA was performed in three species (Saechalssalbori, Hinchalssalbori, and Yeongbaekchal) of pre- and post-milling barley. Profiling analyses of OAs as methoxime/tert-butyldimethylsilyl (TBDMS) derivatives and AAs as ethoxylcarbonyl-TBDMS derivatives were performed by gas chromatography-tandem mass spectrometry. The 36 metabolite levels of 16 OAs and 20 AAs were determined in the three species. Altered OAs and AAs were monitored in post-milling compared with pre-milling. In Saechalssalbori, α-ketoglutaric and pipecolic acid were significantly decreased (*P*-value < 0.05). In *Hinchalssalbori*, malonic acid, oxaloacetic acid, alanine, glycine, α-aminobutyric acid, leucine, isoleucine, proline, pipecolic acid, serine, γ-aminobutyric acid, phenylalanine, and glutamic acid were significantly decreased. In Yeongbaekchal, glycolic acid, 2-hydroxybutyric acid, fumaric acid, 4-hydroxyphenylacetic acid, 2-hydroxyglutaric acid, pipecolic acid, y -aminobutyric acid, and tyrosine were significantly decreased, while  $\alpha$ -ketoglutaric acid, *cis*-aconitic acid, α-aminobutyric acid, pyroglutamic acid, and glutamine were significantly increased. In PLS-DA score plot, the three species were completely separated between pre- and post-milling. Therefore, the present metabolomic study will be useful for the monitoring of altered metabolites following physical milling processes.

Keywords: Barley, Milling process, Amino acid, Organic acid, Profiling analysis, Gas chromatographytandem mass spectrometry.

### P-071 [식품/농학]

# Monitoring of heavy metals contamination in agricultural products at abandoned mine area

<u>Eun-hee Chang</u><sup>1,★</sup>, Mi-jeong Gwon, Hwang-ran Hwang, Eun-mo Jeong 장은희<sup>1,★</sup>, 권미정, 황향란, 정은모

<sup>1</sup>Gyeongbuk Provincial Office, National Agriculture Products Quality Managemenet Service <sup>1</sup>국립농산물품질관리원 경북지원

Corresponding author: silvermile@korea.kr; Tel, 053-320-5391

This study was carried out to risk assessment of lead(Pb), cadmium(Cd), and inorganic arsenic(I-As) contamination in agricultural products at abandoned mine area in 27 crops including rice and vegetables. The 269 typical investigation sites located in Bongwha-gun area were selected by considering the heavy metal levels, that had been known that the amount of the heavy metals exceeded the contamination level based on the previous survey. The various samples were collected and performed using microwave device and ICP/MS in lead and cadmium(n=1,059). Inorganic arsenic was treatment of 1% nitric acid and using HPLC-ICP/MS(n=365). The Limit of detection(LOD), Limit of quantification(LOQ), and correlation coefficient( $R^2$ ) for heavy metals were 0.19-0.66 µg/kg, 0.19-0.65 µg/kg, and 0.9998-1.0000, respectively. Conclusively, it requires to consider the critical levels of heavy metals agricultural products due to unexpectedly high levels in few places while amount of heavy metals in the samples were relatively low in most areas.

Keywords: heavy metal, agricultural product, mine area, ICP/MS

### P-072 [식품/농학]

# Comparison of phenolics compounds between healthy and viroid-infected grapes in Korea

Nguyen Bao Tan<sup>1</sup>, Thi Phuong Duyen Vu<sup>1</sup>, In Sook Cho<sup>2</sup>, Young Ho Kim<sup>1</sup>, Hyung Min Kim<sup>1</sup>, Jong Seong Kang<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Chungnam National University, Daejeon 3414, Korea <sup>2</sup>Department of Horticultural and Crop Environment, National Institute of Horticultural and Herbal Science, RDA, Wanju 55365, Korea

\*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

Grapes are widely consumed fruits in Korea. It has been used for the products such as raisins, wine, juice, vinegar and sweet spreads. However, grapes are subject to viroid infection, causing malformed berries and reducing fruit quality and yield. In this study, effect of Grapevine yellow speckle viroid 1 (GYSVd1) on the phenolics in grape skin of three different cultivars including 'Campbell Early', 'Kyoho', and 'Shine muscat' were investigated by liquid chromatography method. Nineteen phenolic compounds in grape skin of three cultivars were detected using HPLC-PDA-MS/MS. Maximum wavelength of anthocyanins were determined at 520 nm while the others were quantified at 350 nm. The separation was achieved by using a mobile phase containing 10% formic acid in water (A) and 10% formic acid in acetonitrile (B) with a gradient elution (Tmin/B: T0/7; T20/20; T45/30; T60/60) at a flow rate of 0.7 mL/min. As a result, considerable decreases of anthocyanins in 'Campbell' and 'Kyoho' cultivars were observed in viroid infection group (p<0.05). Additionally, content of flavonols in viroid samples of all three cultivars increased signifacantly (p<0.05) and there were no significant change in phenolic acid content. Because of the viroid infection, flavonols seems to be more synthesized, which could act as the 'antibody' of grapes. However, reduction of anthocyanins will lead to low quality of the berries as well as products made from viroid-infected grapes.

### P-073 [식품/농학]

# Analysis in phenolic contents between healthy and viroid-infected apples using HPLC-PDA-ESI-MS/MS

Ninh Khac Thanh Tung<sup>1</sup>, Thi Phuong Duyen Vu<sup>1</sup>, In Sook Cho<sup>2</sup>, Kyung Tae Kim<sup>3</sup>, Seo Young Yang<sup>1</sup>, Young Ho Kim<sup>1</sup>, Hyung Min Kim<sup>1</sup>, Jong Seong Kang<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Chungnam National University, Daejeon 3414, Korea <sup>2</sup>Department of Horticultural and Crop Environment, National Institute of Horticultural and Herbal Science, RDA, Wanju 55365, Korea <sup>3</sup>Dong-Eui University, Busan 47340, Korea

\*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

Apples (Malus domestica Borkh.) are one of the most popular fruit in Korea which have played a significant economic role in the agricultural field. Recently, widespread of virus and/or viroid infection in apples had serious impact in Korea which affected the qualities of apples. This study compared healthy and viroid apples in three apple cultivars (Fuji, Gamhong and Hongro) by HPLC. Eleven compounds in apple peels were identified and quantified using HPLC-PDA-MS/MS and HPLC-UV at 280 nm. Analysis condition was optimized using mobile phase of 0.5% acetic acid in water (A) and methanol (B) with a gradual increase of 15% to 60% B for 60 minutes. Significant increases in the level of dihydrochalcones (in all three cultivars), hydroxycinnamic acid (in "Fuji"), and flavonols (in "Hongro") were detected in response to viroid infection. Additionally, the flavonol concentration of "Fuji" viroid-infected samples was significantly decreased. For the discrimination between healthy and viroid-infected samples, researchers developed an excellent linear discriminant model with 98.2% accuracy and 94.6% predictive capacity. The developed method can be used to identify viroid-infected apples and assess their quality.

### P-074 [식품/농학]

# Screening and quantitative analysis of plant-growth regulators from metabolites of microorganisms by using QuEChERS and LC-MS/MS

## Jeongeun Kim, Jueun Kim, Chul Won Lee\*

Department of Chemistry, Chonnam National University

\*Corresponding author: cwlee@jnu.ac.kr

Recently, the worldwide market share of using biological pesticides, using biological materials such as effective microorganisms, natural enemies, and plant extracts to control plant diseases, pests and weeds, and fertilizers is increasing to combat the problems of using chemical pesticides and fertilizers. In addition, the concerns about environmental pollution caused by synthetic growth regulators are let people demand for eco-friendly growth regulators to replace them. Plant-growth regulators can control plant growth and development, such as the formation of flowers and leaves, elongation of stems, and development of fruits, by modifying physiological characteristics of plants. These plant-growth regulators are known to be produced not only in plants but also in microorganisms including various fungi and bacteria.

In line with this trend, we established the analysis methods of three well known plants regulators, indole acetic acid, Gibberellin and Kinetin, which are produced by microorganisms and plant cells. First, a standard of each material was purchased and dissolved in 50% acetonitrile including 0.1% formic acid to concentration of 1000  $\mu$ g/mL , and then diluted with the same buffer to 1  $\mu$ g/mL. Then, the precursor ion (Q1) and product ion (Q3) values were set for multiple simultaneous analysis in positive mode of ESI-MS/MS, and HPLC-MS/MS conditions for the standard mixture were established. Finally, the culture supernatant containing the metabolites of effective microorganisms was prepared through the QuEChERS (Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged, and Safe) method, and analyzed whether the target materials were contained.

#### P-075 [식품/농학]

# Establishment of simultaneous analysis method for Indole acetic acid, Abscisic acid, and Jasmonic acid in bacteria using HPLC-MS/MS

# Myeonghan Yoo, Jueun Kim, Chul Won Lee\*

Department of Chemistry, Chonnam National University

\*Corresponding author: cwlee@jnu.ac.kr

Indole acetic acid(IAA), Abscisic acid(ABA), and Jasmonic acid(JA) are used as plant- growth regulators. IAA promotes cell growth to regulate fallen leaves and fruits, promote growth of fruits, and root development, but it also has side effects that suppress growth when treated at excessive concentration. IAA and ABA are confirmed to be produced by some bacteria.

In this study, we developed and validated simultaneous analysis method to analyze IAA, ABA and JA using high-performance liquid chromatography-mass/mass spectrometer (HPLC-MS/MS). And QuEChERS(quick, easy, cheap, effective, rugged, and safe) method was used to extract substances from bacteria growth media. The limit of detection and limit of quantification of IAA, ABA and JA were 0.04 and 0.16  $\mu$ g/mL, 0.008 and 0.02  $\mu$ g/mL and 0.18 and 0.30  $\mu$ g/mL, respectively. Standard calibration curve of IAA, ABA and JA presented linearity with the correlation coefficient (R²) > 0.998, 0.999, 0.997. Finally we confirmed that IAA was extracted from *Bacillus velezensis* culture broth.

#### P-076 [식품/농학]

# Research on Hazardous Materials in Fishery Products in Busan Area

<u>Jiyoon Lee</u>\*, Hocheol Yun, Hyeonjeong Kwon, Eungung Jeong, Hyunnho Cho, Dayoung Kim, Seongju Lee, Jung-mi Kang

Busan Metropolitan City Institute of Health and Environment, Food Analysis Team
\*Corresponding author: mero214@korea.kr

To ensure the safety of fishery products marketed in Busan, 42 residual veterinary drugs, heavy metals (Pb, Cd and Hg) and radioactivity (131 l, 134 Cs, 137 Cs) were analyzed. Fishery products were collected in 2020 from January to November, and collected products were divided into groups for further analysis. Fifty-one samples were analyzed for residual veterinary drugs, 157 samples for heavy metals and 322 samples for radioactivity. LC-MS/MS analysis showed that veterinary drugs were detected in 9 cases in 4 species of fishery products. Detected samples were Rockfish (5 cases), Olive flounder (2 cases), Sea bass (1 case) and Gizzard shad (1 case). The detected veterinary drugs were ciprofloxacin (3 cases), trimethoprim (3 cases), lincomycin (2 cases) and enrofloxacin (1 case), and the concentrations were below MRL (Maximum Residue Limit).

A total of 157 samples were analyzed for heavy metals using ICP-MS and mean concentrations were 0.024 mg/kg for Pb, 0.063 mg/kg for Cd and 0.074 mg/kg for Hg. The concentrations of Pb, Cd and Hg were within MRL. Radioactivity was measured by HPGe spectrometer and among the 322 samples tested, radioactivity was not detected in 321 samples which means that the activity was below MDA (Minimum Detectable Activity). For 1 sample (Sea bass), 0.88 Bq/kg of <sup>137</sup>Cs was detected, but <sup>238</sup>Pu, <sup>239</sup>Pu, <sup>240</sup>Pu and <sup>90</sup>Sr were not detected in the subsequent experiment.

#### P-077 [식품/농학]

# Discrimination of the geographical origin of soybean products using energy dispersive XRF spectrometry and NIR spectroscopy

김남훈\*, 조주연, 박주현, 장미라, 김애경, 유인실, 황인숙

서울시보건환경연구원 식품의약품부
\*Corresponding author: nhkim70@seoul.go.kr

Soybeans (Glycine max(L.) Merrill) have been utilized as principal food resources owing to their rich nutrients including protein, fat, vitamin B, and mineral. Consumers are increasingly concerned about the origin of foods, so accurate labelling of origin has become very important. In this study, a non-destructive and rapid technique like energy dispersive X-ray fluorescence spectrometry (ED-XRF) and near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) was applied for classifying the geographical origin of soybeans. Multivariate statistical methods, including principal component analysis (PCA), discriminant analysis (DA), and discriminant partial least squares (DPLS), were applied to the spectral data to discriminate the origin of soybeans. A statistically significant difference was observed in the elemental determination of Al, P, S, Cl, Ca, Fe, Ni, Cu, and Zn between domestic and imported soybeans. A total of 112 samples were perfectly classified according to their origins in the application of DA with ED-XRF. NIRS based on DA application showed excellent classification with 99.1% accuracy after optimizing spectral pretreatment. NIRS based on DPLS model with cross-validation showed 100% prediction results using the first or second derivative pretreatment of raw spectrum with smoothing techniques of Salvitzy-Golay or Norris derivative. Calibration and validation statistics on DPLS model for root mean square error of calibration (RMSEC) and root mean square error of cross-validation (RMSECV) were found to be 0.132-0.472% and 0.146-0.491% respectively. These results suggest that ED-XRF and NIRS combined with multivariate statistical analysis can be suitable technology for efficient determination in the geographical origin of soybean products.

#### P-078 [식품/농학]

# Changes in major components of royal jelly depending on harvest times

<u>Eun-hee Kim</u>\*, Jeong-sook Lee, Hee-jeong Jeong, Yun-hee Kim, Jung-hyun Park, Yae-jae Shin, Ju-sung Park, In-sook Hwang and Yong-seung Shin

Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

\*Corresponding author: unimir@seoul.go.kr

This study was intended to serve as a basis for determining the quality control and authenticity of royal jelly by identifying changes in the major components of royal jelly. Since the components of royal jelly are affected by various environments such as nectar source and seasons, it was analyzed that they were provided monthly from a farm in Gyeongsangnam-do to obtain reliable results. From March to July, 40 samples of Royal Jelly were investigated for the content of 10-hydroxy-2-decenoic acid(10-HDA), carbon isotope ratio, saccharide and water.

As a result of analyzed 10-HDA with high performance liquid chromatograph diode-array detector, it showed a wide range of  $1.5\sim2.5\%$ , and some showed a lower value than the standard value (1.6%) of the Korean Food Standards Codex. The carbon isotope ratios were measured using an elemental analysis isotope ratio mass spectrometry, and the range was -17.3 to -24.0 %. Saccahride were measured by ultra performance liquid chromatography with evaporative light scattering detector and the analyzed components were fructose, glucose and sucrose. Fructose showed  $2.7\sim6.1\%$ , glucose  $2.9\sim4.9\%$ , and sucrose  $0.9\sim5.4\%$ . The water content analyzed by vacuum drying method (70 °C, 4 hours,  $25\pm5$  mmHg) was  $60.1\sim67.1\%$ .

Pearson correlation coefficient between variables was analyzed using IBM SPSS Statistics 24.0 software. As a result, correlations were confirmed between variables such as 10-HDA and water content, carbon isotope ratio and sucrose (P<0.01).

#### P-079 [식품/농학]

# Molecular weight distribution analysis of fish collagen using gel permeation chromatography (GPC)

Hee-Jin Yoo<sup>1,2</sup>, Duck-Hyun Kim¹ and Kun Cho<sup>1,3</sup>★

<sup>1</sup>Center for Research Equipment, Korea Basic Science Institute (KBSI), <sup>2</sup>Department of Chemistry, Sogang University, <sup>3</sup>Bio-Analytical Science, University of Science and Technology (UST)

\*Corresponding author: chokun@kbsi.re.kr

People are increasingly interested in health functional foods, especially low-molecular collagen peptides that are upgraded every time to prevent skin aging and maintain physical health. However, for collagen, the qualitative effect of the product is different depending on the raw material, synthesis method, and enzyme treatment method and so on. Although it depends on the standard, in general, the higher the amount absorbed in the body, the greater the effect. However, in reality, a method that can objectively verify the efficacy of such collagen has not yet been developed. The purpose of this study is to research a method for confirming the overall molecular weight distribution of collagen prepared with various components. As a first step in the research on the molecular size and distribution of collagen peptides, which has recently been an issue, an analysis was attempted using Gel Permeation Chromatography (GPC), the most representative instrument for measuring the molecular weight and distribution of polymers. In order to apply the collagen sample to this instrument, we need to find the right conditions for GPC analysis, but it is very tricky. so there are many conditions to be aware of. Therefore, it is considered to be a very meaningful study in that it is an early stage to use GPC and a data processing system for analysis to confirm the overall molecular weight distribution using various collagen samples.

P-080 [식품/농학]

# Method Development for the Analysis of Fenitrothion and Malathion in Food by Isotope Dilution Mass Spectrometry

Kebede G. Mekete<sup>1,2</sup>, 안성희<sup>2,★</sup>

<sup>1</sup>University of Science and Technology, <sup>2</sup>한국표준과학연구원 \*Corresponding author: sahn@kriss.re.kr

Fenitrothion and malathion are organophosphorus pesticides which are used world widely even though they are regulated in many nations and organizations. Our laboratory has employed isotope dilution mass spectrometyr (IDMS) as a reference method for accurate determination of these analytes in kimchi cabbage and strawberry. In this presentation, two sample preparation method, SPE and QuEChERS, were compared for selection of the appropriate sample clean-up method. In additions, two gas chromatography columns with different polarity were compared for separation. To develop the ID-GC/MS/MS method, the scan mode and product ion mode MS spectrum were observed for appropriate MS/MS channel. The selected MS channels were at m/z  $277 \rightarrow 260$  for fenitrothion and at m/z  $173 \rightarrow 99$  for malathion. The results were compared with fortified values (10  $\mu$ g/kg, 25  $\mu$ g/kg, 100  $\mu$ g/kg, and 250  $\mu$ g/kg) and measured values by the selected method and conditions. The method will be applied to the certified reference materials provided by KRISS.

P-081 [무기/재료]

# 분석기기를 활용한 광물 판별 방법 간의 차이 및 상호 보완

최은철, 구민호\*, 성미나, 노을, 손형석

한국광해광업공단

Corresponding author: 9mino@kores.or.kr

광물감정은 분석과 달리 정확한 수치로 광물이 판단되는 것이 아니라 광물에서 나타나는 다양한 특 징을 고려하여 특정 광물로 감정한다. 광물을 판단할 때 주로 사용되는 분석장비는 편광현미경(투과 및 반사), X-선 회절분석기, 적외선 분광기(IR)가 있다. 본 연구는 광물 구분시 각각의 분석기기에 따른 장단 점을 파악한 후 효과적인 상호 보완 방식을 제시하고자 하는 것을 목적으로 한다. 편광현미경의 경우 편 광된 빛을 조사하여 광물을 투과하거나 반사시켜 굴절 또는 반사된 빛을 확인하여 색, 벽개, 소광각, 형 태, 간섭상 등 다양한 특징을 확인할 수 있는 장점이 있는 반면, 암석의 특정 부분을 확인하는 방식으로 불균질한 암석 내에서 광물을 확인해야 한다는 점과 입자가 10 🔎 이하의 경우나 분상인 경우 제한적으 로 확인 가능하다는 단점이 있다. X-선 회절분석기(X-ray diffractometer)의 경우 현미경과 달리 특정한 각도로 X-선을 조사하면 광물 내 격자간격에 따라 보강간섭이 일어나는 특징으로 광물을 식별하는 방식 으로 분말 시료의 경우 균질성을 확보하기는 좋으며, 미립의 입자를 식별할 수 있는 장점이 있으나 백운 모, 흑운모와 같이 유사한 격자구조를 가진 광물간 구분이 어려우며 주요하게 보강간섭이 일어나는 격자 간격이 7Å, 10Å, 14Å 의 경우에는 해당되는 광물이 많아서 식별하기 힘들다는 단점을 가진다. 적외선 분광기(Infrared spectroscopy)의 경우 IR을 시료로 조사하면 분자운동이 일어나며 분자운동이 일어나는 주파수 영역에 반응한 결과를 가지고 추정된 분자구조를 바탕으로 광물을 식별하는 방식으로 작용기가 있는 경우 함유 광물이나 탄산염 광물의 경우 구분이 유효하나 함수 규산염 광물인 점토나 운모류, 각섬 석류를 제외한 무수 규산염 광물의 경우 식별을 할 수 없다는 단점이 있다. 또한 적외선 분광법 및 X-선 회절 분석법은 빛을 조사하는 영역을 줄이고는 있으나 특정 광물이 아니 일정 영역에 대한 분석으로 둘 이상의 결과가 서로 영향을 준다는 단점이 있다. 광물을 판별하는 시료에서 각각의 광물의 입자경계가 육안으로 식별이 가능한 경우 현미경을 통한 분석이 우선 선택되어야 하며, 입자가 보이지 않는 경우 X-선 회절 분석이 우선적으로 시행되어야 하며 X-선 회절 결과 7Å, 10Å, 14Å에서 검출세기가 높게 나온 경우 편광현미경이나 적외선 분광기가 병행되어야 한다. 따라서 특정하고자 하는 대상 시료에 따라서 적 합한 분석기기를 선택하는 것이 우선되어 야 하며, 경우에 따라 둘 이상의 분석기기를 이용하여 상호 결 과를 보완해야 신뢰도 높은 광물 식별이 가능하다.

#### P-082 [무기/재료]

# 텅스텐 광물 중의 Si 정량

고경수, 정봉근\*, 허환기, 김행운

한국광해광업공단 \*Corresponding author: bgjeong@komir.or.kr

규소는 주기율표의 14쪽에서 탄소 다음에 위치하는 두 번째 원소로 지각에 27.7 %로 산소 다음으로 풍부하게 존재하는 원소로 필요 금속을 선광 및 제련하는 과정에서 불순물로 영향을 준다. 따라서 이러한 영향을 최소화하기 위해 규소 함유량의 정확한 분석이 필요하다.

특히 텅스텐 광물의 규소는 텅스텐과 유사한 성질을 갖고 있어서 기존의 일반적인 방법으로는 정확한 정량에 어려움이 있다. 따라서 본 연구에서는 텅스텐 광물 시료를 산분해 또는 용융 후 텅스텐과 규소를 분리하여 무게분석법으로 실리카로써 정량하는 방법에 대하여 검토하였다.

먼저 텅스텐을 산분해 하면 텅스텐 화합물인 노란색의 텅스텐산 $(H_2WO_4)$ 이 형성되고 이 텅스텐산이 암모니아에 녹는 성질을 이용하여 텅스텐과 규소를 분리하여 정량하는 방법에 대하여 실험하였다. 두 번째로 텅스텐 용액에 주석산을 첨가하면 텅스텐의 침전이 생기지 않는 성질을 이용해서 실리카를 정량하고자 하였다. 그러나, 이 두가지 방법으로는 실리카 침전에서 텅스텐을 제거하는 효과를 보지못했다.

마지막으로 시료를 용융 분해 후 과염소산에 인산을 첨가한 혼합산으로 탈수하는 실험을 진행했을 때 실리카 침전에서 텅스텐이 제거되는 것을 확인할 수 있었다.

#### P-083 [무기/재료]

# 자동차용 알루미늄 판재의 규소 분석 방법에 관한 연구

박태창1,\*, 고경수2, 윤순모1, 정봉근2, 서용기1

1,★현대제철 재료분석팀, 2한국광물자원공사 광물분석팀

\*Corresponding author: tae\_chang@hyundai-steel.com

차량 경량화는 연비 향상 및 배기가스 배출 감소를 위한 가장 현실적인 대안이며, 최근 고성능 프리미엄 차체를 중심으로 알루미늄, CFRP 등과 같은 경량화 소재의 적용이 확대되고 있는 추세이다. 경량화 효과를 고려하면 CFRP 소재가 가장 우수하나 비용이 비싸다는 단점을 가지고 있다. 반면에 알루미늄은 상대적으로 비용 대비 효과가 우수하고 자동차 내 적용 가능 부품도 다양하여, 현재는 가장 현실적인 경량소재로 주목을 받고 있다. 당사에서도 자동차용 알루미늄 확대적용을 위해 ICP-OES를 활용한 분석 의뢰 물량이 증가하고 있으나, 분석 성분 중 규소(Si)의 결과 재현성이 떨어지는 문제점이 발생되고 있다. 본 연구에서는 이러한 문제를 해결하기 위해서 기존 방법과 다른 새로운 알루미늄 샘플 전처리 조건에 관한 연구를 진행하였다. 결과 재현성 확보를 위해 염산과 과염소산을 이용한 2가지산처리 적용 절차를 제시하였으며, 각 전처리 적용결과에 대한 비교검증을 통해 유효성을 확인하였다.

#### P-084 [무기/재료]

# 국내 멜레크기 합성다이아몬드 유통현황 및 분석연구

### 이보현\*, 이영주

서울주얼리지원센터(SJC) 감정연구소 \*Corresponding author: bohyunlee@hanmail.net

1955년 General Electric(GE)사가 다이아몬드 고온고압(HPHT) 합성에 성공하고 20년 뒤인 70년대에 보석품질의 캐럿 크기 다이아몬드 합성에 성공했다. 그러나 보석으로 사용될 수 있는 품질의 합성다이 아몬드가 본격적으로 유통되고 판매가 되기 시작한 것은 1990년대에 들어와서이다. 1995년, 국내에는 타산성의 문제로 큰 크기의 합성 다이아몬드만 유통되었는데 공업용 다이아몬드의 90% 이상을 생산하던 중국 기업들이 보석용 다이아몬드 합성을 시작하면서 2015년 이후부터 멜레크기(직경 0.9~3.0mm) 합성다이아몬드의 유통이 전 세계적으로 본격화되었다.

2017년 서울주얼리지원센터는 멜레크기 다이아몬드 자동선별장비를 도입하여 천연다이아몬드에 혼재된 합성다이아몬드를 빠르게 필터링하여 국내 시장을 보호해 왔다.

그러나 전 세계적으로 합성다이아몬드의 생산능력 증가와 기술발전으로 단가경쟁이 치열해지면서 가격은 지속적으로 하락하고 있으며 국내에서도 수요가 증가하고 있다. 특히, 다이아몬드 유사보석인 합성큐빅지르코니아의 대체재로 멜레크기 합성다이아몬드가 국내 주얼리시장에서 증가하고 있는 추세 이다.

서울주얼리지원센터에서는 자동화선별장비 및 추가분석 시스템을 통하여 합성다이아몬드의 유통현황 및 특성을 분석하였다. 2021년도부터 멜레크기 합성다이아몬드의 의뢰가 급증하고 있으며 합성다이아몬드에서 천연다이아몬드 및 유사석, 모조석을 선별 요청하는 사례가 증가하고 있기에 국내 합성다이아몬드의 유통현황에 대해 사례별 분석을 실시하였다. 의뢰된 멜레크기 합성다이아몬드의 대부분은 고온고압(HPHT)법으로 제조된 것이 대부분이며 기상증착합성(CVD)법으로 제조된 것이 그 뒤를 이었다. 더불어 다이아몬드가 아닌 모조석이 혼재된 사례로는 합성큐빅지르코니아가 가장 많았으며 천연다이아몬드, 무색의 유색석 순으로 확인되었다.

국내 다이아몬드시장에 멜레크기의 합성다이아몬드가 진입하기 시작한 것은 2016년도 후반이지만 지금은 유통량이 급증 뿐 아니라 소비자층도 증가하고 있는 실정이므로 이에 대한 꾸준한 모니터링과 소비자피해가 발생하지 않도록 시장상황에 맞는 가이드라인과 분석법이 추가적으로 검토되어져야 할 필요성이 있다.

#### P-085 [무기/재료]

# LA-MC-ICPMS를 이용한 괘불탱에 사용된 안료의 납 동위원소 분석

정연중1,\*, 김숙주1, 한기운1, 김효진1, 김소진2, 이은우2

¹/\*한국기초과학지원연구원 환경분석팀, ²국립문화재연구소 보존과학연구실 \*Corresponding author: hero0123@kbsi.re.kr

회화문화재인 우리나라 괘불탱에 대한 연구는 유물의 보존·복원 자료 확보를 목적으로 과학적인 분석을 통해 안료의 재료 분석, 채색 기법연구 및 제작방법 등을 규명하는데 있다. 특히 동위원소 분석은 유물의 제작에 사용된 원료의 산지를 추정하는데 대표적인 방법이다. 본 연구에서는 괘불탱 제작에 사용된 채색 안료 중 연백색 안료에 대한 납 동위원소 분석을 바탕으로 안료의 산지 추정 및 괘불 탱에 사용된 안료의 동일성 판별 등에 대해 검토하였다.

쾌불탱에 사용된 안료는 수십  $\mu$ m 내외의 두께로 사용되어 기존의 습식분석으로는 채색 안료별로 구별이 어려워 공간분해능이 큰 LA-MC-ICPMS를 이용한 in-situ 분석법을 개발하여 이용하였다. 안료의 납 동위원소 분석에 사용된 LA-MC-ICPMS는 한국기초과학지원연구원의 NWR193<sup>UC</sup>와 Nu Plasma II를 결합된 장비를 이용하였다. 안료의 spot 분석에 이용된 spot size는  $10\sim15\mu$ m, ablation time은 30sec이며, 안료의 line analysis에는 analysis distance가  $100\mu$ m이고, scan speed는  $5\mu$ m/sec를 이용하였다.

분석법의 신뢰도 확보를 위해 참고물질로 확보한 연백색 및 연적색 시료에 대한 습식분석(TIMS) 과 표면분석(LA-MC-ICPMS)의 정확도와 정밀도를 비교 검증한 결과 99% 내외의 높은 신뢰도를 나타냈다. 조선시대 제작된 만연사, 법주사, 통도사, 금탑사 등의 괘불탱에 사용된 연백색안료의 납 동위원소 분석을 수행하였고, 이를 통해 각 사찰의 괘불탱에 사용된 안료들의 동일성 판별 및 한반도 납동위원소 분포도를 활용하여 국내 안료 산지를 추정하였다.

#### P-086 [무기/재료]

# 화학공정 최적화를 위한 256채널 다중 전극 소자 기반 딥러닝 활용방안에 관한 연구

# 김보경¹, 최헌진¹,★

<sup>1</sup>연세대학교 신소재공학과 \*Corresponding author: hjc@yonsei.ac.kr

본 연구에서 256채널 다중 전극 소자의 디지털 데이터를 활용한 합성곱 신경망(CNN)-다층퍼셉트론 (MLP) 복합구조의 딥러닝 알고리즘으로 화학공정 최적화를 시도하였다.

공정 최적화 대상은 물유리를 출발 물질로 하는 에어로겔 생산공정으로 해당 공정은 수화겔 형성에서 건조까지 전체 약 78시간이 소모된다. 각 단계별 공정 진행은 경험적 데이터에 근거하여 일률적으로 적 용되고 있다. 하지만 화합물의 화학반응 상태를 직접 모니터링하면서 공정을 진행한다면 일률적인 시간 적용보다 효율적으로 공정을 진행할 수 있을 것이머 이를 위해서 측정센서 및 피드백 시스템이 포함된 체계가 필요하다.

실험은 대상인 에어로겔 공정에서 많은 시간이 소모되는 표면개질과 n-Hexane 숙성 공정을 6시간 단위로 구분하여 화학적 상태가 다른 9개의 결과물을 얻을 수 있도록 설계 하였으며, 각 공정을 2회씩 진행하여 총 18개의 실험 샘플을 제작될 수 있도록 하였다.

에어로겔 공정 간 화합물 상태 측정을 위한 256채널 다중 전극 소자는 CMOS 공정으로 제작된 소자로 53x83µm²의 면적에 256개(16x16)의 다중 전극이 배열된 멀티 어레이 센서다. 소자는 1회 측정 시 1600개의 디지털 데이터를 약 800ms에 출력하며 출력값은 raw 데이터와 개별 소자의 발화정도를 시현하는 디지털 맵 형태로 저장된다. 모델 훈련을 위해 raw 데이터를 1차원 시계열 데이터로 처리하여 딥러닝 모델의 입력데이터로 사용하였다. 각 단계에서 얻어진 화합물 상태 데이터는 입력데이터의 x변수로 활용하였으며, y변수는 완성된 에어로겔을 SEM 및 BET로 분석한 다공성 구조의 기공 크기를 활용하였다.

딥러닝 모델은 다층 퍼셉트론(MLP)과 합성곱 신경망(CNN) 두 종류 모델로 설계하였다. 딥러닝 알고리 즘은 표면개질 진행정도를 파악하는 1단계 모델과 n-Hexane 숙성 진행을 파악하여 결과물 물성을 예측 하는 2단계 모델로 구성된다. 간 단계별 설계된 모델은 1단계 MLP 18개, CNN 20개와 2단계 MLP 10개, CNN 20개이다. 각 단계의 모델에 대한 평가는 F1 스코어를 기준으로 모델 정확도를 평가하였다. 모델의 예측정확도 평가 결과 1단계는 3개의 합성곱층과 풀링으로 이루어진 CNN 구조가 97%의 정확도를 보였으며, 2단계에서는 2개의 은닉층을 가진 MLP 모델이 89%의 정확도를 보였다. 화학공정 최적화를 각 단계에서 높은 성능을 보인 모델을 결합하여 구축하였으며, 본 연구는 공정 최적화를 위한 체계로 256채널 다중전극 소자와 CNN-MLP 복합 구조의 딥러닝 알고리즘을 제안한다.

본 연구를 통해 256채널 다중 전극 소자와 이를 활용한 알고리즘은 특정 화학공정에 특화된 체계가 아니라 디지털 빅데이터만 확보되면 여러 공정에 활용될 수 있는 알고리즘이기에 다양한 화학 공정의 효율화를 도모할 수 있을 것으로 기대된다.

#### P-087 [무기/재료]

# 습식 기기분석을 위한 동합금 상용표준물질 개발

김동인\*, 이용현, 김현정

한국화학융합시험연구원 소재부품연구소 \*Corresponding author: kdi0213@ktr.or.kr

동(Copper, 銅)은 기원전 8세기경부터 인류에 의해 사용되었고 기원전 3세기경부터 동과 주석의 합금인 청동을 사용하면서 청동기 시대가 시작되었다. 이후 비로소 인류문명생활의 시작이라고 하는 철기시대를 거치며 현재에 이르기까지 철은 인류의 수많은 분야에 적용되어왔다. 그럼에도 불구하고 동의 쓰임새는 실로 다양하여 고강도를 가지면서 연신율이 좋고 도전성이 높아야 하는 반도체 부품 등에 활용되는 등 철이 대체 할 수 없는 불가의 영역이 존재한다.

대부분 이러한 동을 이용한 제품들은 초기 설계 공정부터 합금원소의 함유량을 설정하여 필요와 용도에 맞는 제품설계를 위한 기본이 된다. 이후 생산과정에서 혹은 사용과정에서의 문제가 발생되었을 때 원인으로 많이 의심되는 재질 선정 문제 등은 육안으로는 알 수 없으므로 성분분석을 통해 성분원소의 함유량이 설계값에 비교하여 함량 차이는 없는지, 문제가 있다면 해당 원소의 어느 정도가 문제이고 분석결과 값을 신뢰해도 되는지 등을 직접 확인하여야 한다. 이때 중요한 것은 정확한 분석이며해당 분석결과가 합리적인 결과인지 확인하기 위해서 표준물질을 이용한 비교시험을 통해 많이 확인된다.

따라서 성분분석의 필수품이라 할 수 있는 표준물질의 그 개발 과정에 대해서, 이번 연구에서는 습식 기기분석 용도의 Chip 타입의 동합금 표준물질 4종을 개발하고 이후 검증 및 측정불확도의 추정 과정을 소개하고자 한다. 분석 원소 중 Cu는 전해무게분석법을 이용하였고 나머지 원소(Sn, Zn, Pb, Ni, Fe, P)는 유도결합플라스마 발광분광분석법(ICP-OES)을 통한 분석을 진행하였다. 제조된 후보표준물질의 균질성을 확인하기 위해 균등간격으로 10병 이상을 선택하여 측정하였고 분산분석(ANOVA)를 통해 검증하여 특성값을 설정하였다. 그리고 보관의 온도조건, 보관기간을 달리하여 회귀분석을 통해 안정성을 확인하였다. 측정불확도는 배치의 특성화 표준불확도, 병간 표준불확도, 안정성에 대한 표준불확도를 각각 산출하고 합성하여 표준물질 인증값에 대한 최종 확장불확도를 산출하였다.

#### P-088 [무기/재료]

# 연소 적외선 흡수법을 이용한 SiC계 내화물의 Total 및 Free Carbon 분석을 통한 SiC 정량분석

<u>한홍현</u>¹, 김소영², 정세훈²,★

<sup>1</sup>포항산업과학연구원 분석인프라섹션, <sup>2,\*</sup>포항산업과학연구원 분석평가연구센터 \*Corresponding author: jshoon@rist.re.kr

제철 공정서 사용되는 내화물은 산성, 염기성, 중성 등 다양하게 사용되고 있다. 그 중 SiC(Silicon Carbide, 탄화규소)계 내화물의 사용처는 제선 공정의 고로 및 제강 공정의 Ladle, 전로 등에 널리 사용되는 핵심 소재이다. SiC계 내화물의 장점으로 고온 및 Gas로 인하여 내화물이 침식 및 부식 방지로 내화물의 내구성이 향상된다. 이에 조업 조건에 맞는 SiC계 내화물 사용이 점차 늘어나고 있다. 이러한 SiC계 내화물의 SiC 성분은 사용 목적에 따라 6 % ~ 12 % 로써 엄격히 관리하고 있으며 이들의 신속하고 정확한 농도 분석은 매우 중요하다. 본 연구에서는 연소 적외선 흡수법을 이용하여 SiC 내화물 중 시료 전체 탄소량(Total Carbon)과 SiC 화합물 외에 존재하는 탄소량(Free Carbon)을 선택적으로 각각 분석하여 SiC의 Carbon양을 정량하여 SiC의 농도를 분석했다. 기존의 SiC 농도 분석은 연소용량법을 이용하여 샘플 내 Carbon을 CO2로 산화시키고 포집하여 분석을 했다. 이런 산화 과정은 결과의 오차가 발생하고 샘플 당 분석 소요시간이 오래 걸리는 단점이 있었다. 본 기술에서는 고주파 가열로를 이용한 연소 적외선 흡수방법은 Free Carbon과 Total Carbon을 850도씨와 1800 도씨에서 각각분석하고 그 차이를 통하여 SiC를 정량화 했다. NBS 112b 등 Carbon 표준물질을 이용하여 Carbon 농도를 정량화 하였다. SiC계 내화물 시료 분석결과 1% 이내 높은 반복 재현성을 확보하였다. 본 분석기술은 향후 제철 공정에서 신속한 내화물 중 SiC 화합물 정량 분석 기술로 활용될 예정이다.

### P-089 [원자력/방사선]

# Comparison and Analysis of Neutron Detectors used in HANARO and Korea Standard Nuclear Power Plant

# Hoon-Jo Cho\*, Kwang-Young Lee, Ho-Young Choi

Korea Atomic Energy Research Institute \*Corresponding author: chj1869@kaeri.re.kr

The neutron flux in a Reactor is one of the most sensitive variables. Since the intensity of the neutron flux represents the power, there is a possibility that an accident may occur if a sudden change in the neutron flux occurs or exceeds the set value. Also, the neutron flux is an important factor for controlling the power of the reactor and plays an important role in allowing it to operate within the limit. Table 1 shows the neutron detectors used in the KSNP and HANARO. In this paper, neutron detectors used in KSNP and HANARO were analyzed, and differences according to each other's environment and conditions were analyzed. Therefore, the two reactors being operated according to different purposes and conditions. The KSNP uses different types of neutron detectors for startup, midium, high power areas. However, the HANARO does not have a higher power than KSNP and uses a wide range neutron detector, so a neutron detector is no longer needed. Since the HANARO controls the reactor through the magnitude of the neutron flux converted into the measured electrical signal of the neutron detector, it is operated without any safety issues.

Table 1. Types and characteristics of neutron detectors used in KSNP and HANARO

	Korea Standard Nuclear Power Plant	HANARO
Type of Neutron – Detector according to the Measurement – Area	Startup Area : $BF_3$ Counter $ (10^{-9}\% \text{FP} \sim 10^{-4}\% \text{FP}) $ Midium Power Area : Fission Chamber $ (10^{-4}\% \text{FP} \sim 125\% \text{FP}) $	Wide Range Log Power : Fission Chamber $(10^{-9}\%\text{FP} \sim 150\%\text{FP})$
	High Power Area : Uncompensated	Power Range Monitor
	Ionization Chamber	: Fission Chamber
	(125%FP ~ 200%FP)	(0%FP ~ 150%FP)
Type of Neutron	Monitoring Function : $BF_3$ Counter(Startup Area)  Fission Chamber(Middle & Power Area)	Monitoring Function : Fission Chamber
Detector according to	Control Function	Control Function
Function	: Uncompensated Ionization Chamber Protection Function	: Fission Chamber Protection Function
	: Fission Chamber	: Fission Chamber
The number of Neutron Detectors	Startup : 2 RRS : 4 RPS : 12	RRS: 3 RPS: 3
Installation location	Outside the Reactor Vessel	Reflector Tank Outer Wall

#### P-090 [원자력/방사선]

# Analysis of Nuclides Generated From Defective Fuel

# Tae-Ho Kim\*, Ho-Young Choi, Hoon-Jo Cho

Korea Atomic Energy Research Institute Corresponding author: taehokim@kaeri.re.kr

In this study, cases in which defective fuel occurred during 59th and 90th operation in HANARO are analyzed. FFDS(Failed Fuel Detection System) is one of the HANARO's safety systems. This system automatically stops the reactor when the system detector found that detecting value is increasing by defected fuel. When defected fuel is founded, the radioactivity level of the instrument that is installed in the core outlet pipe rises, and the value of the radioactivity level changes depending on the degree of damage to the fuel. In addition, even if a slight fault occurs, the radiation dose gradually increases over time. So even if the limit value is not exceeded, the operator can notice that the radioactivity of the system is increasing in advance and stop the reactor safely.

In the case of HANARO, there was no trip by FFDS since the first operation, but there were cases where the operator confirmed that the measured value gradually increased due to the defected fuel and manually stopped the reactor. In order to accurately determine whether a defective fuel has occurred, a fuel test is performed after the reactor is stopped, and fuel defects can be determined through nuclide analysis result. Fuel leakage is determined by the detection of radioactive isotopes Tc-99m, I-131, and I-132. It was confirmed that Tc-99m increased by more than 20 times and I-131 and I-132 increased by more than 10 times compared with the back-ground value in 59th and 90th operation.

At 59th and 90th operation, it was confirmed that the radioactivity level exceeded the limit and defective fuel was generated. After that, the defective fuel was replaced and the next operation was performed normally.

#### P-091 [원자력/방사선]

# 플루토늄 연대측정을 위한 pq급 극미량 아메리슘 동위원소 및 정량 분석

박난희\*, 정근호

한국원자력연구원 환경·재해평가연구부

\*ranhee@kaeri.re.kr

핵감식(nuclear forensics)을 위해 입수된 물질은 대부분 방사성물질로 붕괴특성이 있으므로 그 시료 자체 내에 이력특성을 갖고 있다. 핵물질 연대측정 정보는 핵물질의 동위원소 특성과 함께 대상 핵물질의 이력을 추적하는 아주 중요한 징후 중 하나이다. 이러한 연대측정을 위해서는 모핵종과 딸핵종의 순수분리기술과 정확한 동위원소 분석 기술이 매우 중요하다. 예로서, 정제한지 2년이 지난 플루토늄 1 μg의 연대측정을 위해서는 딸핵종인 수십 pg의 아메리슘 또는 우라늄에 대한 분석 능력이 필요하다. 본 실험실에서는 2<sup>41</sup>Am/<sup>241</sup>Pu법을 이용한 플루토늄 연대측정 기술을 개발하고자 한다. 질량분석과정을 살펴보면, 먼저 플루토늄 시료에 함유되어 있는 <sup>241</sup>Am과 <sup>241</sup>Pu의 양을 개별적으로 정량을 한 후, <sup>241</sup>Am/<sup>241</sup>Pu의 비를 구하게된다. 본 연구에서는 수 pg급 <sup>241</sup>Am의 양을 결정하기 위해 동위원소희석질량법(IDMS)을 적용하였으며, MC-ICP-MS를 이용한 동위원소 분석 성능을 평가하였다. MC-ICP-MS의 감도는 Am 기준 ppt당 74000 cps이며, 1 ppt 이하에서 농도에 따라 Am 동위원소비 측정 정밀도와 상대오차를 평가한 결과, 모두 1% 이내로 분석 가능이 가능하였다. 동위원소희석질량법에 의한 <sup>241</sup>Am 정량분석 결과, 5 pg, 1 pg수준에서는 상대오차 0.22%, 0.1pg 수준의 <sup>241</sup>Am은 상대오차 2.8%로 매우 만족할만한 결과를 얻었다. 본 연구의 기술을 바탕으로 추후 연대측정 표준시료를 통한 플루토늄 연대측정 검증에 사용될 예정이며, 이는 기존에 연구된 우라늄 연대측정 기술과 함께 핵물질 이력 추적 기술로써 우리나라의 핵물질 안전관련 규제 정책 도출이 필요한 기초 자료로 활용 가능할 것으로 기대된다.

#### P-092 [원자력/방사선]

# The analysis about correlation with change of hot water system thickness during the HANARO reactor operation cycle and reactor pool surface radiation

# Yong-hwi KIM\*

Korea Atomic Energy Research Institute
\*Corresponding author: dragon227@kaeri.re.kr

HANARO (High-flux Neutron Advanced Application Reactor) is open pool type reactor which has open primary system through the reactor pool. So, primary water is rising to the pool surface through the reactor core with high radioactive nucleus. That's the reason that hot water layer system is operating to decrease the radiation on the surface. This study shows changes of thickness of hot water system during a cycle and checks that how much it affects radiation on the reactor pool surface.

Hot water system means that at least 1.2m thickness of water has over 5 °C difference with under part of hot water layer system is maintaining during stand by and maneuver state and 1.3 m thickness of water has over 5 °C difference with under part of hot water layer system is maintaining during the reactor operation to interrupt rising flow path of water with radioactive nucleus to postpone reaching the reactor surface. Therefore, amount of N-16 which is a main radioactive nucleus has 7.1 sec of half-life is decreased by this system.

Consequently, the hot water thickness is decreased slightly during a cycle. However, it didn't affect pool surface radiation. It means that decreased thickness is also very enough to prevent to increase pool surface radiation conservatively. This hot water layer is already prepared before operating nuclear reactor for safe and maintained until the reactor operation cycle ends.

#### P-093 [원자력/방사선]

# Change of gaseous radioactive waste amount generated from HANARO reactor during the reactor operation cycle and contemplating the safe guide

# Yong-hwi KIM\*

Korea Atomic Energy Research Institute
\*Corresponding author: dragon227@kaeri.re.kr

Gaseous radioactive waste is generated by nuclear fission reaction in a reactor core from starting to operate the HANARO reactor to shutdown. It is known that generated radioactive waste is proportional to nuclear power. This study shows difference of amount of generating gaseous radioactive waste on shutdown period comparing with operation period. Also, it studies the maximum value, minimum value, average value and the time to reach to the maximum value after starting nuclear reactor operation for normal safe situation.

Two plastic scintillators installed in the reactor ventilation system measure gaseous radioactive waste floating through the reactor core from the reactor pool. The study can find new safe guide about normal operation state. Problems like nuclear fuel break or primary system defect can be predicted through this study. Consequently, the amount of gaseous radwaste was increased and reached the maximum value after 6 hours. And then, this value was stayed until nuclear power was changed. This study check that change of gaseous radioactive waste is helpful to operate the reactor more safely.

#### P-094 [원자력/방사선]

# 실리카겔을 첨가하여 Mo의 열이온화질량분석 시 단일필라멘트와 이중필라멘트 사용에 따른 Mo 검출세기 비교

박양순\*, 이재석, 조혜륜

한국원자력연구원 방사성물질화학분석실 \*Corresponding author: <u>nyspark@kaeri.re.kr</u>

몰리브데눔은 기화 온도가 낮은데 반해 이온화 온도는 높아서 열이온화 효율이 좋지 않은 것으로 알려져 있다. 그러므로 열이온화질량분석 장비로 몰리브데눔 동위원소를 측정할 때, 검출효율을 높이기 위하여 다양한 첨가제를 사용하곤 한다. 첨가제 사용 시 원소의 특성에 따라 단일필라멘트가 효과적일 경우도 있고 이중필라멘트가 효과적일 경우도 있다. 본 실험에서는 실리카겔을 첨가하여 단일필라멘트와 이중필라멘트의 사용에 따른 몰리브데눔 동위원소의 검출성능을 비교하고자 하였다. 실험에 사용된 열이 온화질량분석 장비는 TRITON 모델로 9개의 파라데이 컵이 장착되어있어 몰리브데눔의 여러 동위원소를 동시에 측정할 수 있었다. 물리브데눔 시료는 MoO3 분말(Mo-96, ORNL)을 약 2 mg 취해 1M 질산 수용액에 용해하고 희석하여 준비하였다. 준비된 시료를 단일필라멘트와 이중필라멘트에 각각 1  $\mu$ 은씩 로딩하고 건조한 후에 실리카겔을 1  $\mu$ 은 가하여 최종적으로 1.8 A에서 30초간 가열한 후, 이온화쳄버에 장착하고 측정을 수행하였다. 측정결과, 단일필라멘트에 시료를 로딩하고 실리카겔을 첨가하여 측정하였을 때 Mo-96이 전혀 검출되지 않았다. 반면에 이중필라멘트에 시료를 로딩하고 실리카겔을 첨가제로 가하여도 단일필라멘트로는 검출할 수 없고 이중필라멘트를 사용해야 검출이 가능함을 확인할 수 있었다.

### P-095 [원자력/방사선]

# 모의 금속시료 대상 휘발성 요오드 분리특성

강병만\*, 천경진, 박재일

한국원자력연구원 방사성폐기물 화학분석센터 \*Corresponding author: bkang@kaeri.re.kr

장반감기 방사성 핵종인 I-129는 비방사능이 매우 낮기(6.5 × 106 Bg/g) 때문에, 일반적인 방사선 측 정법(radiometric method)은 핵분열 생성물인 I-129 농도가 매우 높은 시료에만 적합하다. 따라서 중/저 준위 해체폐기물 환경에서 존재하는 낮은 농도의 I-129를 측정하기 위해서는 높은 측정감도의 유도결합 플라즈마 질량분석법(ICP-MS) 적용이 필요하다. 특히 이러한 ICP-MS 적용 요오드 분석법은 분리 과정의 요오드 회수율 산출 시 필요한 비방사성 I-127 유반체 사용을 최소화하여 이차 방사성폐액을 경감시키 고, 기존 수 시간이 소모되는 계측(radiation measurement) 시간을 5분 이내로 단축시키는 장점을 보여 줄 수 있다. 한편 기존 방사선 측정법 또는 요오드화은(Aal) 측정시료 제조에 특화된 화학분리과정을 ICP-MS에 적용하면 과량의 요오드 운반체(carrier)로 인해 시료가 주입되는 스프레이 챔버와 튜빙 내에 휘발성 요오드가 잔존하는 문제가 발생하여 미량 방사성 요오드의 정량분석에 어려움을 겪을 수 있다. 또한 일반적으로 사용되는 질산 또는 염산 매질은 휘발 및 흡착성이 강한 요오드의 제거에 효율적이지 못하여 높은 바탕값 신호와 교차오염 문제를 발생시킬 수 있다. 따라서 미량 요오드 운반체를 사용하는 전처리에서 시작하여 염기성 매질이 최종 단계에 적용되는 화학분리과정의 확립이 필요하다. 이에 미량 요오드 운반체 손실의 최소화를 위하여 산화제를 이용한 요오드 수용액 침출의 온화한 반응 조건을 채 택하였고, 모의 금속 시료 조건에서 15 mM NaOCI 산화제, 2 시간 침출로 최대 88 %의 전처리 효율을 확인하였다. 이어서 전처리 과정 시 시료 매트릭스로부터 탈착된 코발트, 세슘 등의 방사성 금속이온 제 거를 위해 수용액에 존재하는 요오드산(IO<sub>3</sub><sup>-</sup>)을 환원시켜 아이오딘(I<sub>2</sub>)으로 변환 후 유기용매로 추출하였 다. 이러한 환원반응은 pH 2 이하의 0.1 mM 이상 NH<sub>2</sub>OH·HCI 환원제 조건에서 요오드산의 정량적인 아이오딘 전환(98 %) 결과를 보여준다. 마지막으로 수용액 매질의 ICP-MS 측정시료 준비를 위하여 전단 계의 유기용매 용해 아이오딘을 수용액 상태의 요오드(I<sup>-</sup>) 이온으로 전환시켰고, 10 μM ~ 1 mM 농도 범위의 아황산수소나트륨(NaHSO3) 환원제는 97 % 이상의 정량적인 요오드 전환율을 보여준다. 최종적 으로 여러 종류의 모의 금속시료에 대한 전처리 및 2 단계 추출과정에서 나타난 평균 80 % 대의 효율 적인 요오드 회수율을 토대로 제시된 분리법의 해체금속폐기물 I-129 분석 적용 가능성을 확인하였다.

#### P-096 [원자력/방사선]

# 원자력발전소 증기발생기 슬러지 성분원소 분석

이승천\*, 이재석, 조혜진, 박재일

한국원자력연구원 방사성물질화학분석실
\*Corresponding author: leesc1002@kaeri.re.kr

원자력발전소 증기발생기에서는 고온/고압의 용수가 연속적으로 순환되기 때문에 최적의 수질관리를 하더라도 구성 배관으로부터 철산화물이 용출되는 것을 막기는 힘들며, 용출된 철산화물은 증기발생기의 내부에 슬러지 형태로 축적되어, 증기발생기 운전에 좋지 못한 영향을 미치게된다.

고온/고압에서 생성된 슬러지는 일반적인 산용해방법으로 용해가 잘 안되기 때문에 과거에는 불용물을 용융(LiBO<sub>2</sub>:Li<sub>2</sub>B<sub>4</sub>O<sub>7</sub>, 1:1)하는 방법을 사용하였으나, 많은 시간이 소요되고, 융제에 다량 함유된 B이 분석결과에 영향을 줄 수 있기 때문에, 현재는 마이크로웨이브 용해장비를 사용하여 전처리 실험을 하고 있다. 일반적으로 마이크로웨이브용해장치를 활용해 혼합산으로 용해한 후 용해액에서  $14\sim20$ 개의 성분원소를 ICP-AES로 측정하고, 원시료 일부를 고체성분분석기를 이용하여 C와 S를 측정하여 총함량이  $100\pm1$  %에 해당하면 합격으로 판단한다.

마이크로웨이브용해장비는 물리적으로 렌치를 이용해 밀폐시키는 방법의 Ethosone장비와 고압질소가 스를 이용하여 밀폐시키는 Ultrawave장비, 이 2가지의 방법을 사용하고 있으나, 성분원소 중 Si이 휘발되 지 않는 실험조건을 찾기 위하여 2가지 방법에 대한 비교실험을 진행하였다.

Ethosone와 Ultrawave장비에 동일한 시료를 4개씩 분취하여  $HNO_3$ 와 HCl을 5:2의 비율로 넣고 HF의 첨가량을 0.25, 0.1, 0, 0.25(상온)mL 의 4단계로 첨가하여 용해하였다. 주성분인 Fe의 농도를 비교하여 완전용해 되었는지 판단하고, Si의 농도를 측정하여 변화가 있는지 확인하였다.

Ethosone장비로 실험한 결과는 HF를 첨가하여 용해하였을 때가 HF를 첨가하지 않거나 상온에서 첨가하였을 때보다 Fe과 Si의 농도가 모두 높았기 때문에, 이 장비의 경우 HF가 Si의 휘발에 영향을 주지않고, 오히려 시료의 완전용해에 도움을 주었다.

Ultrawave장비의 경우는 Fe의 함량이 4단계 모두 비슷하였고, Si의 농도는 상온에서 HF를 첨가하였을 때가 가장 높은 결과를 보였기 때문에, 이 장비의 경우는 HF가 Si을 휘발시키지만 시료의 용해에는 무관한 결과를 보였다.

슬러지 시료를 혼합산을 첨가하여 마이크로웨이브용해장비로 전처리 할 경우, Ethosone장비는 HNO<sub>3</sub>/HCI/HF의 혼합산을 첨가하여 용해하고, Ultrawave장비의 경우는 HNO<sub>3</sub>/HCI 혼합산으로 용해 후 상온에서 HF를 첨가하는 것이 시료의 완전용해와 Si의 휘발을 막을 수 있는 것을 확인하였다.

### P-097 [원자력/방사선]

# 중성자방사화분석과 WD-XRF 측정을 이용한 미세먼지 시료 내원소 정량 분석법 개발

한보영1,\*, 문종화1, 남용현1, 김지석1

<sup>1</sup>한국원자력연구원 융복합양자과학연구소 하나로이용부 \*Corresponding author: byhan@kaeri.re.kr

한국원자력연구원 하나로이용부에서는 2018년부터 현재까지 미세먼지 오염원 연구를 진행하고 있으 며 오염원 연구를 위해 서울 성동구 지역과 대전 유성구 연구원 내 미세먼지를 하루 단위로 수집해 오고 있다. 미세먼지 오염원(발생원)을 예측하기 위해서는 미세먼지 내 오염 원소들의 정확한 정량 분 석과 주변 환경변화에 따라 원소 정량 변화를 분석하여야 한다. 본 연구의 목적은 한국원자력연구원 내 하나로 연구용 원자로를 이용한 중성자 방사화 분석으로 선별된 특정 시료의 정밀 정량분석을 진 행하고 하루 주기 시료의 정량 변화를 분석하기 위해 WD-XRF 측정법을 활용하는 것이다. 이를 위해 장기간 시료채취가 가능한 고용량 공기채집기(HiVol-3000 model)를 서울 성동구 한양대학교(2018년 11월부터 운영)와 대전 유성구 한국원자력연구원 빌딩 옥상(2019년 4월부터 운영)에 설치하고 24시간 단위로 필터교환 작업을 수행하고 있다. 채집된 시료는 먼저 채집 시간, 채집풍속, 온도, 습도, 필터 무 게를 기록한다. 최근 하나로 원자로 재가동에 따라 수집된 다량의 시료 가운데 최근 2021년 시료 중 다양한 미세먼지 농도를 대표할 수 있는 45개의 시료를 선별하여 중성자방사화분석(Neutron Activation Analysis)를 수행하였고 시료 내 28개 원소들에 대한 정량값을 얻었다. 그리고 빠른 시간내 다량의 시료 측정이 가능한 Wavelength Dispersive XRF(WD-XRF) (Tiger S8, Bruker)를 이용해서 미세 먼지 내 해당원소의 분광선을 측정하여 교정곡선(Calibration curve) 획득하였다. 또한 결정된 원소의 교정곡선은 모든 시료의 원소 정량 변화를 모니터링 하기 위해 활용된다. 추후 연구로는 다양한 NAA 데이터를 이용하여 WD-XRF 미세먼지 교정시료(표준물질)를 개발하고 LIBS 측정 분석법 활용을 위한 교정곡선 측정도 수행 할 것이다.

### P-098 [원자력/방사선]

# Screening determination of nuclear material distribution and contents on swipe samples using MMXRF

# Hyun Young Kim\*, Cheong Won Lee, Jeonghyeon Ryu, 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 in safeguards. The particle analysis of swipe samples collected from the nuclear facilities is considered to be useful in detecting undeclared nuclear activities. When swipe samples are introduced, screening analysis is conducted using non-destructive methods, then the uranium particles are recovered, and precise particle analysis is conducted for enrichment. For the screening analysis of swipe samples, monochromatic micro-focusing X-ray fluorescence (MMXRF, ISP iEDX-150M) has been developed, focused on uranium detection. The MMXRF has higher sensitivity in uranium detection than other XRF since the micro-sized monochromatic X-ray beam generated from doubly curved crystal optics can reduce the background in X-ray scattering.

In the present study, swipe samples from the nuclear facilities were analyzed to estimate the concentration and distribution of the uranium on the swipe. In total, 34 swipe samples were collected. The measurement was conducted at coarse mode (3\*3 mm²/spot) for 5 sec/spot. First, the linearity and reproducibility to determine U contents were evaluated. the linear relationship between uranium mass and the total counts of a swipe (100×100 mm²) was obtained (r²=0.994). The total counts of background sample (n=4) was 163.45±12.85 cps. The average total counts of the samples was ranged 155.8 to 365.2 cps. Most of the sample showed a similar value to the background, but in some cases, the value was significantly higher than the control. In addition, the MMXRF map can be useful to understand the distribution of U particles on the swipe. The distribution pattern of each sample was not identical to the visual observation. The MMXRF map was effectively applied to determining the recovery areas of the samples. For further study, particles will be recovered on the carbon planchet and particle analysis of each sample will be conducted to confirm that there is no undeclared activity of the facility by comparing to the existing baseline.

#### P-099 [원자력/방사선]

# Optimization of method for uranium standard particle samples using SEM and Nano-manipulator

Hyun Ju Kim<sup>1</sup>, Hwan Lee<sup>2</sup>, Hyun Young Kim<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Korea Institute of Nuclear Nonproliferation and Control (KINAC)

<sup>2</sup>LG Chem R&D Campus(Daejeon)

\*Corresponding author: hykim33@kinac.re.kr

The environmental sample(Swipe sample), which is used as the basis for detecting undeclared nuclear activities, recovery of uranium particles through the screening results, and then performs precision particle analysis.

Nuclear material particle analysis is an important research field, but there have limitations in quality control activities such as the nuclear material detection/analysis results and the verification of the analysis method validity because standard samples do not exist. For this reason, it is necessary to make uranium standard particle samples.

The objective of this study, to make uranium standard particle samples using SEM-EDS(Scanning Electron Microscope-Energy Dispersive Spectroscopy) and nano-manipulator under the various uranium reference materials(U010, U030-A, U100, U200) and manipulator probe size(CR= 1000 nm, 500 nm, 100nm) conditions. And, quantitative and isotope ratio analysis of uranium particle were conducted by TIMS.

As a result, U030-A, which has a large particle size and is easier to move than other uranium reference materials, was suitable for making uranium standard particle samples. In addition, it was easy to measure and analyze images when considering the resolution of the SEM. Considering the size of U030-A particle(5~8  $\mu$ m), when the manipulator probe size was 500 nm, the particle could be easily moved.

The analysis of particles moved through SEM-manipulator is performed using TIMS to confirm the applicability of whether homogeneity is proven by securing representations through comparison of result values and certification values.

Through this, it is thought that uranium standard particle samples production for quality control homeostasis of screening equipment can lay the analytical basis for environmental samples by obtaining reliable results that maintain accuracy and reproducibility.

#### P-100 [원자력/방사선]

# 중성자 및 감마선 동시측정 시스템을 활용한 핵종분석방법 고찰

진동식1,\*, 홍용호1, 이재근1, 정영석1

<sup>1</sup>엔이티(주) 부설공학연구소 \*Corresponding author: dsjin1064@netec.co.kr

북한 핵무기 보유가 현실화 된 시점에서 유사시 방사능 피해 최소화에 대한 대비책과 비핵화과정을 통해 철저한 검증이 필요하며, 비핵화 검증은 국가차원의 위성과 영상에 의한 1차적인 핵탐지 가능성이 확보되면 실제 현장에서의 검증이 필수적이다. 현장 검증에 있어 신속탐지 및 방사능 정보에 대한 정확한 데이터 수집이 필요하며, 수집데이터를 통해 처리방안 등이 강구되어야 한다. 본 연구는 CZT(Cadmium Zinc Telluride) 반도체 센서를 이용한 단일의 측정 시스템을 사용하여 현장에서 신속한 중성자 및 감마선 동시측정이 가능하고 이동 및 휴대가 용이한 핵종분석장치를 개발하는 것이 목적이다. 핵종분석장치는 다양한 에너지 범위의 중성자 및 감마선 동시측정과 함께 두 방사선의 구분이 가능해야하며, 측정 데이터를 활용한 방사선원의 종류, 에너지 및 방사능 등의 분석이 가능해야한다.

감마선은 방사선원의 종류에 따른 고유의 에너지 특성을 가지므로 본 연구에서 사용되는 CZT 반도체센서로 30 keV ~ 3 MeV의 범위의 감마선 에너지를 직접적으로 측정하여 해당 에너지에 따른 방사선원의 종류를 확인할 수 있고, 측정시간과 계수를 활용하여 방사능 분석도 가능하다. 중성자는 원자로에서일어나는 인공적인 핵분열 반응이나 자발 핵분열, 또는 알파선 및 양성자 등의 하전입자 반응으로부터생성되며, 대부분 고유의 에너지 특성을 가지지 않는다. 따라서 중성자의 경우는 중성자의 에너지 범주와 검출반도가 분석대상이다. 중성자는 직접적인 측정이 불가능하며, 간접적인 방법으로 검출한다. 본 연구에서 사용되는 CZT 반도체 센서는 중성자와 CZT 센서 내 카드뮴(Cd)의 핵반응(113Cd + ¹n → 114Cd + γ)에 의해 방출되는 고유의 2차 감마선 에너지(558.3 keV) 특성을 활용하여 간접적으로 중성자를 검출한다. 중성자와 카드뮴(Cd)의 핵반응은 저속중성자(열중성자) 에너지 범위에서 발생하므로 고속중성자의 경우는 저속중성자로 감속시켜야 하며, 이를 위해 본 연구에서는 감마선 검출 목적의 CZT 반도체 센서 이외에 중성자 검출 목적으로 감속재(Polyethylene Moderator)로 둘러싸인 CZT 반도체 센서 1개를 추가적으로 구성하였다. 즉, 중성자의 경우는 2개의 CZT 반도체 센서를 활용하여 고속중성자와 저속중성자를 선별 분석할 수 있도록 설계하였다.

연구개발 시스템을 활용하여 감마선과 중성자 방사선원을 선별 분석하고, 중성자 방사선원의 에너지 특성에 따른 고속중성자와 저속중성자를 선별 분석하기 위해서는 2개의 CZT 반도체 센서에서 측정되는 데이터 정보를 활용한 추가적인 분석기술이 요구된다.

본 발표에서는 다양한 에너지 범위의 중성자 및 감마선 동시측정이 가능한 연구개발 시스템의 구조 및 특성에 대해서 간략히 설명하고, 본 연구개발 시스템을 통해서 측정된 데이터 정보를 활용하여 방사선원의 종류, 에너지 및 방사능 등의 핵종분석 방법에 대해서 논의하고자 한다.

### P-101 [원자력/방사선]

# 식품 중 방사성 베타핵종 테크네튬-99 시험법 확립을 위한 연구

박찬종1,\*, 김태희1, 안태현1, 이근영1, 구용의1, 이교철2, 이용진2

1\*식품의약품안전평가원 오염물질과, <sup>2</sup>한국원자력의학원 방사선의학연구소 RI응용부 \*Corresponding author: cjpark22245@korea.kr

식품의약품안전처에서는 현재 수입되는 식품에 대해 세슘(Cesium), 아이오딘(Iodine), 플루토늄 (Plutonium) 동위원소 및 스트론튬(strontium)-90에 대한 시험법이 확립되어 있으나, 원자력시설, 핵물질 노출사고 등에 의하여 발생되는 방사성 동위원소 중 하나인 테크네튬-99(Technetium-99, Tc-99)에 대한 시험법은 부재상태이다. 따라서 본 연구에서는 식품시료에 적용 가능한 Tc-99 분석법을 구축하기위한 연구를 진행하였다.

식품 중 Tc-99 분리 및 정제를 위해 분쇄, 균질화, 건조, 회화와 같은 전처리를 거친 후 철 공침(Iron hydroxide precipitation) 및 음이온교환수지(1-X8, 100-200 mesh)를 사용하여 최종적으로 Tc-99를 추출하였다.

앞선 단계에서 추출한 Tc-99는 신틸레이션 바이알에서 섬광칵테일(AquaLight LLT scintillation cocktail)과 혼합한 뒤 액체섬광계수기(Liquid Scintillation Counter, LSC)를 사용하여 분석하였다. Tc-99 분석을 위해 검출기 최적화는 Tc-99 표준물질(Eckert&Ziegler)을 사용하였다. 회수율 계산을 위한 준안 정상태 테크네튬-99(internal yield monitor)을 사용하였으며, 측정에는 고순도저마늄(High-Purity Germanium, HPGe) 검출기를 사용하였다.

개발 및 최적화한 시험법에 대한 평가를 위해 Tc-99 표준용액 및 Tc-99m를 사용하여 실험한 결과 90 % 이상의 회수율을 보였다. 이를 바탕으로 개발한 시험법을 농·축·수산물, 가공식품 및 영유아식품 등 실제 식품시료에 적용할 수 있게 최적화 연구를 진행할 예정이다.

#### ※감사의 글

본 연구에 사용된 준안정상태 테크네튬-99는 한국원자력의학원 방사선의학연구소 RI응용부의 지원을 받아 수행되었으며, 2021년도 식품의약품안전처의 연구개발비(21161식품위002)로 수행되었음에 감사드립니다.

#### P-102 [원자력/방사선]

# 정밀기체질량분석기를 사용한 소비재 품목 내 방사성물질 함유량 분석

<u>김정은</u><sup>1</sup>, 김봉기<sup>2</sup>, 김민준<sup>2</sup>, 양인석<sup>3</sup>, 이진복<sup>4</sup>, 김진석<sup>4</sup>, 홍기룡<sup>4</sup>★

<sup>1</sup>과학기술연합대학원대학교 측정과학과, <sup>2</sup>한국원자력안전기술원 산업방사선평가실, <sup>3</sup>한국표준과학연구원 열역학온도팀, <sup>4</sup>,\*한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀 \*Corresponding author: khong@kriss.re.kr

우리가 실생활에서 사용하고 있는 제품 중에는 방사성물질이 포함된 것들이 종종 있다. 그 중에 다른 방사성 물질이 포함된 제품보다 삼중수소(Tritium, <sup>3</sup>H)가 포함된 제품들이 흔하게 많은데, 이는 삼중수소는 붕괴될 때 나오는 방사선의 에너지가 낮아 위험성이 적기 때문이다. 삼중수소의 붕괴로부터 방출되는 전자가 인광물질과 반응하여 발광하는 원리를 이용하여 비상구 표시나 시계, 낚시찌 등의 제품에 활용되고 있다. 이러한 제품들을 사용함으로써 우리 생활에 영향을 미치는지 위험도를 검증하기 위해서는 관련된 제품에 들어있는 삼중수소의 정량 분석이 필수적이다.

본 연구에서는 해외에서 유입된 몇 가지 제품군(시계, 나침반, 낚시찌, 귀이개 등)에 포함된 삼중수소를 정밀기체질량분석기(Precision Gas Mass Spectrometer, MAT271)를 이용하여 분석하였다. 시료안의 삼중수소 기체 및 관련 부산물들(HT, DT, T2)의 분압을 바탕으로 정량 및 정성분석을 하였다. 그결과 시료 하나에 모든 삼중수소 원자를 포함한 기체의 양이 적게는  $0.09 \times 10^{-6}$  g 에서 많게는  $6.48 \times 10^{-6}$  g 정도 검출되었다. 이는 방사선 단위인 베크렐(Bq)로 환산했을 때 0.03 GBq에서 2.31 GBq의 수준이다. 해당 제품군 대부분은 국내 원자력안전법(또는 국제원자력안전기구)에서 정하는 삼중수소의 면제수량(1 GBq)보다 매우 낮은 값으로 확인되었지만, 이를 초과하는 제품군도 있었다.

### P-103 [표준]

# Development and certification of bifenazate diazene reference material using mass balance method

Young Hoon Kim<sup>1</sup>, YuHui Son<sup>1</sup>, Chan-yang Lee<sup>1</sup>, Jeong Ju Moon<sup>2</sup>, Uijeong Park<sup>1</sup>, Heesun Yu<sup>1</sup>, Jae-hyuk Han<sup>1</sup>, Hongjun Jang<sup>1</sup>, Hyoungsu Kim<sup>1,\*</sup>, Dongjoo Lee<sup>1,\*</sup>, Seung-Hoon Baek<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy and Research Institute of Pharmaceutical Science and Technology (RIPST),
Ajou University, Suwon 16499, Republic of Korea,

<sup>2</sup>Department of Molecular Science and Technology, Ajou University,
Suwon 16499, Republic of Korea

\*Corresponding author: hkimajou@ajou.ac.kr, dongjoo@ajou.ac.kr, shbaek@ajou.ac.kr

Bifenazate diazene (BD) is a environmental metabolite of bifenazate a selective carbazate acaricide. The residual levels of bifenazate and BD is regulated in food stuffs. In this study, we aimed to develop a certified reference material (CRM) of BD for efficient and reliable testing. BD was synthesized from bifenazate through the catalytic aerobic oxidation. Organic impurity was determined using HPLC-UV assay. Inorganic impurity was determined using loss on ignition. The content of water and residual solvent were determined using Karl fisher coulometric titration and residual solvent assay, respectively. Calculated purity of candidate CRM was 99.67%, and expanded uncertainty was 0.03% at 95% confidence levels. Homogeneity and stability test will be further carried out to ensure the reliability of CRM. The estabilished CRM will be useful to determine the BD residue levels in food.

#### Keywords

bifenazate diazene; certified reference material; mass balance method; uncertainty

#### P-104 [표준]

# 중수소 및 수소 기체 중 수소동위원소 정량분석법

장진우<sup>1,2</sup>, 김정은<sup>3</sup>, 이진복<sup>1</sup>, 김진석<sup>1</sup>, 이진홍<sup>2</sup>, 홍기룡<sup>1</sup>\*

<sup>1</sup>한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀, <sup>2</sup>충남대학교 대기, 폐기물, 에너지학과 <sup>3</sup>한국표준과학연구원 열역학온도팀

\*Corresponding author: khong@kriss.re.kr

수소의 안정동위원소는 H와 중수소(D)가 있고, 분자로는 H2, HD, D2가 있다. 중수소는 일반 수소보다 확산속도가 낮아 공정의 안정성을 높일 수 있다. 이러한 이유로 최근 전자 및 반도체 등의 산업에서 수소 대신 중수소를 사용하는 추세이며, 활발한 연구가 진행되고 있다. 한국이 수입하는 중수소 가스(D2) 양이 전 세계 시장의 절반 이상임에도 불구하고 산업적용에 적합한 중수소 생산설비가 구축되어 있지 않아 전량 수입에 의존하고 있다. 현재 국내 여러 기업에서 중수소 생산시설을 구축하여 순도 높은 중수소를 생산하고자 한다. 중수소 가스(D2)는 중수(D2O)를 전기분해하는 방식으로 생산하게 되는데 이과정에서 생산되는 중수소 가스(D2) 내부에는 그 동위원소인 H2(Hydrogen)와 HD(Hydrogen Deuteride)가 불순물로 존재하게 된다. 이는 결국 중수소 가스의 순도에 영향을 미치게 되기 때문에산업에 활용되기에 적합하지 않다.

본 실험에서는 수소, 중수소, HD(Hydrogen Deuteride) 각각의 고순도 가스 3종을 활용하여 미량의 수소 동위원소들을 정밀기체질량분석기(Precision Gas Mass Spectrometer, MAT271)를 사용하여 분석 하였다. 분석에는  $H_2$ , HD,  $D_2$  가스의 감도값을 사용하여 각각의 가스 내에 존재하는 수소동위원소들을 정량하였다. 수소에는 불순물로의 HD가 300  $\mu$ mol/mol, 중수소에는 2500  $\mu$ mol/mol, HD에는 중수소가약 5000  $\mu$ mol/mol 수준으로 존재하는 것을 확인했다. 해당 고순도 물질을 이용하여 수소동위원소를 분석용 CRM을 개발할 계획이며, 해당 CRM은 반도체 공정 품질관리에 활용할 수 있을 것으로 기대된다.

#### P-105 [표준]

# GC-FID/Methanizer를 이용한 고순도 질소의 순도분석법 개발

유제이12, 문동민1, 이진복1, 김운중2, 홍기룡1\*

<sup>1</sup>한국표준과학연구원 가스동위원소분석표준팀, <sup>2</sup>한남대학교 화학과 \*Corresponding author: khong@kriss.re.kr

산업의 고도화에 따라 반도체와 디스플레이에 사용되는 고순도 가스 및 미량의 가스상 불순물 분석을 위한 표준물질 및 관련 분석 기술의 필요성이 증가하고 있다. 국내・외 가스분석 관련 산업체에서 표준가스, 고순도 가스 및 특수가스 등의 생산을 위해 가스분석을 수행하고 있으나 품질관리에 애로사항이 많아 관리가 미흡한 실정이다. 본 실험실에서는 고순도 질소의 불순물로 존재할 수 있는 일산화탄소(CO), 이산화탄소(CO2), 및 메탄(CH4)을 3  $\mu$ mol/mol 농도로 중량법을 이용하여 제조한 바가 있다. 본 연구에서는 제조된 일차표준가스를 활용하여 고순도 질소의 순도분석법을 개발하였다.

기체크로마토그래프(Gas Chromatograph, GC)에 메타나이저(Methanizer)가 부착된 불꽃 이온화 검출기(Flame Ionization Detector)를 사용하였다. GC를 통해 물질을 분석할 때에는 운반가스와 시료가스가 필요하다. 일반적인 GC 분석에서 시료가스는 표준가스와 분석하고자 하는 가스가 번갈아 가며 사용되지만 개발된 순도분석법에서는 시료가스로서 일차표준가스를 고정적으로 사용하고 운반가스를 교체해가며 분석이 진행된다. 운반가스에 초고순도 질소를 사용한 분석값과 고순도 질소를 사용한 분석값을 비교하여 고순도 질소 내에 불순물의 농도를 측정할 수 있다. 본 실험에서는 액체질소와 제조사가 각기 다른 3곳의 99.999% 질소를 사용하여 분석을 진행하였다. 초고순도 질소와 순도분석이 필요한 질소를 각각 운반가스로 활용하였을 때 나오는 일차표준가스의 CO, CO2, CH4의 피크 면적을 비교하여그 차이만큼을 불순물로 정량할 수 있다. 그 결과, 얻어진 불순물의 농도 값을 기존의 순도분석 방법과 비교하였을 때 불확도 내에서 서로 일치하는 것을 확인하였다.

#### P-106 [표준]

# 브로민 정량 분석용 폴리에틸렌 인증표준물질 개발 및 보급

권덕준<sup>1</sup>, 방양석<sup>1</sup>, 허기영<sup>1</sup>, 염태호<sup>1</sup>, 이용현<sup>1</sup>, 박지민<sup>1</sup>, 홍원표<sup>1</sup>, 이희진<sup>1</sup>, 김형기<sup>1</sup>, 박정애<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>한국화학융합시험연구원 \*Corresponding author: pj0515@ktr.or.kr

전기·전자제품 중 유해물질 규제는 유럽의 RoHS(Restriction of Hazardous Substances Directive, 유해물질 제한지침)과 REACH(Registration, Evaluation, Authorization and Restriction of Chemicals)를 태동으로 각 선진국 및 개발도상국으로 퍼져나가고 있다. 특히, 규제 물질 중 상당수를 차지하는 물질이 브로민(Br) 화합물과 염소(Cl) 화합물임에 따라 국제적으로 할로겐 자체에 대해 규제에 대한 요구가증가해 왔으며, 그에 따라 국제적으로 "할로겐 프리"라는 명칭으로 규제를 시행하고 있다. 이와 같은 할로겐 규제의 증가에 따라 할로겐 분석을 위한 인증표준물질(CRM) 개발의 요구가 증가되어 왔으며, 현재 여러 나라에서 할로겐 CRM을 개발하여 판매하고 있다. 현재 할로겐 분석을 수행하는 국내 시험기관 및 대기업에서는 해외 브랜드의 CRM을 주로 사용하고 있는 실정이며, 그에 따라 해외의존도 감소를 위해 국내 할로겐 분석 전용 CRM 개발의 필요성이 대두되어 왔다.

이 연구는 전기전자제품에 많이 사용되는 폴리에틸렌(Poly Ethylene) 소재를 기반으로 한 브로민 정량 분석용 인증표준물질 개발을 목표로 하였으며, 목표 농도는 고농도 약 1,000 mg/kg, 저농도 약 200 mg/kg로 하였다. 생산계획에서부터 제조, 분석방법의 유효성 평가, 균질성 평가, 안정성 평가 및특성값 및 측정불확도 산출의 일련의 절차를 통해 CRM 후보물질을 개발하였으며, 국제적으로 할로겐 분석에 많이 사용되는 국제 표준 IEC62321-3-2 : 2020 (Determination of certain substances in electrotechnical products – Part 3-2: Screening – Fluorine, chlorine and bromine in polymers and electronicsby combustion-ion chromatography (C-IC))을 사용하였다.

시판되는 고분자 재질의 브로민 인증표준물질을 활용하여 시험방법 유효성 평가를 실시한 결과, 정밀 도는 5% 이내, 회수율은 불확도 이내로서 만족한 결과를 나타내었다. 균질성 평가 결과, 고농도 및 저 농도 후보표준물질 상대표준편차가 각각 3.5 %, 2.5 %로서 목표치인 5 % 이내로 산출되었으며, 신뢰수준 95 %에서 P-값이 0.05보다 크므로 유의성이 없는 것을 확인하여 충분한 균질성을 확보하였음을 확인하였다. 3주간 단기안정성 평가 결과, 운송온도(-10℃, 45℃)에서 고농도, 저농도 모두 온도간 유의성이 없는 것으로 확인되었으며, 6개월간 장기안정성 평가 결과, 고농도, 저농도 모두 P-값이 0.05보다 크므로 장기 안정성이 확보된 것으로 확인하였다. 최종적으로 고농도, 저농도 CRM 후보물질의 인증값 및 확장불확도 값을 산출하였다.

### P-107 [표준]

# 염소계 난연제 Tris(2-chloroethyl)phosphate 분석용 ABS 상용표준물질 개발

손현화<sup>1</sup>, 이진숙<sup>1</sup>, 차진선<sup>1,\*</sup>

¹한국산업기술시험원 재료기술센터
\*Corresponding author: jscha@ktl.re.kr

Tris(2-chloroethyl)phosphate(TCEP)는 플라스틱과 같은 가연성 소제에 첨가되는 대표적인 염소계 난연제로 브롬계 난연제가 유해물질로 규제되면서 그 대체제로 사용량이 계속 증가하고 있다. 그러나 생식 독성과 같은 인체 유해성이 보고되면서 유럽에서는 2010년부터 TCEP를 REACH(Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of CHemicals) SVHC(Substance of Very High Concern) 물질로 지정하여 규제하고 있다. 또한 전기전자제품의 유해물질 시험방법 국제표준화 작업반(IEC/TC 111/WG 3)에서 표준 개발이 가장 시급한 유기성 유해물질로 선정되어 현재 국제표준화가 진행 중이며 향후 규제가 강화될 전망이다. 국내외 관련 기업들이 환경규제에 선제적으로 대응하기 위해서는 표준물질 사용을 통한 신뢰성 높은 유해물질 평가가 요구된다. 그러나 현재 TCEP 분석용 표준물질은 국내외 전무한 상황이다. 따라서 본 연구에서는 전자재료용 고분자 소재로 널리 사용되고 있는 ABS를 매질로 하여 TCEP 분석용 상용표준물질 2종(고농도, 저농도)을 개발하였다. 제조한 표준물질은 TCEP-d<sub>12</sub> 동위원소를 이용하여 동위원소희석질량분석법으로 고농도 표준물질의 경우 (779 ± 55) mg/kg, 저농도 표준물질의 경우 (107 ± 8) mg/kg으로 TCEP의 특성값을 부여하였다 (신뢰수준 95 %, k = 2). 또한 등간격샘플링을 통해 균질성을 평가한 결과 상대표준편차 3 % 이하로 균질함을 확인하였으며, 고온 (70 ℃), 저온 (-20 ℃)에서의 운송 안정성과 6개월간 장기 안정성을 평가하여 회귀분석법으로 경향성을 확인한 결과 유효기간 내에 안정함을 확인하였다.

### P-108 [표준]

# ICP-OES와 ICP-MS를 이용한 고순도 산화이트륨의 화학 분석 방법 최적화

Optimization of methods for chemical analysis of impurities in yttrium oxide using ICP-OES and ICP-MS

최연지, 손현화, 이현아, 이진숙, 이연숙\*

한국산업기술시험원 재료기술센터
\*Corresponding author: lou0824@ktl.re.kr

현재 반도체·디스플레이 산업에서 사용되는 첨단소재 중 산화이트륨 소재는 우수한 내열성, 내식성, 내플라즈마 특성으로 인해 가장 활발하게 사용된다. 특히 고순도 산화이트륨 $(Y_2O_3)$ 은 내플라즈마 특성이 우수하여 반도체·디스플레이 공정장비 부품이나 코팅 소재로 가장 많이 이용된다. 반도체·디스플레이 산업의 공정 과정이 초미세공정으로 개선됨에 따라 99.99 % 이상의 고순도 산화이트륨이 요구되고 있지만, 분석방법의 부재로 인해 고순도를 평가하기가 어렵다. 따라서 높은 신뢰도와 정확도의 표준화된 고순도 산화이트륨 평가기술이 확보되어야 한다.

따라서 본 연구에서는 ICP-OES와 ICP-MS를 이용해 99.99 % 고순도 산화이트륨의 불순물을 정확하게 정량할 수 있는 화학 분석 방법에 대해 최적화하였다. 일반적인 산분해 방법과 마이크로파 분해 방법 등의 전처리 방법별로 비교하였고, 무기산의 종류와 농도에 따른 영향을 파악하였으며 직선성, 정밀성, 정확성 및 검출한계 등을 통해 시험방법의 유효성을 검증하였다. 또한, ICP-MS를 사용해 Eu, Nd 등과 같은 희토류 금속 원소에 대해 정량하고 차수법으로 고순도 산화이트륨의 순도를 구할 수 있는 방법을 개발하였다.

#### P-109 [법과학]

# 소변 중 쿠에티아핀, 리스페리돈, 아리피프라졸 및 올란자핀 LC-MS/MS 분석결과를 이용한 ROC 곡선기반 판정기준값 설정

김선영, 이현수, 신동원, 서승일, 정재철, 김진영\*

대검찰청 디엔에이·화학분석과

항정신병약물의 정상적 복용과 비정상적 복용 여부에 대해 객관적인 구분이 가능하도록 약물 농도 기준값 (cut-off value)을 설정하고자 하였다. 항정신병약물의 소변 중 농도를 측정하기 위해 액체크로마토그래피-이중질량분석법 (LC-MS/MS)을 사용하였으며 측정된 약물의 농도는 소변 중 크레아티닌 농도로 보정하였다. 치료명령이 부과된 보호관찰대상자의 소변시료에서 처방받은 약물의 복용여부 확인을 위해 항정신병약물의 모체와 그 대사체를 분석하였다. 분석대상 약물의 최적판정기준값은 ROC (receiver-operating characteristic) 곡선을 사용하여 계산하였다. 우선 민감도 (sensitivity)와 특이도 (specificity)를 계산한 후, 이를 이용하여 ROC 곡선을 작성하였다. 분류 모형의 성능 평가를 위해 ROC 곡선으로부터 AUC 값을 계산하였고, 쿠에티아핀, 리스페리돈, 아리피프라졸 및 올란자핀의 AUC 값은 각각 0.875, 0.925, 0.978 및 0.953이었다. 이 때 얻은 판정기준값은 쿠에티아핀 59.3 ng/mg[Cr], 노르쿠에티아핀 315.0 ng/mg[Cr], 리스페리돈 11.2 ng/mg[Cr], 9-하이드록시리스페리돈 296.7 ng/mg[Cr], 아리피프라졸 1.2 ng/mg[Cr], 디하이드로아리피프라졸 1.1 ng/mg[Cr], 올란자핀 16.2 ng/mg[Cr], 사-데스메틸올란자핀 12.2 ng/mg[Cr]이였다. 본 연구를 통해 쿠에티아핀, 리스페리돈, 아리피프라졸과 올란자핀 모두에서 정상적인 복용과 비정상적 복용 여부 구분을 위한 농도 기준값을 설정할 수 있었고, 앞으로도 더 많은 시료에 적용하여 결과의 유용성을 검증할 예정이다.

# P-110 [법과학]

# 제련소 근로자의 사후 전혈에서 9 종의 유해중금속농도 비교 연구

김경민\*, 김유나, 권미아

국립과학수사연구원 법과학부 화학과, 강원도 26460, 대한민국 kmkim1226@korea.kr

최근에는 인간의 생물학적 시료에서 유해중금속 함량 측정뿐만 아니라 환경에 존재하는 중금속 농도의 지속적인 증가로 인한 부정적인 영향에 상당한 주의를 기울이고 있다. 본 사례 연구에서는 제련소에서 일하는 공장 근로자 및 사무실 근로자, 일반 대조군과 국·내외 발표된 참고문헌의 사후 전혈에서 유해중금속농도를 비교분석했다. 유해중금속 9 종(예: Cr, Mn, Ni, Cu, As, Cd, Hg, Pb 및 Li)의 농도는 유도결합플라즈마-질량 분석기(ICP-MS)를 사용하여 상대적으로 결정됐다. 분석에 앞서 혈액샘플을 1-step으로 마이크로파 시스템을 통해 전처리하여 분석 시료를 준비했다. 제련소 공장 근로자의 Cr의 함량은 제련소 사무실 근로자, 일반 대조군 및 국·내외에 발표된 일반 대조군의 전혈보다 높은 농도로 검출됐다.

## P-111 [법과학]

# Assessment of postmortem gas distribution and cause of death in two low-level exposure cases to explosive gas

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

\*Chemistry Division, National Forensic Service

Case 1: Butane is a simple asphyxiant with explosive (LEL% 1.9) and flammability. Butane cans are often used as fuel gas for portable heaters. In a case of death by turning on portable heaters in enclosed vehicle, exposure to butane concurrently with carbon monoxide (CO) was investigated as a toxicological issue such as the time of death. To estimate the death history, it is important to determine if fuel gas is detected in the cadaver. Field test showed that after 70 minutes after the heater was ignited, the heater was turned off and butane started leaking without burning. CO-Hb was above the lethal level, so the cause of death was CO poisoning. However, other trace amounts of butane were detected in tissues, so it is possible that they were breathing for up to 70 minutes or more. Butane was not detected in blood but was detected in brain, suggesting that brain is a better specimen.

Case 2: Methane is also a simple asphyxiant with explosive (LEL% 5.0) and flammability. We present a victim who was found at the site of a coal mine collapse. We determined methane concentrations in blood and tissues. The values showed lower exposure levels compared to deaths from inhalation suicide or methane gas explosion. The brain-to-blood methane concentration ratio was 3, which was consistent with not-long survival period and compression death by simple collapse rather than gas explosion.

<sup>\*</sup>Corresponding author: siyusang@korea.kr

## P-112 [법과학]

## 부식방지를 위한 보일러 배관 약품처리 여부 규명

이준배1\*, 조영훈1, 고정아1, 박민주1, 권미아2

<sup>1</sup>국립과학수사연구원 대구과학수사연구소 독성화학과, 대구 <sup>2</sup>국립과학수사연구원 화학과, 원주 \*Corresponding author: pajlee@korea.kr

부식(corrosion)은 금속이 그 주위환경의 여러가지 물질과 화학반응 또는 전기화학적 반응에 의해 발생되는 금속의 파괴 및 유효수명이 단축되는 현상으로서, 자연상태의 광석에 많은 에너지를 가해 정련 과정을 통해 얻어진 금속이 다시 안정한 자연상태로 되돌아 가려는 성질을 의미한다. 산업현장의 배관, 반응기, 분리탑 등 각종 설비 금속의 부식으로 인한 경제적 손실은 GNP의 3.5 ~ 4%에 이르며, 세계에서 생산되는 철의 약 10 ~ 20%가 부식에 의해 손실된다는 보고도 있다. 부식이 발생되기 위해서는 산화 및 환원의 전극반응을 통해 이온의 이동이 수반되어야 한다. 이 과정을 통해 전기적으로 완전한 회로가 구성되어 양극인 금속배관에서 화학적으로는 산화반응이 이루어지므로 부식이 발생된다. 따라서, 부식은 전류가 양극의 금속을 떠나 전해질인 매질로 들어가는 곳에서 발생하며, 양극을 떠난 전류는 음극으로 흘러가고, 금속재질인 양극에서 산화반응이 일어나 부식이 진행된다. 이러한 부식을 방지하기 위해상황에 따라, 회로를 차단하는 환경을 조성하기 위해 도금, 피복, 부식환경 차단, 전기방식, 부식억제제사용 등의 방법이 적용된다.

본 연구에서는 보일러 배관 파열과 관련된 사건에서, 부일러 배관에 부식방지를 위한 부식억제약품처리 여부를 부식물을 통해 확인하고자 하였다. 부식억제제로 사용되는 물질로서 통상적인 열전달유체인 수중에서 산소제거를 위한 탈산소제가 흔히 적용되며, 여기에는 배관규모와 목적에 따라하이드라진, 아황산 또는 아질산 등과 함께 인산염 등이 사용된다. 배관 중 철 부식물에 대해이온크로마토그래피-질량분석법(IC-MS)과 페놀(phenol)과의 nitration 및 MSTFA(2,2,2-trifluoro-N-methyl-N-(trimethylsilyl) acetamide)에 의한 silylation 반응을 이용하여기체크로마토그래피/질량분석법(GC/MS)을 통해 아질산 및 인산염을 확인하였다. 이들 성분의 확인을통해 보일러 배관에서 부식억제제 사용을 추정할 수 있었으며, 보일러 배관 파열은 용접이나 국부적열부하 또는 기타 설비상 결함에 의한 것으로 추정되었다.

### P-113 [법과학]

## Analysis of carbon monoxide in postmortem spleen specimens by GC-TCD

## Miyeon Lee<sup>1</sup>, Mia Kwon,<sup>1</sup> Hyun Jee Kim<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Forensic Chemistry Division, National Forensic Service, Wonju, Republic of Korea \*Corresponding author: hjkim0@korea.kr

Carbon monoxide(CO) is a gaseous diatomic molecule that has no taste, color or odor. It is generated during incomplete combustion of hydrocarbon-based substances, such as from poorly ventilated fires, wood, gasoline, and exhaust gases from petroleum-fueled engines. CO is known to have the potential to cause serious adverse health effects related to the respiratory, cardio-circulatory and neurological systems, which in the worst case can lead to death.

If sufficient femoral venous blood(FVB) can be collected from autopsy, the concentration of carboxyhaemoglobin(COHb) in the blood can be measured using the CO-oximetry method. However, the above method cannot be applied if the blood volume is insufficient or the postmortem is highly putrified. In this case, in order to assess whether or not death is caused by CO, the concentration of COHb in the spleen specimens, which can be a major substitute for blood that provides a rich source of erythrocytes in living tissues, can be analyzed by gas chromatograph-thermal conductivity detector(GC/TCD).

In 21 spleen specimens from autopsy, there were cases of COHb poisoning at levels of 58-94% due to charcoal and fires in vehicles and rooms, but levels up to 27% were found in individuals who did not show symptoms of CO poisoning. In most cases of highly purified postmortem, CO was found to be produced in significant quantities in cases that were not related to fire- or CO exposure. COHb levels of 25% in a postmortem case may be considered as a contributing factor to the cause of death but should not be considered exclusively as the cause of death. It is suggested that the CO in a putrified postmortem is due to CO in blood prior to death and the CO formed by the decomposition of Hb, myoglobin, and other substances during putrefaction.

### P-114 [법과학]

Simultaneous analysis of 12 selective androgen receptor modulators (SARMs) adulterated in the dietary supplements using LC-ESI-MS/MS and LC-Q-TOF/MS

## Nam Sook Kim, Hwan Seong Choi, Na Young Lim, Ji Hyun Lee, Hyungil 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 selective androgen receptor modulators (SARMs) have been popular in the sport athletes due to their muscle strengthening effects. However, it has been often reported that the unauthorized compounds like SAMRs illegally adulterated in dietary supplements and misused to improve their pharmacological efficacies. The SARMs not only are similar to anabolic-androgenic steroids as synthetic derivatives of testosterone with efficacious for muscle strengthening but also may occur serious health problems such as liver damage, and sexual dysfunction and so on. So far, there are no SARM products clinically approved, and the U.S. Food and Drug Administration and World Anti-Doping Agency warned and prohibited to take in the SARMs. In this study, we would like to simultaneously analyze and reconfirm the SARMs adulterated in dietary supplements sold via on-line market using LC-ESI-MS/MS and LC-Q-TOF-MS. As target compounds, 12 SARMs (andarine, ostarine, SR-9009, and etc.) were chosen that were referred to the hazardous food bloking list on the Foodsafetykorea website and previous reports. The LC-ESI-MS/MS simultaneous analytical method was developed using Atlantis dC<sub>18</sub> (2.1x100 mm, 3.0um) as a column and two mobile phases (0.1% formic acid in water and acetonitrile). The methodwas validated as follows: LODs and LOQs spiked in solid- and liquid-type blank samples (0.03-2.00 ng/mL and 0.10-6.00ng/mL), linearities (R<sup>2</sup>>0.99), and recoveries spiked in blank samples including powder, liquid, hard-capsule, and tablets (86.69-109.86%), respectively. For the applicability test of the methods on various types of real samples, 12 dietary supplements consisted of powder (3), liquid (3), hard-capsule (3), and tablets (3) were analyzed using LC-ESI-MS/MS method. Then the detected SARMs in one capsule was reconfirmed using LC-Q-TOF-MS. In conclusion, the established simultaneous analysis method can help to investigate the unauthorized compounds adulterated in various types of dietary supplement.

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

### P-115 [법과학]

## A Case of Industrial Accident Death due to Exposure to Tetramethylammonium Hydroxide(TMAH)

## Bokyoung Gong, Hyun Kyoung Ju, Su Hyeon Lee, Sung Hee Ahn, Min Jin Lee, Ji-Sook Min, Seh Youn Park\*

Forensic Toxicology and Chemistry Division, Seoul Institute, National Forensic Service, Seoul, Republic of Korea

\*Corresponding author: swan@korea.kr

Tetramethylammonium hydroxide(TMAH) is a quaternary ammonium salt,  $N(CH_3)_4^+OH^-$ . TMAH is most commonly encountered as an aqueous solution, which is colorless and no odor. TMAH has numerous and diverse industrial and research applications. One of the industrial uses of TMAH is for the anisotropic etching of silicon and typical etching concentrations are 5 ~ 25 wt. % in water

The tetramethylammonium ion affects nerve and muscles, causing difficulties in breathing, muscular paralysis and possibly death. In this case, A worker is exposed to TMAH solution and a safety accident occurred in which the worker fell down in a display factory on January 13, 2021. The day after the accident, even after cleaning the accident site thoroughly, TMAH was still detected at the accident site. Two months later, the worker who was being treated in the intensive care unit died of multiple organ failure due to chemical exposure, and we were asked whether TMAH was detected in his blood. The identification of TMAH by IC(ion chromatography) was not clear because of blood interference effect. It was confirmed that TMAH was no longer residual completely in the blood of the patient after 2 months of hospital treatment using IC-MS/MS(ion chromatography triple quadrupole mass spectrometer).

### P-116 [법과학]

## 화재 사고 현장에서의 휘발유 검출 지표 탐색을 위한 외부 노출시간에 따른 모의 화재 잔류물의 조성 분석

박치현\*, 박우용, 전수경, 이수민

국립과학수사연구원 대전과학수사연구소 \*Corresponding author: pch0938@korea.kr

화재에 의한 경제적 피해가 꾸준히 증가하고 있는 현대 사회에서 화재의 원인과 방화의 의도성 여부를 판단하는 것은 갈수록 중요해지고 있으며, 이에 따라 휘발유, 등유, 경유, 시너 및 유기용제류, 양초 등을 사용한 사건에서 인화성 물질의 검출 또한 그 중요성이 증대되고 있다. 특히 방화사건에서 사용빈도가 높은 인화성 물질 중 하나인 휘발유는 상대적으로 비점이 낮은 성분들로 이루어져 있어 화재 현장에 오래 잔류하기 어려우며, 플라스틱, 합성가죽 및 섬유 등의 연소에 의하여 발생하는 물질과 혼동될 수 있다. 이 때문에 야외 대기에 노출된 화재 잔류물에서 휘발유의 사용 여부를 판단하는 것은 분석자의 높은 숙련도를 필요로 하고 있다.

본 연구에서는 휘발유가 도포된 지류 및 인화성 물질이 도포되지 않은 지류를 사용한 모의 화재 잔류물을 우천을 포함한 야외 대기 환경에 장시간 노출시킨 후, 각각 노출 시간에 따라 분류하여 잔류한물질의 조성을 분석하였다. 이를 통하여 휘발유가 사용된 화재의 잔류물 혹은 휘발유가 사용되었던 것으로 추정되는 현장 등에서 채증된 시료에서 비교적 오랜 시간 잔류하여 휘발유 검출의 지표가 될 수있는 기준을 확인할 수 있었다.

## P-117 [법과학]

# Evaluation of measurement uncertainties in the determination of cobalt from racehorse urine and plasma

## Junhyuk Jeon, Yong Duk Lee, Jundong Yu\*

Korea Racing Authority
\*Corresponding author: jundong@kra.co.kr

Given the nature of its hypoxic stimulus, cobalt is a potential dope for racehorses. It can cause gene modulation to induce erythropoietin transcription, thus leading to an enhancement in aerobic performance(Emmie N M Ho et al., 2015). Hence it is controlled by the international threshold(urine : 100 ng/mL, plasma : 25 ng/mL).

In this study, measurement uncertainties(MU) of the analysis of cobalt(Co) from equine urine and plasma using Inductively Coupled Plasma-Mass Spectrometry(ICP-MS) were evaluated in detail, on the threshold level. Matrix-matched quality controls which are made equivalent to each threshold level were analyzed repetitively(n=10). Uncertainty budget were studied under the bottom-up approach suggested by EURACHEM/CITAC Guide. 5 major sources of MU were specified; uncertainty of standard, calibration curve, use of surrogate matrix(i.e. 0.35% HNO<sub>3</sub>), sampling, and dilution. The most dominant contributions were from the use of the surrogate matrix in calibration, and their contributions were 63.3% and 93.3% for urine and plasma, respectively. Bias component of urine appeared to be relatively as small as 0.09%, while for plasma it was as big as 5.88%.

Standard MUs from each source were converted into relative MUs and combined. Expanded measurement uncertainty was 2.6 ng/mL in urine and 3.2 ng/mL in plasma, with coverage factor k=2 at 95% level of confidence.

### P-118 [법과학]

## In vitro metabolism study of anamorelin in human liver microsomes using molecular networking on GNPS platform

Young Beom Kwak<sup>1,2</sup>, Yong Duk Lee<sup>1</sup>, Jungdong Yu<sup>1,\*</sup>, Hye Hyun Yoo<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Racing laboratory, Korea Racing Authority, Gwachon, Republic of Korea <sup>2</sup>College of Pharmacy, Hanyang University, Ansan, Republic of Korea

Anamorelin is s selective agonist of the non-peptide growth hormone secretagogues (GHs). The illegal use of "GHs" for their anabolic activity is strongly prohibited by World Anti-Doping Agency (WADA). However, the metabolism study of anamorelin for forensic evidence has not been done in human yet. In this study, the *in vitro* metabolism of anamorelin was investigated in human liver microsomes (HLM) using molecular networking (MN). As a result, a total of 17 metabolites (M1-M12) nodes in MN were structurally connected and elucidated based on MS¹, MS² and FMOs test (M1, demethylation; M2, demethylation and desaturation; M3a-b, hydroxylation; M4a-d, di-hydroxylation; M5a-c, hydroxylation and demethylation; M7, *N*-dealkylation; M8, *N*-dealkylation and demethylation; M9, *N*-dealkylation and desaturation; M10, *N*-oxidation; M11, *N*-oxidation and hydroxylation; M12, *N*-oxidation and demethylation). MN analysis additionally detected 12 metabolites which had not been reported previously.

### P-119 [일반]

## Surface analysis of Integrated Circuit Chip with SEM-EDS and XRD

<u>김연수</u><sup>1</sup>, 서지형<sup>1</sup>, 장한별<sup>2</sup>, 홍성민<sup>2</sup>, 손영구<sup>1,2</sup>, 김정권<sup>1,2</sup>\*

<sup>1</sup>충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터, <sup>2</sup>충남대학교 화학과 \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Various equipments for surface analysis are used in one or more combinations depending on the case. In order to obtain as many conclusions as possible for a single sample, the data obtained with various equipments should be used comprehensively, and these comprehensive analysis could provide a synergy effect. In this study, in order to determine a complete surface analysis of the integrated circuit (IC) chip attached to a discarded credit card, the data obtained by scanning electron microscopy-Energy dispersive X-ray spectroscopy (SEM-EDS) and X-ray diffraction (XRD) analysis was compared. The IC chip separated from the credit card was first analyzed by XRD to obtain data on its constituent. And then, point analysis and mapping analysis were performed using EDS on the electron image obtained by SEM. Elemental composition and distribution analyzed by SEM-EDS were similar to those obtained by XRD. The comprehensive use of multiple analytical results obtained by various equipments for a single sample would be helpful to derive more reliable conclusions about surface analysis.

### P-120 [일반]

## Quantification of limonene in citrus peel oil

서지형<sup>1</sup>, 김연수<sup>1</sup>, 손영구<sup>1,2</sup>, 김정권<sup>1,2</sup>\*

<sup>1</sup>충남대학교 화학물질특성분석 핵심연구지원센터 <sup>2</sup>충남대학교 화학과

\*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Citrus peel, a by-product generated after processing citrus, contains various active ingredients and has been widely used in oriental medicine. In general, citrus peels are used to extract essential oils. In this study, commercially available citrus peel oil was analyzed by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) as a preliminary experiment for the analysis of citrus peels. Citrus peels are mainly composed of limonene which is a natural chiral compound. In order to accurately determine the amount of limonene contained in citrus peel oil, a calibration curve was generated by using a pure limonene standard. GC-MS anlaysis showed the limonene peak at 7.8 min with m/z 41, m/z 53, m/z 68, m/z 93, m/z 107, m/z 121 and m/z 136. In the future, the limonene will be directly extracted from citrus peel and quantitatively analyzed using GC-MS.

### P-121 [일반]

## Urinary exosome isolation using multiple cycles of centrifugation

## Iqbal Jalaludin, 김정권\*

충남대학교 화학과 \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Exosomes have great potential for non-invasive diagnostics and therapeutics because of their capacity in facilitating communication between cells and drug delivery. Exosomes are produced in cells and discharged into the extracellular milieu as they circulate throughout the system. Hence, they can be found in biofluids such as blood and urine. Ultracentrifugation is a standard method for isolating exosomes that use high-speed centrifugation, i.e. 100,000×g, to pellet exosomes. However, the exosome integrity can be compromised by repetitive high-speed centrifugation, which damages the vesicles. Our present study employed low-speed centrifugation, i.e. 40,000×g, to isolate exosomes from urine samples. The method required four cycles of centrifugation to remove non-exosomal proteins based on the gel electrophoresis results. Exosomal proteins like CD63 and TSG101 corresponded to the antibodies in Western blotting, confirming the existence of exosomes. Dynamic light scattering profiles suggested that the average diameter of the isolated pellets was 50 to 200 nm, which is the size range of exosomes. All characterization methods indicate that the urinary exosome isolation using lower speed centrifugation was feasible. Further research with a larger group of subjects is needed to assess the reproducibility of the method.

### P-122 [일반]

# C-terminal modification of peptides after microwave-assisted weak acid hydrolysis of proteins

장세은, 이크발, 김정권\*

충남대학교 화학과 \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

In this study, microwave-assisted weak acid hydrolysis of myoglobin was performed. We introduced the analysis of the hydrolyzed myoglobin peptides by matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry (MALDI-TOF MS). In horse heart myoglobin, complete C-terminal cleavage using weak acid hydrolysis provides nine peptides. We obtained six completely cleaved peptides and four partially cleaved peptides. Here, 2,2'-dipyridyl disulfide (DPDS), triphenylphosphine (TPP), and 2-hydrazinoquinoline (HQ) will be used to convert carboxylic acid to hydrazide. DPDS and TPP are used to modify the carboxylic acid to acyloxyphosphonium ion, and HQ is used to modify the acyloxyphosphonium ion to hydrazide. We expect an increase of the peak intensity of the orginal peptides in MALDI-TOF MS. In addition, some unidentified peptides would be observed with the current modification strategy. It will be a useful tool for identifying proteins using microwave-assisted weak acid hydrolysis with MALDI-TOF MS.

### P-123 [일반]

# A binary matrix to observe a broad range of peaks in matrix-assisted laser desorption/ionization-mas spectrometry

## 황효진, Iqbal Jalaludin, 김정권\*

충남대학교 화학과 \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

In matrix-assisted laser desorption/ionization-mass spectrometry (MALDI-MS), one matrix is mixed with peptides for the analysis. However, the detection range and effect on peptide peaks for each matrix are different. In 2,5-dihydroxybenzoic acid (2,5-DHB), the peptide peaks are well observed in a low m/z range, and in 2-nitrophloroglucinol (2-NPG), the peaks in a high m/z range are well observed. Mixing two matrices and thereby using the effects they both have at the same time would simplify the experimental procedure and save time. To prepare a peptide solution, a protein stock solution is first prepared by dissolving 10 mg of protein (beta-casein) in 1 mL of 10 mM ammonium bicarbonate buffer. The prepared protein stock solution was digested overnight with trypsin. To prepare 2,5-DHB matrix solution, 10 mg of 2,5-DHB was dissolved in 1 mL of 50 % acetonitrile (ACN) containing 1 % phosphoric acid in distilled water. To prepare 2-NPG matrix solution, 10 mg of 2-NPG was dissolved in 1 mL of 50 % ACN and 1 % HCl in distilled water. The two matrix solutions were mixed to prepare 2-NPG to be 0 %, 25 %, 50 %, 75 %, and 100 %, respectively. The prepared matrix and peptide solution were mixed 1:1, placed on a MALDI plate, dried, and analyzed in MALDI-MS. As the proportion of 2-NPG in the matrix solution increased, the number of peaks observed in a low m/z range decreased, and the number of peaks observed in a high m/z range increased. The range where peaks can be observed is expanded when two matrices are used together than when one matrix is used alone.

P-124 [일반]

## Analysis of disaccharide isomers using GC-MS

임진아<sup>†</sup>, Iqbal Jalaludin, 김정권\*

충남대학교 화학과 <sup>†</sup>lovewlsdk624@gmail.com \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Disaccharide isomers such as gentiobios, isomaltose, melibios, lactose, maltose, cellobios, and sucrose have the same elemental composition of  $C_{12}H_{22}O_{11}$  and the same molar mass of 342.3 g/mol. Therefore, to distinguish these disaccharide isomers additional analytical tools such as liquid chromatography or tandem mass spectrometry are often required. In this study, the seven disaccharide isomers were analyzed using gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) after trimethylsilyl (TMS) derivatization. Since the disaccharides contain eight –OH groups, they have low volatility, so the disaccharides were analyzed after TMS derivatization. Each disaccharide was identified as a unique GC and GC-MS peak pattern. The unique GC and GC-MS peak pattern can be used to distinguish the disaccharide isomers. Ultimately, this study attempts to confirm what disaccharides are present in honey.

### P-125 [일반]

# MALDI-MS analysis of disaccharide isomers using graphene oxide matrix with different cation agent

권도경, Iqbal Jalaludin, 김정권\*

<sup>1</sup>충남대학교 화학과 \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Disaccharides consist of two monosaccharides joined by a glycosidic linkage. The differences in disaccharide isomers are related to their constituent monosaccharides, anomeric configuration, and type of glycosidic linkage. In this study, seven disaccharide isomers (cellobiose, melibiose, maltose, lactose, sucrose, gentiobiose, and isomaltose) were analyzed by matrix-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry (MALDI-MS) using a graphene oxide matrix with different cationization agents (Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, and Ag<sup>+</sup>). More disaccharide isomers fragmentation occurred when Na<sup>+</sup> was used. The seven fragmentation peaks were detected when Na<sup>+</sup> was used, while two fragmentation peaks detected when K<sup>+</sup> or Ag<sup>+</sup> was used. An adduct form of disaccharide isomers with sodium, potassium, or silver ion was detected at *m/z* 365, *m/z* 381, or *m/z* 449, respectively. To identify disaccharide isomers, tandem mass spectrometry (MS/MS) is used for all the seven isomers. The current results will be beneficial for differenciating disaccharide isomers using MALDI-MS.

### P-126 [일반]

## Efficient extraction of intact proteins from polyacrylamide gel by using triethylamine hydrogen sulfate and syringe filter

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 triethylamine hydrogen sulfate and 0.1 % (v/w) sodium dodecyl sulfate and a syringe filter 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 and the syringe filter. 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 quantified by image J. Quantitative analysis showed that the proteins were efficiently extracted from the gel.

### P-127 [일반]

## Sterilization of Bacillus atrophaeus spores by liquid phase of ozone

노소정<sup>1</sup>, 장한별<sup>1</sup>, 임진아<sup>1</sup>, 조은아<sup>2</sup>, 최수훈<sup>2</sup>, 김정권<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>충남대학교 화학과, <sup>2</sup>충남대학교 환경공학과 \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Ozone has been recognized as a safe disinfectant. Ozone is commonly used to disinfect contaminants or microorganisms in water and foods such as raw meat and vegetables that could not be disinfected with heat. Ozone inactivates microorganisms by destroying bacteria' metabolic and reproductive capabilities that break down or degrade cell membranes and genetic nucleic acids. The reported extinction coefficient of ozone at wavelength of 258 nm is 3840 M<sup>-1</sup> · cm<sup>-1</sup>. As a result of measuring the ozone concentration in ozone dissolved water, the ozone concentration was  $1.30 \times 10^{-5}$  M. In this experiment, the sterilization effect of liquid phase ozone will be confirmed by dropping onto the *Bacillus atrophaeus* spores absorbed on glass. For the experiment, 100 µL *Bacillus atrophaeus* spores (1×10<sup>6</sup> CFU/mL) will be loaded on the glass for absorption. Then, an ozone dissolved in water is applied on the spore loaded glass. After the sterilization, the spores are desorbed by a laser blade cutter and washed using PBS with 0.2 % tween 20. The desorbed spores are cultivated on a solid culter (LB agar plate) for 24 hr at 37 °C in an incubator to calculate the colony-forming unit (CFU/mL) of viable colonies. The detailed results will be presented during the session.

P-128 [일반]

## A New Approach for Time-dependent Cancer Volatiles Profiling via Isotope-labeling

Kyongjin Moon<sup>1</sup>, Dong-Kyu Lee<sup>2</sup>, Euiyeon Na<sup>1</sup>, Seongoh Park<sup>3</sup>, Jeong Hill Park<sup>1,2</sup>, Johan Lim, Sung Won Kwon<sup>1,2</sup>★

<sup>1</sup>서울대학교 약학대학, <sup>2</sup>서울대학교 종합약학연구소, <sup>3</sup>서울대학교 통계학과 \*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

While extensive research has been done on cancer detection using volatile biomarkers, the intracellular biochemical processes for the origin of biomarkers have not been fully elucidated. These limitations interrupt practical application of volatile biomarkers. Therefore, we developed a metabolism tracking method utilizing isotope labeling and flux analysis to overcome this problem. This novel method allows us to track intracellular volatiles and clarify their association with cancer metabolism. In this study, the carbon isotope ratio of <sup>13</sup>C-labeled lung cancer cell was measured using NanoSIMS-based imaging. The kinetic modeling of time-dependent isotopic ratio deduced the duration of cancer cell reaching a steady state of metabolism, at which point all potential intracellular volatiles are completely replaced by isotopes. In addition, by measuring the enrichment of isotopes in volatiles, it was revealed that 2-pentadecanone is derived from the fatty acid synthesis starting from glucose. Moreover, it was confirmed that this metabolic pathway is upregulated in cancer cells such as colon cancer, breast cancer, and pancreatic cancer compared to normal cells. These results indicate that this new method will be an effective strategy for tracing the origin of cancer volatiles and understanding intracellular metabolic pathways.

This work was supported by the Bio-Synergy Research Project of the Ministry of Science, ICT and Future Planning through the National Research Foundation (NRF-2012M3A9C4048796).

P-129 [일반]

## Meta-metabolomics: comparison of meta-analysis using public untargeted metabolomics data

Young Cheol Yoon¹, Hoang Anh Nguyen¹, Phuoc Long Nguyen¹, Sung Won Kwon¹★

> <sup>1</sup>서울대학교 약학과 \*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

The large scale data in metabolomics received attention as becoming the first-line approach in clinical and molecular biology. Meta-analysis can provide the higher level of statistical power, but there were too many obstacles because of characteristics of mass spectrometry data. These days various statistical tools have been developed, overcoming batch effect and pathway analysis without identification became possible. We investigated several public untargeted metabolomics studies to build meta-analysis. We tried manual integration, metaXCMS, and Multimodal XCMS and compared the performance. Additionally, GC-MS data used for supporting meta-analysis result. The result revealed the best performance with metaXCMS and the most convenient with Multimodal XCMS. This work was supported by the Bio-Synergy Research Project of the Ministry of Science, ICT and Future Planning through the National Research Foundation (NRF-2012M3A9C4048796).

### P-130 [일반]

# LC-MS/MS approach for multiple cardiovascular drugs profiling in dried blood spot

정철운¹, 김형민¹, 권성원¹,★

서울대학교 약학과<sup>1,★</sup>

\*Corresponding author: swkwon@snu.ac.kr

A dried blood spot (DBS) sampling method which extracts cardiovascular drugs in blood is considered as useful tool in terms of analyzing a small amount of blood. In this study, LC-MS/MS-based analytical method coupled with DBS sampling was developed for simultaneous quantification of 12 cardiovascular drugs. A punchable 6 mm-disc was specifically designed to collect 10 µL of blood and gradient elution method with a total run time of 16 min was applied. A flow rate of 0.2 mL/min was ran for sample separation using C18 reverse phase column. By investigate linearity, accuracy, and precision, developed methods was verified. For the extraction efficiency, we investigated the matrix effects thoroughly. The stability of DBS was also assessed by storing it at room temperature and these drugs was stable for at least 1 month. In conclusion, we have developed a LC-MS/MS-based analytical method for multiple cardiovascular drugs profiling by a single analysis. This work was supported by the Bio-Synergy Research Project of the Ministry of Planning through Research Science, **ICT** and Future the National Foundation (NRF-2012M3A9C4048796).

P-131 [일반]

# Capillary electrophoresis/dual C<sup>4</sup>D of various lithium salts on a lithium battery anode surface

Sunkyung Jeong<sup>1</sup>, Byung-Hee Choi<sup>2</sup>, Jonggeol Kim<sup>2</sup>, Hee-Sun Yun<sup>2</sup>, and Doo Soo Chung<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul 08826, Korea <sup>2</sup>LG 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 (C<sup>4</sup>D) were placed on a single capillary, one near the inlet, and the other near the outlet. After performing liqui dextraction surface analysis (LESA) of as olid 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 C<sup>4</sup>Ds. When a reverse electric field is applied across the capillary, the cations and anions migrated in the opposite directions, andwere quickly detected with the C<sup>4</sup>D located in each direction. The ionic composition of a lithium battery anode surfacewas investigated by this LESA-CE/2C<sup>4</sup>D.

### P-132 [일반]

# Headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis mass spectrometry for complex samples

권준엽1, 정두수1,\*

<sup>1</sup>서울대학교 자연과학대학 화학부 \*Corresponding author: dschung@snu.ac.kr

Headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis mass spectrometry (HS-ITME-CE/MS) consists of three steps. First, samples are extracted via air, the excellent filter for separating volatile and non-volatile molecules. Second, extracted samples are enriched in a small volume of acceptor phase, giving higher signals than normally injected samples. Third, CE/MS gives good quantitative and qualitative analysis. HS-ITME-CE/MS is applied to extraction of trichlorophenol(TCP) isomers. TCPs are extracted from standard aqueous samples, tap/pond water. To enhance the extraction efficiency and to control the experimental environment, lab-designed water jacket and magnetic stirring system was built in the commercial CE instrument. HS-ITME-CE/MS results shows good results which meets the WHO drinking water guidelines of TCPs, and uses less extracting process and manpower. HS-ITME-CE/MS provides green analytical chemistry for the green environment.

### P-133 [일반]

Investigation of identifying method for lamellarity of lipid vesicles by asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS)

## Binnam Kang, Meiyu Zhang, Da Wang, Jaeyeong Choi and Seungho Lee\*

Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

Lipid vesicle (LV) is widely used for drug delivery due to its low toxicity, its structure being similar to the cell membrane of the human body, and its capability to carry substances inside the hollow structure. LVs are classified as multilamellar vesicle (MLV) and unilamellar vesicle (ULV) according to the number of lipid bilayers. The lamellarity affects the size distribution and stability of the LVs as well as the encapsulation efficiency and the drug releasing kinetics. It is thus necessary to develop a methodology for identifying the lamellarity of LVs.

In this study, LVs of various sized were prepared, and then asymmetric flow field-flow fractionation coupled with a multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS) was used to measure their molar masses. The molar masses were compared with those calculated from the size of the lipid vesicles to determine the LV lamellarity.

Results showed that the LV size decreased as the extrusion flow rate increased. And the LV lamellarity is affected by the extrusion flow rate and the lipid concentration. Under the influence of osmotic pressure, the size distribution of LVs tends to decrease in the case of hypotonicity and increase in the case of hypertonicity. The AsFIFFF-MALS provided a useful tool for determining the lamellarity of LVs. This method may be useful for quality control of LVs in the fields such as drug delivery applications.

### P-134 [일반]

# Study on the effect of size of cellulose on properties of blended polymer film (SBR with cellulose)

## Jin Wook Kim, Meiyu Zhang, Da Wang, Jaeyeong Choi, and Seungho Lee\*

Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea

A polymer blending is one of the methods to create new or similar materials with different physical properties by mixing and dispersing other heterogeneous polymer materials.

Nanocellulose is known as one of readily available natural polymers. It has been widely used in polymer blends due to its unique features such as high thermal stability, high mechanical strength, and hydrophilicity. It has been shown that hydrogels containing nanocellulose have improved heat resistance, strength, hygroscopicity, and biodegradable. It is estimated that the physical properties of the blended polymer will be significantly affected by the physical properties of cellulose, such as their size and the size distribution.

In this study, we prepared polymer films by blending Styrene Butadiene Rubber(SBR) and nanocellulose of various sizes, and then monitored the effect of the size and size distribution of cellulose on the properties of the polymer films. For the characterization of physical and chemical properties, asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) and SEM were used to determine the size and size distribution of nanocellulose. IR was used to confirm the preparation of nanocellulose and blended polymer film. In addition, TGA and DSC were used to evaluate the thermal stability of nanocellulose and blended polymer films.

### P-135 [일반]

## Development of Simutaneous Analysis Method for 13 Volatile Organic compounds (VOCs) in E-cigarettes by HS-GC-MS

## Kyeong-Yun Choi<sup>1</sup>, Ho-Sang Shin<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kongju National University, <sup>2</sup>,\*Department of Environmental Education, Kongju National University \*Corresponding author: hshin@kongju.ac.kr

E-cigarette needs the electronic device that convert e-liquid into gas and allow it to be inhaled into the human body. According to The World Health Organization, it is difficult to say if E-cigarettes are safer than conventional cigarettes. Some E-cigarettes companies are selling e-cigarettes, mentioning that e-cigarettes are harmless. However, e-cigarettes reported to cause a serious lung disease in 2019. In addition, some e-cigarettes are more possible to cause smokers to inhale nicotine excessively than conventional cigarettes.

There is a lack of information on harmful substances in e-cigarettes. Therefore, it is necessary to develop an analysis method for harmful ingredients to provide basic data necessary for e-cigarette regulation.

In this study, an analysis method for 13 volatile organic compounds (VOCs) were developed to analyze harmful components in e-cigarettes. The linearity of the proposal method is above 0.986. The detection limits are 0.0005 to 1.360. For an intra-day, the accuracy is 92.8-124%, and the precision is 2.56-15.7% (n=7). For an inter-day, the accuracy is 97.8-123%, and the precision is 0.22-13.2% (n=3).

### P-136 [일반]

## Development of Simutaneous Analysis Method for 41 Carbonyl compounds in E-cigarettes by Headspace Gas Chromatography-mass spectrometry

## Kyeong-Yun Choi¹, Ho-Sang Shin²,\*

<sup>1</sup>Department of Environmental Science, Kongju National University, <sup>2</sup>,\*Department of Environmental Education, Kongju National University \*Corresponding author: hshin@kongju.ac.kr

E-cigarette contains the electronic device which consist of an atomizer, a power source such as a battery, and cartridge containing nicotine. The devices converts e-liquid into gas and allow it to be inhaled into the human body. The World Health Organization comments that it is difficult to say if E-cigarettes are safer than conventional cigarettes. Some e-cigarettes vendors are selling e-cigarettes while providing scientifically unverified their harmless information. However, there are reports that e-cigarettes cause lung disease in 2019, and there are many other cases complaining of side-effects such as cough, trouble breathing, and chest pain. Moreover, some e-cigarettes are more possible to cause smokers to inhale nicotine excessively than conventional cigarettes, and the rate of use of e-cigarettes by teenagers is increasing.

There is a lack of management of harmful substances in e-cigarettes. Therefore, it is necessary to develop an analysis method for harmful ingredients to provide basic data necessary for e-cigarette regulation.

In this study, an analysis methods for 41 carbonyl compounds were developed to analyze harmful components in e-cigarettes. Headspace (HS) gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) was used for analysis method of carbonyl compounds. Carbonyl compounds reacted with 2,2,2,-triflouroethylhydrazine (TFEH) as derivatization reagent in headspace vial. TFEH derivatives were extracted and analyzed with GC-MS.

P-137 [일반]

# Method Development of Wood Volatile Organic Compounds Analysis using HS-INME Coated with GO;PANI followed by GC/MS

Sehyun Kim<sup>1</sup>, Jinyoung Park<sup>2</sup>, Daeun Lee<sup>2</sup>, Hyesu Lee<sup>2</sup>, Sunyoung Bae\*, Dongsun Lee\*

Department of Chemistry, Seoul Women's University

\*Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

Volatile organic compounds (VOCs) released by plants are the main metabolites. Plant VOCs are distributed by almost all types of plants and are released either consitutively or in response to a variety of stimuli. Plant VOCs have a variety of roles, such as indirect plant defense against insects, attraction to pollinators, communication between plants, adaptation to heat resistance and environmental stress, and defense from predators. In addition, the emission of plant VOCs are highly species dependent. In this study, the VOCs from Juniperus virginia, Juniperus chinensis, Cinnamomum camphora, and Santalum album were analyzed using headspace-in-needle microextraction (HS-INME) method with graphene oxide; polyaniline (GO; PANI) adsorbent followed by GC/MS. Cyclic voltammetry (CV) method was applied to fabricate GO;PANI adsorbent on stainless steel wire.  $\alpha$ -Longipinene,  $\alpha$ -cedrene, and cedrol corresponding to the typical scent of wood were chosen as target materials and used for optimization processes. Adsorbent production and HS-INME extraction conditions were optimized through the response surface methodology (RSM) to which the Box-Behnken Design (BBD) was applied. GO;PANI adsorbent was characterized using thermogravimetric analysis (TGA), fourier transform-infrared spctroscopy (FT-IR), and field emission-scanning electron microscope (FE-SEM). As a result, it was confirmed that the GO;PANI adsorbent was successfully fabricated and that different distribution of VOCs were shown from plants we have investigated. The developed method was validated including limit of detection (LOD), limit of quantitation (LOQ), recovery and reproducibility.

Keywords: *Juniperus virginia, Juniperus chinensis, Cinnamomum camphora, Santalum album,* GO;PANI, HS-INME, CV

P-138 [일반]

# Activated porous carbon derived from black tea waste for supercapacitor electrode

Hojong Eom<sup>1</sup>, Joo Young Kim<sup>2</sup>, Sunyoung Bae<sup>2,★</sup>, Inho Nam<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Advanced Materials Engineering, Chung-Ang University

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Seoul Women's University

\*Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

As the amount of used black tea waste is increasing, it demands economically and environmentally efficient recycling method. Herein, we reacted black tea waste under various conditions to use as an active material for supercapacitors. Among value-added products generated by recycling method, supercapacitors have received a great attention. In our study, black tea waste was converted to the activated hydrochar after hydrothermal carbonization process followed by activation process with KOH. It provided a large surface area and porous structure that is suitable for an active material for supercapacitor. In order for the black tea waste to have high surface area and specific capacitance, the reaction temperature and the ratio of KOH were optimized. As a result, activated hydrochar of black tea waste has a large surface area of 1,062 m² and specific capacitance up to 200 F·g⁻¹ at 1 mV·s⁻¹. In addition, it remained 98.8% charge-discharge capacitance after 2000 cycles at the current density of 5 A·g⁻¹. In conclusion, black tea waste might be abundant source of porous carbon for supercapacitor after hydrothermal carbonization followed by KOH activation.

Keywords: black tea waste; hydrothermal carbonization; supercapacitors

P-139 [일반]

Accurate Determination of Short-Chain Fatty Acids and TCA Cycle Intermediates in Human Plasma by GC-MS/MS Combined with Lyophilization and Derivatization

You Lee Kim¹, Wonwoong Lee², Chung So Hyeon¹, Jongki Hong¹,\*

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea <sup>2</sup>College of Pharmacy, Woosuk University, Wanju 55338, Korea \*Corresponding author: 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. In addition, the tricarboxylic acid (TCA) cycle is central to carbon metabolism and energy production in all aerobic organisms and consists of eight low molecular weight polar intermediates such as ketoglutaric acid, citric acid, malic acid, succinic acid, fumaric acid, and oxaloacetic acid. Development of analytical method is needed to effectively profile SCFAs and TCA cycle intermediates in complex biological samples. However, accurate determination of SCFAs in biological samples is not easy task due to their easy loss during sample workup causing to their high volatility and hydrophilicity, and the coexistence of interference. Furthermore, carboxylate groups of TCA cycle intermediates are liable to decarboxylation under basic conditions or high temperature. In this study, we developed a feasible method for the analysis of SCFAs and TCA cycle intermediates in human plasma by GC-MS/MS combined with lyophilization. Prior to sample pretreatment, ethanol was shown to be effective for protein precipitation of plasma sample. Dehydration of SCFAs from plasma sample was successfully performed by the tetraethylammonium bromide (TEABr) controlled cryogenic lyophilization to protect the loss of SCFAs and TCA cycle intermediates. Pretreated sample of SCFAs and TCA intermediates were derivatized with MTBSTFA for sensitive detection and effective separation in GC/MS analysis. Established method provided several advantages such as minimizing loss of SCFA during sample workup, affording high sensitivity and selectivity using GC-MS/MS MRM mode, and giving low matrix effect. This novel method is applicable to clinical biological samples for clarification of the biological role of SCFAs and TCA cycle intermediates in various disease.

### P-140 [일반]

## Structure analysis of anti-enterovirus 71 polysaccharide from the root of Sanguisorba officinalis

Minyeong Kim<sup>1</sup>, Jiye Park<sup>1</sup>, Ju Yeup Kim<sup>1</sup>, Yong Jin You<sup>2</sup>, Ye-jin Choi<sup>1</sup>, Hye-Jin Park<sup>1</sup>, Seo-Hyeon Mun<sup>3</sup>, Myounghai Kwak<sup>4</sup>, Hyun-Jeong Ko<sup>3,\*</sup>, Seung-Hoon Baek<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy and Research Institute of Pharmaceutical Science and Technology (RIPST), Ajou University, Suwon 16499, Republic of Korea,

<sup>2</sup>Department of Molecular Science and Technology, Ajou University, Suwon 16499, Republic of Korea,
 <sup>3</sup>Department of Pharmacy, Kangwon National University, Chuncheon 24341, Republic of Korea,
 <sup>4</sup>Plant Resources Division, National Institute of Biological Resources,
 Incheon 22689, Republic of Korea

\*Corresponding author: hjko@kangwon.ac.kr, shbaek@ajou.ac.kr

Increasing prevalence and pandemic risk of viral diseases urgently need the development of safe and effective treatment. The root of *Sanguisorba officinalis* (SO) has been traditionally used for infectious diseases. In this study, we aimed to elucidate the structure of polysaccharide isolated from SO that inhibits the infection of enterovirus 71 (EV71) causative agent for hand, foot, and mouth disease. The purified macromolecule (S-a3, 260.4 kDa) was a homogenous polysaccharide consisted of galacturonic acid (26.1%), galacturonic acid-6O-methyl ester (14.1%), glucose (20.2%), arabinose (18.3%), galactose (11.8%), and rhamnose (3.7%) residues. Linkage and NMR analysis exhibited that S-a3 consisted of different types of polysaccharides interlinked together including homogalacturonan, rhamnogalacturonan-I, 1,4-α-glucan, and arabinogalactan. S-a3 significantly inhibited cell death and viral gene expression in the EV71-infected Vero cell, and alleviated EV71-induced body weight loss, death, and paralysis in the hSCARB2 transgenic mice model. Importantly, S-a3 was non-toxic to cells and mice at the effective concentration. The antiviral effect of S-a3 was associated with disturbance of EV71 attachment on host cells. Our findings demonstrate that a polysaccharide of SO can be a safe and effective treatment for prevention of EV71 infection.

### Keywords

Sanguisorba officinalis; Pectin; Glucan; Arabinogalactan; Enterovirus 71; Antiviral activity

### P-141 [일반]

## LC-UV/MS를 이용한 노닐페놀에톡실레이트와 알러지성 분산염료 동시분석 연구

Simultaneous analysis of NPEOs and Allergenic Disperse Dyes by using LC-UV/MS

## 이규성, 권정민, 최충열, 전진경

Gyu Sung Yi, Jungmin Kwon, Choongyoul Choi, Jinkyung Jeon

롯데중앙연구소 Lotte R&D Center

노닐페놀 에톡시레이트(이하 노닐페놀류)와 알러지성 분산염료(이하 알러지성 염료)는 어린이제품안전특별법과 전기용품 및 생활용품안전관리법에서 유·아동 및 성인용 섬유제품에서 각각 규제하고 있는 유해물질이다. 노닐페놀류는 미국 EPA, 유럽 ECHA 등에서 내부분비계 장애물질로 규정되어 관리되고 있으며 알러지성 염료는 인체 노출 시 피부염을 유발할 수 있고 일부 물질은 IARC에서 발암가능 물질로 규정되어 있다. 국내 공인시험기관에서는 해당 물질들의 함유량 분석을 위해 개별 KS규격에 따라 검사업무를 진행하고 있다. 다양한 색상 및 재질에 따라 안전성 검사를 진행해야하는 제조·수입업체들은 비용 및 기간에 대해 부담을 가질 수 있는 상황이다. 따라서 고성능 액체크로마토그래피-자외선분광/질량분석기(HPLC-UV/MS)를 이용한 동시 분석법 정립을 통해 해당 물질들의 검사비용 및 기간을 단축하고자하였다.

노닐페놀류와 알러지성 염료 개별 KS규격에서 전처리 조건을 살펴보았다. 시료 준비, 추출 용매 그리고 초음파 추출 진행 온도는 동일하였으나 추출 시간에 있어서 차이가 존재하였다. 추출 시간은 알러지성 염료는 30분, 노닐페놀류는 60분이며, 본 동시분석법에서는 시료로부터 유해물질을 충분히 추출해낼 수 있도록 추출 시간을 60분으로 설정하였다. HPLC-UV/MS(Agilent) 장비에 ZORBAX SB-C18 (2.1 mm I.D x 100 mm Length, 1.8 µm) 컬럼을 사용하였고 이동상으로 10 mM ammonium acetate with 0.1 % formic acid와 acetonitrile with 0.1 % formic acid를 사용하였다. 설정한 동시분석 조건으로 분석결과 6개 섬유재질에서 노닐페놀류는 90.5 ~ 110.6 %, 알러지성 염료는 70.4 ~ 113.8 % 회수율을 확인하였고, 추가적인 유효성 검증을 위해 검출 샘플을 이용하여 공인시험기관과 검사결과를 비교해 보았다. 확인 결과 노닐페놀류는 5% 이내, 알러지성 염료는 8.2 % 이내의 편차를 확인할 수 있었다.

이렇게 정립된 동시분석법은 기존 개별 분석법 결과와 유의성이 없다는 것을 확인하였다. 섬유제품 안전 관리의 법적 규제 항목인 노닐페놀과 알러지성염료의 동시분석 적용을 통해 제조·수입업체들에게 검사비용 및 기간에 대해 효율성을 높여 줄 수 있을 것이라고 기대된다.

### P-142 [일반]

## Quasi-complete laser-ablation sampling of dry residues on the laser-patterned silicon wafer

박 정<sup>1</sup>, Sandeep Kumar<sup>1,2</sup>, 남상호<sup>1,2</sup>, 이용훈<sup>1,2,\*</sup>

1.\*목포대학교 화학과, <sup>2</sup>목포대학교 유무기 소재 및 천연물 분광화학 분석센터 \*Corresponding author: yhlee@mokpo.ac.kr

레이저 어블레이션을 이용하여 액체 시료를 샘플링하는데 레이저로 패턴닝한 실리콘 기판 (laser-patterned silicon wafer substrate, LPSW)을 사용할 수 있다. 이때 건조 잔류물의 불균일한 분포 로 인한 분석의 정확도 저하를 극복하기 위해 기판 표면에서 높은 밀도의 샘플링이 필요하다. 본 연구 에서는 LPSW 상에서 15% 소금 용액의 건조 잔류물의 정확한 원소 분석을 빠르게 수행하기 위한 준 완전 레이저 어블레이션 샘플링 방법을 개발했다. 시료는 원산지가 호주, 볼리비아, 프랑스 및 대한민 국인 6 가지의 암염 및 해수염이다. DPSSL(diode-pumped solid-state laser)를 사용해 실리콘 웨이퍼 표면(1 cm × 1 cm)에 격자 패턴을 새겨 친수성을 증대시킨 후 그 위에 소금 용액을 떨어뜨리고 건조 시켜 시료를 준비했다. 이 시료 표면에 파장 나노초 펄스 레이저 빔(266 nm, 1 mJ/pulse)을 집속시켜 레이저 유도 플라즈마를 만들고 광방출 스펙트럼을 얻었다. 소금의 K와 Mg의 방출선 세기를 이용하 여 미네랄 함량을 알아내기 위해 동일한 시료에 대해서 ICP-OES(inductively-coupled plasma optical emission spectroscopy)로 K와 Mg의 정량분석을 수행했다. 9800 지점에서 촘촘하게 레이저 샘플링을 수행한 경우, K와 Mg의 방출선 세기는 ICP-OES에서 얻은 농도 값과 강한 상관관계를 보였다 $(R^2$ 는 각 각 0.9909, 0.9894). 분석성능을 유지하면서 데이터 수를 줄이기 위해 프랙탈 구조로 차원 수를 늘리는 데이터 수집 방법을 채택해 ~1000 지점에서 얻은 적은 수의 데이터로도 분석성능을 유지하는 준 완 전 샘플링 방법을 사용해 상관관계를 비교했다( $R^2$ 는 각각 0.9916, 0.9889). 이 방법은  $\mu$ L 수준의 적은 양의 액체시료의 빠르고 정확한 원소 분석에 유용하게 쓰일 수 있을 것으로 기대된다.

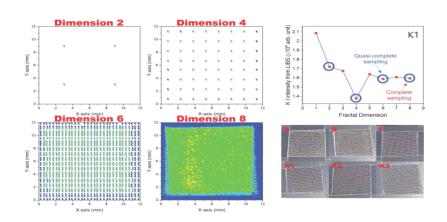


그림 2. 프랙탈 구조로 데이터를 수집한 국내 천일염의 K 원소 Mapping과 준 완전 샘플링을 프랙탈 차원에 따라 비교한 그래프, 시료 사진

## P-143 [일반]

## 디스플레이 소재용 철-니켈 합금 상용표준물질개발

홍진영<sup>1</sup>, 한상원<sup>1</sup>, 홍창기<sup>1</sup>, 정준호<sup>1</sup>, 홍종욱<sup>1</sup>, 임광수<sup>1</sup>, 김지민<sup>1</sup>, 정현주<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>한국화학융합시험연구원 \*Corresponding author: longhangc@ktr.or.kr

Invar합금은 1897년 스위스 물리학자 샤를 에두아르 기욤(Charles Édouard Guillaume)이처음 발견하여 노벨물리학상을 받은 금속소재이다. 또한 Invar는 불변강이라고도 불리는데이는 Ni을 약 36 % 함유한 강재로써 열팽창계수가 극히 적고 녹슬지 않는 특성을 갖고 있기 때문이다. 이에 측정장비 및 시계, 극저온의 저장 및 운송장치 나아가서는 반도체등의 분야에서도 널리 사용되고 있는 소재이다.

특히 약 5 %의 Ni을 Co로 치환한 초인바(Super Invar)는 일본에서 개발된 금속으로 기존 개발된 Invar 보다 더 낮은 열팽창계수를 갖고 있어 최근 개발중인 디스플레이 소재에 널리 사용되고 있다. 그러나 디스플레이 핵심부품인 섀도마스크(Fine-Metal Mask)는 현재 일본수입에 100 % 의존하고 있어 일본의 수출 규제시 한국의 OLED산업에 치명적인 요소이다. 현재 디스플레이 업계에서는 섀도마스크 국산화를 위한 여러 개발과제등을 수행중이며, 최종 국산화를 위해서는 Invar의 CRM(인증표준물질)이 꼭 필요한 실정이다.

이 연구는 전기전자제품에 많이 사용되는 Invar 및 Super Invar 소재를 기반으로 한 정량 분석용 인증표준물질 개발(3종)을 목표로 하였으며, 목표 농도는 Ni함량을 기준으로 Invar36 및 Invar42, Super Invar를 기준으로 개발 진행 하였다. 생산계획에서부터 제조, 분석방법의 유효성 평가, 균질성 평가, 안정성 평가 및 특성값 및 측정불확도 산출의 일련의 절차를 통해 CRM 후보물질을 개발하였으며, 분석방법은 Invar 의 조성에 따라 KS D 1789 : 2019의 절차에 따라 진행하였다.

시판되는 Ni-Cr-Fe 합금재질의 인증표준물질(NIST)을 활용하여 시험방법 유효성 평가를 실시하였으며, 균질성 평가를 통해 유의성이 없는 것을 확인하여 충분한 균질성(Ni, Mn, Co)을 확보하였음을 확인하였다. 2주간 단기안정성 평가 결과, 운송온도(-10℃, 50℃)에서 개발된 3종 표준물질 모두 온도간 유의성이 없는 것으로 확인되었으며, 8개월간 장기안정성 평가 결과, 고농도, 저농도 모두 P-값이 0.05보다 크므로 장기 안정성이 확보된 것으로 확인하였다. 최종적으로 3종 CRM 후보물질의 인증값 및 확장불확도 값을 산출하였다.

### P-144 [일반]

## 몽골 알타이 시베트 하이르한 유적 옛사람 뼈의 DNA 분석

조은민\*, 김수연, 김윤지

국립문화재연구소 보존과학연구실
\*Corresponding author: emcho85@korea.kr

몽골을 비롯하여 유목민족의 역사는 우리나라뿐 아니라 유럽, 아메리카, 아시아 등 대륙 정착 민족 의 형성과정에 있어 매우 중요한 위치이다. 그 중 알타이 지역은 몽골-중국-러시아-카자흐스탄의 국경 이 접하는 위치이며 인류 생활에 유리한 환경적인 영향 덕분에 선사시대 이래로 다향한 문화들이 지 속되었다. 2016년부터 2018년까지 총 3회에 걸쳐 국립문화재연구소와 몽골 과학아카데미 고고학연구 소의 공동발굴조사가 이루어졌으며 총 12개체의 옛사람 뼈를 수습하여 분석을 수행하였다. 보존상태가 양호한 다리뼈에서 고DNA를 추출하였으며 미토콘드리아 DNA와 성별분석이 가능하였다. 미토콘드리 아 하플로그룹 동정 결과 MAB0098는 하플로그룹 F에 속하였으며 동아시아와 동남아시아에서 가장 흔하게 나타나는 그룹으로 알려져있다. MAB0099 시료는 U4로 동정되었는데 U그룹은 R그룹으로부터 유래된 그룹으로 현대인에서는 상대적으로 드물게 나타난다. MAB0100은 K2그룹으로 나타났으며 서유 럽, 북아프리카, 남아시아에서 나타나고 네이티브 유러피안의 약 10%가 발견된다. MAB0101, 104가 속한 C그룹은 시베리아를 포함한 동북아시아에서 나타되는 그룹이며 MAB102는 D그룹. MAB103, 106 은 G그룹, MAB107은 K그룹, MAB108은 H그룹으로 다양하게 나타났다. 아멜로제닌 유전자 분석결과 남성이 7명, 여성이 5명으로 판별되었다. 본 연구결과는 철기시대로 예상되는 오래된 옛사람 뼈임에도 불구하고 양호한 보존상태로 인해 높은 성공률을 보인 것으로 생각되며 이는 매장환경과 밀접한 영향 이 있다고 생각된다. 이에 앞으로 알타이 지역의 다양한 조사 및 DNA연구가 진행된다면 좀 더 유의 미한 결과를 얻을 수 있을 것이라 기대한다.

### P-145 [일반]

## 출토 옛사람 뼈와 치아의 DNA 분해지수 및 정량 비교 연구

김윤지\*, 김수연, 조은민

국립문화재연구소 보존과학연구실
\*Corresponding author: dbswl0420@korea.kr

옛사람 뼈의 고DNA 분석을 통한 고유전학 연구는 인류학, 고고학, 진화학 등의 분야에서 그 이용이 증가되고 있는 추세이다. 우리나라의 매장문화와 토질의 특성상 유적지에서 온전한 형태의 옛사람 뼈가 출토되는 경우는 매우 드물고 변형, 분해, 부패가 상당히 진행된 상태로 발견된다. 이러한 시료의 제한된 양과 극미량으로 존재하고 있는 DNA의 양 때문에 중합효소연쇄반응(Polymerase Chain Reaction, PCR) 기법이 발명된 이 후 PCR법은 고DNA 분석에 필수적으로 사용되고 있다. 출토된 옛사람 뼈의 고DNA 분 석에는 주로 넙다리뼈와 치아 부위를 사용하는데, 넙다리뼈의 경우, 옛사람 뼈 중 많은 양의 시료를 얻 을 수 있고 다른 뼈 부위에 비해 DNA 양도 많이 남아 있는 것으로 알려져 있다. 치아는 유적지에 남아 있는 옛사람 뼈 중 최악의 환경에서도 온전히 보존될 수 있는 가장 견고한 조직으로 알려져 있다. 그러 나 고DNA만이 가지고 있는 중합효소 억제자로 인한 방해, 화학적 변형들이 PCR법의 결과에 한계를 보 였다. 이 같은 고DNA 특성을 이해하고자 본 연구에서는 포항시 흥해읍에서 출토된 옛사람 뼈를 대상으 로 5-dye DNA profiling systems법과 실시간 유전자 증폭법(real-time PCR)을 이용해 DNA의 농도와 분 해된 정도를 수치화 하였으며, 이를 토대로 옛사람 뼈의 넙다리뼈와 치아 시료의 DNA 보존 상태를 비 교할 수 있었다. 포항시 흥해읍 출토 옛사람 뼈 2개체(PH-1, PH-2)의 mtDNA 변이형 분석 결과, PH-1의 넙다리뼈 DNA에서 HVR1 부위의 16154-16189 구간이 PCR증폭이 되지 않았으나 치아시료에서는 비분 석 구간까지 모두 증폭되었다. 또한 넙다리뼈 DNA에서 확인이 불가능했던 성별을 치아시료 DNA에서는 확인이 가능했으며, DNA 분해 정도도 치아시료가 너 낮게 나온 것으로 확인되었다. 이와 같은 결과로 같은 출토환경에서 치아가 넙다리뼈보다 보존 상태가 더 나은 것을 알 수 있었다.

### P-146 [일반]

## PCR 기법을 적용한 고고유적지 출토 동물뼈의 종 동정

김수연\*, 조은민, 김윤지

국립문화재연구소 보존과학연구실
\*Corresponding author: shkim85@korea.kr

고고유적지에서 출토되는 동물유체는 유적지의 과거 생활상과 문화에 대한 정보를 복원하는데 중요한 자료이다. 출토 동물뼈를 대상으로 형태학적 분석이 주로 수행되었으나 최근 DNA 분석과 동위원소 분석, 연대측정 등 분석 적용 범위가 다양해지고 있는 추세이다. 본 연구는 금관 가야(42~532년)의도성과 왕궁으로 추정되는 김해 봉황동 유적에서 출토된 동물뼈 시료 중 12개체를 선별하여 중합효소연쇄반응(polymerase chain reaction; PCR) 기법을 이용한 DNA 분석을 통해 동물의 종을 알아보고자하였다.

Yang 등이 제시한 실리카 이온교환컬럼법을 일부 개선한 방법으로 시료의 DNA를 추출하였으며, 종특이적 염기서열을 이용하여 PCR 증폭을 수행하였다. PCR은 DNA에 기반을 둔 검사 방법 중 가장 잘활용되고 있는 분자생물학적 방법으로 종 특이적 염기서열을 이용한 증폭 방법은 신속하고 민감도가 높아 종 감별에 있어 매우 유용한 분석법이며 고DNA와 같이 주형 유전자의 크기가 작은 경우에도 적용이 가능하다.

멧돼지, 소, 사슴의 종 특이적 프라이머를 사용하여 PCR 증폭한 결과, 12개체 중 멧돼지 1점, 소 1점, 사슴 9점으로 11개체의 종이 확인되었으며 이는 당시의 주 단백질 공급원인 포유류과 동물에 해당된다. 이와 같은 연구결과를 통해 특정 종의 존재를 확인할 수 있으며, 과거 동물자원으로 이용된 현황을 추정할 수 있는 자료가 되므로 출토 동물뼈 분석은 당시의 문화와 생활상 복원에 필요한 정보를 제공하는 유용한 자료로 활용될 것으로 판단된다.

P-147 [일반]

# A Proteomics Approach for the Human milk-derived Glycated Peptides using LC-MS/MS

#### Seong-Hyeon Cho¹, Jong-Moon Park¹, Hookeun Lee¹, Jun Hwan Song², Nam Mi Kang³,★

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Gachon university, hambakmoe-ro, Incheon, 21936, Republic of Korea <sup>2</sup>Department of Pediatrics, Soon Chun Hyang University, Suncheonhyang-gil, Cheonan, 31151, Country <sup>3</sup>Department of Nursing, Konkuk University, Chungwondaero, Chungju, 27478, Republic of Korea \*Corresponding author: nmkang03@konkuk.ac.krPhone: +82-(0)2-1234-5678, Fax: +82-(0)2-1234-5678

Many studied have so far shown that AGEs and glycation adducts are significantly linked to changes in aging and disease. In particular, the level of glycation in human milk is important because the intake of AGEs is deeply related to the level of AGEs in infants. In this study, we used human milk samples (IRB 7001355-202108-E-153) obtained from 4 mothers with first baby and 4 mothers with not first baby. We isolated proteins using acetone preparation and TCA preparation. A total of 67 glycated proteins and 122 glycated peptides were quantified; among them, 19 glycated differentially expressed peptides were found. Through these results, we confirmed that there was a difference in the degree of glycation according to fertility. The study will pave the way for future studies to use proteomics for the evaluation of the mother's human milk quality and the link between maternal health and human milk quality.-This work was supported by the National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by the Korean government, MSIT (No. 2020R1A2C1005082)-.

Key words: glycation, advanced glycation end products, human milk, lc-ms/ms, fertility

#### P-148 [일반]

#### A Preliminary Study of Lipid Profiles of Human Transient Breast Milk

Young Soo Keum¹, Ji Woo Yu¹, Nam Mi Kang²,★

<sup>1</sup>Department of Crop Science, Konkuk University, 1 Hwayang-Dong, Kwanjin-Gu, Seoul, Korea <sup>2</sup>Department of Nursing, Konkuk University, 268 Chungwon-daero Chungju-si Chungcheongbuk-do, Korea

\*Corresponding author: nmkang03@kku.ac.kr

Lipidomic analyses of transient breast milk were far more limited than dairy products. As a preliminary analysis of breast milk lipidomes, analytical methods for polar and non-polar lipids from transient breast milk were developed and the detailed fatty acid profiles were determined in this study. The newly developed methods include solvent fractionation of phospholipids and acyl glycerols, one-pot derivatization to FAMEs, and instrumental analysis, including ordinary GC-FID and GC-MS. The results indicated that breast milk contains approximately 30 different fatty acids, where the straight-chained saturated/unsaturated analogues with 8-24 carbons were the major constituents. There detailed concentrations in different fractions were measured via internal standard method. In addition to the ordinary fatty acids, breast milk also contains several branched fatty acids, including iso/anteiso acids with 15-18 carbons. Their structural studies have been performed for selected minor fatty acids through chemical synthesis. The resulting data was treated with several statistical analysis including discriminant analysis.- This work was supported by the National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by theKorean government, MSIT (No. 2020R1A2C1005082-.

#### P-149 [일반]

#### Analysis Quality of Methanol, Formaldehyde, Fluorescent Bleaching Agents, Methylisothiazolinone, and Cloromethylisothiazolinone on Commercial Wet Wipes for Food Restaurants

## <u>Chang-ho Han</u><sup>1</sup>, So-young Jung\*, Bu-Chuhl Choi, Si-Jung Kim, Jae-hoon Cha, and In-sook Hwang

<sup>1</sup>Department of Food and Drug, Seoul Metropolitan Government Research Institute of Public Health and Environment

\*Corresponding author: syjung12@seoul.go.kr

The purpose of this study was to analyze the content level of methanol, formaldehyde, fluorescent bleaching agents, methylisothiazolinone, and cloromethylisothiazolinone on 29 commercial wet wipes for food restaurants.

Use for personal hygiene items is very emerging due to outbreak of the COVID-19 virus and increase of single person household. Accordingly people pay attention to the safety for personal hygiene items. We analyzed 29 commercial wet wipes for food restaurants. 6 items were purchased from superstore chains, and 23 items were from on-line markets.

Detection amount of methanol by head-spaced GC-FID on 29 commercial wet wipes showed ND  $\sim$  9.3 mg/kg. 19 items were ND, and 10 items were detected from 0.6 to 9.3 mg/kg[KFDA criterion of MeOH is less than 20 mg/kg].

Those results of assay to 29 wet wipes about formaldehyde(HPLC), fluorescent bleaching agents, MIT(LC/MS/MS) and CMIT(LC/MS/MS) showed not detected(ND) and estimated safe compare with criteria of KFDA on personal hygiene items.

#### P-150 [일반]

#### Structure Analysis of Low-molecular weight mannogalactofucans derived from *Undaria pinnatifida* and Anticancer activity

#### **Woo Jung Kim**

Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator

Low-molecular weight mannogalactofucans (LMMGFs) prepared by enzymatic degradation of high-molecular weight Undaria galactofucan (MF) were evaluated for their anti-cancer effects against human prostate cancer. Correlation NMR and linkage analyses confirmed that LMMGFs consist mainly of  $\alpha$ -fucose and  $\beta$ -galactose units:  $\alpha$ -fucose units are 1,3-linked;  $\beta$ -galactose units are terminal, 1,3- and/or 1,6-linked; both sugars are partially sulfated, fucose at positions O-2 and/or O-4 and galactose at O-3. Mannose residue, as a minor sugar, presents as the 1,4-linked terminal units. LMMGFs more significantly induced cell cycle arrest at the G0/G1 phase and cell death via suppression of the Akt/GSK-3 $\beta$ / $\beta$ -catenin pathway than MF in human PC-3 prostate cancer cells. These results demonstrated that LMMGFs attenuate the growth of human prostate cancer cells, suggesting that LMMGFs can be used as a potent functional ingredient in health-beneficial foods or as a therapeutic agent to prevent or treat androgen-independent human prostate cancer.

#### P-151 [일반]

#### 염소계 난연제 정량 분석을 위한 전처리법 연구

A study on pretreatment for quantitative analysis of chlorine-based flame retardants

#### 송문환<sup>1</sup>, 박광서<sup>1</sup>, 정재학<sup>2</sup>, 김주양<sup>2</sup>, 조영달<sup>1,\*</sup>

Moon Hwan Song<sup>1</sup>, Kwang Seo Park<sup>1</sup>, Jeahak Jung<sup>2</sup>, Juyang Kim<sup>2</sup>, Young Dal Cho<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>,\*한국생산기술연구원 환경규제기술센터, <sup>2</sup>한국분석과학연구소 \*Corresponding author: chemism@kitech.re.kr

염소계 난연제인 SCCP(Short Chain Chlorinated Paraffins) 및 MCCP(Medium Chain Chlorinated Paraffins)는 주로 전기전자제품 내 PVC나 고무 재질로 만든 cable, power cord 등에 가소제 및 불연제로 사용되고 있다. SCCP 및 MCCP는 EU REACH (Registration, Evaluation, Authorization, and Restriction of Chemicals) 법령에서 고위험성물질 허가 후보물질이고, PBT(Persistent, Bioaccumulative and Toxic) 및 vPvB (very Persistent and very Bioaccumulative)로 분류되고 있으며, 국내를 비롯한 미국, 중국, 캐나다 등에서는 제조 및 수입 규제가 시행되고 있다.

본 연구에서는 고분자 내 존재하는 염소계 난연제의 전처리 방법을 확립하기 위하여 국내외 표준에서 제시된 시료 전처리 방법 및 시험분석 방법 등을 검토하여 ABS(Acrylonitrile Butadiene Styrene) 및 PVC(Polyvinyl chloride) 등의 고분자 표준물질 (reference material, RM)을 확보 후 전처리 시험방법 인 속슬렛 추출 방법과 Ultrasonic 추출 방법에 대하여 비교 평가 하였고, 기존에 제안된 추출 용제별로 회수율을 비교평가 하였다. 염소계 난연제인 SCCP와 MCCP 함유량을 정확하게 분석하기 위하여분석방법 최적화를 통하여 염소계 방향족 물질들의 간섭 및 메트릭스 효과를 최소화하기 위한 분석방법을 모색하였다. 따라서 [M], [M-HCI] 확인이 가능한 GC-NCI-MS 시스템을 이용하여 측정하였다. 두개의 전처리 방법을 통해 시험분석 한 결과 ABS에 함유된 SCCP의 경우 n-Hexane을 추출 용제로 한속슬렛 추출 방법에서 우수한 회수율을 나타내었고, PVC 재질의 MCCP는 속슬렛 추출 방법 시 톨루엔을 추출 용제로 사용한 방법에서 가장 좋은 회수율을 나타내었다. 향후 최적화된 전처리 방법을 활용하여 다양한 고분자 재질의 표준물질을 확보 후 추출시간과의 상관관계 및 다양한 용제에 따른 추출효율에 대한 조사를 수행하고자 한다.

#### P-152 [일반]

#### Evaluation of the hazard index of mercury and arsenic residues in pet food

#### <u>Seung-Hwa Lee</u>\*, Hyejeong Yun, Yeong-Jun Seon, Hyunjeong Cho, and Seong-Hee Hong

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

\*Corresponding author: shlee96@korea.kr

In order to evaluate the hazard index of mercury and arsenic in the companion animal compound feed, we considered contamination data of official inspection for mercury carried out from May to July, 2021 and arsenic monitoring results in the first half of 2021. As a result of the analysis of 348 cases (dog 246, cat 102), mercury was detected in 18 samples(7.3%) of dog food and 17 samples(16.7%) of cat food, with average contamination levels of 5.2 and 7.1 ug/kg, respectively. For the calculation of the exposure levels, the body weight of dogs and cats were set at 5 and 3 kg, and the daily feed intake was assumed to be 0.15 and 0.06 kg/day, respectively. In the case of dogs and cats, the mercury exposure through pet food intake was 1.1 and 1.0 ug/kg bw/week, respectively, and the hazard index was evaluated as less than 1 when the exposure level was compared to the Tolerable Weekly intake values(human) 3.7 and 2.0 ug/kg bw/week for inorganic mercury and methylmercury.

Arsenic was detected at 48 samples (67.6%) and 29 samples (70.7%), respectively, in a 112 samples (dog 71, cat 41), and the average contamination levels were 276.0 and 419.4 ug/kg. The daily arsenic exposure level, 8.3 and 8.4 ug/kg bw/day for dogs and cats, was very low compared to the previous Health Based Guidance Value for human (50 ug/kg bw/day for total arsenic, withdrawn in 2010)

In this evaluation, the risk of two heavy metals through consumption of the compound feed does not seem to be significant, but for a more scientific evaluation, it is necessary to collect contamination data of methylmercury, which is more toxic, and inorganic arsenic for which HBGV have been established. There is also a need to increase the relevance of pet food risk assessments by establishing tolerable intake limits of heavy metals for dogs and cats.

#### P-153 [대학원생 구두 & 포스터]

#### 장거리 이동 오염원 평가를 위한 PM2.5 구성성분 정량분석

이채연<sup>1</sup>, 임종명, 김현철, 이진홍<sup>2,\*</sup>

¹한국원자력연구원 원자력환경실, ².★충남대학교 환경공학과 ★Corresponding author: jinlee@cnu.ac.kr

국내 대도시의 대기 중 미세먼지의 농도는 지속적으로 증가하고 있어 국민 건강에 대한 위협요인으로 작용하고 있다. 잘 알려진 것처럼 미세먼지에 장기간 노출될 경우 호흡기 질환(천식, 호흡곤란), 피부질환(두드러기, 피부염), 안구질환(결막염)의 직접적인 원인이 될 수 있다. 대도시에서의 대기 중 미세먼지의 주요 오염원은 이동오염원(자동차), 산업활동(산업장의 굴뚝 및 소각로)에 의한 것으로 알려져 있으나 외부로부터 유입되는 장거리 이동 오염원의 비중이 역시 크며 계속 증가하고 있다. 중국의 급속한 산업화에 따라 1차상 대기오염물질 배출량은 지속적으로 증가하고 있으며, 대기 중에서 물리화학적으로 반응하여 생성되는 2차상 오염물질들이 서해상으로 국내에 유입되어 영향을 미치고 있다. 미세먼지의 장거리 이동을 평가하기 위해서는 수용점에서의 장기간 모니터링을 통하여 미세먼지내 성분의 오염원을 정량적으로 평가하고, 공기 역쾌적분석과 같은 기상 모델을 이용하여 분석하는 연구가 필요하다.

본 연구에서는 이러한 장거리 이동으로 영향을 주는 미세먼지의 오염원을 평가하기 위하여 대전과 제주의 2지점에서 각각 2020년부터 Teflon filter와 Quartz filter를 통해 주별 2개의 미세먼지 시료를 채취하였다. 채취된 시료는 ED-XRF, lon chromatography, EC/OC analyzser, multi-wavelength absorption black carbon 분석기기를 이용하여 각각 미세먼지 중 금속성분, 이온성분, 탄소성분, black carbon을 정량 분석하였다. 미세먼지 중 성분원소들의 정량분석 결과를 이용하여 각 지점에서의 분포특성을 평가하였으며, 다양한 통계분석기법을 통해 미세먼지의 오염원과 지리적 위치를 평가하였다.

#### P-154 [대학원생 구두 & 포스터]

# A study on the distribution characteristics of microplastics introduced into the water system from the paint on the Gongjicheon Stream trail

#### So Young Park, Hyo Jeong Choi, Dong Hyun Kim, A Ram Cho, Sang Hui Hwang, Hye Bin Kim, Man goo Kim\*

Department of environmental science, Kangwon National University

\*Corresponding author: mgkim@kangwon.ac.kr

Paint peeling was found on the pedestrian road in Gongjicheon Stream. The peeled paint was introduced into the water system in the form of microplastics, which was discussed as an environmental problem in the local community. The introduced microplastics are a mixture of chemicals that can cause water and ecological health degradation and spread along the Bukhangang River water system to the Hangang River basin. In general, microplastics refer to plastics of 5 mm or less, but in this study, microplastics in the soil were analyzed, and a total of 5 research points were designated based on the size of 2 mm or less to be quantified and qualitatively analyzed.

As a result of quantitative analysis, the particle size of microplastics observed in the soil was 0.000173 mm to 2 mm and 70 near Uiamho Lake in Chuncheon MBC, 13,128 in Gongjicheon Seoksa Bridge, 17,700 between Gongjicheon Toegye Bridge and Namchuncheon Bridge, 8 in Gongjicheon Recreation Area, and 205 at Gongjicheon Gongji Bridge were detected. As a result of the analysis, at least  $1.1\times10^9$  microplastics were calculated based on a maximum particle diameter of 2 mm and a maximum of  $1.5\times10^{17}$  microplastics were calculated based on a minimum particle diameter of 0.000173 mm.

As a result of qualitative analysis, the same IR value was confirmed at all wave numbers except for 1550 /cm to 1200 /cm and 700 /cm. Through IR spectral analysis, matching of OH, NH, NH amide or Aldehydes and Ketones or Ester, NH amines, C=C trans, H-C=C, C=C cis or C-Cl functional group components were confirmed. Qualitative and quantitative analyzes were able to demonstrate the release of microplastics into the surrounding soil.

#### P-155 [대학원생 구두 & 포스터]

#### Identification of thymosin \( \beta \) in-vitro metabolites with synthesized standards

Khandoker Asiqur Rahaman<sup>2,3</sup>, Anca Raluca Muresan<sup>2,3</sup>, Hophil Min<sup>1</sup>, Junghyun Son<sup>1</sup>, Min-Jung Kang<sup>2,3</sup>, and Oh-Seung Kwon<sup>1,2,★</sup>

<sup>1</sup>Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, 02792, Korea, <sup>2</sup>Division of Bio-Medical Science & Technology, KIST School, Korea University of Science and Technology, Seoul 02792, Korea.

<sup>3</sup>Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul 02792, Republic of Korea

Thymosin β4 is a highly active protein that exerts biological activities such as actin-binding, tissue repair, regeneration, anti-inflammation, and cell maturation. Thymosin β4 has also been listed in WADA prohibited drugs. Based on its biological activities, thymosin β4 undoubtedly has a high potential to be abused by athletes. This study aims to identify metabolites of thymosin β4 in different enzyme-buffer systems, characterize each m/z ion of the detected metabolite in-silico and confirm its structure with the synthesized authentic standards. At first, thymosin \( \beta \) was metabolized with an appropriate buffer system for 22 hours. Then, the samples were collected and analyzed for metabolites by UHPLC-Q-Exactive Orbitrap MS. The metabolites were calculated by in-silico software. Finally, the standards for detected metabolites were custom synthesized and validated through respective TIC, MS, and MS/MS. In this study, we detected 13 new metabolites. 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. Metabolite M1, M5, M7, M11, M12, M13 were confirmed to their synthesized authentic standards, respectively. This study established a method of detection and identification of new peptide metabolites. Remaining further studies by screening these peptides could discover new drug development with the potential of numerous biological activities.

P-156 [대학원생 구두 & 포스터]

Study on effect of sample preparation on structure and size distribution of exudate gums using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS)

Meiyu Zhang<sup>1</sup>, Jaeyeong Choi<sup>1</sup>, Da Wang<sup>1</sup>, Lars Nilsson<sup>2</sup>, and Seungho Lee<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Hannam University, South Korea <sup>2</sup>Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden ★Corresponding author: slee@hnu.kr

Exudate gums are widely used as emulsifiers or thickening agents in the food industry. The performance of exudate gums is affected by their physicochemical properties such as molar mass (), molecular size, molecular conformation, protein content, et al. The high polydispersity, large and poor solubility of exudate gums bring challenges to their analysis. Either filtration or centrifugation can be used for preliminary separation of soluble and insoluble parts of the gum. However, their separation efficiency and their effect on the structural changes in gums are still unclear.

In this research, asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS) was used to investigate the effect of the preparation method (filtration or centrifugation) on the size and the conformation of three types of gums (labelled 'GT', 'GA', and 'GK', respectively).

The effect of removal of insoluble and large -populations on the emulsifying property of gums are also evaluated. Results showed that both filtration and centrifugation remove the co-eluted large populations, thus decrease the measured radius of gyration () of the gums. The removal of the large-sized populations and insoluble parts significantly reduced the viscosity of the gum dispersion and the emulsion prepared by the gums, resulting in an decreases in the stability of the emulsions.

#### P-157 [대학원생 구두 & 포스터]

# Size characterization and quantification of TiO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub> in food matrix by sedimentation field-flow fractionation (SdFFF) and relative techniques

Da Wang<sup>1</sup>, Meiyu Zhang<sup>1</sup>, Jae-Min Oh<sup>2</sup>, Jaeyeong Choi<sup>1</sup> and Seungho Lee<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Hannam University, Republic of Korea <sup>2</sup>Department of Energy and Materials Engineering, Dongguk University, Republic of Korea

 $TiO_2$  and  $SiO_2$  nanoparticles are widely used as food additives. It has been reported that  $TiO_2$  and  $SiO_2$  nanoparticles as food additives may be toxic, possibly causing cancer or other diseases. It is thus necessary to develop effective methods for analysis of physical and chemical properties of  $TiO_2$  and  $SiO_2$  nanoparticles.

Field-flow fractionation (FFF) is a family of analytical tool for separation and characterization of polydispersed nanoparticles. Among the FFF family members, sedimentation field-flow fractionation (SdFFF) is suitable for analyzing nanoparticles based on their sizes and/or densities.

In this study, SdFFF was setup, and was used to perform separation and quantitative analysis of  $TiO_2$  and  $SiO_2$  nanoparticles after mixing with food matrices such as sucrose or casein. This study focuses on quantitative analysis of the nanoparticles mixed in food matrix, and, to some extent, the size change of the nanoparticles in food matrix. Results show that sucrose promotes aggregation of  $TiO_2$ , resulting in an increase in the size of  $TiO_2$  nanoparticles. Casein has essentially no effect on the dispersing of  $SiO_2$  nanoparticles. This study demonstrates that SdFFF is a useful and reliable method for separation and quantitation of food-grade nanoparticles.

#### P-158 [대학원생 구두 & 포스터]

# Simultaneous analysis of multi-component lipids by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry

#### 이혜진, 윤혜란\*

덕성여자대학교 약학대학 생의약분석실
\*Corresponding author: hyeran11@duksung.ac.kr

There is a growing interest in lipid metabolism-related chronic diseases such as asthma, chronic obstructive pulmonary disease to more severe diseases as forms of cancer.

We developed the ultra high performance liquid chromatography–electrospray ionization tandem mass spectrometry (UHPLC-ESI-MS/MS) based analytical method of 40 lipids series (7 omega fatty acids, 3 sphingolipids, 23 glycerophospholipids and 5 neutral lipids) after "dried serum spot" sample preparation. We used "dried serum spot" sample preparation as an alternative method to conventional LLE or (SPE) methods. Developed method included special solvent system (MTBE:MeOH:DDW=3:2:1(v/v/v). After extraction, the lipid analytes were separated on a Acuity UPLC BEH C8 column using 5 mM ammonium acetate in 10% MeOH as mobile phase A and IPA:ACN:MeOH=2:3:5 as mobile phase B at flow rate of 0.35 mL/ min.

The calibration curve showed an excellent sensitivity. Correlation coefficient was 0.9947  $\sim 0.9972$  for omega fatty acids, 0.9976  $\sim 0.9996$  for phospholipids, 0.9987  $\sim 0.9989$  for sphingolipids and 0.9961  $\sim 0.9997$  for Neutral lipids. LOQ was 0.005~0.625 µg/mL for omega fatty acids, 0.00008~0.0025 µg/mL for sphingolipids, 0.00008  $\sim 0.05$  µg/mL for phospholipids, and 0.0006  $\sim 0.1$  µg/mL for neutral lipids. The accuracy and precision showed 88.5 to 109.9%( SD; 1.9 to 10.6%) in intra-day assay and 92.7  $\sim 112.0\%$  (SD; 3.0  $\sim 8.6\%$ ) in inter-day assay for all 40 lpids If clinically applied, this new analytical method will be practically useful with its simple dried serum spot use and excellent sensitivity as lipid biomarkers for monitoring various chronic inflammatory and autoimmune diseases.

#### P-159 [대학원생 구두 & 포스터]

# Simultaneous determination of 37 lipids metabolites and Bio-profiling in human serum by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry

#### 이지선, 윤혜란\*

덕성여자대학교 약학대학 생의약분석실
\*Corresponding author: hyeran11@duksung.ac.kr

Biometabolites such as bile acids, omega fatty acids, sphingolipids and phospholipids are reported to be related to various inflammatory reactions such as asthma, chronic obstructive pulmonary disease(COPD), rheumatoid arthritis, and inflammatory bowel disease. We developed the ultra high performance liquid chromatography-electrospray ionization tandem mass spectrometry (UHPLC-ESI-MS/MS) based analytical method of 37 lipids metabolites(6 bile acids, 5 omega fatty acids, 2 sphingolipids, and 24 phospholipids). This method was applied to the asthma patients (n=25) and healthy controls(n=25). Statistical analyzes were performed using partial least squares discriminant analysis(PLS-DA), t-test, fold change test to effectively discriminate whether there was a difference in the concentrations of metabolites in normal and asthma groups. The result of PLS-DA showed that 16 metabolites have statistical significance with p-value <0.05. Eleven metabolites (DOCA, SPH, LPC16:0, LPC18:3, LPC18:2, LPC18:1, LPC18:0, PC32:2, PC36:4, PE36:3, PE36:2) showed significance at p-value < 0.05, 5 metabolites (UDCA, CA, CDCA, LPE18:1, LPE18:0) showed significance at p-value < 0.01. 4 metabolites (SPH, LPC 18:3, LPC 18:0, PC 32:0) had concentration difference of asthma and normal more than 1.5 times in fold change test. The probability of correctly diagnosing asthmatic and normal patients with significant metabolites was measured using random forest. The probability of diagnosing asthma was 88% in 22 asthma patients, and the probability of diagnosing normal in normal people was 84%. We confirmed that two groups were significantly different in metabolic bio-profiling and concentration. Asthma-related metabolites identified in this study will provide alternative diagnostic methods or diagnostic biomarkers by quantifying metabolites from serum in healthy normal and asthmatics patients.

#### P-160 [대학원생 구두 & 포스터]

#### UVC-lamp sterilization of Bacillus atrophaeus spores on glass and tile

장한별1, 임진아1, 김정권1,\*

<sup>1,\*</sup>충남대학교 화학과 \*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Ultraviolet-C (UV-C) radiation (100-280 nm) is a disinfection method to kill or inactivate microorganisms such as viruses, bacteria, and other pathogens. In this study, UVC-lamp sterilization of *Bacillus atrophaeus* on glass and tile was investigated. *Bacillus atrophaeus* spores were diluted with  $10^6$  CFU/mL in PBS buffer and  $50~\mu$ L of spore solution was loaded on a  $1\times1$  cm glass piece or vitrified ceramic tile. After the sample was dried overnight, UVC-lamp irradiated on a each sample with 1 hr. Then, the sample was desorbed using a razor blade and repeated pipetting of  $50~\mu$ L PBS containing 0.2% Tween 20. The desorbing solution was spreaded on agar plate, and incubated for 24 h at 37 °C. As a result, bacteria appeared in UVC-lamp sterilization using glass piece, but all bacteria were killed in UVC-lamp sterilization using tiles. Sterilization of UVC-lamp using glass. In further research, we plan to reduce the UVC-lamp irradiation duration to confirm the tendency of sterilization effect on tile.

#### 사단법인 한국분석과학회 임원 명단

■ **명예 회장**: 박긍식

■ **고문:** 김만구, 김연제, 김영만, 김영상, 김원호, 김일광, 김진석, 김태승, 김택제, 문동철, 박만기, 박성우, 음철헌, 이광우, 이광필, 이석근, 이승호, 이종해, 조남준, 최덕일, 하재호

**■ 회장:** 정두수

■ **감사:** 명승운, 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), 백만정(기획), 백승훈(기획), 서금희(홍보), 송준명(재무), 안장혁(식품/농화학), 유혜현(학술), 윤정기(조직), 윤혜온(학술), 이군택(학술), 이상일(조직), 이성협(홍보), 이정미(재무), 이지현(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, 이성광, 이수연, 이정미, 장혜원, 표재성, APL Prof. Dr. Georg Hempel, Dr. Steve Williams, Prof. Bruce Gale, Prof. Lars Nilsson, Prof. Thomas J. Schimidt

#### 제67회 한국분석과학회 추계 학술대회 초록집

2021년 11월 15일 인쇄 발 행 사단법인 한국분석과학회

2021년 11월 18일 발행 학회 본부 서울시 마포구 마포대로 127, 1603호 (04144) (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

nome page. http://www.koanai.or

편집인: 권성원

# High Performance Gas Chromatograph Time-of-Flight Mass Spectrometer



#### JMS-T2000GC AccuTOF™ GC-Alpha

Pursuing the ultimate in performance and functionality



Aiming for high performance while keeping it simple, the ultimate GC-MS with superior performance and ease of operation.

The JMS T2000GC AccuTOF<sup>TM</sup> GC-Alpha is the 6th generation JEOL GC-TOFMS and has an improved ion optics system to achieve ultra high resolution. The Alpha features 6 times higher resolution than the first generation  $AccuTOF^{TM}$  GC and has a mass accuracy of  $\leq 1$  ppm.

Acquiring unrivaled high quality data, the Alpha is the ultimate solution for GC-MS qualitative analysis.

#### Key Technology 1

#### New high performance hardware

- New ion optics system
- Ultra-high resolution : 30,000 or greater
- High mass accuracy : 1 ppm or better
- El and a variety of soft ionization (SI) methods
- Two combination ionization sources available

\* As per JEOL evaluation standards

Two combination ionization sources available

soft ionization technique, thus allowing the operator to switch between ionization techniques without changing the ion source or

The EI/FI/FD and EI/PI ion sources are designed to combine EI with a

# Key Technology 2 A new generation of analysis software for Simple, speedy operation

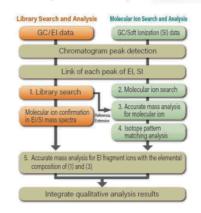
- msFineAnalysis Ver.3 is included in the standard configuration.
- Combines El and Soft ionization(SI) data for automatic qualitative analysis
- Features chromatographic peak deconvolution
- Differential analysis for directly comparing 2 samples
- Also supports the analysis of El data alone



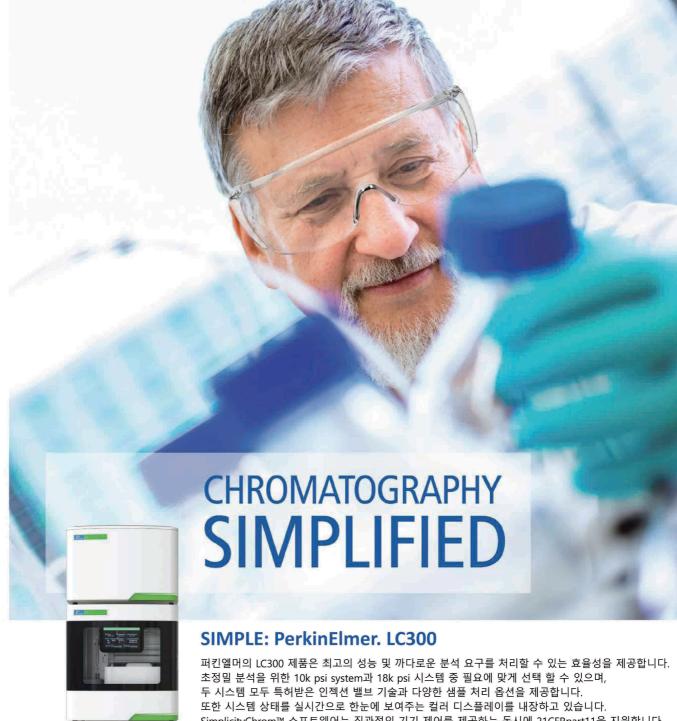
Automated qualitative analysis flow



㈜ 지<mark>올코리아</mark> 서울특별시 강동구 양재대로 1443 TEL:02)511-5501 http://www.jeol.co.kr







SimplicityChrom™ 소프트웨어는 직관적인 기기 제어를 제공하는 동시에 21CFRpart11을 지원합니다.

- -Pump delay volume이 50 μL로 고효율 컬럼 사용에 최적
- 이동상 priming과 purge를 위한 밸브 추가로 편이성 제공
- -자동희석기능및 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



### 분석 장비 (LC / MS) 전용 테이블



#### 왜 ionBench를 선택해야 하는가?



- 소음 저감 (약 80%)
- 진동 저감 (약 99%)
- 효율적인 공간 활용 가능
- 장금 장치가 있는 다리 바퀴
- 편의 장치 설치 가능
- 폐액통, PC, 수납장
- 내화학성 재질 사용

- 과열 알람 기능(40℃)
- 분석 기기별 맞춤 제작 기기 종류, 펌프 종류별로 제작
- 펌프 오일 Kit을 통한 편리한 관리
- 질소 발생기 설치 가능(Option)
- 테이블 이동이 가능하여 효과적인 공간 활용 및 기기 수리 시 공간 확보 가능

#### Automatic door opening system



40℃ 이상 상승시 과열 알람 기능 작동



알람 작동과 동시에 문이 자동으로 열리며 위험 방지

#### Nitrogen Generator for ionBench

- 질소발생기를 ionBench에 추가로 장착이 가능
- 사용중인 콤프레셔가 있다면, ionBench에 넣어서 소음 제거 가능
- 질소발생기는 ionBench 테이블의 좌, 우측면에 부착이 가능
- Dry & Clean Air 생성 기능을 추가 가능
- 최소 크기 150 X 839 X 562 mm (WDH)
- Nitrogen production: 35NL/min / 7BAR / 97% purity

# ion Bench

N2 Generator or Air generator

#### VIBRATION DAMPENING



- 과도한 진동은 질량 분석기 내부의 펌프의 성능과 수명에 영향을 미치므로 성능이 저하되어 수리 비용이 많이 발생. ionBench 솔루션은 특허받은 코일 스프링 기반 진동 완충제를 적용하여 진동을 99%까지 감소.
- 기본 진공 펌프에서 질량 분석기(특히 MS 내부의 터보 펌프)로 진동이 전달되는 것을 방지합니다.
- 보정된 스프링이 진공 펌프 구성(회전 속도, 주파수 및 중량)과 일치.
- 옵션으로 오일 누출을 방지할 수 있는 oil drip steel tray를 추가 가능.



www.labpedia.co.kr blog.naver.com/labpedia 서울특별시 성동구 연무장5가길 7, E동 1401호 Mail: labpedia@labpedia.co.kr

Tel : 02)2223-2111 Fax : 02)2223-2112



World Top

# RIST 표준물질생산기관

#### 국내 최초 철강 분야 표준물질생산기관, RIST

포항산업과학연구원(RIST)는 수십 년간의 평가 분석기술 및 연구활동을 통하여 **국내 최초로 각종 철강** 표준물질을 생산하였고, KOLAS(한국인정기구)로부터 철강 분야 최초 표준물질생산기관 인증을 받았습니다.(KRMPs-004호) 분석의 정확성과 신뢰도를 높이기 위해서는 분석 대상 물질과 유사한 표준물질의 사용이 중요하며, 이때 사용되는 표준물질의 품질도 좋아야 합니다. 저희 분석평가센터는 표준물질생산기관에 대한 국제적 인정 기준인 ISO Guide 34(표준물질생산기관의 자격에 대한 일반요건) 및 ISO Guide 35(표준물질의 인증 - 일반 및 통계적 원칙)의 엄격한 요구조건을 만족하는 철강 관련 표준물질을

RIST 표준물절 개발 분야

저합금강

탄소강

고Mn강

실리콘강

INVAR 합금 표면처리 강판 스테인리스 304

표준물질(reference material, RM): 하나 이상의 지정된 양에 대하여 충분히 균질하고 안정한 물질

인증표준물질(certified reference material, CRM): 인증서가 수반되는 표준물질로 특성값, 연계 불확도, 측정 소급성을 제고하는 표준물질 표준물질의 필요성 : 기기의 교정, 측정 방법의 평가, 특성값 부여, 측정결과 품질관리에 필수

#### KOLAS 인정 인증표준물질 개발실적 및 진행현황

#### ❖ 표준물질 개발실적

RIST는 철강 대표 소재인 저합금강, 탄소강, 스테인리스강 등에 대한 인증표준물질 18종을 개발하였고, 미국 최상위 표준연구기관인 NIST (National Institute of Science & Technology)와 동일한 품질 수준의 생산능력을 KOLAS로부터 인정받았습니다.(NIST Traceability) 또한, 기존 표준물질 대비 강종 당 15개 원소의 농도 범위로 대폭 확대해 철강 및 금속관련 실험실에서 XRF나 Spark-OES를 이용하여 시료 분석에 사용할 수 있도록



저합금강, 6종

RIST-CRM1001 ~ CRM 1006 Dimension: Ø40 x h24 (mm) 성분(15원소): C, Si, Mn, P, S, Cr, Ni, Cu, Mo, Al, Ti, V, B, W, Co



탄소강, 6종

RIST-CRM2001 ~ CRM 2006 Dimension: Ø40 x h24 (mm) 성분(15원소): C, Si, Mn, P, S, Cr, Ni, Cu, Mo, Al, V, Nb, Ti, B, W



스테인리스강, 6종

RIST-CRM3001 ~ CRM 3006 Dimension: Ø50 x h24 (mm) 성분(14원소): C, Si, Mn, P, S, Cu, Ni, Cr, Mo, Al, V, Co, Ti,

#### ❖ 표준물질개발 진행현황(~`21.12)

RIST는 현재 기계 구조용 합금, 티타늄 합금, 철강 충격시험용, API강 등 철강 관련 표준물질 뿐만 아니라 고순도 실리카, 슬래그 분말 등 다양한 표준물질 개발을 진행중입니다.

1. 기계 구조용 합금강 화학 분석용

4. 고순도 실리카 화학 분석용

2. 티타늄 합금 화학 분석용

5. 슬래그 분말 화학 분석용

3. 철강 충격시험용

6. API강 화학 분석용

CRM RM

#### 기술 및 판매 문의

**포항산업과학연구원 분석평가그룹 정세훈** E-mail: jshoon@rist.re.kr Tel: 054-279-6460

"항상 새 기기처럼 분석기기 전문가가 관리해주는"

# HPLC 렌탈州비스

고성능 액체크로마토그래프 전문 유지보수, 판매



## HPLC 전문 유엠MI/NOI언스

전화, 1661-1906 이메일, umc@umckorea,com

Agilent 소모품의 새로운 선택

# BIOSPECHROM



Comsumables for Chromatography & Spectrometry



**Sample Preparation** 



**Water Purification System** 



**Analytical Standard & Reagent** 

2016년부터 Agilent Technologies사의 실험 분석 공식대리점으로서 다양한 컬럼, 바이알, 실험 분석 소모품 및 다양한 실험기초장비까지 고객 실험 환경에 알맞은 맞춤형 솔루션을 제공합니다.

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



경기도 의왕시 이미로 40, 9층(포일동) 인덕원 아이티밸리 C동 913호 T. 02-898-3352 F. 0303-3445-3360 E. bsc\_info@biospechrom.com





#### 한국생산기술연구원

#### 환경규제기술센터 유해물질·화학분석공용실험실

화학분석 지원

유해물질분석 지원

위해성평가기술 지원

화학물질규제대응 지원

**Regulatory Chemical Analysis & Risk Assessment Center** 

경규거(기) (국/선) 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 OSHS 기준 및 국내 산안법에 따른 MSDS 작성이 필요한

기업에게 맞춤형 기술지원을 제공하고 있습니다.



#### 주요 장비



#### 유해물질 분석 항목

- 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 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

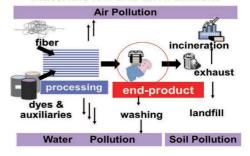
■ 섬유제품 함유 유해물질 분석 항목

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

#### Material Flow and Environment



고용노동부 IFRDK 한국산업인력공단

#### 2022년 환경규제대용 분석 실습 교육 안내

국가인적자원개발 컨소시엄 사업

전략분야: 국내외 환경규제 대용 교육훈련

운영기관: 한국생산기술연구원

2022년 교육 과정명

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

■ 모집 인원: 과정당 10~14명(선착순) ■ 교육 시간: 14~15시간(2일)

■ 실시 횟수 : 과정별 1~3회/년 ■ 신청 요건 : 고용보험 납부기관 근무자

- 1. GC-MS를 활용한 유해물질 분석 실무
- 2. LC-MS를 활용한 유해물질 분석 실무
- 3. ICP를 활용한 중금속 분석 실무
- 4. RoHS 지침 대응을 위한 IEC 62321 시험법 실무
- 5. 화평법 대응을 위한 화학물질 위해성 평가 실무