

제61회 한국분석과학회 추계 학술대회

The 61th Biannual Conference of The Korean Society of Analytical Sciences

2018. 11. 15.(THU.) ~ 16.(FRI.)
대명리조트 거제마리나



주 관 (사)한국분석과학회

후 원



경상남도
GYEONGNAM



창원시



경남컨벤션뷰로

협 찬

(주)지올코리아, 동일시마즈(주), 리코코리아, 머크주식회사, 비케이사이언티픽(주), 삼인사이언스(주), 서울대학교 공동기기센터 NICEM분원, 씨모피셔사이언티픽코리아(주), 씨케이아이씨(CKIC)코리아, 아반토퍼포먼스머티리얼즈코리아(유), 연세대학교 공동기기원, 오디랩, 인성크로마텍(주), (유)워터스코리아, (주)KCC중앙연구소, (주)리가스, (주)애니랩, (주)어플라이드스펙트라, (주)지티사이언, (주)케이엠, (주)캠트리, (주)한국아이티에스, 한국기초과학지원연구원, 한국생산기술연구원, 한국애질런트테크놀로지스(주), 한국퍼킨엘머, 한국화학연구원, phenomenex



사단
법인 한국 분석 과학 회

THE KOREAN SOCIETY OF ANALYTICAL SCIENCES

■ 목 차 ■

1. 초대의 글	1
2. 학술대회 운영 공지 사항	2
3. 2018년도 추계 학술대회 프로그램	3
4. 포스터 발표 목록	10
<초 록>	
5. 심포지엄 강연	35
6. Special Session	71
7. PI급 구두 강연	77
8. DI 분석과학상 수상 강연	101
9. 대학원생 구두 발표	105
10. Early Bird Seminar	115
11. 포스터 발표 I (11월 15일)	
환경	119
의약품/화장품	147
무기/재료	178
표준	197
원자력/방사선	206
법과학	211
12. 포스터 발표 II (11월 16일)	
식품/농학	217
일반	244
대학원생 구두발표	306
13. 인명 색인	313
<총 회>	
14. 총회 식순	322
15. 제61회 추계 학술대회 상	323
16. 2018년도 업무 보고	326
17. 2018년도 수입·지출 현황	327
18. 2019년도 임원(안)	328
19. 2019년도 사업계획서(안)	331
20. 2019년도 예산(안)	332
<기타 안내 사항>	
21. 학술 발표회장 도면	333
22. 한국분석과학회 임원 명단	334

초대의 글

제61회 한국분석과학회 추계 학술대회가 2018년 11월 15일(목)~16일(금) 아름다운 거제 대명리조트에서 개최됩니다. 이에 학회 회원 여러분과 분석과학 분야에 종사하시거나 관심 있는 모든 분, 그리고 가족을 정중히 초대합니다.

이번 추계학술대회에서는 화학, 식품, 약학, 표준, 원자력, 법과학 등 각 분야별 특별 심포지엄을 알차고 다양하게 구성하였습니다. 포스터 발표는 예년과 동일한 방식으로 제한 없이 진행됩니다. 본 학회를 통하여 분석과학 분야의 기술 수준이 한 단계 발전하는 소중한 시간이 될 것을 확신합니다.

아름다운 11월의 다도해, 거제에서 개최되는 제61회 추계 학술대회는 국내외 분석과학자 간의 유익한 학문적 교류의 공간이 되고, 다양한 분야의 산업에서 분석과학의 중요성을 발견하는 기회가 될 것입니다. 참석하신 모든 분들이 회원 간의 학문적 대화는 물론, 친교를 통하여 휴식을 취하고 재충전하는 시간이 되기를 기원합니다.

이번 추계 학술대회가 성공적으로 추진될 수 있도록 함께 헌신해 주신 김진석 총무 부회장, 류재정 홍보 부회장, 배선영 사무총장님께 감사드리며, 특별히, 본 학회의 학술프로그램을 총괄하여 주신 한상범 학술부회장님과 분야별 심포지엄을 조직해주신 각 분야 부회장님들께 깊은 감사의 말씀을 올립니다.

본 학회에 참석해주신 학회 회원 여러분과 가족, 학술대회 후원기관 및 전시업체에게 심심한 감사의 말씀을 드리며, 이번 학회가 특별하고 즐거운 학회가 되시기 바랍니다.

2018년 11월
사단법인 한국분석과학회
회장 이 승 호 드림

학술대회 운영 공지 사항

1) 참가비 안내

2018년도 년 회비를 납부하지 않은 분은 년 회비 ₩30,000(학생 ₩20,000)과 등록비를 함께 납부하여 주시기 바랍니다.

회원 구분		연회비	참가비	
			사전 등록비	당일 등록비
정회원	일반	30,000원	90,000원	100,000원
	학생	20,000원	50,000원	60,000원
비회원	일반		130,000원	
	학생		80,000원	

- 참가하시는 모든 회원께서는 필히 등록하시고, 학회장에서는 등록 명찰을 지참하여 주시기 바랍니다.
- 발표장 질서유지를 위해 명찰을 지참하지 않은 회원은 발표장 및 간담회장 입장이 제한될 수 있습니다.

2) 구두 발표

- 발표자에게 배정된 시간은 수상 강연 30분, 심포지엄, PI급 구두 강연 20분, 대학원생 구두 발표 10분입니다.
- 발표자께서는 발표 시간 시작 전에 발표장에 도착하셔서 발표 자료를 도우미 학생에게 전달하시고 발표 내용을 현장에서 미리 확인하시길 바랍니다.
- 발표자께서는 배정된 시간의 2/3 발표 시간으로, 1/3 토의 시간으로 활용해 주시고 발표 시간을 엄수해 주시기 바랍니다.
- 좌장께서는 발표자가 배정 시간을 절대 초과하지 않도록 운영 바랍니다.

3) 포스터 발표

장 소	날짜	부착 시간	발표 일시	철수 시간
루비 홀 & 로비	2018.11.15.(목)	10:30-14:00	16:00-17:00	17:10-18:00
	2018.11.16.(금)	07:40-09:00	11:00-12:00	12:00-12:10

- 포스터 규격은 가로 90cm × 세로 120cm 입니다. 발표 예정자는 이 크기에 적합하게 제목, 저자, 연구 내용을 준비하시면 됩니다.
- 발표자는 포스터 앞에서 정해진 시간 동안 대기하시어 질문과 토의에 응하셔야 합니다. 본회에 별도의 연락 없이 포스터를 게시하지 않으면 추후에 본인 뿐 아니라 해당 연구실의 차기 논문 발표에 제한이 있사오니, 유의하여 주시기 바랍니다.
- 철거하지 않은 포스터는 임의 폐기합니다.

※ 우수 포스터 4편, 대학원생 우수 구두 2편을 선정하여 2019년 춘계 학술대회에서 시상할 예정입니다.

4) Early Bird Seminar에서는 참석자에게 간단한 조식(샌드위치, 음료)이 제공됩니다. (선착순)

5) 기타 자세한 사항은 아래로 문의 바랍니다.

- 학회 사무실 담당 강미경: 02-701-8661

2018년도 추계 학술대회 프로그램

11월 15일(목)	그랜드볼룸 I	그랜드볼룸 II	다이아몬드	루비	로비
10:30 -	등록 및 포스터 게시				
13:00 - 14:20	Symposium I (식품/농화학)	Symposium II (표준/원자력/안전)	Symposium III (법과학)		기기전시
14:20 - 14:30	Coffee Break & 기기전시 참관				
14:30 - 15:50	Symposium IV (약학)	PI급 구두 I	Special Session (생활공감 환경보건 분석)		기기전시
16:00 - 17:00				포스터 발표 (PT-001~096)	
17:00 - 17:10	Coffee Break & 기기전시 참관				
17:10 - 17:40	DI 분석과학상 수상 강연 (1명*30분)				
17:40 - 18:20	총회				
18:20 -	간담회(만찬)				
11월 16일(금)	그랜드볼룸 I	그랜드볼룸 II	다이아몬드	루비	로비
07:40 -	등록 및 포스터 게시				
08:00 - 08:30		Early Bird Seminar (한국퍼킨엘머)			기기전시
08:40 - 10:00	Symposium V (화학)	Symposium VI (재료/섬유)	대학원생 구두 (08:40-9:50)		
10:00 - 11:00	PI급 구두 II	PI급 구두 III	PI급 구두 IV		
11:00 - 12:00				포스터 발표 (PF-001~096)	
12:00 - 12:10	경품 추첨 및 폐회식				

11월 15일(목), 그랜드볼룸 I

10:30 -	등록 및 포스터 게시	로비
13:00 - 14:20	Symposium I. 식품의 최근 분석 동향(식품/농화학)	
좌장: 김정권(충남대학교)		
13:00-13:20	Addressing the challenges in the analysis and characterization of food macromolecules and colloids with asymmetrical flow field-flow fractionation (AF4) Lars Nilsson(Lund University, Sweden)	
13:20-13:40	Analytical methods of prohibited veterinary drugs and illegal compounds in food 가미현(한국기능식품연구원)	
13:40-14:00	원소분석용 식품 CRM 개발 및 활용 허성우(한국표준과학연구원)	
14:00-14:20	건강기능식품 기능성 원료의 중금속 실태조사 양중석(한국과학기술연구원)	
14:20 - 14:30	Coffee Break & 기기전시 참관	로비
14:30 - 15:50	Symposium IV. 의약품 품질향상을 위한 약전분석법의 진보(약학)	
좌장: 이정미(성균관대학교)		
14:30-14:50	대한민국약전 선진화를 위한 약전분석법 개선 강종성(충남대학교)	
14:50-15:10	합성의약품의 약전분석법 개선 사례 김경호(강원대학교)	
15:10-15:30	Analytical Methods for the Quality Control of Biopharmaceuticals 나동희(중앙대학교)	
15:30-15:50	의약품 중 금속불순물의 측정 및 문제 해결 박재홍(한국애질런트테크놀로지스)	
16:00 - 17:00	포스터 발표	루비 홀 & 로비
17:00 - 17:10	Coffee Break & 기기전시 참관	로비
17:10 - 17:40	DI 분석과학상 수상 강연	
좌장: 김진석(한국표준과학연구원)		
17:10-17:40	역상 액체 크로마토그래피에 의한 금속 킬레이트 분리 및 지르코니아 기반 정지상에서의 키랄 분리 김인환(대구대학교)	
17:40 - 18:20	총회	
18:20 -	간담회(만찬)	

11월 15일(목), 그랜드볼룸 II

10:30 -	등록 및 포스터 게시	로비
13:00 - 14:20	Symposium II. 표준과 원자력 분야의 기술 개발과 활용(표준/원자력/안전)	
	좌장: 최기환(한국표준과학연구원)	
13:00-13:20	Development of LIBS for Pyroprocessing Salt Analysis 박세환(한국원자력연구원)	
13:20-13:40	Sensitive analysis of lanthanide in a sample matrix with high salt by capillary electrophoresis 김지혜(한국원자력연구원)	
13:40-14:00	인증표준물질 (CRM), 어떻게 사용할까? 백송이(한국표준과학연구원)	
14:00-14:20	아보가드로 상수를 사용한 SI 단위 몰(mole)의 재정의 소개 이경석(한국표준과학연구원)	
14:20 - 14:30	Coffee Break & 기기전시 참관	로비
14:30 - 15:50	PI급 구두 강연 I	
	좌장: 류재정(경북대학교)	
14:30-14:50	[Leco 젊은 분석과학자상 수상자] Liquid chromatography-tandem mass spectrometric method for analysis of caffeine and its metabolites in urine to assess drug metabolizing enzyme activities 유혜현(한양대학교)	
14:50-15:10	Predictive analytics of inhalation toxicity for organic chemicals 이성광(한남대학교)	
15:10-15:30	Small Angle X-ray Scattering Studies on Structures of Biological Macromolecules in Solution 진경식(포항가속기연구소)	
15:30-15:50	Development and validation multi-residue method for butralin, prodiamine, methoprene in apple by GC-MS/MS 임채욱(국립농산물품질관리원)	
16:00 - 17:00	포스터 발표	루비 홀 & 로비
17:00 - 17:10	Coffee Break & 기기전시 참관	로비
17:10 - 17:40	DI 분석과학상 수상 강연	
	좌장: 김진석(한국표준과학연구원)	
17:10-17:40	역상 액체 크로마토그래피에 의한 금속 킬레이트 분리 및 지르코니아 기반 정지상에서의 키랄 분리 김인환(대구대학교)	
17:40 - 18:20	총회	
18:20 -	간담회(만찬)	

11월 15일(목), 다이아몬드홀

10:30 -	등록 및 포스터 게시	로비
13:00 - 14:20	Symposium Ⅲ. 안전사고 예방을 위한 법과학(법과학)	
	좌장: 황승율(화학물질안전원)	
13:00-13:20	Introduction of modified methods of preparing fiber cross sections for the comparison of fibers 성태명(국방부 과학수사연구소)	
13:20-13:40	잠재 지문의 지속성과 노후 성분 변화 연구 김남이(국립과학수사연구원)	
13:40-14:00	Variation of phenolic compounds in apple (<i>Malus pumila</i> , cv. Gamhong) leaves under chemical exposures 김영희(화학물질안전원)	
14:00-14:20	Strategic analysis of chemical reaction product using computational chemistry and nuclear magnetic resonance for chemical accident response 류태인(화학물질안전원)	
14:20 - 14:30	Coffee Break & 기기전시 참관	로비
14:30 - 15:50	Speical Session. 인체유래물 활용 노출생체지표 분석 고도화 기술 개발 현황과 향후 과제(생활 공감 환경보건 분석)	
	좌장: 이재익(한국과학기술연구원)	
14:30-15:00	인체유래물 활용 노출생체지표 분석 고도화 기술 개발 임호섭((주)스마티브 생명환경연구소)	
15:00-15:25	신종 환경유해물질의 노출생체지표 개발 전략 이상규(경북대학교)	
15:25-15:50	의약품 중 휘발성유기화합물의 분석 백승훈(아주대학교)	
16:00 - 17:00	포스터 발표	루비 홀 & 로비
17:00 - 17:10	Coffee Break & 기기전시 참관	로비

11월 16일(금), 그랜드볼룸 I

07:40 -	등록 및 포스터 게시	로비
08:40 - 10:00	Symposium V. 최신 분석기술과 장비개발 동향(화학)	
	좌장: 김종혁(한국화학연구원)	
08:40-09:00	NMR 최신 기술 : InsightMR (Reaction Monitoring) 황정현(브루커코리아)	
09:00-09:20	Atmospheric Pressure Ionization Sources: Their Use and Applicability 배상철(워터스코리아)	
09:20-09:40	X-선 소각산란장치 SAXS 를 이용한 물질의 구조 분석 최신 동향 김세훈(어썬레이 주식회사)	
09:40-10:00	Low temperature SEM and FIB-SEM: Analysis approach to cryo techniques in Life Sciences 표성수(테스칸코리아)	
10:00 - 11:00	PI급 구두 강연 II	
	좌장: 배선영(서울여자대학교)	
10:00-10:20	MC-ICP-MS를 이용한 Eu 동위원소 분석법의 개발 이승구(한국지질자원연구원)	
10:20-10:40	펄토초레이저절제현미분석 유도결합플라즈마 질량분석기(fs-LA-ICP-MS)를 이용한 다양한 물질의 분석 사례 소개 이호선(부산대학교 공동실험실습관)	
10:40-11:00	Flat Panel Display의 Metal 부식불량 분석사례 및 발생 Mechanism에 대한 연구 최재하(LG 디스플레이)	
11:00 - 12:00	포스터 발표	루비 홀 & 로비
12:00 - 12:10	경품권 추첨 및 폐회식	

11월 16일(금), 그랜드볼룸 II

07:40 -	등록 및 포스터 게시	로비
08:00 - 08:30	Early Bird Seminar(한국퍼킨엘머)	
	좌장: 이중주(APRO)	
08:00-08:15	LC-MS/MS에 적용된 새로운 Q0 기술 김왕유(한국퍼킨엘머)	
08:15-08:30	유도결합플라즈마 질량분석기(ICP-MS)를 활용한 나노입자 및 단일 세포 분석 이창환(한국퍼킨엘머)	
08:40 - 10:00	Symposium VI. 소재의 신속 분석 기술 동향(재료/섬유)	
	좌장: 정성욱(포항산업과학연구원)	
08:40-09:00	Py-GC-MS를 이용한 유해물질 Screening 분석방법 연구 김재우(KOTITI 시험연구원)	
09:00-09:20	인공지능(AI)을 이용한 철강소재 미세조직 분석기술 개발 박중철(포항산업과학연구원)	
09:20-09:40	LA-ICP-MS를 이용한 초내열 세라믹 섬유의 미량원소 분석법 및 표준화 김동현(한국세라믹기술원)	
09:40-10:00	머신러닝을 활용한 LIBS 분석 정확도 향상 연구 정세훈(포항산업과학연구원)	
10:00 - 11:00	PI급 구두 강연 III	
	좌장: 유혜현(한양대학교)	
10:00-10:20	XRF, FTIR 기기를 이용한 후처리 용액 검수분석기술 개발 김성남(포항산업과학연구원)	
10:20-10:40	전기-분석 화학적 개념을 이용한 3 nm 이하 크기의 촉매 나노입자의 합성 및 특성 분석 김주훈(경희대학교)	
10:40-11:00	Standardization activities for Halogen and PAHs testing methods & Joint working group establishment between ISO/TC 61/SC 5/WG 11 & IEC/TC 111/WG 3 정재학((주)성문시스텍 한국분석과학연구소)	
11:00 - 12:00	포스터 발표	루비 홀 & 로비

11월 16일(금), 다이아몬드 홀

07:40 -	등록 및 포스터 게시	로비
08:40 - 09:50	대학원생 구두발표[포스터 발표도 함께 진행]	
좌장: 조건(한국기초과학지원연구원)		
08:40-08:50	[PF-090] Nonspecific inhibition of PF543 on Serine Palmitoyltransferase Activity Detecting by LC-MS/MS Maftuna Shamshiddinova(충북대학교)	
08:50-09:00	[PF-091] Determination of 15 endocrine disruptors in human saliva using GC-MS VU THI HOANG VAN(공주대학교)	
09:00-09:10	[PF-092] Chemical Compositions and Emission Characteristics of Atmospheric Aerosols in relation to Meteorological Conditions at Background Site of Korea during 2017 김륜경(제주대학교)	
09:10-09:20	[PF-093] Composition and Pollution Characteristics of Ionic Precipitation Components in Jeju Island 부준오(제주대학교)	
09:20-09:30	[PF-094] Determination of curcumin in rat plasma using UPLC-MS/MS and its application to a pharmacokinetic study of a novel curcumin formulation 유준상(한양대학교)	
09:30-09:40	[PF-095] Rapid and accurate simultaneous determination of natural toxic pyrrolizidine alkaloid in medicinal plant by UPLC-ESI-Q-TOF 정원태(충북대학교)	
09:40-09:50	[PF-096] Surface homogeneity enhancement of 2,5-Dihydroxybenzoic acid matrix using on-target recrystallization by acetonitrile droplet in MALDI-MS dried-droplet sample preparation 원유광(충남대학교)	
10:00 - 11:00	PI급 구두 강연 IV	
좌장: 남궁현(코오롱중앙기술원)		
10:00-10:20	신라 왕경유적 출토 옛사람 뼈의 분자유전학적 분석 김수훈(국립문화재연구소)	
10:20-10:40	몽골 샤하르톨고이 유적에서 발굴된 옛사람 뼈의 DNA 분석 조은민(국립문화재연구소)	
10:40-11:00	Multiplexed Fluorescence-free In-depth 3D Live Cell Super-resolution Imaging by Correlative Light Sheet Microscopy Suresh Kumar Chakkarapani(경희대학교)	
11:00 - 12:00	포스터 발표	루비 홀 & 로비

*: 교신저자, _(밑줄): 발표자

11월 15일(목)

환경: PT-001 ~ PT-028

- PT-001 국내 연근해산 수산물의 PCDD/Fs, DLPCBs 및 PCNs의 잔류수준과 분포 특성**
박시현, 최민규, 김정배, 이인석*
국립수산과학원 어장환경과
- PT-002 수산 환경과 양식생물 중 펜타클로로페놀(PCP) 분석방법 정립과 양식장 밀집해역 내 스크리닝**
김예지¹, 성재현¹, 최민규¹, 김정배¹, 이인석^{1,*}
¹국립수산과학원 어장환경과
- PT-003 국내 양식어장 퇴적물과 생물 중 잔류성유기오염물질 분포 특성**
성재현¹, 이인석^{1,*}
¹국립수산과학원 어장환경과
- PT-004 국내 주요 해역별 계절별 신방오도료(Tin-free biocides) 잔류량 변동**
이인석^{1,*}, 최민규¹, 김정배¹
¹국립수산과학원 어장환경과
- PT-005 제주연안 육상 어류양식장 배출수와 수산용수 중 항생제 잔류 현황 모니터링**
이미경¹, 이인석^{1,*}, 최민규¹, 김정배¹
¹국립수산과학원 어장환경과
- PT-006 국내 상수원수 내 냄새 유발물질의 검출특성 연구**
이선홍, 이은정, 윤미애, 김윤석*
한국수자원공사 수질연구센터
- PT-007 미지 물질 확인을 위한 고도정수처리공정의 통계적 분석기법 적용**
최원석¹, 윤미애¹, 이선홍¹, 김윤석¹, 최재원^{1,*}
^{1,*}K-water 융합연구원 수질연구센터
- PT-008 안정동위원소를 활용한 상수원 오염원 추적 및 유입지천의 기여도 평가**
김형석¹, 김정인¹, 최원석¹, 이선홍¹, 김윤석^{1,*}
^{1,*}K-water 융합연구원 수질연구센터
- PT-009 분말활성탄(PAC)에 의한 과불화 화합물(PFCs) 제거방안**
Removal of Perfluorinated Compounds (PFCs) by Powdered Activated Carbon (PAC)
정관조*, 이인자, 홍원해, 김준일, 윤우현, 장수경, 박영복, 김복순
서울물연구원
- PT-010 한강지천에서 인공감미료 실태조사**
윤우현*, 정종순, 정관조, 홍원해, 김준일, 이인자, 안재찬, 김복순
서울특별시 서울물연구원

- PT-011 Determination of SiO₂ in rocks and sediments by ICP-OES and microwave digestion**
 이덕환, 최원명, 음철현*
 한국지질자원연구원 지질자원분석센터
- PT-012 Optimization of microwave digestion procedure for As analysis in rocks and sediments by ICP-MS without DRC**
 최원명, 이덕환, 음철현*
 한국지질자원연구원 지질자원분석센터
- PT-013 수질시료 중 과불화화합물 분석 방법**
 류건영^{1,*}, 최승윤, 송준희
^{1,*}KOTIT시험연구원
- PT-014 가축매몰지 침출수 및 농촌지역 지하수 수질의 이화학적 특성 평가**
 최민영, 박선화, 이경미, 김덕현, 김문수, 정현미, 김현구*
 국립환경과학원 환경기반연구부
- PT-015 솔잎가지 표면 흡착면지의 물리화학적 특성 및 대기오염도 평가지표로서의 고찰**
 정다위, 최정희, 이장호*, 이수용, 이하은, 박기완, 심규영, 이종천
 국립환경과학원 자연환경연구과 국가환경시료은행
- PT-016 New analysis method for organotin compounds by Tandem-LC/MS without the derivatization**
 안정은*, 송윤채, 김영수, 이경철, 정남용
 (재)한국의류시험연구원 환경분석본부
- PT-017 섬유제품용 과불 발수제 및 대체 비불소 발수제의 수질 오염도 및 폐수제거성 비교**
 Comparison of water pollution and its eliminability between perfluoro and alternative non-PFC water repelling agents for textiles
 손승환, 박광서, 김주양, 최은경*
 한국생산기술연구원 환경규제기술센터
- PT-018 온돌효과를 반영한 건축자재의 휘발성유기화합물 방출특성에 관한 연구**
 고영환^{1,*}, 현승민¹, 김만구², 서주희², 류혜진³, 박준형³, 이영미³
^{1,*}한국산업기술시험원, ²강원대학교, ³한국주택가구협동조합부설 한국가구시험연구원
- PT-019 건축자재의 절단면 영향을 고려한 시험방법 및 시험편 채취방법 개발**
 Development of testing method and test specimens sampling method considering the effect of cutting surface of building products
 유헤진¹, 박준형¹, 이영미¹, 김만구^{2,*}, 서주희², 고영환³, 현승민³
¹한국주택가구협동조합부설 한국가구시험연구원, ^{2,*}강원대학교, ³한국산업기술시험원
- PT-020 Development of Heavy Metal Removal Technology to Recycle Waste Liquid from OLED Process**
 SE Chul Hong^{1,*}, Mi Young Son¹, Byung Man Chae², Seok Hwan Lee²
^{1,*}Gumi Electronics & Information Technology Research Institute, ²KMC Research Center

- PT-021 Development and Characterization of metal complexed Melt-Blown (MB) air purification filter**
 Seyoung Yoon¹, Heejin Lee¹, Mihyun Lee¹, Kyong Eun Yu¹, Ji-hyun Bae², Minwook Kim²,
 Woonjung Kim², Seong Ho Choi², In Soo Lee³ and Seunggho Lee^{1*}
^{1*}Chemtree Co.Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea,
²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea,
³Department of Biological Science and Biotechnology, Hannam University, Daejeon 34054,
 Korea
- PT-022 Characterization of electrospun nanofiber with dust-removal and antibacterial properties**
 Seyoung Yoon¹, Heejin Lee¹, Mihyun Lee¹, Kyong Eun Yu¹, Ji-hyun Bae², Minwook Kim²,
 Woonjung Kim², Seong Ho Choi², In Soo Lee³ and Seunggho Lee^{1*}
^{1*}Chemtree Co.Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea ,
²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea,
³Department of Biological Science and Biotechnology, Hannam University, Daejeon 34054,
 Korea
- PT-023 천공 방법을 이용한 건축자재 절단면으로부터 방출되는 오염물질 농도 비교 평가**
 조지은¹, 서주희¹, 김상욱¹, 고영환², 류혜진³, 김만구^{4*}
¹강원대학교 환경학과, ²한국산업기술시험원, ³한국가구시험연구원, ^{4*}강원대학교 환경융합학부
- PT-024 Analysis of contamination source of contaminated soil by crude oil using GC×GC-MS**
 Hyeong Won Mun¹, Ki-Jung Paeng¹
¹Department of Chemistry, Yonsei University
- PT-025 Thermal Desorption GC/MS를 활용한 식품 속에 함유된 휘발성 유기화합물 스크리닝**
 이상미^{1*}, 이호선, 최하정, 진미정
^{1*}부산대학교 공동실험실습관
- PT-026 LC-MSMS를 이용한 생활화학제품 중 살생물제(농약) 성분 동시분석법 검토**
 조형욱¹, 권정환², 문준관^{3*}
¹한경대학교 산학협력단, ²고려대학교 환경생태공학과, ^{3*}한경대학교 식물생명환경과학과
- PT-027 전혈의 금속 동시 정량 분석법 개발**
 이유진¹, 박준영¹, 차상원^{1*}
^{1*}한국외국어대학교 화학과
- PT-028 유치(Deciduous teeth)대상 엑스포즘 연구를 위한 원소 분석법 개발**
 서은지, 박태민, 갈영주, 차상원*
 한국외국어대학교 화학과

의약품/화장품: PT-029 ~ PT-059

- PT-029 의약품 원료·제제 공통시험법 개발 - 대한민국약전 의약품각조 시험법 개선 연구**
 안재형, 방유빈, 김민선, 정래석, 이효민*
 식품의약품안전처 식품의약품안전평가원 의약품연구과

- PT-030 박층크로마토그래프법(TLC)을 이용한 열매 · 종자류 생약의 확인시험 확립 연구**
고은혜, 최은영, 현성예, 김종환, 강주혜*
 *식품의약품안전평가원 생약연구과
- PT-031 박층크로마토그래프법(TLC)을 이용한 전초류 생약 등의 확인시험 신설 연구**
최은영, 고은혜, 현성예, 김종환, 강주혜*
 *식품의약품안전평가원 생약연구과
- PT-032 백출 중 아트로핀 및 스코폴라민 시험법 확립**
 Establishment of Analytical Method of Atropine and Scopolamine in Atractylodes Rhizome White
이동원, 이혜은, 김선화, 백옥진, 강주혜*
 식품의약품안전평가원 생약연구과
- PT-033 Determination of ethylhexyl methoxycinnamate in sunscreen products using high performance liquid chromatography**
 Kyoung-Moon Han, Haein Cheon, Soae Ji, Rheeda Lee, Chungsik Min, Sangseop Kim, Sang-myeong Park, Yong-Kyu Choi, Hyojin Kim, Kyungwon Seo, Kyunghun Son*
 Cosmetics Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Cheongju, Chungbuk, Republic of Korea
- PT-034 Simultaneous determination of whitening components and adenosine in various cosmetic formulations by high-performance liquid chromatography coupled with photodiode array detection**
 Kyoung-Moon Han, Soae Ji, Haein Cheon, Rheeda Lee, Chungsik Min, Sangseop Kim, Sang-myeong Park, Yong-Kyu Choi, Hyojin Kim, Kyungwon Seo, Kyunghun Son*
 Cosmetics Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Cheongju, Chungbuk, Republic of Korea
- PT-035 Validation of HPLC Method for Simultaneous Analysis of Major components in 'Galgeunhaegi-tang' Mix Soft Extract**
Sung-Ok Moon, Ha-Yeong Lee, Min-Ju kim, Jong-Bum Kim, Ji-Bum Lee and Hwa-Dong Lee*
 National Development Institute of Korean Medicine(NIKOM)
- PT-036 Evaluation of phenolic compounds from viroid-free and viroid-infected apples using HPLC-PDA-ESI-MS/MS**
Thi Phuong Duyen VU¹, In Sook CHO², Kyung Tae KIM³, Seo Young YANG¹, Young Ho KIM¹, Jong Seong KANG¹*
¹Department of Pharmacy, Chungnam National University,
²Department of Horticultural and Crop Environment, National Institute of Horticultural and Herbal Science, RDA
³Division of Bio-engineering, Dong-Eui University
- PT-037 Pattern analysis of main components of DA mixture and its composition herb material with anti-aging activities by HPLC-DAD-ESI-MS**
Hyun June KIM, Chong Woon CHO, Seo Young YANG, Young Ho KIM and Jong Seong KANG*
 Department of Pharmacy, Chungnam National University

- PT-038 Pattern analysis of the bio-converted *Morus alba* leaves as the resource of functional foods with anti-diabetic activity using HPLC-DAD-ESI-MS**
Tae Jeong KIM¹, Young Ho KIM¹, Chong Woon CHO¹, Cheong-Weon CHO¹, Chang-Seon MYUNG¹, Seok Jin KIM², Hyun So CHO², Min Ho YOON³, and Jong Seong KANG^{1,*}
^{1,*}Department of Pharmacy, Chungnam National University, ²MSC Co. Ltd.
³Department of Bio-environmental chemistry, Chungnam National University
- PT-039 Development of the HPLC analytical method of two components in SH and CO mixture using HPLC-ELSD**
GAO DAN, Chong Woon CHO, Seo Young YANG, Young Ho KIM, and Jong Seong KANG*
 College of Pharmacy Chungnam National University
- PT-040 Quantitative analysis of impurities in sulfur hexafluoride and octafluoropropane**
Chong Woon Cho¹, Mi Yeon Park², Hyun Jun Kim¹, Jin Hyeok Kim¹, Tae Jung Kim¹, Jin Seog Kim², Jin Bok Lee² and Jong Seong Kang^{1,*}
^{1,*}Department of Pharmacy, Chungnam National University,
²Center for Gas Analysis, Korea Research Institute of Standards and Science
- PT-041 Analysis of inotodiol in plasma using LC-MS/MS for pharmacokinetic study using non-compartment analysis**
Jin Hyeok KIM, Chong Woon CHO and Jong Seong KANG*
 Department of Pharmacy, Chungnam National University
- PT-042 Assessment of cytochrome P450 inhibition potential of a new drug candidate (HY001)**
In Yong Bae¹, Min Sun Choi¹, Young Seok Gi¹, Hye Hyun Yoo*
¹한양대학교 약학대학
- PT-043 Simultaneous determination of sulbactam sodium and ampicillin sodium in powder for injection by HPLC**
Xuan-Lan Mai¹, Thuy-Vy Pham¹, Ga-Hyun Han¹, Su-Jin Kum¹, Sang-Hoon Woo¹, Jong-Seong Kang², Mi Hee Woo³, Dong-Hee Na⁴, In-Koo Chun⁵, Kyeong Ho Kim^{1,*}
¹College of Pharmacy, Kangwon National University,
²College of Pharmacy, Chungnam National University,
³College of Pharmacy, Catholic University of Daegu,
⁴College of Pharmacy, Chungang University,
⁵The Research Foundation for Pharmaceutical Quality
- PT-044 Rapid screening of multi-class illegal adulterants in lipid type supplements by UHPLC-Q/TOF-MS combined with QuEChERS methods**
Bum-Hee Kim, Jisu Hur, Hyun Ji Kim, Jongki Hong*
 College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea
- PT-045 Investigation of the effects of different brewing conditions on *Camellia sinensis* infusions**
Yan Jin, Seulgi Kang, Heesoo Lee, Keunbae Park, Dasom Jung, Ke Li, Jeongmi Lee*
 School of Pharmacy, Sungkyunkwan University, Suwon, 16419, Republic of Korea

- PT-046 Development and validation of an analytical method for the determination of narcissoside in sea buckthorn (*Hippophae rhamnoides* L.) by HPLC-UV**
 Ke Li^{1,§}, Seulgi Kang^{1,§}, Yan Jin¹, Dasom Jung¹, Heesoo Lee¹, Keunbae Park¹, Yong Seok Choi², Jeongmi Lee^{1,*}
¹School of Pharmacy Sungkyunkwan University,
²College of Pharmacy, Dankook University
- PT-047 Extractive desulfurization of fuels using ammonium-based deep eutectic solvents**
 Heesoo Lee, Yan Jin, Seulgi Kang, Keunbae Park, Dasom Jung, Li Ke, Jeongmi Lee^{*}
¹School of Pharmacy Sungkyunkwan University
- PT-048 Investigation of stabilization/destabilization effects and mechanisms of solvents on epigallocatechin gallate**
 Seulgi Kang, Yan Jin, Heesoo Lee, Keunbae Park, Dasom Jung, Ke Li, Jeongmi Lee^{*}
 School of Pharmacy Sungkyunkwan University
- PT-049 Minimization of spectral differences between lab-blended and real process pharmaceutical samples with wetting strategy for Raman spectroscopy**
 Yoonjeong Lee¹, Sang Hoon Cho¹, Jaejin Kim², Young-Ah Woo², and Hoeil Chung^{1,*}
¹Department of Chemistry, Hanyang University, ²Quality Management, Chong Kun Dang Pharm
- PT-050 Optimization for determination of microbeads from cosmetics and personal care products**
 Yeonjeong Jung, Hyunhwa Son, Jinsook Lee^{*}
 Material Technology Center, KTL, Ansan-si, Korea
- PT-051 황 기반의 단백질 정량분석법과 아미노산 기반의 단백질 정량분석법의 비교**
 김휘진^{1,3}, 정지선^{2,3}, 트란 흐영^{2,3}, 임영란¹, 허성우¹, 임용현^{1,3,*}
¹한국표준과학연구원 분석화학센터, ²한국표준과학연구원 바이오센터,
³*과학기술연합대학원대학교 생물과학분석
- PT-052 Determination of bisphenol A in Pharmaceutical Capsules**
 Hyub Kim^{*}
 ASC, Department of Medicine Quality Analysis
- PT-053 Cetyl alcohol의 함량에 따른 크림제형 해나 천연 염모제의 안정성 확인**
 강이영, 서현정, 연승연, 정희경, 이윤형, 정종진^{*}
 한남대학교 화학과
- PT-054 Manufacture and characterization of mascara using coffee bean extract**
 Jaeseon Lee¹, Jihyun Bae¹, Heejin Lee², Seongho Lee² and Woonjung Kim^{1,*}
¹*Department of Chemistry, Hannam University, ²Chemtree Co. Ltd. Research Center
- PT-055 Analysis of the flavouring substance of Chrysanthemum Flower Essential Oil and Study on the Suitability of Perfume Materials**
 Dawon OH¹, Jihyun Bae¹, Mihyun Lee², Seongho Lee² and Woonjung Kim^{1,*}
¹*Department of Chemistry, Hannam University, ²Chemtree Co. Ltd. Research Center

PT-056 Characterization of Natural Preservatives in Korean Pharmaceuticals

Mihyun Lee¹, Seyoung Yoon¹, Heejin Lee¹, Kyong Eun Yu¹, Ji-hyun Bae², Woonjung Kim², Seong Ho Choi², Eun Bi Kang³, In Soo Lee³ and Seungho Lee^{1,*}

^{1,*}Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea

²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

³Department of Biological Science and Biotechnology, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

PT-057 Development of solid natural sunscreen using inorganic compounds

Heejin Lee¹, Mihyun Lee¹, Seyoung Yoon¹, Kyong Eun Yu¹, Woonjung Kim², Seong Ho Choi², Ah Ryeoung Kim³ and Seungho Lee^{1,*}

^{1,*}Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea,

²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea,

³Department of Cosmetic Science, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

PT-058 Synthesis and characterization of vesicles containing calcein using asymmetrical flow field-flow fractionation (AF4) and multi-angle light scattering (MALS)

Hyemin Kim², Woonjung Kim², Seong Ho Choi², Lars Nilsson³, Seungho Lee^{1,*}

^{1,*}Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea

²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, 305-811, Korea republic

³Dept of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Lund, SE-22100, Sweden

PT-059 Study on effect of particle size and Mica content on sun protection factor (SPF) using gravitational field-flow fractionation (GrFFF)

Jihye Kim¹, Jaeyeong Choi², Woonjung Kim¹, Seongho Choi¹, Seungho Lee^{1,*}

¹Department of chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

²Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden

무기/재료: PT-060 ~ PT-078

PT-060 Failure Analysis of Polymeric Materials : A Case Study in Deterioration of polymers

김경문¹, 최병일, 박재현, 유석

¹한국화학융합시험연구원 고분자재료팀

PT-061 고순도 알루미늄(99.999% 중 미량 불순물 원소 분석법 개발에 대한 연구

김은화^{1,2}, 고청아¹, 민형식¹, 한명섭¹, 허성우¹, 임영란¹, 김태규², 이경석^{1,*}

¹한국표준과학연구원 분석화학표준센터, ²부산대학교 화학과

PT-062 The thermal and mechanical properties of silica-aerogel in polyurethane

정영희¹, 변진원¹, 조유정¹, 신혜철¹, 한상원¹, 김형진², 고혜인², 정정설^{1,*}

^{1,*}한국화학융합시험연구원, ²전남대학교 신화학소재공학과

PT-063 Ferro-Silicon 중 SiC 정량분석기술

이재우^{*}, 정성욱, 장영석, 양정환

(재)포항산업과학연구원 분석평가그룹 화학조성섹션

- PT-064 알루미늄실리케이트 광물 중 알칼리금속 정량분석기술**
양정환*, 정성욱, 하상수, 김성남
(재)포항산업과학연구원 분석평가그룹 화학조성섹션
- PT-065 합성 다이아몬드의 국내 유통현황과 제조방법에 따른 특성 분석**
이보현*, 이영주
서울주얼리지원센터(SJC) 감정연구소
- PT-066 미세먼지 필터창호의 구조적 화학적 분석**
김주영¹, 이준균^{1,*}
^{1,*}한국생산기술연구원
- PT-067 Friction resistance-related surface analysis after various riblet patterns on aluminum foil, plastic, and iron specimens**
이준균
한국생산기술연구원 스마트섬유그룹
- PT-068 국내 현무암 및 화강암 암석시료의 주성분 및 미량성분 정량분석**
Quantitative Analysis of Major and Trace Elements in Korean Basalt and Granite Rock Samples
김건한, 정은숙, 이현아*, 김현구*, 임경미*, 유지혜*, 최병인**, 안상호**
대덕분석기술연구소, *한국세라믹기술원 분석·인증센터, **한국지질자원연구원 기술사업화센터
- PT-069 코팅 적층 박막의 표면 · 계면 특성분석을 위한 SAICAS 시험방법**
정재학* 추의성, 조인진
(주)성문시스템 한국분석과학연구소
- PT-070 Development and characterization of eco-friendly industrial materials using oyster shell**
Kihyun Kim¹, Jihyun Bae¹, Younghee Lee², Dongwon Chang², Seongho Lee¹
and Woonjung Kim^{1,*}
^{1,*}Department of Chemistry, Hannam University, ²OKMTech Co. Ltd
- PT-071 Characterization of ceria nanoparticles using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF)**
Jihyun Bae¹, Byeongjun Kim¹, Se Young Ahn², Seungho Lee¹ and Woonjung Kim^{1,*}
^{1,*}Department of Chemistry, Hannam University, ²MS Materials Co., Ltd.
- PT-072 Size and Characterization of High Viscosity Carbon Black Dispersion Using asymmetrical flow field-flow fractionation(AF4)**
Kisuck Sung¹, Jihyun Bae¹, Minwook Kim¹, Jongjin Jung¹, Seongho Lee² and Woonjung Kim^{1,*}
^{1,*}Department of Chemistry, Hannam University, ²Chemtree Co. Ltd. Research Center
- PT-073 Ligand effect of ZAIS[(ZnxAg_yIn_z)S₂] synthesis**
Yoonhyoung Lee, Hyunjung Seo, Soonhee Sul, Jongjin Jung*
Department of Chemistry, Hannam University
- PT-074 Determination of optimum ratio of Ag, In, Zn components in ZAIS nanocrystal synthesis for its high fluorescence performance at the specific emission wavelength**
Heekyoung Jung, Seungeon Yeon, Soonhee Sul, Jongjin Jung*
한남대학교 화학과

PT-075 Analysis of sonochemical parameters(power and concentration) effects on $(Zn_xAg_yIn_z)S_2$ synthetic mechanism

Jinee Choi, Seungeon Yeon, Soonhee Sul, Jongjin Jung[★]
한남대학교 화학과

PT-076 Study on elution behavior of non-spherical gold nanoparticles in asymmetrical flow field-flow fractionation(AsFIFFF)

Jangjae Lee¹, Jaeyeong Choi³, Joontaek Park², Emad S. Goda¹ and Seongho Lee^{1,★}
¹Department of Chemistry, Hannam University, Deajeon, 305-811, Korea republic,
²Dept. Of Chem. & Biochem. Engineering, Missouri University of Sci. & Technol. USA
³Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Lund, Sweden

PT-077 Synthesis of ZAIS($ZnS-AgInS_2$) nanocrystal and characterization using thermal field-flow fractionation (ThFFF) and Dynamic light scattering (DLS)

Eunhee Jeon¹, Dongsup Song¹, Hyunjung Seo¹, Jongjin Jung^{1,★} and Seunggho Lee^{1,★}
¹Department of chemistry, Hannam University

PT-078 연속주조법으로 제조한 구리합금의 미세조직 특성

Microstructure Characteristics of Copper Alloys Prepared by Continuous Casting Method
오석진^{1,★}, 오종명, 정경채, 국승우, 김기호, 김기환, 박정용
¹한국원자력연구원

표준: PT-079 ~ PT-087

PT-079 유해대기오염물질(HAPs) 중 휘발성유기화합물(14종) 100 nmol/mol 컬럼에 따른 분석영향평가
전신배^{1,2}, 김용두¹, 강지환¹, 이상일^{1,2,★}

¹한국표준과학연구원 가스분석표준센터, ²과학기술연합대학원대학교(UST) 측정과학과

PT-080 표준가스 제조 시 액체시료 주입장치에 따른 분석 영향 평가

강지환¹, 김용두¹, 이상일^{1,2,★}

^{1,★}한국표준과학연구원 가스분석표준센터, ²과학기술연합대학원대학교(UST) 측정과학과

PT-081 Quantification of cholesterol in beef and tuna powder by isotope dilution liquid chromatography-tandem mass spectrometry

Hwashim Lee^{1,★}, Sanga Lee², Seulgi Lee²

¹Division of Chemical and Medical Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science,
²Hanbat National University, Department of Chemistry

PT-082 Method validation for the purity assignment of L-phenylalanine by mass balance method

Hwashim Lee[★], Sujin Park

Division of Chemical and Medical Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science

PT-083 저농도 (10 μ mol/mol) 산소 질소 인증표준물질 개발: GC-TCD를 이용한 미량 가스 분석 방법

Developing low concentration of oxygen and nitrogen (10 μ mol/mol) certified reference material: Low concentration gas analysis using GC-TCD

안병수^{1,2}, 이진홍², 이진복¹, 문동민¹, 김진석¹, 홍기룡^{1,★}

¹한국표준과학연구원 가스분석표준센터, ²충남대학교 환경공학과

PT-084 GC-TCD를 이용한 네온 분자량 측정

Absolute Neon Molecular Weight Measurement using GC-TCD

김정은^{1,2}, 양인석², 김진석³, 문동민³, 홍기룡^{3,*}

¹과학기술연합대학원대학교 측정과학과, ²한국표준과학연구원 열유체표준센터,

³한국표준과학연구원 가스분석표준센터

PT-085 TD-GC/MS를 이용한 건강한 한국인의 호흡 가스 분석

김다운^{1,2}, 이성광¹, 김달호^{2,*}

¹한남대학교 화학과, ^{2,*}한국표준과학연구원 가스분석표준센터

PT-086 Halogen 규격(IEC 62321-3-2) 개정을 위한 분석법 개발

이우람¹, 류건영¹, 정재학^{2,*}

¹KOTIT시험연구원, ^{2,*}성문시스텍

PT-087 저농도 HF 표준가스의 안정성 향상

이선영, 나예슬, 이상호*

주식회사 리가스

원자력/방사선: PT-088 ~ PT-092

PT-088 자연동위원소분석 및 응용연구

Natural Radionuclide Analysis Method and its Application Study

윤윤열

한국지질자원연구원, 지질환경연구본부, 지하수연구센터

PT-089 The effect of increasing wet bulb temperature on HANARO

Sung-Woo Lee*, Won-Ho In, Ho-Young Choi

Korea Atomic Energy Research Institute

PT-090 EPMA를 이용한 U-Zr 핵연료의 반정량 분석

정양훈¹, 백승제, 안상복

한국원자력연구원

PT-091 열이온화질량분석기에 의한 조사핵연료 시료 중의 세륨 동위원소 비 측정

박양순*, 김정석, 하영경

한국원자력연구원 원자력화학연구부

PT-092 열이온화질량분석기에 사용되는 레늄 필라멘트의 불순물(Ce, Nd, Sm) 분석

박양순*, 김중윤

한국원자력연구원 원자력화학연구부

법과학: PT-093 ~ PF-096

PT-093 Identification and structural elucidation of a new synthetic cannabinoid in powder product found in an airmail package: DMBA-CHMINACA

Ji Hyun Lee¹, Aeran Jung¹, Han Na Park¹, Changhee Lee¹, Suresh Mandava², Sung-jun Lim³, Byoung-bok Lim³, Sung-Kwan Park¹, Jongkook Lee^{2,*}, Hoil Kang^{1,*}

¹Advanced Analysis Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety

²College of Pharmacy, Kangwon National University

³Laboratory and Scientific Service, Incheon Airport Customs, Korea Customs Service

PT-094 SPME-GC/MS 를 이용한 문서 내 잉크 작성 시기 분석

김은영, 손경진, 강동영, 고원건*, 김민정¹

연세대학교 공동기기원, ¹대검찰청 과학수사담당관실

PT-095 Blood and urinary pharmacokinetics of detomidine in horse

Youngbeom Kwak¹, Man Bae Huh^{1,*}, Hyun Chul Lee¹

¹Korea Racing Laboratory, Korea Racing Authority

PT-096 Decomposition effects on beta-hydroxybutyrate levels in postmortem spleen

Ah Ram Choi^{1,2}, Sang Chul Huh¹, Woo-Yong Park¹, Jin Mee Jung¹, Kyoung-Min Kim¹, Su Hyeon Lee¹, Jong Shin Park¹, Nam Yee Kim¹, Ji-Sook Min³, Hyun Kyoung Ju^{1,*}, Sunyoung Bae^{2,*}

^{1,*}Seoul institute, National Forensic Service,

^{2,*}Department of Chemistry, Seoul Women's University,

³Department of chemical analysis, National Forensic Service

11월 16일(금)

식품/농화학: PF-001 ~ PF-027

PF-001 과자류 중 지방산 유래 유해물질 분석법 연구

황소정, 양세희, 정유경, 김형수, 이동호*

식품의약품안전평가원 식품위해평가부 신종유해물질팀

PF-002 Development of simultaneous analysis methods for anti-gout compounds illegally adulterated in dietary supplements by UPLC and LC-ESI-MS/MS

Nam-Sook Kim, Sun-Hee Moon, Ji-Hee Kim, Sung-Kwan Park and Hoil Kang*

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

PF-003 Ergot alkaloids monitoring in food in local market by LC-MS/MS

Bom Nae Lee, Eun A Chong, So Young Chun, Sheen Hee Kim, Gil Jin Kang

Food Contaminants Division, National Institute of Food & Drug Safety Evaluation, Ministry of Food and Drug Safety

PF-004 Monitoring of illegally added drugs in adulterated foods

임무송*, 김은정, 임지은, 신호숙, 최현철

경인지방식품의약품안전청 시험분석센터 유해물질분석과

PF-005 Simultaneous analysis of multi residue pesticides in agricultural commodities by Gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS/MS)

Hye Soon Kang, Eun Jeong Kim, Moo Song Lim, Dong Hyuk Seo, Eun Jung Jang, Young-Seok Oh, Yonhun Lee, Hyun-cheol Choi^{1,*}

¹Division of Hazardous Substances Analysis, Gyeongin Regional Office of Food and Drug Safety, Incheon 22133, Korea

PF-006 Monitoring of Veterinary Drug Residues in Fishery Products by Liquid Chromatography-Mass Spectrometry

Yong Woo Shin*, Myung-Hee Kang, Mi-Ran Kim, Jin-Seon Shin, Mi-Ok Kim, Il-young Ahn, Yooyoung Jung, Ji-Hye Shin, Hyeon-Cheol Choi

Hazardous Substances Analysis Division, Gyeongin Regional Office of Food and Drug Safety, Incheon 22133, Republic of Korea

PF-007 Analytical Method Development for the Determination of Astaxanthin by LC-MS/MS in Dietary Supplements

Ji Eun Park, Mi Hyune Oh*, Yang Sun Kim, Jin Hee Lee, Eun Joo Koo, Eun Hee Keum, Mee Hyun Cho, Mi Sook Kim, Ga Young Jung, Hye Young Lee

Imported Food Analysis Division, Gyeongin Regional Food and Drug Administration, Ministry of Food and Drug Safety

PF-008 Monitoring of illegal adulterants and drugs in direct oversea-purchased foods

Jung Eun Lee*, Woo Jin Cho, So Young Won, Do Hyeong Kim, In Seon Kim, Jae Hee Hyun, Kyeong Wook Kim, Jae I Kim, Dong Sul Kim, Woo Seong Kim

Center for Food & Drug Analysis, Busan Regional Korea Food and Drug Safety

- PF-009 Development of a new multiresidue analytical method with LC-MS/MS for detection of veterinary drugs in fishery products**
Eunhye Lee, Sunhee Park, Jaewan Park, Youngji Jung, Hyunjeong You, Joonshik Park, Sookhee Ha, Jaeyoung Shim, Kwangsoo Yoo, Gyeongyeol Kim, Juyoung Hwang, Miran Noh, Kwangsoo Lee, Dongsul Kim and Changhee Lee*
 Center for Food and Drug Analysis, Busan Regional Office of Food and Drug Safety, Ministry of Food and Drug Safety, Republic of Korea
- PF-010 저장기간 및 품종에 따른 쌀 중 솔비톨 변화량 분석**
 박섯별, 조지미, 박희일, 최현주, 이현선, 이민경, 이동필, 이성우*, 김재호
 국립농산물품질관리원 전남지원 품질관리과
- PF-011 Development and Validation of Pyribencarb and Pyriofenone using LC-MS/MS in Fruiting and Vegetable**
Hyo Young Kim, Chai Uk Lim, Su Min Hong, Dong-Ho Kim, Hyunjeong Cho*
 Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service
- PF-012 Rapid Determination of Mandestrobin, Norflurazon using Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry in Fresh Produce**
Hyunjeong Cho*, Hyo Young Kim, Chai Uk Lim, Su Min Hong, Dong-Ho Kim
 Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service
- PF-013 Survey on the Residues of Natural Growth Promoter in Livestock Manure Compost by using LC-MS/MS**
Hee-Chang Shin^{1,*}, Song-Yi Gu¹, Dae-Jung Kim¹, Yong-Kyoung Kim¹, Jae-Min An², Kyong-Suk Hong¹ and Dong-Ho Kim¹
¹Division of Safety Analysis, Experiment & Research Institute National Agricultural Products Quality Management Service,
²Division of Quality Management, Gyeongbuk Provincial Office National Agriculture Products Quality Management Service
- PF-014 Simultaneous Analysis and Measurement of Uncertainty Estimation of Six Isoflavones in Cheonggukjang by LC-MS/MS**
Mi Jin Lee, Jeong Min Lee, Soo Min Park, Soon Kil Cho, Jong Sung Ahn, Ho Jin Kim*
 National Agricultural Products Quality Management Service
- PF-015 Development of an IAC and HPLC-FLD method for the detection and quantification of three group mycotoxins in animal feed**
Jeong Min Lee, Mi Jin Lee, Soo Min Park, Soon Kil Cho, Jong Sung Ahn, Ho Jin Kim*
 National Agricultural Products Quality Management Service
- PF-016 건식회화를 이용한 식품의 전처리법 연구**
 김은지¹, 최성화¹, 이민영¹, 이유리¹, 최은미¹, 박경수^{1,*}
¹한국과학기술연구원 특성분석센터
- PF-017 식품의 매질 별 Sn, Al 분석법 비교 연구**
 최성화¹, 이민영¹, 이유리¹, 김은지¹, 최은미¹, 박경수^{1,*}
¹한국과학기술연구원 특성분석센터

- PF-018 LC-MS/MS를 이용한 식약 공용 원료의 지표성분 확인**
 김형주*, 안수진, 이아영, 민승식, 인상환
 국립과학수사연구원 법독성학과
- PF-019 Sorbic acid, benzoic acid and propionic acid contents of aquatic products distributed in Korean market**
 장광주, 김단비, 유미영, 이상희*
 한국식품연구원
- PF-020 Evaluation of assay conditions for the performance of Enzyme Linked Aptamer Assay**
 Soyeon Kwon¹, Insook Rhee^{2,*}
¹Department of Chemistry, Seoul Women's university
- PF-021 High-resolution NMR spectroscopy for classification of various beverages**
 Ji-Ho Jeong, Ji-Sun Kim, Hyun-Jun Jang and Yongae Kim*
 Department of Chemistry, Hankuk University of Foreign Studies
- PF-022 Effect of black pepper (*Piper nigrum* L.) extract on the metabolic activity of turmeric (*Curcuma longa* L.) extract in human lung cancer cells: analysis by UPLC-ESI-Q-TOF/MS**
 조현기, 정원태, 임흥빈*
 충북대학교 특용식물학과
- PF-023 담배의 물리적 특성에 따른 타르 및 니코틴 양**
 임현희^{1*}, 신호상²
¹공주대학교 약물남용연구소, ²공주대학교 환경교육과
- PF-024 Characterization of anthocyanin in red wine using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) and HPLC**
 Dongsup Song¹, Daniel Osorio², Jaeyeong Choi³, J. Mauricio Peñarrieta^{2,*}, Lars Nilsson^{3,*} and Seungho Lee^{1,*}
¹Department of Chemistry, Hannam University, Korea
²Carrera de Ciencias Químicas, San Andrés University, La Paz, Bolivia
³Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden
- PF-025 Fluorescence-labelling for analysis of proteinaceous matter in food using asymmetrical field flow-fractionation (AsFIFFF) coupled with multiple detectors**
 Meiyu Zhang¹, Jaeyeong Choi², Lars Nilsson^{2,*} and Seungho Lee^{1,*}
¹Department of Chemistry, Hannam University
- PF-026 Determination of conformation of a polysaccharide (Gum Acacia) with asymmetrical flow field-flow fractionation coupled online with light scattering detectors**
 Meiyu Zhang¹, Bobae Kim¹, Jaeyeong Choi², Lars Nilsson^{2,*} and Seungho Lee^{1,*}
¹Department of Chemistry, Hannam University,
²Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University
- PF-027 Characterization of non-solvent precipitated starch using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multiple detectors**
 Catalina Fuentes^{a,b*}, Hisfazilah Saari^a, Jaeyeong Choi^c, Seungho Lee^c, Malin Sjöö^a, Marie Wahlgren^a and Lars Nilsson^a
^aFood Technology, Engineering and Nutrition, Faculty of Engineering LTH, Lund University,

PO Box 124, S-221 00 Lund, Sweden.

^bSchool of Chemistry, Faculty of Pure and Natural Science, Universidad Mayor de San Andres (UMSA), PO Box 330, Cota Cota 27 St., La Paz, Bolivia

^cDepartment of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Republic of Korea

일반: PF-028 ~ PF-089

PF-028 Separation efficiency of glycogen and pullulan in asymmetric flow field-flow fractionation: Difference between conventional focusing and hydrodynamic-relaxation frit inlet

Catalina Fuentes^{a,b*}, Jaeyeong Choi^{a,c}, Claudia Zielke^a, J. Mauricio Peñarrieta^b, Seungho Lee^c and Lars Nilsson^a

^aDepartment of Food Technology, Engineering and Nutrition, Faculty of Engineering, Lund University, PO Box 124, S-22100 Lund, Sweden,

^bSchool of Chemistry, Faculty of Pure and Natural Science, Universidad Mayor de San Andres (UMSA), PO Box 330, Cota Cota 27 St., La Paz, Bolivia,

^cDepartment of Chemistry, Hannam University, Daejeon 3054, Republic of Korea.

PF-029 Optimization of technical methods for applying new technique to biomolecule separation: Electrical Asymmetrical Flow Field-Flow Fractionation (EAF4)

Jaeyeong Choi¹, Catalina Sandra Fuentes Zenteno¹, Mats Leeman², and Lars Nilsson¹

¹Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden

²SOLVE Research and Consultancy AB, Lund, Sweden

PF-030 Study on stability and structure of protein-based drug using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AF4-MALS) and small-angle X-ray scattering (SAXS)

Jaeyeong Choi¹, Christopher Söderberg², Vilhelm Ek², Marie Wahlgren¹, and Lars Nilsson¹

¹Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden,

²Research Institutes of Sweden (RISE), Stockholm, Sweden,

³Swedish Orphan Biovitrum AB (SOBI), Stockholm, Sweden

PF-031 벤토나이트 함유 크림제형 헤나 천연염모제의 점도변화 및 염색효과에 미치는 영향 연구

박아림, 강이영, 설순희, 연승연, 서현정 정종진*

한남대학교 화학과

PF-032 ZAIS[Zn_xAg_yIn_z]S₂]-Herceptin complex Fluorescent Nanoparticles for target specific imaging

Hyun Jeong Seo¹, Soon Hee Seol¹, Yoon Hyoung Lee¹, Joung Kyu Park², Seung-jae Lee², Younggyu Kim³, Jongjin Jung^{1,*}

¹Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, Korea,

²Korea Research Institute of Chemical Technology (KRICT), Daejeon, Korea,

³LuMiMac, seoul, Korea

PF-033 Analysis of sonochemical parameters and various ligands effects on (Zn_xAg_yIn_z)S₂ synthetic mechanism

Seung Eon Yeon¹, Soon Hee Sul², Hyun Jung Seo¹, Joung Kyu Park², Jong Jin Jung¹

¹Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, Korea (the Republic of Korea)

²Korea Research Institute of Chemical Technology (KRICT), Daejeon, Korea (the Republic of Korea)

PF-034 Study on size variation of liposomes under osmotic pressure using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFFFF) - multi-angle light scattering (MALS)

김민욱¹, 김운중, 이승호, 정종진*

한남대학교 화학과

PF-035 SERS combined with electrochemical modulation for gallbladder diseases identification using Au nanodendrites/screen printed electrode

Tung Duy Vu, Eunjin Jang, Chang-Hwan Eum and Hoeil Chung*

Department of Chemistry, Hanyang University

PF-036 Profiling of bile acids and histamine in gastric juice by UHPLC-MS/MS combined with polarity tuning derivatization : diagnosis of gastric disease

Kean-hee Ko, Wonwoong Lee, Jinhee Um, Jongki Hong*

College of Pharmacy, Kyung Hee University

PF-037 High-Sensitive Quantitative Detection of Alpha-Fetoprotein in Nanoscale Region by Superlocalization TIRS Nanoscopy

Seungah Lee, Seong Ho Kang*

Department of Applied Chemistry, Kyung Hee University

PF-038 단백질 분석을 위한 종이 분무 이온화 질량분석법 최적화

박태민, 차상원*

한국외국어대학교 화학과

PF-039 Home built double resonance probes for non-spinning Solid-state NMR

Ji-Ho Jeong, Ji-Sun Kim and Yongae Kim*

Department of Chemistry, Hankuk University of Foreign Studies

PF-040 Headspace in-tube microextraction of volatile compounds by capillary electrophoresis-electrospray ionization-mass spectrometry

Sunkyung Jeong, Doo Soo Chung*

Seoul national university, Department of chemistry, Seoul, 08826, Korea

PF-041 In vitro evaluation for metabolic stability and CYP inhibitory activity of asperchalasine A using liquid chromatography-tandem mass spectrometry

Young Seok Ji¹, Min Sun Choi¹, Jun Sang Yu¹, Yonghui Zhang², Hye Hyun Yoo^{1,*}

^{1,*}Department of Pharmacy, Hanyang University, Korea,

²Department of Science and Technology, Huazhong, China

PF-042 Characterization of *in vitro* metabolites of 5F-ADB: Detection of their metabolites in human liver microsomes by LC/QTOF MS

Gi Beom Kim¹, In Sook Kim¹, Jeong Hoon Park¹, Eun Kyu Lee¹, Moonhee Jang²,

Wonkyung Yang², Hye Hyun Yoo^{1,*}

¹Institute of Pharmaceutical Science and Technology and College of Pharmacy, Hanyang University, Ansan, Gyeonggi-do 15588, Korea,

²National Forensic Service, 139 Jiyang-ro, Yangcheon-gu, Seoul 158-707, Republic of Korea

- PF-043 Characteristic analysis of the sweet-tasting protein brazzein expressed in transgenic tobacco plants**
Seon Yeong Jo, Hyo-Eun Choi, Ji-In Lee, Kwang-Hoon Kong*
 Laboratory of Biomolecular Chemistry, Department of Chemistry, College of Natural Sciences, Chung-Ang University
- PF-044 Analysis and optimization of expression conditions for mass production of a sweet protein in *Kluyveromyces lactis***
Se-Woong Park, Jae-Seok Kang, Sung-Jun Lee, Kwang-Hoon Kong*
 Laboratory of Biomolecular Chemistry, Department of Chemistry, Chung-Ang University
- PF-045 감미단백질 브라제인의 루프 부분에서 파생된 펩타이드의 기능 분석**
 김한슬, 조현주, 김수연, 공광훈*
 중앙대학교 화학과, 생명분자화학연구실
- PF-046 Synthesis of new calix[4]arene derived chiral stationary phase for the resolution of chiral amino acid and amino alcohol**
 김규리¹, 허규성¹, 유정재¹, 류재정^{2,*}
¹경북대학교 화학과, ^{2,*}경북대학교 화학교육과
- PF-047 The influence of Ultrasonication on Chiral Separation by High Performance Liquid Chromatography(HPLC)**
Jae Hwan Lee¹, Jae Jeong Ryu^{2,*}
¹Department of Science Education, Graduate School, KyungPook National University,
^{2,*}Science Education, KyungPook National University
- PF-048 디스크 확산법을 이용한 약용식물(양제근, 어성초) 추출물의 *Staphylococcus aureus*, *Candida albicans* 에 대한 항균 능력 측정**
 신태섭, 이학수, 조남준*
 한국기술교육대학교 에너지신소재화학공학과
- PF-049 *In-vivo* isotopic glucose labeling of glycan in fungi using metabolic isotope labeling of polysaccharides with isotopic glucose for quantitative mass spectrometry**
Soo-Hyun Choi, Ji-Yeon Kim, and Jae-Min Lim*
 Changwon National University, Changwon 51140, South Korea
- PF-050 DLLME-GC/MS를 이용한 소변 중 파라벤 4종과 20종의 페놀 동시분석법**
 이정이¹, 신호상^{2,*}
¹공주대학교 환경과학과, ^{2,*}공주대학교 환경교육과
- PF-051 Ionic liquid matrix in matrix-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry of iso-maltooligosaccharide**
 한솔, 김다희, 김여선, 박소영, 원유광, 이다빈, 최혜민, 김정권*
 충남대학교 화학과
- PF-052 Effect of graphite matrix concentration on sucrose analysis using MALDI-MS**
 박소영, 이다빈, 김여선, 원유광, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권*
 충남대학교 화학과

- PF-053 Effects of drying process and matrix on qualitative analysis of protein using MALDI-MS**
 최혜민, 이다빈, 박소영, 원유광, 한솔, 김여선, 김다희, 김정권*
 충남대학교 화학과
- PF-054 Effects of temperature and acetonitrile amount on protein tryptic digestion with microwave irradiation**
 김여선, 이다빈, 박소영, 원유광, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권*
 충남대학교 화학과
- PF-055 Effects of microwave irradiation time on Microwave-Assisted Weak Acid Protein Hydrolysis**
 김여선, 이다빈, 박소영, 원유광, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권*
 충남대학교 화학과
- PF-056 Differentiation of disaccharide isomers by MALDI-TOF MS analysis**
 이다빈, 김여선, 한솔, 최혜민, 박소영, 원유광, 김다희, 김정권*
 충남대학교 화학과
- PF-057 A Study on Synthesis of Molecularly Imprinted Fiber for Di-2-ethylhexyl phthalate Extraction**
 Soyoung Ahn, Sunyoung Bae*
 Department of Chemistry, Seoul Woman's University
- PF-058 Analysis of volatile compounds in Maehwa tea by Gas Chromatography**
 Sehyun Kim, Sunyoung Bae*
 Department of Chemistry, Seoul Women's University
- PF-059 Optimization of 5-hydroxymethyl-2-furaldehyde Adsorption Conditions Using Molecularly Imprinted Polymer**
 Hyeyoung Jung, Sunyoung Bae*
 Department of Chemistry, Seoul Women's University
- PF-060 A Study on Selective Recognition of Zn on Ion Imprinted Polymer (ZIIP)**
 Yelin Lee, Soyoung Ahn, Sunyoung Bae*
 Department of Chemistry, Seoul Women's University
- PF-061 Direct Competitive Enzyme-Linked Immunosorbent Assay for Determination of Symmetric Dimethylarginine**
 Jimin Oh, Mihyun Kim, Insook Rhee*
 Department of chemistry, Seoul Women's University
- PF-062 Normalization of $\delta^{18}\text{O}$ value of drinking water against VSMOW2-SLAP2 scale with uncertainty assessment**
 Taewan Kim¹, Jeongsoon Lee^{2,*}, and Jeong Sik Lim^{2,*}
¹Science of Measurement, University of Science and Technology (UST), ²Center for gas analysis, Korea Research Institute of Standards and Science (KRISS)
- PF-063 Non-Voigt Line Shape 함수 프로그래밍 개발에 대한 유효성 평가 및 1.39 μm 영역 수증기의 분광학적 특성 평가**
 김예라^{1,2}, 이정순^{1,2}, 박미연^{1,2}, 김상우¹, 김태완^{1,2}, 김가해¹, 임정식^{2,*}
¹한국표준과학연구원 가스분석센터, ²과학기술연합대학원대학교(UST)

- PF-064 GC/MS에 의한 PNG 중 고탄화수소 분석방법 개선 연구**
 윤은규¹, 김용두², 배현길², 우진춘², 이강진^{1*}
¹한국가스공사 가스연구원 기술지원센터, ²한국표준과학연구원 삶의질표준본부
- PF-065 기능성 소재 합성을 통한 난연섬유 개발 및 분석**
 이진경¹
¹한국화학융합시험연구원
- PF-066 자동차 도장 물성과 그에 따른 시험 방법**
 김이혁¹
¹한국화학융합시험연구원
- PF-067 Discrimination of geographic origin from Paper mulberry bast fiber by NIR and MIR spectra data coupled with PLS-DA**
 Kyung Ju Jang, In Hee Go, So Yoon Jung, Seon Hwa Jeong^{*}
^{*}Restoration Technology Division, National Research Institute of Cultural Heritage
- PF-068 수질 중 다환방향족 탄화수소류 벤조(a)피렌의 숙련도 시험용 개발**
 최원석¹, 이선홍¹, 김윤석^{1*}
^{1*}K-water 융합연구원 수질연구센터
- PF-069 REACH에 기반한 다성분 물질 확인 사례 연구**
 Case study on substance identification of multi-constituent substance based on REACH
 박광서, 최은경^{*}
 한국생산기술연구원 환경규제기술센터
- PF-070 Qualitative analysis of polyol in Polyurethane foam using Matrix-assisted laser desorption/ionization-Time of flight (MALDI-TOF)**
 Yoo Yeongsuk¹, Lee Jaeyong², Lee Seunghwa², Lim Mi Ja², Chung Joo Hee³,
 Ahn Yun Gyong³, Cho Kun^{1*}
^{1*}Biomedical Omics Group, Korea Basic Science Institute,
²Research and Business development, Kumho petrochemical,
³Seoul Center, Korea Basic Science Institute
- PF-071 1-Propanol의 28일간 분석모니터링 및 Mice을 이용한 반복흡입독성 연구**
 임철홍^{*}, 조은상², 이성배^{1*}, 박찬혁¹, 박가영¹
¹산업안전보건연구원 흡입독성연구센터 흡입시험연구부
²산업안전보건연구원 흡입독성연구센터 병리검사부
- PF-072 바이오알코올 혼합연료에 따른 특성 분석 연구**
 김신^{1*}, 이돈민¹, 이미은¹
¹한국석유관리원 석유기술연구소
- PF-073 석·연탄 품질 검사 자료로 바라본 한국의 무연탄**
 서의영^{*}, 권순동, 조진선, 서지혜
 한국광해관리공단 분석센터
- PF-074 A quantification and mechanism study on anhydride in the polyimide film via one and two dimensional NMR technique**
 Euiyoung Shin, Seunghwan Paek, Hyun Namgoong
 Analysis & Evaluation Research Team, R&D Division, KOLON INDUSTRIES,INC

- PF-075 Identification and Simultaneous Quantification of Marker Compounds in Herbal Extract using LC-MS/MS**
Sun Ho Chung^{*}, Woo Jung Kim, Jun Ho Shin, Han Na Cha, Jong Suk Lee
 Department of Infrastructure Support Team, Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator(GBSA)
- PF-076 LC-MS based rapid secondary metabolite profiling and its anti-inflammatory activities**
Jun Ho Shin¹, Sun Ho Chung¹, Hanna Cha¹, Woo Jung Kim¹, Young Ok Kim², Jun Sik Lee³
 and Jong Suk Lee^{1,*}
¹Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator,
²Biotechnology Research Division, National Institute of Fisheries Science (NIFS),
³Department of Life Science, Immunology Research Lab, BK21-plus Research Team for Bioactive Control Technology, College of Natural Sciences, Chosun University
- PF-077 다층 Film 전처리 방법에 따른 전자주사현미경 단면 관찰**
한재철¹, 양영모¹
¹SKC R&D 센터
- PF-078 Analysis of content of quinoline in tar oil**
Hye-mi Kim^{*}
 Analysis Research Center, KCC Central Research Institute
- PF-079 Analysis of Cu metal oxidation and study on adhesion characteristics of Cu/EMC interface**
Han-jung Cho, Hyun-wook Kong
 Analysis Research Center, KCC Central Research Institute
- PF-080 A study on the factors affecting adhesion mechanism of hetero-polymersystems by adhesion failure analysis**
So-Hyun Kim¹, Jong-Woo Lee¹ and Kyu-Ho Kim^{1,*}
¹Analysis research center, KCC Central Research Institute, Yongin 16891, Korea
- PF-081 Study of the mechanism of can swelling of urethane hardener using NMR Spectroscopy and TG-MASS**
Jin-Kyoung Kim¹, So-Hyun Kim¹ and Kyu-Ho Kim^{1,*}
¹Analysis research center, KCC Central Research Institute, Yongin 16891, Korea
- PF-082 유도체화를 통한 신경전달물질의 고성능 액체 크로마토그래피-질량분석기 동시분석법 개발**
조요셉^{1,2}, 임혜인^{3,4}, 유제욱², 윤상선², 손정현^{*1,5}
¹한국과학기술연구원 도핑컨트롤센터, ²연세대학교 의과학과,
³한국과학기술연구원 치매DTC융합연구단, ⁴과학기술연합대학원대학교 생체신경과학과,
⁵과학기술연합대학원대학교 생물화학과
- PF-083 인공지능을 이용한 도핑 진단법 개발 (iD²)**
박진우^{1,2}, 손정현^{1,3,*}
¹한국과학기술연구원 도핑컨트롤센터, ²한양대학교 생명과학과,
³과학기술연합대학원대학교 한국과학기술연구원 스쿨
- PF-084 혈청 시료 중 단당류 분석법 개발**
박진우^{1,2}, 한보영^{1,3}, 김병주⁴, 정지선⁵, 권오승^{1,6}, 손정현^{1,6,*}
¹한국과학기술연구원 도핑컨트롤센터, ²한양대학교 생명과학과,

³연세대학교 의과학과, ⁴한국표준과학연구원 분석화학표준센터,

⁵한국표준과학연구원 바이오분석표준센터, ⁶과학기술연합대학교 한국과학기술연구원 스쿨

PF-085 Urine metabolomics in male pattern baldness; androgens and bile acids profiling by LC-MS/MS

Haksoon Kim^{1,2}, Jeongae Lee¹, Han Bin Oh², Bong Chul Chung¹

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

²Department of chemistry, Sogang University

PF-086 Performance characterization of bimodal cation exchange/hydrophilic interaction LC-ESI/MS/MS by mobile phase composition

Seunghwa Lee^{1,2}, Sang Moon Han^{1,2}, Byungjoo Kim³, Oh-Seung Kwon¹, Ki Hun Kim^{1,*},
Jaeick Lee^{1,*}

¹Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology

²Department of Chemistry, Research Institute for Natural Sciences, Korea University

³Analytical Chemistry Center, Division of Metrology for Quality Life, Korea Research Institute of Standards and Science

PF-087 Identification of in-vitro metabolites of bolasterone (7 α ,17 α -dimethyltestosterone) by ultra high-performance liquid chromatography/ orbitrap mass spectrometer

Anca Raluca Muresan^{1,2}, Khandoker Asiqur Rahaman^{1,2}, Hophil Min¹, Hyein Kim¹, and
Oh-Seung Kwon^{1,2,*}

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

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

PF-088 Determination of Arsenic in Heavy Oil by ICP-MS

조금중, 최제남, 성정문

Analysis Lab, Platform Tech. R&D Center, Institute of Technology Innovation, SK Innovation

PF-089 Analysis of Cashew Nuts Shell Liquid (CNSL) contents from Power Bio-Fuel Oil using Metal capillary GC Column

Don-Min Lee^{1,*}, In-Ha Hwang¹, Jung-Min Lee¹

¹Research Institute of Petroleum Technology, Korea Petroleum Quality & Distribution Authority, Chungcheongbuk-do, 28115, Korea

대학원생 구두 & 포스터 발표: PF-090 ~ PF-096

PF-090 Nonspecific inhibition of PF543 on Serine Palmitoyltransferase Activity Detecting by LC-MS/MS

Maftuna Shamshiddinova¹, Dong-Jae Baek², Kyung-Ran Min¹, Khilola Nazrullaeva¹ and
Yong-Moon Lee¹

¹College of Pharmacy, Chungbuk National University, Cheongju, Korea

²College of Pharmacy, Mokpo National University, Mokpo, Korea

- PF-091 Determination of 15 endocrine disruptors in human saliva using GC-MS**
VU THI HOANG VAN^{1,*}, SHIN HO-SANG²
^{1,*}Kongju National University, Department of Environmental Science,
²Kongju National University, Department of Environmental Education
- PF-092 Chemical Compositions and Emission Characteristics of Atmospheric Aerosols in relation to Meteorological Conditions at Background Site of Korea during 2017**
Lyun-kyung Kim, Jung-Min Song, Jun-Oh Bu, Sook-Young Park, Hyo-Sun Yang, Chang-Hee Kang^{*}
 Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University
- PF-093 Composition and Pollution Characteristics of Ionic Precipitation Components in Jeju Island**
Jun-Oh Bu, Soo-Young Kim, Hee-Ju Kang, Geon-Yoon Kim, Jung-Min Song, Chang-Hee Kang^{*}
 Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University
- PF-094 Determination of curcumin in rat plasma using UPLC-MS/MS and its application to a pharmacokinetic study of a novel curcumin formulation**
Jun Sang Yu¹, Yu Mee Han², Hee Joung Joung³, Hye Hyun Yoo^{1,*}
¹Department of Pharmacy, Hanyang University, Ansan, Korea.
²Dongoh Life Science Co., Ltd. #301B Venture Center, 303 Cheonjam-ro Wansan-gu, Jeonju-si, Jeollabuk-do, Korea
³Kyungnong Co., Ltd., 13F, Dongoh B/D., 28 Hyoryeong-ro77gil, Secho-gu, Seoul, Korea
- PF-095 Rapid and accurate simultaneous determination of natural toxic pyrrolizidine alkaloid in medicinal plant by UPLC-ESI-Q-TOF**
Won Tae Jeong, Hyun Ki Cho, Hyung Ryeol Lee, Ki Hoon Song and Heung Bin Li^{*}
^{*}Department of Industrial Crop Science & Technology, Chungbuk National University Cheongju, Chungbuk 28644, Korea
- PF-096 Surface homogeneity enhancement of 2,5-Dihydroxybenzoic acid matrix using on-target recrystallization by acetonitrile droplet in MALDI-MS dried-droplet sample preparation**
원유광, 김여선, 이다빈, 박소영, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권^{*}
 충남대학교 화학과

Symposium I

- 식품의 최근 분석 동향 -

Addressing the challenges in the analysis and characterization of food macromolecules and colloids with asymmetrical flow field-flow fractionation (AF4)

Lars Nilsson*

Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden

Biomacromolecules and colloidal particles play an important role for the properties of many foods. They influence thickening and gelling properties, texture and colloidal stability in, for instance, emulsions and foams. The aggregation behavior and structure of aggregates can also influence health benefits of foods. In this case, the benefits are often associated to the ability to form viscous slurries in the gut and how intermolecular interaction and aggregation influences the fermentation by the microbiota in the colon.

To be able to understand and ultimately design functionality in foods, adequate characterization work is necessary. The characterization of such biomacromolecules and colloidal particles is typically challenging due to the large sizes/molar masses involved as well as polydispersity. One of the few techniques that is suitable is asymmetrical flow field-flow fractionation (AF4). When coupled to suitable detectors, such as multi-angle light scattering (MALS), refractive index (dRI) and UV, size and molar mass distributions can be obtained. Furthermore, the method can give an insight into chemical and conformational properties over the size distribution.

In this presentation, it is shown how AF4 can be a powerful tool in the field of food technology. Examples are given from several food applications involving proteins, polysaccharides and lipids.

SP I -2

Analytical methods of prohibited veterinary drugs and illegal compounds in food

Mi-Hyun Ka

Korea Health Supplement Institute

★Corresponding author: mhka@khsa.or.kr

With the increasing of imported foods and health functional foods, analysis of food safety has become imperative. Ministry of food and drug safety (MFDS) regulated the use of any veterinary drugs and Illegal compounds. Also, They prohibited those for all types of food products. Any veterinary drugs (18 kinds) have been prohibited from manufacture or import (including metabolites) due to identified safety and effectiveness problems shall not be detected. Analysis was performed by high performance liquid chromatography diode array detector (HPLC/DAD) and liquid chromatography with electrospray ionization tandem mass spectrometry (LC-ESI-MS/MS). Illegal Compounds are such as erectile dysfunction drugs (53 kinds), anti-obesity drug (5 kinds), antidiabetics (4 kinds), other drug compounds (11 kinds) and their analogues. Analysis was achieved using HPLC/DAD and was confirmed with LC-ESI-MS/MS.

key word: veterinary drugs, Illegal compounds, analytical method, foods

원소분석용 식품 CRM 개발 및 활용

허성우¹, 황의진¹, 김숙현¹, 이경석¹, 민형식¹, 한명섭¹, 임영란¹, 임명철¹, 임용현^{1*}

¹한국표준과학연구원(KRISS) 분석화학표준센터

*Corresponding author: yhyim@kriss.re.kr

한국표준과학연구원(KRISS)에서는 식품 중 원소분석 및 영양성분 및 잔류 농약 분석용 인증표준물질(CRM, certified reference material)을 개발하여 보급하고 있다. 이들 CRM은 실험실에서 관련 물질 중 특성 성분의 함량을 정확하게 분석하고자 할 때 분석기기의 교정과 분석방법의 신뢰성 평가에 사용할 수 있다. 지금까지 한국표준과학연구원에서 곡류, 어패류, 채소류, 음료, 유제품, 육류 등 다양한 식품에 대한 CRM을 50여 종을 개발 보급하였거나, 개발 중이다. 이 중 쌀(KRISS CRM 108-01-004), 콩(108-01-005), 밀가루(108-01-006), 조제분유(108-02-002, 108-02-004), 굴(108-04-003, 108-04-004), 다랑어(108-04-002), 미나리(108-05-001), 배추(108-05-002, 108-05-007), 톳, 인삼(108-10-006), 김, 찻잎(108-10-009) 버섯(108-10-011), 마늘(108-10-016), 영양제(108-10-012) 등 많이 섭취하는 식품들에 대한 원소 분석용 CRM이 23 종이 있다. 한국표준과학연구원은 국가 측정표준 대표기관으로 품질체계 하에서 ISO guide 34(ISO 17034) 및 guide 30 series에 의거하여 제조 및 인증 절차를 확립하고 이를 통해 CRM을 개발하고 있다. 후보 물질들은 실험실에서 사용하기에 적합한 균질도와 안정도가 확보 될 수 있도록 제조되었다. 인증값은 최상위 측정법인 동위원소희석 유도결합플라즈마 질량분석법(ID-ICP-MS, Isotope dilution inductively coupled plasma mass spectrometry)를 적용하여 결정하였으며, 이 방법을 적용하기 어려운 단일동위원소 물질(As, Mn 등)의 경우 내부물질이 결합된 표준물질첨가법(GSAM-IS, gravimetric standard addition method with internal standard) 또는 중성자방사화분석법(NAA, Neutron Activation Analysis)을 적용하였다. 이러한 인증 능력은 국가표준기관 간 비교(key comparison)를 통해 국제적 동등성이 증명되었으며 국제도량형국 공식 database에 등재되어 있다.

모든 인증값은 ISO guide에 따라 10개 이상의 시료로부터 산출하였으며, 한국표준과학연구원에서 개발 유지하는 단일원소 표준용액을 통해 국제단위계(SI)에 측정소급성(measurement traceability)를 가지고 있다. 측정불확도는 GUM(guide to expression of uncertainty in measurement, JCGM 100:2008)에 따라 산출하였다.

이렇게 개발된 CRM들은 여러 경로를 통해 보급이 되고 있으며, 보급 전에 KOLAS, 식품의약품안전처(식약처), 농산물품질관리원, APLAC-APMP에서 진행되는 숙련도 시험(Proficiency Testing, PT)을 통해 보급 활용되기도 하였다. 2002년부터 관련 KOLAS PT를 주관한 바 있으며, 2007년 이후 지금까지 숙련도 시험 표준시료 및 기준값을 식약처에 제공하고 있으며 최근에는 APLAC-APMP Joint PT를 수행하여 국내뿐만 아니라 국제적으로 시험검사기관의 신뢰성 제고에 이바지 하였다.

건강기능식품 기능성 원료의 중금속 실태조사

양중석^{1,*}, 황보람¹, 양지연²

¹한국과학기술연구원 천연물연구소, ²연세대학교 환경공해연구소

*Corresponding author: inenviron@kist.re.kr

건강기능식품의 안전성 확보와 건강한 유통 및 판매를 도모하여 국민의 건강증진과 소비자 보호에 이바지하기 위해서는 적절한 기준규격이 존재해야 한다. 특히 인구의 고령화와 소득 수준 향상으로 건강기능식품의 소비가 꾸준히 증가하고 있어 건강기능식품과 기능성 원료의 안전성이 보다 중요해 지고 있다. 이러한 국민적 관심과 건강한 삶의 영유, 산업적 성장에 맞추어 건강기능식품의 기능성 원료에 대한 중금속 기준규격의 마련이 필요하다. 이를 위하여 건강기능식품 기능성 원료에 대한 국내외 중금속 기준을 조사한 후 국내 유통되는 기능성 원료에 대한 중금속 실태 조사를 진행하였다. 기준 규격 조사는 국가별 및 국제 기구의 건강기능식품 법령 및 중금속의 식품군별 관리 세부 항목 및 관리 기준을 비교하며, 가능한 경우 권고 기준 설정 근거 조사를 포함하였다. 국내 기능성원료의 중금속 함량 실태 조사를 위하여 「건강기능식품 기준 및 규격」에 등재된 건강기능식품 기능성 원료 중 4종 중금속의 기준 규격이 설정되지 않은 원료 40종을 선정하였다. 국내에서 건강기능식품을 제조하는 많은 업체가 기능성 원료를 함께 생산 및 수입하고 있는 실정을 고려하여 기본적으로 기능성 원료의 확보는 건강기능식품을 제조하는 회사에서 제공받았으며, 기능성 원료를 판매하는 곳에서 현장구입을 병행하여 총 1,352건의 시료를 확보하였다. 시료는 마이크로웨이브 분해법으로 전처리하여 납, 카드뮴, 비소 함량을 ICP-MS로 분석하였으며, 총 수은은 골드아말감법으로 분석하였다. 최종적으로 분석된 중금속 함량 결과와 이를 이용하여 건강기능식품 기능성 원료에 대한 중금속 기준 규격을 설정하는 방법을 소개하고자 한다.

Symposium II

**- 표준과 원자력 분야의
기술 개발과 활용 -**

Development of LIBS for Pyroprocessing Salt Analysis

Se-Hwan Park^{1,*}, Seul Ki Han¹, Seong-Kyu Ahn¹, Bo Young Han¹

¹Korea Atomic Energy Research Institute

*Corresponding author: ex-spark@kaeri.re.kr

The pyroprocessing is a technology, which can separate the constituents of the spent fuel into several groups for the reuse of the spent fuel. Safeguards are applied to verify that the nuclear material is not diverted to nuclear weapon or nuclear explosive devices. Korea Atomic Energy Research Institute (KAERI) is developing Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) as a safeguards measure of the pyroprocessing. LIBS offers elemental analysis with advantages such as no sample preparation, chemical interrogation of H - Pu from any sample, and field applicability. Since there is possibility that the nuclear materials inside a hot cell can be measured in a timely manner, the LIBS is developed as one of the safeguards technology for pyroprocessing. A LIBS system is installed inside the glove box for the experiment using the simulated samples. Salt sample will be obtained with dip stick method, and the solidified salt sample on the stick is analyzed with LIBS. Uranium in the surrogate salt for oxide reduction and electro refining were analyzed quantitatively with LIBS. Multivariate analysis technique is applied to the analysis. ACPF LIBS Monitoring System (ALIM) is installed at an air cell of Advanced spent fuel Conditioning Process Facility (ACPF) of KAERI. A LIBS probe and sample stage are inside the air cell, and an instrument rack is outside the air cell. The laser power on the sample and the spectrum from the plasma are delivered through optical fibers.

Acknowledgement

This work was supported by a National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by the Korean government's Ministry of Science and ICT (MSIT) (No. NRF-2017M2A8A5015084).

**Sensitive analysis of lanthanide in a sample matrix
with high salt by capillary electrophoresis**

Jihye Kim^{1*}, Kihwan Choi², and Tae-Hong Park¹

¹*Nuclear Chemistry Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute, ²Division of Chemical and Medical Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science

*Corresponding author: jihyekim21@kaeri.re.kr

Electrokinetic supercharging (EKS) is a powerful in-line concentration method in capillary electrophoresis (CE) analysis. However, sample cleanup should be required before injection to enhance the sensitivity for applying real samples by the EKS method. Here, we introduced a method to obtain high sensitivity of lanthanide in a highly saline matrix by EKS with liquid-liquid extraction (LLE). Off-line LLE was performed prior to EKS and developed to consider the compatibility of final extract of LLE and EKS system in CE. We used heptane including a carrier (0.29 M (2-ethylhexyl)phosphate) as an acceptor. Then, octanol and 0.1 M nitric acid were used for back extraction. Octanol was necessary to remove the carrier from the sample matrix. As a result, thousand-fold sensitivity enhancement was achieved using lanthanide from a highly saline matrix.

인증표준물질 (CRM), 어떻게 사용할까?

백송이*

한국표준과학연구원 화학의료표준본부 분석화학표준센터

*Corresponding author: songyee.baek@kriss.re.kr

산업현장, 과학기술연구현장에서 이뤄지는 화학 측정은 대부분 기준이나 목적에 부합한 지 판단하기 위해 이뤄진다. 시험, 검사 등의 측정 결과를 바탕으로 기준에 대한 부합여부를 판단하고, 연구 현장에서는 측정 결과를 바탕으로 개발된 기술이나 제품이 실용화나 상용화 등 목적에 적합한지 판단한다. 잘못된 측정 결과를 바탕으로 한 결정은 사회경제적 혹은 건강적 측면에서 치명적인 결과를 초래할 수 있다. 그러므로 실험자는 정확한 측정을 해야 하고, 그 결과가 정확하다는 것을 보여줄 수 있어야 한다. 정확한 측정 결과는 신뢰성 있는 분석방법과 정도관리 (Quality Control)를 통해 얻을 수 있다. 신뢰성 있는 분석방법은 방법의 유효화 (Method Validation)를 통해 얻을 수 있는데 검정곡선, 방법의 정밀도, 정확도, 검출한계, 정량한계, 선택성 등의 다양한 요소들을 검증해야 한다. 실험실에서는 지침서와 표준화된 방법 등을 토대로 이러한 요소들에 대한 검증이 시행되고 있지만 상황에 따라서는 형식으로 끝나기도 한다. 한편으로는 분야에 따라 지침서와 표준방법 내 용어가 혼용되기도 하고 계산식이 달라 실험자들을 혼란에 빠뜨리기도 한다.

인증표준물질 (Certified Reference Materials, CRM)을 포함한 표준물질 (Reference Materials, RM)은 방법의 유효화와 정도관리의 각 요소에 활용될 수 있다. 하지만 실험의 목적에 맞게 적절히 사용되지 않으면 제대로 된 방법의 유효화나 정도관리의 결과를 얻기 어렵다. 본 발표에서는 인증표준물질의 제조 및 인증 과정을 소개하고 인증표준물질의 특성 값이 주는 의미 파악하여, 각 실험실에서 인증표준물질을 적절하게 사용할 수 있는 방법을 모색하고 정확한 측정에 대한 의미를 되짚어 보고자 한다.

아보가드로 상수를 사용한 SI 단위 몰(mole)의 재정의 소개

이경석*, 이호성, 황의진, 임용현

한국표준과학연구원(KRISS)

*Corresponding author: kslee@kriss.re.kr

과학에서 대부분의 측정(measurement)은 어떤 양에 대해 기준과의 비교를 통해 그 크기를 결정하는 것이다. 이때 과학적인 측정의 기준을 측정표준(measurement standard)이라고 한다. 미터협약(Meter Convention)에 의거하여 국제적으로 일관되고 합의된 측정단위의 체계인 국제단위계(SI)를 바탕으로 측정표준을 확립하여 사용하고 있다. 몰(mole, 기호: mol)은 국제단위계의 7개의 기본단위 중 하나로서 물질의 양을 나타내는 단위이다. 몰은 어떤 물질을 구성하고 있는 구성요소의 많고 적음을 나타내고자 할 때 사용하는 단위이며, 주로 화학과 생물학 분야에서 많이 사용하고 있다. 몰의 정의는 1971년 국제단위계의 7개 기본단위 중 하나로 채택될 때부터 탄소-12 원자의 0.012 킬로그램에 있는 원자의 개수를 바탕으로 정의되었다. 그런데 현재의 몰은 구성요소의 수를 정의로 사용하면서도 정작 탄소-12 원자 1몰의 수는 명시되어 있지 않다. 또한, 몰의 정의는 질량과 직접적으로 연결되어 있다. 하지만, 현재 질량의 정의는 “국제 킬로그램 원기”를 사용하고 있는데, 인공물을 정의로 사용하는데서 오는 변동 가능성 등 여러 문제점이 있다. 이런 문제점은 질량과 직접적으로 연결되어 있는 몰에도 영향을 미칠 수 있다. 국제단위계를 관장하는 국제도량형총회에서는 이런 문제점을 해결해줄 수 있는, 더 엄밀하고 변하지 않는 단위의 정의에 대한 연구를 진행할 것을 권고하였다. 그리고, 측정학(metrology) 전문가들은 기본물리상수를 사용하여 단위를 정의함으로써 이를 충족시킬 수 있음을 제안하였고, 새로운 정의를 위해 기본물리상수를 정확하게 측정하는 연구를 진행하게 되었다. 이에 따라 몰은 아보가드로 상수(N_A)를 사용하여 재정의가 될 수 있으므로 이 값을 정확하게 결정하는 실험이 진행되었다. 여기서는 물질의 양에 대한 설명과 함께 2019년부터 시행될 새로운 국제단위계에서 몰의 새 정의와 이를 위해 아보가드로 상수를 어떻게 결정하였는지를 소개한다.

Symposium III

- 안전사고 예방을 위한 법과학 -

Introduction of modified methods of preparing fiber cross sections for the comparison of fibers

Tae Myung Sung*

Forensic chemistry & toxicology section, Scientific Investigation Laboratory,

*Corresponding author: sungtm@empas.com

Fibers are common trace evidence and the largest category of polymer evidence analyzed in forensic laboratories. Fibers are analyzed with many tools, from optical instruments and PLM to microspectrophotometry and chromatography. However in the case of non-circular fibers, we should compare fibers involving cross-sectional shapes. Fiber cross-sectional shape analysis normally can be carried out by cross-sectioning a single fiber or fibers. The methods for fiber cross-sectioning used commonly are polyethylene film, Joliff plate, Norland optical adhesive and Hardy microtome, etc., but those methods have some disadvantages for a short single fiber.

As my knowledge, among Asian forensic laboratories, the forensic lab of Singapore only routinely analyze cross-sectional shapes by applying Polyethylene film method; but this method could be difficult to cross-section a fiber in thin slices. Thus, we modified Polyethylene film method to fix the film vertically by using a vise to be seen clearly of the edge surface of the film under a low-power stereoscopic microscope and cut thinly with a razor blade, which is easy to become proficient. The other method is that a microtome is used for a short single fiber (less than 0.5 cm), which is lengthened to 1.5 cm (the proper length to be fixed) by inserting the fiber between polyethylene films; the fiber is marked in a pen and placed at a proper position while being fixed with wax; the waxed fiber can be shaved easily in 10 μm width. Above methods can be applied easily for the analysis of cross-sectional shape of a fiber or fibers.

잠재 지문의 지속성과 노후 성분 변화 연구

김남이*, 박종신, 박우용, 허상철, 정진미, 주현경, 김경민, 이수현

국립과학수사연구원 서울과학수사연구소

잠재 지문은 많은 범죄에서 개인 식별에 활용되는 강력한 증거 중의 하나이다. 특히 우리는 지문 데이터베이스 시스템을 확보하고 있어 범죄 현장에서 잠재 지문 확보와 현출은 범인 검거와 사건 해결에 매우 큰 역할을 하고 있다. 그러나 최근 범죄 수법이 다양화되고 지능화됨에 따라 현장에 남겨진 지문의 날인 시기가 사건 해결에 매우 중요한 의미를 가진다.

이번 연구는 포장 박스 등 일상생활에서 널리 사용되어 범죄 현장에서 쉽게 접할 수 있는 스티로폼에 날인된 지문을 에멀션 블랙법(사삼산화철 용액법) 적용 시 현출 향상 조건과 날인 후 얼마만큼의 시간 경과 후까지 현출이 가능한지에 대한 지문 지속 기간을 검토하였다. 박스용 스티로폼에 지문을 날인하고 종이 박스에 넣은 후 지하 암실에 보관하면서 시간경과 후 지문의 지속 기간을 실험한 결과 지문이 남겨진 후 6개월까지도 선명하게 지문이 현출되었다. 이로써 스티로폼에 날인된 지문은 상당기간 동안 남아있을 수 있으며 에멀션 블랙법으로 현출이 가능함을 확인 할 수 있었다. 또한 에멀션 블랙법의 현출 조건으로 잠재 지문이 남겨진 스티로폼 조각을 가온하여 건조시켰을 때가 더욱 선명하게 현출됨을 확인하였다.

지문의 노후 성분 변화를 보기 위하여 스티로폼 날인된 지문을 암실 종이 박스 안에 보관한 경우와 필터용 종이에 날인한 지문은 창가 햇빛에 노출과 암실 종이 박스에 보관하여 지문 노후화에 따른 지문의 화학적 성분 변화를 용매 추출과 TMS 유도체화 반응을 통하여 GC/MSD로 분석한 결과 보관 환경에 따른 차이는 있으나 대체적으로 스쿠알렌 함량이 시간 경과에 따라 현저히 감소함을 보았으며, 콜레스테롤 또한 시간 경과에 따라 감소함을 나타내었다. 종이 박스 안 암실 보관에서는 스쿠알렌과 콜레스테롤 모두 1개월까지도 검출이 모두 가능하였으며, 창가 햇빛 노출의 경우는 2주일 경과 후부터는 스쿠알렌은 검출되지 않았다. 또한 스쿠알렌의 최종 분해산물들 중 아디프산은 1주일 후부터 검출되기 시작하였다. 또한 특히 에멀션 블랙법의 경우 현출 후에도 지문의 성분 분석이 가능하여 현출 후 지문의 성분 변화 분석으로 시간 경과 등의 추정이 가능하여 이는 실제 사건에서 지문으로 개인식별을 한 다음 지문 날인 시기 추정까지 시도할 수 있는 매우 유용한 방법으로 사료된다.

Variation of phenolic compounds in apple (*Malus pumila*, cv. Gamhong) leaves under chemical exposures

김영희¹, 김보라¹, 김현지¹, 류태인¹, 박춘화¹, 이진환¹, 황승율^{1,*}

¹화학물질안전원 사고총괄훈련과

*Corresponding author: komelong@korea.kr

Chemical accidents are increased during the last decades according to the increases of chemical usage. There are many research about environmental impacts of chemical accident, but, little information has been reported on the harmful impact on natural plants. Thus, we selected three frequently chemical accident materials in Korea, which are ammonia, hydrofluoric acid and hydrochloric acid. The main purpose of this study was to prove the changes in phenolic metabolites of apple leaves under chemical exposure. In this research, we carried out the experiments regarding 3 steps including hydrofluoric acid (1, 2.5, 5 %), hydrochloric acid (1, 2.5, 5 %) and ammonia (10, 20, 28 %). Moreover, we evaluated the leaves of apple trees (3 years) according to the growth periods (1, 3, 7, and 14 day) after chemical exposures. Each apple leaves were freeze-dried for 5 days and made a powder under 100 mesh size. Extraction condition was preformed by 70 % methanol and sonication process under 240 W, for 10 min at 60 °C. The contents of six phenolic metabolites (phloridzin dihydrate, hyperoside, isoquercitrin, avicularin, and quercitrin) in apple leaves extract were observed by UPLC-UV and UPLC-ESI-TOF-MS. There were significant differences between normal and exposure samples in high chemical concentration. In case of 20 and 28 % ammonia, the leaves exhibited various appearances including browning, chlorosis, water-soaked blotches, mottle, tip-burn and necrosis and were observed low phenolic compound contents. However, there were no significant differences between normal and damaged sample in low concentration. Then, phenolic compounds investigation in apple leaves showed more details. Especially, phenolic compounds of 10 % ammonia treated samples was increased until 7 days, and gradually decreased which is same pattern with normal condition. The exposures of hydrofluoric acid and hydrochloric acid were also similar to those of ammonia. This study may be a useful tools in damage calculation of chemical accident and future researches are need to evaluate the various natural plants.

Strategic analysis of chemical reaction product using computational chemistry and nuclear magnetic resonance for chemical accident response

류태인, 김현지, 김보라, 김영희, 김찬식, 박춘화, 이진환, 황승율*

화학물질안전원 사고총괄훈련과

*Corresponding author: komelong@korea.kr

Chemical accident is unintentional leak of one or more chemical substances which could be harmful to health and environment. In scene of chemical accident, it is significant that initial response is right and prompt. Unfortunately, response actions of the response agents have restriction when the accident substance was not identified. Chemicals can be synthesized new hazardous materials by the water for fire-fighting and decomposed by circumstances during the emergency response process. In this case, the understanding of chemical reactions were needed for response of chemical accident to prevent secondary damage.

In this study, we can approach with twice attractive tools. Firstly, the first-principles computational study on chemical reaction was very powerful that can elucidate of chemicals reaction mechanism and calculate thermochemistry data using Gaussian 09 program. The results of calculation such as activation energy, reaction rate, gibbs free energy, and reaction products could be evidenced that predict dangerous/hazard of secondary damage by chemical reaction. Secondly, nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy is widely used to determine the structure of organic molecules. During the chemical reaction, especially, NMR can observe reaction process that reactants change into products. And, we were able to verify chemical structure of reaction products by ^1H , ^{13}C , and, 2-D homo/hetero nuclear experiments.

It is important to combine the theoretical and practical research. Therefore, prediction of computational chemistry and the verification of instrumental analysis were complementary for understanding of chemical reactions. Studies on chemical reaction will lead to preventing secondary damage and handling the incident properly.

Symposium IV

- 의약품 품질향상을 위한
약전분석법의 진보 -**

대한민국약전 선진화를 위한 약전분석법 개선

강종성^{1,*}, 전인구², 김경호³, 나동희⁴, 우미희⁵

^{1*}충남대학교, ²의약품품질연구재단, ³강원대학교, ⁴중앙대학교, ⁵대구 가톨릭대학교

*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

대한민국약전은 국민보건 향상에 기여하기 위하여 국가에서 제정한 의약품에 관한 법전으로 "의약품등의 성질과 상태, 품질 및 저장방법 등의 적정을 기하여 안전성과 유효성이 확보된 의약품의 공급을 목적"으로 식품의약품안전처에서 고시하고 있다. 우리나라의 약전은 제11개정까지의 상대적으로 긴 연혁을 가지고 있으며, 국가의 의약품 품질 규격과 산업체의 품질관리 분야에서의 핵심적 법적 지위와 구속력에도 불구하고, 국가가 정한 공정규격서로서의 적절성 측면 및 실제 제약 산업체 등 현장에서의 활용성 측면 그리고 국제조화라는 측면에서 선진화되어야 할 부분이 많다는 지적이 있다.

본 발표는 이러한 미비점들을 정확하게 조사 분석하고 기준규격을 선진화하여 약전의 개정에 반영하기 위한 분석 학의 역할을 강조하고자 한다. 비 특이적 확인시험법이나 분해능이 낮고 오래된 시험법을 어떻게 최신의 방법으로 대체할 것인지에 대한 대안을 제시할 뿐 아니라 실험에 있어 실험실 및 실험자의 안전이나 환경 문제에 대한 해결책도 모색하여 대한민국약전이 국가 차원의 공정규격서로서의 법적 지위를 회복하는데 도움이 되도록 할 것이다.

특히 분석 학의 입장에서는 확인시험, 순도시험, 정량법 등 최신분석법의 적극 도입, 시험에 사용되는 물질의 사용량을 축소할 수 있는 미량 분석법의 활용, 정성 및 정량에 공통적으로 사용 가능한 시험법의 선택, 유해성으로 인해 시험자에 대한 노출이 우려되는 시약, 유해 작용 및 잔류성 등으로 환경에 미치는 영향이 큰 시약 및 마약류 등 특수한 취급이 필요한 시약의 대체 시약 개발 등에 중점을 두어 대한민국약전을 개선하도록 노력할 것이다.

합성의약품의 약전분석법 개선 사례

김경호^{1,*}

¹강원대학교 약학과,

*Corresponding author: yeong@kangwon.ac.kr

의약품의 규격은 약전 등에 명시된 기준 및 시험법에 의해서 유지되는 것으로, 약전 규격의 과학적 타당성, 최신 과학기술의 도입 및 현실성을 보증하기 위해서는 시험 목적에 적절하며 과학적으로 검증되어진 시험법들이 수록되어야 한다. 대한민국약전 의약품각조는 외국약전과 국제조화를 이루어 가면서 비 특이적인 확인시험법을 배제하고 낡고 오래된 분석법을 최신의 분석법으로 대체하고 있으며, 유해한 시약을 대체하는 그린시험법을 채택하고 있다. 그 예로서 디페메린염산염, 비퀴딜염산염의 정량법은 수은을 사용하던 비수적정법이 수은을 사용하지 않는 중화적정법으로 대체되었고, 피나베룸브론화물의 정량법은 수은을 사용하던 비수적정법이 수은을 사용하지 않는 비수적정법으로 개량되었다. 세프록사딘캡슐의 정량법은 사염화탄소를 사용하던 산화환원적정법이 HPLC법으로 대체되었다. 옥틸로늄브롬화물과 우라자마이드 정제의 정량법은 클로로포름을 사용하지 않는 그린시험법으로 대체되었다. 그리고 디오스민 캡슐, 트라마돌염산염 주사액, 트리플루살 캡슐, 티옥트산 정 및 설박탐 나트륨 · 암피실린나트륨 점안현탁액의 정량법으로 특이성이 좋은 HPLC 분석법을 새로이 개발하였고 직선성, 정밀성, 정확성, 시스템 적합성, 실험실내 정밀성과 완건성 등의 밸리데이션을 실행하였으며 이 방법을 기존의 정량법을 대체하는 약전 12개정의 정량법으로 추천하고자 한다.

Analytical Methods for the Quality Control of Biopharmaceuticals

나동희

중앙대학교 약학대학

Corresponding author: dhna@cau.ac.kr

Recently, pharmaceutical biotechnology has developed very dynamically and resulted in the development of many biopharmaceuticals. Biotechnological processes are much difficult to control than small molecule preparations and the limited ability to characterize the product results in increased manufacturing risks. Biopharmaceuticals include vaccines derived from non-genetically modified organisms or blood, therapeutics from blood or animal organs, recombinant proteins derived from cultivation of genetically modified cells, gene therapeutics, and cell therapeutics. Including monoclonal antibodies, recombinant proteins represent the biggest sector of current pharmaceutical biotechnology. Biopharmaceuticals are characterized by their heterogeneity in terms of composition and molecular structure. This heterogeneity creates special challenges for the pharmaceutical application of analytical techniques. Furthermore, modified proteins such as PEGylated proteins results in molecular heterogeneity with respect to the distribution in terms of number and positions of attached polyethylene glycol (PEG) molecules as well as the inherent polydispersity of PEG itself. For well-characterized biopharmaceuticals, it is important to develop and validate suitable analytical techniques that enable consistent manufacturing processes to be established. Strategies for the characterization of the biopharmaceuticals have recently been accelerated by new analytical techniques that are primarily based on modern liquid chromatography, electrophoretic techniques, and mass spectrometry. This presentation shows the roles of analytical methods for the well-characterization and specifications of biopharmaceuticals.

의약품 중 금속불순물의 측정 및 문제 해결

박재홍¹

¹한국애질런트테크놀로지스
jae-hong.park@agilent.com

Elemental impurities include catalysts and environmental contaminants that may be present in drug substances, excipients, or drug products. These impurities may occur naturally, be added intentionally, or be introduced inadvertently.

When elemental impurities are known to be present, have been added, or have the potential for introduction, assurance of compliance to the specified levels is required. A risk-based control strategy may be appropriate when analysts determine how to assure compliance with this standard. Due to the ubiquitous nature of arsenic, cadmium, lead, and mercury, they (at the minimum) must be considered in the risk assessment.

Also, manufacturers of pharmaceutical products need certain information about the content of elemental impurities in drug substances or excipients in order to meet the criteria. Drug product manufacturers can use elemental impurity test data on components from tests performed by drug substance or excipient manufacturers, who may provide test data, or if applicable, risk assessments. Elemental impurity data generated by a qualified supplier of drug product components are acceptable for use by a drug product manufacturer to demonstrate compliance with this presentation in the final drug product.

In this presentation, Agilent Technologies suggest about analysis method of elemental impurities and this presentation include that introduction of USP 232/233 and Analysis of Inorganic Extractable & Leachable.

Symposium V

- 최신 분석기술과 장비개발 동향 -

NMR 최신 기술: InsightMR (Reaction Monitoring)

황정현

Bruker Korea

Bruker사에서 소개해 드리는 InsightMR™은 화학 반응이나 생화학적 반응 진행 과정을 실시간으로 확인 할 수 있는 분석법으로 화학 반응 메카니즘 및 세포의 대사과정을 이해 하는데 많은 도움을 줄 수 있다.

즉, 기존의 NMR spectrometer에 InsightMR, InsightXpress 및 InsightCell 등 실험 목적에 따라 추가하여 구성 할 수 있으며, 온도를 조절 할 수 있는 flow unit을 이용하여 반응 용기에서 NMR probe로 시료의 이동 간에 반응 온도 조건을 설정하여 실제 반응 메카니즘에 대한 실시간 연구를 지원 할 수도 있다.

또한, InsightMR software는 NMR 전문가가 아닌 사용자들도 단 한번의 교육으로 쉽게 사용할 수 있는 직관적인 user interface를 가지고 있는 편리성이 있다.

결론적으로 Bruker의 InsightMR™ series는 여러분의 실험반응 메카니즘에 대한 보다 정확한 이해에 도움을 드릴 수 있을 것이다.

Atmospheric Pressure Ionization Sources: Their Use and Applicability

최신 질량분석기의 이온화 기술인 유니스프레이 이온소스의 활용 및 응용

Bae Sang Chul^{*}, Han Jung Hee

^{*}Waters Korea

^{*}Corresponding author: Marcelino_Bae@waters.com

This presentation discusses a range of different atmospheric pressure ionization techniques: Electrospray Ionization (ESI), Atmospheric Pressure Chemical Ionization (APCI), Atmospheric Pressure Photoionization (APPI), and Atmospheric Solids Analysis Probe (ASAP), and Waters' novel UniSpray™ (US) ion source. Included is information about their ionization mechanisms, optimization, and types of small molecules for which they are most applicable.

UniSpray and ESI both offered good coverage of the compound analysed in this work, there were some types of compounds that required alternative options more applicable to non-polar samples. ASAP offered excellent coverage for both polar and non-polar molecules and is a good option for fast, triage-like MS analyse. Furthermore, APPI is well recognised as being the most appropriate ion source for highly aromatic species such as PAHs and related compounds, which was also found to be the case in this work.

Overall, for a problem-solving laboratory, having a wide range of ion sources available would be beneficial to enable the ionization of the broadest range of different molecules. Once an appropriate ion source for a particular analysis has been identified the selected technique can be routinely implemented; however, if new ionization techniques are developed, such as UniSpray, these might offered improved response for established analyses.

X-선 소각산란장치 SAXS 를 이용한 물질의 구조 분석 최신 동향

김세훈^{1,*}, 이학준²

^{1,*}어썸레이 주식회사, ²한국나노MSE (KNMSE)

*Corresponding author: sehoon.gihm@awexomeray.com

최근 나노 소재의 활발한 연구와 본격적인 생산에 따라 구체적인 구조-물성 상관성 연구에 대한 필요성이 커지고 있습니다. 이를 위해 XRD, SEM, TEM 등 다양한 구조분석기기가 사용되고 있지만, 대상 스케일, 시료의 처리 상태, 데이터의 보편성 등에 대한 문제가 꾸준히 제기되고 있는 실정입니다. X-선 소각산란장치(Small Angle X-ray Scattering, SAXS)는 수 Å에서 수 백 nm 에 이르는 스케일에 대한 다양한 구조 정보를, 비파괴 방식으로 얻을 수 있기 때문에 기존의 기기에서 볼 수 없었던 많은 정보를 제공할 수 있어 최근 학계를 비롯해 기업체에서도 큰 주목을 받고 있습니다.

본 발표에서는 SAXS에 대한 기초 이론 및 대표적 사례 분석을 통해 다양한 분야에 대한 SAXS 적용 가능성을 살펴봅니다. 특히 최근에 새롭게 개발된 시스템인 Metaljet, Bonse-Harrt (LAB USAXS), Q-xoom(Stimultaneous SWAXS) 등에 대한 정보 및 연구 사례를 발표합니다.

SPV-4

Low temperature SEM and FIB-SEM: Analysis approach to cryo techniques in Life Sciences

표성수*

TESCAN Korea

*Corresponding author: sspyo@tescan.co.kr

Abstract

Cryo-dual beam system (scanning electron microscopy and focused ion beam) provides good insights into the nano-structure of the biological tissues or cells in their natural states and provides a promising way to analyze the in-situ three-dimensional information of its complexes.

This presentation describes the recently cryo-SEM and FIB (focused ion beam) system technology and its applications.

Keyword: Cryo, FIB, SEM, Gallium, Xenon plasma, 3D analysis, microstructures, TESCAN

Symposium VI

- 소재의 신속 분석기술 동향 -

Py-GC-MS를 이용한 유해물질 Screening 분석방법 연구

문혜미, 김재우*

KOTITI 시험연구원

*Corresponding author: jw_kim@kr.kotiti-global.com

제품과 정보통신기술의 융합으로 이루어지는 4차 산업혁명으로 인해 각 산업의 장벽이 무너지고 있는 추세이다. 이에 산업 환경은 빠르게 변화하고 있으며 관련 환경규제가 강화되고 있어 규제 대응을 위해 신속하고 간편하게 여러 물질을 동시에 분석하는 방법이 요구되고 있다.

용도가 다양하여 공산품, 전기전자제품, 생활용품 등 전 산업분야에서 널리 사용되는 프탈레이트계 난연제와 브롬계 난연제에 대하여 용매 추출 없이 신속분석이 가능한 DIA(Direct Injection Analysis)기법을 이용한 분석방법을 개발함에 있어 이를 위해 고려되는 사항을 고찰하였다. Py-GC-MS를 이용한 분석방법 개발을 위해 EGA 분석을 통한 개별 물질의 휘발온도를 확인하고 그 결과를 바탕으로 스크리닝 분석이 가능한 기기분석조건을 확립하였으며, 다성분 동시 스크리닝 분석을 위한 최적 Substitute compound 선정, 분석 시 매번 검정곡선을 작성하고 대상 시료를 측정해야하는 일반분석과 달리 최초 분석 시 생성된 검정곡선을 저장하고 안정된 Substitute compound를 선정하여 결과 값을 산출하는 스크리닝 분석방법의 비교 연구를 통해 분석방법의 신뢰성을 확인하였다.

인공지능(AI)을 이용한 철강소재 미세조직 분석기술 개발

조다희¹, 최현영², 안건태¹, 박중철^{1*}, 고재필², 박신화¹

¹포항산업과학연구원 AI-MAP PJT팀,

²금오공과대학교 컴퓨터공학과

*Corresponding author: ltpark@rist.re.kr

미세조직은 소재의 표면을 연마하고 엠틡하여 현미경으로 관찰할 때 나타나는 매우 작은 스케일의 구조로 소재 고유의 이미지 패턴이다. 따라서 금속, 폴리머, 세라믹, 복합재료 등의 미세조직은 강도, 경도, 인성, 연성, 내식성, 내마모성과 같은 기계-물리적 특성에 많은 영향을 미친다.

철강소재에서 미세조직의 종류에는 오스테나이트(Austenite), 페라이트(Ferrite), 펄라이트(Pearlite)와 같은 기본적인 상에서 부터 열처리 및 가공을 통해 나타나는 마르텐사이트(Martensite), 베이나이트(Bainite)등과 같은 복잡하고 다양한 미세조직이 있다. 또한 미세조직의 이미지 형상 및 패턴 또한 다양하게 나타난다.

미세조직의 이미지 패턴이 비교적 단순하면 기존의 이미지 분석 소프트웨어(Image Analyzer)를 이용하여, 상분율, 입도 등의 정량분석이 가능하지만, 전술한 것처럼 복잡하면, 사람이 일일이 수동으로 측정하여야 하므로 분석을 포기하거나, 정성적인 판단만을 하고 있는 것이 현실이어서, 미세조직과 기계적 물성과의 상관관계 규명에 어려움이 많은 실정이다. 본 논문에서는 상기의 철강 미세조직 정량분석에 인공지능을 이용한 방법론과 그 결과에 대해 나타내었다.

LA-ICP-MS를 이용한 초내열 세라믹 섬유의 미량원소 분석법 및 표준화

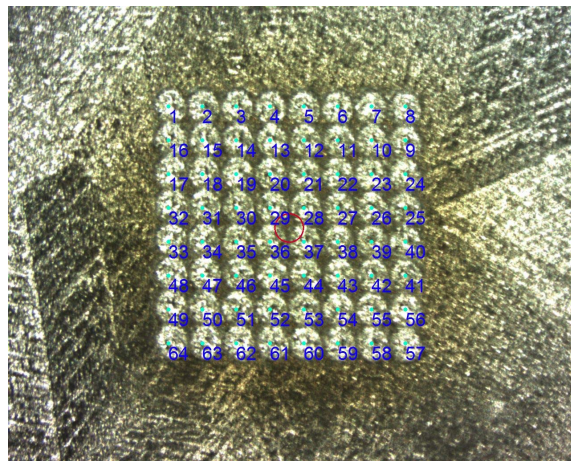
손병서, 김현식, 김동현*

한국세라믹기술원 분석인증센터

*Corresponding author: dhkim1208@kicet.re.kr

세라믹 섬유는 세라믹 소재 중에서 형태적으로 섬유의 모양을 갖춘 소재를 의미하며, 크게 탄화규소(SiC), 유리, 압전, 현무암 섬유 등으로 구분이 가능하다. 특히 탄화규소 섬유는 고내열성과 함께 뛰어난 기계적 성질을 갖추고 있어, 내열 및 복합재료에 다수 활용되고 있으며, 4차 산업관련 핵심소재로서 각광받고 있다. 탄화규소 섬유는 대표적인 난용해성 소재로서 내부 불순물의 농도에 따른 내열성의 변화가 극심하여, 정량적으로 내부 불순물의 농도 분석이 필요하다. 기존의 습식방법으로는 전처리 과정이 복잡하며, 시험자의 숙련도에 따라 결과값이 상이하게 측정되는 것이 일반적이다.

본 연구에서는 기존의 습식 화학분석법과는 달리 Laser ablation을 활용한 탄화규소 섬유의 미량원소 분석법을 고찰하며, 이를 표준화하기 위한 다양한 조건 변수들에 대하여 연구를 하였다. LA-ICP-MS는 Laser ablation을 활용한 샘플 전처리를 활용하기 때문에 습식법에 비해 전처리 시간을 줄여줄 수 있으며, ICP-MS장비와의 커플링을 통해 내부 미량원소를 정량화 할 수 있다. 레이저 소스의 파워, 표면형상, 측정위치, 횡수 등의 조건에 따른 미량원소 결과값의 비교와 함께, 이를 표준화 할 수 있는 방안을 모색하려 한다.



<LA-ICP-MS를 이용한 Si 분석 예시>

머신러닝을 활용한 LIBS 분석 정확도 향상 연구

정세훈*

포항산업과학연구원(RIST)

*Corresponding author: jshoon@rist.re.kr

LIBS (Laser Induced Breakdown Spectrometry)는 레이저를 에너지원으로 하는 원자 분광법이다. LIBS는 전처리 과정이나 시료 상태의 제한이 없이 신속하게 분석 할 수 있는 다양한 장점이 있다. 하지만, LIBS는 글로우 방전이나 유도결합플라즈마를 에너지원으로 하는 GD-OES나 ICP-OES와 비교하여 매트릭스 효과(matrix effect)가 크고 자기 흡수(self-absorption) 효과가 많기 때문에 정확성 향상에 많은 연구들이 진행되고 있다. 본 심포지움에서는 LIBS의 분석 정확도 향상을 위하여 많이 활용되고 있는 대표적인 다변량 분석법인 PLS-R (Partial Least Square Regression)를 포함하여 SVM (Support Vector Machine), RF (Random forest), ANN (Artificial Neural Network), Lasso 등의 머신러닝 기술들을 활용에 대해 소개하고자 한다. 또한 정확도 향상을 위해 스펙트럼 데이터의 정규화(Normalization) 및 특정 파장 영역의 선택 등의 전처리 등의 적용에 대해서도 소개하고자 한다. 이러한 LIBS 데이터 처리 기술을 철강 시료에 대하여 적용하고, 그 정확성과 재현성 결과를 소개하고자 한다.

Special Session

**- 인체유래물 활용 노출생체지표 분석
고도화 기술개발 현황과 향후 과제 -**

인체유래물 활용 노출생체지표 분석 고도화 기술 개발

임호섭^{1,*}

^{1,*}주식회사 스마트브 생명환경연구소

*Corresponding author: hosublim@gmail.com

환경유해인자의 저농도, 다항목 복합 노출로 인한 만성건강영향을 규명하기 위하여 보다 높은 감도를 가지며 최소 시료량으로 많은 항목을 효율적으로 분석할 수 있는 기술의 개발이 필요하다. 본 연구에서는 국내외 환경 바이오모니터링 프로그램에서 대상으로 하고 있는 금속류와 유기화합물, 잔류성유기오염물질(POPs, persistent organic pollutants)에 대하여 인체유래 시료 중 노출생체지표를 통합동시분석하기 위한 방법을 개발, 검증하였다.

무기금속류는 0.5 mL 미만의 혈액과 소변 시료에서 각각 15종 이상의 항목에 대하여 US CDC NHANES (Centers for Disease Control and Prevention National Health and nutrition Examination Survey)에서 제시하는 검출한계 수준으로 분석할 수 있는 방법을 개발하였다. 대상 항목은 환경 중 노출 가능한 납, 비소, 크롬, 카드뮴, 니켈 등을 포함하며 분석기기는 유도결합플라즈마 질량분석기(ICP-MS)로 하였다. 분석법의 검증은 선택성, 직선성, 정확도, 정밀도 등이며 각 항목의 적합기준에 부합하였다. 유기화합물 및 그 대사체의 경우 현재 국내외 바이오모니터링 프로그램에서 페놀류, 프탈레이트 대사체류, 휘발성유기화합물 대사체류, 다환방향족탄화수소 대사체류, 피레스로이드계 농약 대사체류, 환경담배연기 대사체류가 각각 물질군별 동시분석되고 있으나 본 연구에서는 상기 6개 물질군을 0.5 mL의 소변 시료로써 액체크로마토그래피 질량분석기(LC-MS/MS)를 적용한 통합동시분석법을 개발하였다. 통합분석법의 개발은 전처리 방법의 통합, 분리조건 확립 및 검증, 유효성 검사, 교차검증 등을 포함한다. POPs에서도 PCBs(polychlorinated biphenyls), PBDEs(polybrominated diphenyl ethers), OCPs(organochlorine pesticides)의 세 물질군을 통합분석하는 방법을 개발하였으며, 전체 최대 93종의 물질을 분석하기 위한 시료량은 혈청 0.5 mL 미만이었다. 전처리 방법은 QuEChERS(Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged, Safe)를 적용하였고 분석기기는 GC-EI-QQQ 및 APCI-GC-QQQ를 적용, 검증하였다.

또한 환경유해인자에 대한 노출생체지표로서 일반적으로 적용되는 혈액 및 소변뿐 아니라 태아기부터 유아기까지의 노출시점과 누적 노출을 관찰할 수 있는 신규 인체유래물로 유치(deciduous teeth)에서의 환경유해인자 분석법과 시료 채취, 보관방법을 개발, 검토하였다.

본 연구는 최소한의 시료량을 이용하여 최다 항목을 분석할 수 있는 기술을 제시하며 체내 총 환경유해인자 노출량(body burden)을 산출하기 위한 효율적인 방안으로 활용될 수 있다.

본 연구는 환경부의 생활공감 환경보건기술개발사업에서 지원받았습니다.(과제번호: 2017001360003)

신종 환경유해물질의 노출생체지표 개발 전략

이상규^{1*}

^{1*}경북대학교 약학과

*Corresponding author: sangkyu@knu.ac.kr

국가의 산업화 및 고도화에 따라 생활환경 또는 작업환경에서 노출되었을 때, 개인에게서 건강장해를 유발하는 유해인자의 수가 계속 증가되고 있으며, 매년 새로운 종류의 환경유해인자가 등장하고 있다. 노출지표(exposure biomarker)란 생체가 특정 화학물질에 노출되었을 때 뇨, 혈액, 타액 등에서 노출을 확인할 수 있는 지표를 의미하며, 새롭게 나타난 유해인자에 의한 건강장해를 예방하고, 신속하게 대응하기 위해서 유해인자의 노출 여부를 결정하는 새로운 노출 지표 및 분석법의 신속한 개발이 요구되어진다. 본 발표에서는 신규 환경유해물질의 노출에 따른 노출마커발굴을 위한 체계적 접근법 및 개발전략을 소개한다. 먼저 노출지표 개발을 위해 선행조건으로 분명하게 구분되는 대조군과 노출군에서 유래한 시료의 확보가 요구된다. 노출마커는 생체 내 특정화합물의 존재 여부에 대한 흔적을 찾는 것으로 크게 두가지 방법으로 전략적 접근이 가능하다. 먼저 직접적 검색 방법(Direct detection)으로 생체 시료 내 노출된 모화합물 자체, 물질의 1상 또는 2상 대사체, 혹은 단백질 및 DNA와의 adduct를 검출할 수 있다. 특히 혈중 다량 존재하는 albumin 또는 IgG와 같은 단백질과의 adduct 형성을 고려할 수 있다. 직접적 방법을 통한 노출지표의 탐색을 위해서는 대상 물질의 대사(metabolism)경로 규명, 물리화학적 특성에 근거한 시료별 전처리법 개발 및 분석법 개발에 대한 선행연구가 요구된다. 다음으로는 간접적 방법(Indirect detection)으로 물질 노출에 후 이에 대응하는 특이적 생체 내 반응을 분석하는 것으로, 유해인자가 건강장해를 일으키는 특정 장기나 세포에서의 변화를 추적할 수 있다. 대표적으로 오믹스 기반 기술을 활용한 대사체학(metabolomics) 및 단백질체학(proteomics)을 활용할 수 있다. 특히 세포 내 분비단백질(secretome) 분석을 통한 혈액 또는 소변에서의 특이마커 단백질의 검출을 고려할 수 있다. 또한 개발된 노출지표는 만족할 만 수준의 민감도 및 특이도를 가져야 하며, 대량분석을 위한 전처리 방법 재현성 및 간소화도 고려되어야 한다. 새로운 환경변화에 따라 대두되는 신규유해인자의 노출마커를 동정하기 위한 체계적 전략의 수립이 요구되고 있으며, 본 발표를 통해 전략적 접근을 위한 road map을 제시하고자 한다.

의약품 중 휘발성유기화합물의 분석

Static headspace GC-MS method for determination of
volatile organic compounds in quasi-drugs

김민영¹, 박혜진¹, 표재성², 배옥남³, 백승훈^{1,*}

¹*아주대학교 약학대학, ²경성대학교 약학대학, ³한양대학교 약학대학

*Corresponding author: shbaek@ajou.ac.kr

Despite the continuous efforts of regulatory affairs and manufacturers to ensure product safety, there has been growing concerns over exposure to toxic chemicals from the use of disposable sanitary products. Volatile organic compounds (VOCs), unintentional hazardous chemicals in these products, are at the center of safety issues in these days. Here, we aimed to develop and validate the static headspace GC-MS method for determination of toxic VOCs which can be applicable to quantitative risk assessment of VOCs in sanitary products. To simultaneously homogenize and reduce the loss of VOCs, sample was pulverized to a fine powder using cryogenic mill. Homogeneity and recovery test was carried out using surrogate spiking before milling. VOCs was extracted from sample powder using optimized solid-to-gas phase headspace extraction, and analyzed using GC-MS. Method validation was carried out following the ICH guideline in terms of specificity, linearity, LOQ, precision, and accuracy. Cryogenic mill produced homogeneous and amorphous powder with approximate size of 100 μm assessed by homogeneity test (ISO Guide 35:2017) and SEM analysis. Recovery of surrogates after cryogenic mill was 47.1% ~ 61.9%. The all of method validation results satisfied acceptance criteria of each parameter. VOCs content of real sample was quantitated using developed method with matrix-matched calibration. The content of styrene was the highest in samples, followed by hexane and toluene. The developed method proved to be appropriate for analysis of VOCs and applicable to quantitative risk assessment of VOCs in disposable sanitary products. This method further can be used for the quality control testing of disposable sanitary products. This research was supported by a grant (16172MFDS243) from Ministry of Food and Drug Safety in 2017.

PI급 구두 강연 I

(2018년 11월 15일)

**Liquid chromatography-tandem mass spectrometric method for analysis
of caffeine and its metabolites in urine to assess drug
metabolizing enzyme activities**

Hye Hyun Yoo*

Institute of Pharmaceutical Science and Technology and College of Pharmacy, Hanyang
University, Ansan-si, Gyeonggi-do 15588, Republic of Korea

*Corresponding author: yoohh@hanyang.ac.kr

In this study, a high-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometric (LC-MS/MS) method was developed and validated for the determination of caffeine and its 14 metabolites in urine samples for phenotyping the metabolic enzymes. For sample preparation, urine samples were diluted with distilled water and then extracted with Sep-Pak C18 cartridges. Chromatographic separation was achieved on a Kinetex C18 column (3.0 × 100 mm, 2.6 μm) at temperature of 40°C. HPLC mobile phases consisted of 0.1% acetic acid and acetonitrile. A linear gradient program was used with a flow rate of 0.2 mL/min. The multiple reaction monitoring mode was used for mass spectrometric detection and electrospray ionization was performed in both positive and negative ion modes. The method was validated with regard to accuracy, precision, linearity, recovery and matrix effects. Stability test results showed that caffeine and its metabolites are stable in tested conditions with proper recoveries and acceptable RSD range. The developed method was successfully applied to the analysis of human urine samples and caffeine metabolite phenotyping ratios were calculated based on the resulting data. This method would be useful for evaluating drug metabolizing enzyme activities.

Predictive analytics of inhalation toxicity for organic chemicals

이성광*, 이병훈

한남대학교 화학과

*Corresponding author: leesk@hnu.kr

Inhalation toxicity has been increasingly studied and the causal relationships of inhaled chemicals to respiratory diseases has not been fully elucidated. Recently, Korea's "humidifier disinfectant" has raised interests of inhalation toxicity in household products containing chemicals. Additionally an enormous toxic compounds, which may be formed in indoors are being used as ingredients in household products.

In this study, we will explain describe predictive analytics based on MCS and supervised QSAR method for predicting acute inhalation toxicity(rat LC50). Inhalation toxicity data for developing model were collected from various sources(eChemPortal, QSAR toolbox and RTECS). The MCS (maximum common substructure) method was used to extract the "core structure of toxicity" by finding largest substructure common to all(or some) toxic chemicals. Also quantitative structure-activity relationship(QSAR) models that combined regression method (MLR and SVM) were developed according to genetic algorithm for feature selection and bootstrapping sampling for model validation. All models were evaluated according to the OECD principles for QSAR/QSPR validation, and compliance with all five principles was established.

Finally, we present new web-based platform called IHToxPre, which has been developed in response to a need for data management and rapid prediction of inhalation toxicity. This platform enables us to facilitates structural search for existing toxicity data and to provide the inhalation toxicity prediction for new chemicals. This research was supported by a grant (18182MFDS466) from the Ministry of Food and Drug Safety in 2018.

Small Angle X-ray Scattering Studies on Structures of Biological Macromolecules in Solution

진경식*

포항가속기연구소

*Corresponding author: jinks@postech.ac.kr

The fundamental aim of structural studies in molecular biology is to establish a relationship between the structure (or, more precisely, structural changes) and function of biological macromolecules. Over the past years, a tremendous amount of structural information has been obtained using macromolecular crystallography and nuclear magnetic resonance (NMR). These high-resolution methods apply only in rather specific conditions: it is often difficult to grow crystals of high molecular weight (MW) assemblies that are suitable for diffraction, and the application of NMR is fundamentally limited to small (MW < 30 kd) proteins. Investigation of structure of biological macromolecules in solution remains one of the most important fields of application of small angle X-ray scattering (SAXS) technique. SAXS permits analysis of biological macromolecules and their complexes in nearly physiological environments and direct study of structural responses to changes in physical and chemical conditions. Recent remarkable progress in instrumentation, in particular thanks to high-flux dedicated X-ray synchrotron radiation has significantly improved the quality of the experimental SAXS data. This method is an important complementary tool to the high-resolution techniques (X-ray crystallography and NMR). The fundamental aim of this study is to obtain more detailed information on the structure and structural differences of a variety of biological macromolecules in solution under various conditions by using SAXS technique. Ultimately, the structural evidence presented here will contribute to a better understanding of relationship between structures of macromolecules and their function, from a biophysics point of view. In this talk, current status of 4C SAXS beamline, long-term plan for advanced beamline, SAXS data processing, overall parameters, and recent research results of biomacromolecules (DNA, protein) will be discussed in more detail.

**Development and Validation Multi-Residue Method for Butralin,
Prodiamine, Methoprene in Apple by GC-MS/MS**

Chae Uk Lim^{*}, Hyo Young Kim, Sumin Hong, Hyunjeong Cho, Dong-Ho Kim

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products
Quality Management Service

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

A chromatography-tandem mass spectrometry method was developed for the analysis of Butralin, Prodiamine, Methoprene in apple. A simple and rapid sample preparation technique, based on QuEChERS extraction was used for sample treatment.

Key performance parameters investigated were linearity, recovery, relative standard deviation(RSD), limit of detection, and limit of quantitation. The recoveries were within 86.4 ~ 108.2 % with relative standard deviation (RSD) of 0.9 ~ 4.1 % and the limit of quantification (LOQ) of methods were below 10 µg/kg, and the correlation coefficient (r^2) of matrix-matched standards were > 0.997

PI급 구두 강연 II

(2018년 11월 16일)

MC-ICP-MS를 이용한 Eu 동위원소 분석법의 개발

이승구^{1*}, Tsuyoshi Tanaka^{2*}

^{1*}한국지질자원연구원 국토지질연부분부 ²나고야대학 지구행성과학과

*Corresponding author: sgl@kigam.re.kr

원자번호 63인 Eu은 15개의 원소로 구성된 희토류원소 중의 하나이며, ¹⁵¹Eu (47.81%), ¹⁵³Eu(52.19%)과 같이 두 개의 안정동위원소로 구성된다. 대부분의 희토류원소는 자연계에서 3개로 존재하지만, Eu은 자연계에서 2가 혹은 3가로 존재할 수 있기 때문에, 3가 혹은 4가의 산화수로 존재하는 Ce과 더불어, 지구화학적으로 혹은 우주화학적으로 중요한 원소이다. Eu 동위원소의 존재도는 이중 스파이크(Double spike)법과 열이온화 질량분석기를 이용하여 분석할 수는 있지만, 그 과정이 너무 어렵고 시간소모가 커서 일반적으로는 거의 불가능하다. 최근 MC-ICP-MS의 발달로 인해 주기율표상의 많은 원소들의 동위원소비를 정확하고도 정밀하게 측정할 수 있게 되었다. 이 연구에서는 지구화학적/우주화학적으로 중요한 원소인 Eu의 동위원소비를 MC-ICP-MS를 이용하여 정확하고도 정밀하게 측정할 수 있는 실험법을 개발하고자 하였다.

동위원소 측정 실험법으로는 Eu 동위원소 측정치의 보정을 위해 Eu이외의 타원소를 추가하는 도핑법을 활용하였다. 그리고 안정동위원소비를 측정하여 지구화학적/우주화학적으로 활용하고자 할 때에는, 동위원소비의 상대적인 안정도를 비교할 수 있는 NBS987_Sr, DSM-3_Mg와 같은 동위원소 표준물질이 필요하다. Eu의 경우, 아직 공인된 동위원소 표준물질이 없다. 따라서 이 연구에서는, 가장 안정된 Eu 동위원소 표준물질을 찾고자, 시중에서 구입이 가능한 5종류의 Eu 표준시약을 이들의 각각의 동위원소비를 비교하였다.

연구결과, Eu의 안정동위원소비를 10ppm 이하(소숫점 5째 이하)의 정밀하고도 안정된 값으로 측정할 수 있는 분석법을 개발하였고, 이와 더불어 이론적으로는 동일한 값을 보여주어야 할 5개 표준시약의 동위원소비는 상호간에 미세한 차이가 있다는 것을 확인할 수가 있었다. 이와 같은 차이가 존재한다는 것은 Eu의 동위원소 분별작용이 발생되었다는 것을 말해주는 것으로서, 표준시료를 만든 희토류광석 자체에 이미 존재했거나 혹은 제조과정에서 동위원소 분별작용이 일어났을 가능성을 지시해주는 것이다.

펄토초레이저절제현미분석 유도결합플라즈마질량분석기(fs-LA-ICP-MS)를 이용한 다양한 물질의 분석 사례 소개

Introduction to fs-Laser Ablation ICP-MS for the Analysis of various materials

이호선^{1,*}, 이누리¹, 전지영¹, 진미정¹, 최하정¹

^{1,*}부산대학교 공동실험실습관

*Corresponding author: geosun@pusan.ac.kr

레이저절제현미분석 유도결합플라즈마질량분석기(Laser Ablation-ICP-MS)는 통상 액상 시료를 분석하는 유도결합플라즈마질량분석기에 레이저 시스템을 장착하여, 유도결합플라즈마 질량분석기를 검출기로 이용하여 고체 시료 표면의 직접적인 성분분석을 할 수 있는 장비이다. 1995년 Gray에 의해 처음 소개된 이후 현재까지 나노 레이저와 엑시머 레이저 및 펄토초 레이저를 장착한 LA-ICP-MS 시스템을 이용한 다양한 연구가 활발히 진행되고 있다.

이러한 LA-ICP-MS 장비를 이용한 연구는 지구과학, 화학, 분광학, 광물·에너지, 생물, 환경, 고고학, 인류학, 전기전자, 재료물질, 과학수사, 식품 등의 다양한 분야에서 보고되고 있다. LA-ICP-MS 장비를 이용한 고체 시료의 표면분석 공간 분해능은 통상 $\mu\text{m}\sim\text{cm}$ 스케일의 선형 분해능을, 깊이 방향으로는 펄토초 레이저의 경우 수백 나노 깊이의 분해능을 구현할 수 있다. LA-ICP-MS 분석의 성분 농도 검출 한계는 $\text{ppb}\sim\text{wt.}\%$ 까지로 상당히 넓은 분석 영역에 걸쳐 정성 및 정량 분석이 가능한 장점을 가지고 있다.

이와 같이 LA-ICP-MS는 주로 마이크로 영역의 표면 분석분야에서 상당한 장점을 가지고 있는 장비임에도 불구하고 국내에서는 다양한 분야에 걸친 연구가 활발히 진행되지 못하고 있다. 이는 LA-ICP-MS 장비의 보유기관이 많지 않고 정량분석을 위한 다양한 표준물질 확보의 어려움이 있기 때문인 것으로 판단된다.

이 연구는 부산대학교 공동실험실습관에 보유하고 있는 펄토초레이저절제현미분석 유도결합플라즈마질량분석기를 이용하여 분석한 생체시료, 암석, 광물, 반도체기판, 문화재 및 토기, 금속 시료 등의 정성 및 정량 분석 사례를 소개하고자 한다.

Flat Panel Display의 Metal 부식불량 분석사례 및 발생 Mechanism에 대한 연구

최재하

LG디스플레이, 구미분석팀
jaeha80@lgdisplay.com

LCD (Liquid Crystal Display)는 인가 전압에 따른 액정 투과도의 변화를 이용하여 구동 회로에서 발생하는 여러 가지 전기적인 정보를 시각정보로 변화시켜 전달하는 디스플레이로 구성은 크게 구동회로 역할을 하는 TFT (Thin Film Transistor), 백색광을 Red / Green / Blue로 변환하는 CF (Color Filter), 그리고 빛을 공급하는 Backlight로 나눌 수 있다.

TFT 의 Pad 부분은 FPC, Drive-IC 로부터 받은 외부 신호를 Panel 내부로 전달하는 곳으로서 화면 구동이 일어나는 Cell 내 Pixel 영역과는 달리 외부에 노출되어 있어 환경적 요인(오염, 물리적 Damage 등)에 의해 부식, Crack, 찍힘 등의 불량에 취약한 부분이다. 특히 부식 불량은 Pad 영역에서 빈번하게 발생하는 고질적 불량으로 Line Defect 와 같은 화면이상을 유발하는데, 근본적 해결을 위해서는 부식현상에 대한 정확한 원인규명 및 Mechanism 도출이 필요하다.

본 연구에서는 TFT Pad 에서 발생하는 부식 현상을 고찰하고자, 1) TFT 배선으로 주로 사용되는 Metal 소재별 (Al/Nd, Al/ Mo) 부식 취약성, 2) 부식 유발 Test, 3) 부식 발생영역 구조 분석으로 구분하여 진행하였다. 이에 대한 결과, Metal 소재는 AlNd > Al > Mo 순으로 부식에 취약함을 알 수 있었고, 부식 유발 Test 결과 공수, 환경성 오염, 공정 중 사용되는 약액 (Etchant 류) 모두 부식을 유발하는 것으로 확인되었다. 마지막으로 부식 발생 영역 구조 관찰을 통해 ITO 박막의 미세 Open (Pinhole, Taper 틈)에서 부식반응이 유발되어 Pit, Crevice 및 Metal 유실이 발생됨을 확인 할 수 있었다.

위의 연구 내용을 검토 시, TFT Pad 부식은 ITO 박막의 구조적 결함 영역 (미세 Open)으로 침투된 수분 & 불순물 이온 등이 Metal과 반응하여 Metal 유실 및 배선 Open 현상을 가져오고 이는 Display 화면 이상 불량을 유발하는 과정으로 이해된다. 따라서 부식불량을 방지하기 위해서는 ITO 두께 상향, Taper 개선 등을 통해 구조적 결함을 제거함으로써 부분적 Open으로 인한 Metal 외부 노출을 차단하는 것이 효과적이다.

PI급 구두 강연 Ⅲ

(2018년 11월 16일)

XRF, FTIR 기기를 이용한 후처리 용액 검수분석기술 개발

김성남*, 김선혜, 양정환, 정성욱

포항산업과학연구원 분석평가그룹 화학조성섹션

*loverist@rist.re.kr

제철 산업에서 생산되는 다양한 종류의 철강 제품에는 내식성 강화, 윤활성 부여, 도장 밀착성 향상 등을 위해 표면처리(후처리) 기술이 적용되고 있다. 특히 자동차, 강건재, 가전 제품과 같은 주요 철강재 수요 산업에서 표면처리는 필수적이며 관련 표면처리 신기술 개발이 활발히 진행되고 있다. 대표적인 예로 도금강판의 내식성, 도장성, 내지문성 등의 기능을 부여한 Cr free 처리 강판 및 내지문성 강판 등이 있다.

표면처리 강판에 사용되는 후처리 용액의 품질은 표면처리 강판의 품질과 직결된다. 따라서 표면처리 제품의 품질불량 최소화 및 안정적인 품질보증을 위해서는 후처리 용액의 품질관리 프로세스를 명확히 해야 한다. 최근에 제정된 각 산업 분야의 품질 관리 규격들은 이를 반영하여 강화된 원료관리 품질보증 프로세스를 요구하고 있다. 자동차 산업 분야에서도 2016년 10월 품질 인증 규격인 ISO/TS 16949 표준을 대체하는 신규격 IATF16949이 발표되었고, 전환인증을 받기 위해서는 강화된 원료관리 프로세스를 적용해야 한다.

후처리 용액 검수 분석은 용액의 종류가 많고 사용기한이 짧은 용액들이 있기 때문에 빠른 시간 내에 특성을 평가해야 한다. 그리고 표면 처리 기능성을 부여하기 위해 유기물 (고분자)이 첨가되는 경우에는 제조된 용액의 특성 및 사용기한에 따른 유기물 구조의 변화를 모니터링 해야 한다. 본 연구에서는 표면처리 강판에 사용되는 후처리 용액의 품질관리를 위한 검수항목 강화를 위해 기존 관리 항목인 물리적 특성에 더하여 화학적 특성(무기물 화학조성 및 유기물 구조) 평가를 실시하였다. 후처리 용액의 무기물 화학 조성분석은 액체시료 XRF 측정방법을 이용하였다. 증류수를 이용해 10~100배로 희석한 다음용액 표준물질(CRM)을 이용해 검량선을 작성하여 정량분석을 실시하였다. 첨가된 유기물 구조 특성은 ATR 약세서를 이용하여 FTIR 스펙트럼을 측정한 다음, ASTM E2310 규격에서 기술하고 있는 HQI(Hit Quality Index)를 이용하여 기준 용액의 스펙트럼과 비교 결과를 수치로 나타내었다.

전기-분석 화학적 개념을 이용한 3 nm 이하 크기의 촉매 나노입자의 합성 및 특성 분석

주영원, 조태훈, 김주훈*

경희대학교 화학과

*Corresponding author: jkim94@khu.ac.kr

3 nm 이하의 크기를 지닌 나노 입자들은 매우 작은 입자의 독특한 광학적/촉매적 특성으로 인해 의료 영상, 약물 전달, 센서 등의 다양한 분석 과학적 분야에서 널리 활용되어 오고 있다. 예를 들어, 최근에 본 연구자 그룹은 가시광선 영역의 형광(photoluminescence) 특성을 나타내는 수용성 Au 나노클러스터(Au nanocluster)이 근적외선(near-IR) 영역의 전기화학발광(electrochemiluminescence)을 나타내는 특이성을 보고하고 그 분석 과학적 의미를 고찰하였다 [1]. 그러나 이러한 작은 입자들의 정교한 합성 및 세밀한 분석은 입자들의 극히 작은 물리적 크기로 인해 여전히 어려운 문제이다. 본 발표를 통해 우리는 전기-분석 화학적 개념을 사용하여 어떻게 3 nm 이하의 크기를 가진 백금 나노 입자 촉매들을 정교하게 합성하고 특성 분석이 가능한지에 대해 논의하고자 한다. 특히, 우리는 3 nm 이하의 크기 범위에서 서브 나노미터(sub-nanometer) 수준의 정밀도로 제어된 다양한 크기의 백금 나노 입자들에 대한 그 화학발광(chemiluminescence) 특성과 분석 과학적 응용을 살펴보고자 한다 [2-3]. 더 나아가 반복적으로 결합된 화학적 환원과 갈바니 교환(galvanic exchange) 반응들을 활용한 백금 나노 입자의 정교한 합성 방법을 소개하고자 한다 [4].

참고문헌

1. J. M. Kim, S. Jeong, J. K. Song, J. Kim *Chem. Commun.*, **2018**, *54*, 2838-2841.
2. H. Lim; Y. Ju; J. Kim *Anal. Chem.*, **2016**, *88*, 4751-4758.
3. J. Kwon, S. K. Park, Y. Lee, J. S. Lee, J. Kim *Biosens. Bioelectron.* **2017**, *87*, 89-95.
4. T. Cho, C. W. Yoon, J. Kim *Langmuir*, **2018**, *34*, 7436-7444.

Standardization activities for Halogen and PAHs testing methods & Joint working group establishment between ISO/TC 61/SC 5/WG 11 & IEC/TC 111/WG 3

정재학^{1,*}

^{1,*}(주)성문시스텍 한국분석과학연구소
*Corresponding author: jh3370@naver.com

IEC/TC 111/WG 3은 2008년 12월 전기전자제품의 유해물질 규제(RoHS) 시험분석방법인 IEC 62321 Ed. 1.0을 제정한 이후, 대상 유해물질을 RoHS 만으로 국한하지 않고 REACH SVHCs 등 전세계 전기전자 제품의 규제와 관련된 유해물질로 Scope를 넓히기로 결정하였다. 이러한 출발점에서 특정 Phthalates에 대한 분석방법 국제표준화 (IEC 62321-8)를 추진하여 2017년 제정하였고, 그 이후 HBCDD가 UNEP에서 2015년 6월 이후 사용금지 대상물질로 결정됨에 따라 IEC 62321-9에서 분석방법 국제표준화를 한국NC 제안 후 현재 CDV(위원회안 투표)가 진행 중이다. 또한 최근 2014년 전후로 화두가 된 ICT 제품 중에서 인체접촉으로 인해 유해물질 우려가 큰 Wearable smart device에 대한 표준화 논의가 되기 시작하였으며, 유해물질에 대한 우려가 증가하여, WG3에서는 PAHs (다환방향족탄화수소) 물질을 한국대표단의 제안 후 현재 CDV단계 진행중이며, 그 이후 제안된 TCEP(인계 난연제)에 대한 시험방법은 NWIP(신규표준안 제안)가 통과된 상황이다.

현재 IEC 62321 family standard는 RoHS 및 ELV, REACH SVHCs 등의 규제에만 국한되지 않고 전세계 전기전자/자동차/완구/공산품 그리고 부품 및 재료/소재 중의 유해물질 분석방법을 대표할 수 있는 표준으로 자리매김하고 있다. 유해물질 시험분석방법의 국제적인 Horizontal 표준화는 현재 IEC/TC 111/WG 3분야 참여하고 있는 한국의 시험분석 표준전문가들이 신규표준안을 주도하고 있으며, 최근 ISO/TC 61(Plastic)/SC 5(Physical-chemical properties)/WG11 (Analytical methods)과 ISO/IEC Joint working group (JWG) 설립을 통한 ISO/IEC double logo 표준화 프로젝트도 한국주도로 활발하게 추진중이며, 그 시작 표준은 TCEP(인계난연제)에 대한 시험방법이 선정되었다. IEC/TC 111에서는 2017년말 NWIP가 통과 되었으며, ISO/TC 61/SC 5에서는 10월 현재 NWIP 회람 및 투표가 진행 중이다. 이러한 중장기 표준화 활동은 한국 시험분석 표준전문가들의 근본적인 국제 경쟁력 강화 및 젊은 시험분석자들에게 미래에 대한 큰 도전의 기회를 제공할 수 있을 것으로 판단된다.

2018년 10월 부산에서 개최되는 IEC GM (General meeting) 이후 IEC/TC 111/WG 3의 공동작업반장 역할을 맡게 될 한국대표단은 향후 유해물질 시험방법 국제 표준화를 이끌어 감에 있어서 매우 중요한 역할을 담당할 것으로 판단된다. 또한 성공적으로 추진될 ISO /TC 61/SC 5/WG 11과 IEC/TC 111/WG 3와의 JWG 설립 시에도 한국대표가 공동작업반장 역할을 맡을 예정이다.

국제표준화는 최소 3~5년까지 소요되는 중장기 프로젝트로, 이에 참여하여 국익을 대변하려면 사전 준비기간은 물론 3~5년 동안의 지속적인 참여가 필요하다. 또한 시험분석 표준분야 전문지식과 경험이 풍부하고 Global 전문가로서 소통과 표준조화에 대한 이해도가 높은 전문가를 표준화 활동에 참여시키는 소속 기관장의 적극적인 후원 또한 요구된다.

PI급 구두 강연 IV
(2018년 11월 16일)

신라 왕경유적 출토 옛사람 뼈의 분자유전학적 분석

김수훈*, 김윤지, 조은민, 윤은영

국립문화재연구소 보존과학연구실

*Corresponding author: shkim85@korea.kr

유적지에서 출토된 뼈는 키, 나이, 성별, 유전자 정보 등 개별 특성을 제공하고 집단매장지의 경우 피장자의 유전정보를 통해 친연관계도 분석할 수 있는 중요한 연구 자료이다. 국내에서는 나주 복암리 유적지 출토 옛사람 뼈 DNA 분석을 시작으로 분자유전학적 연구가 활발히 진행되고 있으며 시대별, 지역별 분석 자료가 축적되고 있다. 본 연구에서는 국립경주문화재연구소가 발굴한 신라왕경유적(월지동편지구)의 3호 우물에서 출토된 옛사람 뼈를 대상으로 분자유전학적 분석을 수행하였다. 우물의 깊이에 따라 구분한 여러 구간의 넓은 범위에서 성인 뼈 1개체와 소아, 유아, 영아 뼈 각 1개체씩 총 4개체가 발견되었다. 미토콘드리아 DNA 과변이 부위의 염기서열을 분석하기 위해서 실리카이온교환컬럼법으로 4개체의 DNA를 추출하였으며 표준염기서열과 비교를 통해 개체별 변이형을 확인하였다. 분석 결과 3개체의 하플로타입이 동정되어 성인 뼈는 M7b, 유아와 영아는 D4g1 하플로 그룹으로 분류되었으며 유아와 영아는 같은 변이형을 공유하는 것으로 나타났다. 이는 신라시대 왕경유적의 우물에서 출토된 개체의 변이형에 따른 하플로 그룹을 동정하고 이를 토대로 개체간의 모계 유연관계 가능성이 제시된 분석 사례이다.

몽골 샤하르톨고이 유적에서 발굴된 옛사람 뼈의 DNA 분석

DNA Analysis in Ancient Human Bone from the Shaakhar Tolgoi Site in Mongol

조은민*, 김수훈, 김윤지, 윤은영

¹국립문화재연구소 보존과학연구실

*Corresponding author: emcho85@korea.kr

옛사람 뼈의 분자유전학적 분석은 인류학 연구에 DNA 분석기술의 적용이 보편화 되면서 부터 가능하게 되었다. 고 DNA에 대한 분석은 집단유전학의 특징뿐만 아니라 성별 결정, 혈연관계 분석에도 유용하지만 오랜 시간 매장되어 온 환경으로 인해 손상되어 분석하는데 많은 어려움이 있고 오염의 문제가 항상 제기되어 왔다. 본 연구에서는 몽골 샤하르톨고이 지역의 흥노 적색분에서 출토된 옛사람 뼈의 노출과정부터 분석자가 함께 참여하여 DNA를 분석한 결과이다. 옛사람 뼈가 출토된 무덤의 조성 시기는 대략 청동기에서 초기철기시대로 추정되며 DNA분석에는 넙다리 뼈가 사용되었다. 추출된 DNA는 3.9533pg/ul의 정량값이 측정되었으며 보존상태가 양호한 편에 속하였다. 성별은 형질인류학과 아멜로제닌 유전자 분석 모두 동일하게 여성으로 판별되었으며 미토콘드리아 DNA 하플로그룹은 U4a2에 속한 것으로 나타났다. 상염색체 STR 분석도 함께 수행하여 9좌위 모두 분석 값이 나왔으나 1구만 출토되어 혈연관계 분석은 불가능하였다. 몽골에서 출토된 옛사람 뼈의 경우 기후·토양 등 환경적 요인으로 인하여 보존상태가 매우 양호하였으며 현장 작업자가 아닌 고DNA 분석자가 직접 발굴, 수습하여 발생할 수 있는 오염을 차단함으로써 신뢰성 있는 결과를 얻을 수 있었다.

Multiplexed Fluorescence-free In-depth 3D Live Cell Super-resolution Imaging by Correlative Light Sheet Microscopy

Suresh Kumar Chakkarapani, Seong Ho Kang*

Department of Applied Chemistry, Kyung Hee University

*Corresponding author: shkang@khu.ac.kr

Three-dimensional (3D) fluorescence-free super-resolution imaging of live single cell were observed in real time by correlative light sheet super-resolution microscopy. Gold nanorods (AuNRs) are excellent orientation probes due to their anisotropic optical properties. Their orientations in live cell especially at the nuclear indentation site was disclosed with correlative light sheet microscopy. The light sheet microscopy was correlated with polarizer for controlled AuNR photoswitching and cylindrical lens for 3D imaging. Varying the polarizer angle resolved the orientation of individual AuNRs. 3D images of individual nanoparticles were resolved in aggregated regions, resulting in as low as 64 nm axial resolution and 28 nm spatial resolution. The proposed imaging setup and localization approach demonstrates a convenient method for deep live single imaging with 3D super-resolution.

**DI 분석과학상
수상 강연**

역상 액체 크로마토그래피에 의한 금속 킬레이트 분리 및 지르코니아 기반 정지상에서의 키랄 분리

김인환*

대구대학교 화학교육과

*ihkim@daegu.ac.kr

최근 과학의 많은 분야에서 크게 발전한 고성능 액체 크로마토그래피(High Performance Liquid Chromatography ; HPLC)의 응용 범위가 각종 식품, 의약품, 석유제품, 생체 및 환경 등과 같은 시료에 함유되어 있는 유기물질뿐만 아니라 금속이온의 분리 및 정량 등과 같은 무기분석화학 분야에 이르기까지 널리 이용되고 있다.

HPLC를 이용하여 금속을 분리 정량하는 방법을 보면, 정상(normal phase), 역상(reversed phase), 이온쌍(ion-pair) 및 이온교환(ion exchange), 등 여러 가지 방법이 있는데, 역상 분리법이 많이 이용되고 있다. 역상 분리법은 주로 적당한 킬레이트 시약으로 금속 킬레이트를 형성시킨 다음, 착물의 극성, 용해도 및 기하학적 구조 등과 같은 물리화학적 성질의 차이에 의하여 분리하는 방법이다. 대표적인 킬레이트 시약으로는 acetylacetone과 같은 β -diketone류, dithizone, 8-hydroxyquinoline 및 N, N-disubstituted dithiocarbamate(DTC)류를 들 수 있다.

본 연구에서는 isonitrosoacetylacetone(HIAA), isonitrosobenzoylacetone(HIBA) 및 isonitrosoethylacetoacetate(HIEAA)와 같은 α -isonitroso- β -diketone류와 N-alkyl imine 유도체인 N-methylisonitrosoacetylacetone imine(HIAA-NMe), N-ethylisonitrosoacetylacetone imine(HIAA-NEt) 등과 같은 α -isonitroso- β -diketone imine류의 몇 가지 유도체들을 킬레이트 시약으로 사용하여 미량 Pd(II), Ni(II), 및 Co(III)등과 같은 금속 이온을 역상 HPLC법으로 분리를 시도하였으며, 금속킬레이트의 용리 거동에 영향을 미치는 몇 가지 인자들을 조사하여 그 결과로부터 금속 킬레이트의 용리 메커니즘을 규명하였다. 또한 이들 혼합 금속 킬레이트들의 동시 분리 및 정량 분석에의 이용 가능성을 조사 검토하였다.

또한 다른 연구에서는, 최근에 서로 겹칠 수 없는 거울상 화합물 즉 키랄 화합물의 분리가 엄청난 발전을 가져옴에 따라 키랄 정지상이 관심을 받게 되었는데, 키랄 정지상으로서 지르코니아 기반 정지상에 대한 연구가 많이 이루어지게 되었다. Zirconia는 아주 좋은 chromatographic support materials 중의 하나로 알려져 있다.

지르코니아 기반 키랄 정지상으로서 β -Cyclodextrin-hexamethylene diisocyanate copolymer-coated Zirconia(CDPUZ) 및 quinine carbamate-coated Zirconia 및 9-O-(Phenylcarbamoyl) quinine-bonded Carbon-Clad Zirconia(QNCCZ) 키랄 정지상에 대한 retention 및 selectivity 등을 조사하며 서로 비교 검토한 연구 결과를 소개하고자 한다.

대학원생 구두 발표

(2018년 11월 16일)

GF-1

Nonspecific inhibition of PF543 on Serine Palmitoyltransferase Activity Detecting by LC-MS/MS

Maftuna Shamshiddinova¹, Dong-Jae Baek², Kyung-Ran Min¹,
Khilola Nazrullaeva¹ and Yong-Moon Lee¹

¹College of Pharmacy, Chungbuk National University, Cheongju, Korea

²College of Pharmacy, Mokpo National University, Mokpo, Korea
ymleefn@cbnu.ac.kr

Introduction: The sphingolipid rheostat which has been suggested the balance of sphingolipid metabolites, ceramide (Cer) and sphingosine 1-phosphate (S1P) in cells might determine the cell death or cell proliferation. This rheostat theory has long been accepted in the research for pathogenesis of various cancers and their treatment by enhancing Cer accumulation in cancer cells. The sphingolipid rheostat of Cer increase is generally observed by the *de novo* synthesis from serine palmitoyl transferase (SPT) activation, the activation of sphingomyelinase (SMase) and the inhibition of sphingosine kinases (SphKs). Thus, there have been several efforts to develop SphKs inhibitors which is able to change the sphingolipid rheostat greatly by increasing Cer and lowering S1P levels. In this study, several synthetic SphK1 inhibitors of PF543 derivatives were tested to evaluate their specificities by monitoring the influence on SPT activity. The selected PF543 analogs (DPF543, RB0035, RB012, RB040, A013) on SPT activity was investigated by measuring isotope-labeled dihydrosphingosine (DHS) product in HaCaT cells.

Methods: HaCaT cells were cultured in Dulbecco's modified Eagle's medium supplemented with 10% fetal bovine serum in a humidified incubator at 37°C with 5% CO₂, and confluent cells were used for the experiments. Cells were incubated for 24 hours with 10µM of different SphK1 inhibitors. Cells were harvested and lysate. 200µg HaCaT cells protein was incubated at 37°C for 15 min with 200µL of 0.1 M HEPES buffer containing 5mM DTT, 50µM pyridoxal phosphate, 100 µM palmitoyl-CoA, 7,6 mM -Ser (3,3-D2). Reaction was stopped by adding 2 ml 0.5N NH₄OH. After adding 25 pmol C17- SPH (IS), lipids were extracted by adding 2.5 ml chloroform methanol (2:1) and vortexed vigorously. After centrifugation at 4000g for 5 min, the upper aqueous phase was removed, and the lower organic phase was washed with 5 ml water twice. The organic phase was dried under nitrogen gas and reconstituted in 100 µl MeOH. Lipid from samples were injected and eluted from column C18, 4.6 X 50 mm, 2.7 µm particle size column with 50%-98% methanol gradient generated from mobile phase A (2% formic acid and 2 mM ammonium formate in water) and mobile phase B (2% formic acid and 1 mM ammonium formate in MeOH).

Results: The mass spectrometer was operated in multiple reaction monitoring positive ionization mode, monitored the following transitions: m/z 286.2>268.2 for C17-SPH and 304.3>286.3 for DHS (+2). Data were collected and processed using Xcalibur software. Impact of PF543 derivatives on SPT activity was calculated in comparison with control by using the ratio between DHS (+2) and IS areas. In comparison with a control, PF543, RB0035 and RB012 showed 91% inhibition of SPT. In case of DPF543, the DHS (+2) yield was decreased to 82%. RB040 and A013 was moderately inhibit the SPT activity up to 69%.

Conclusion: We developed the SPT activity assay by incubating D,D- L-serine in the media and then measured corresponding product, DHS (+2) selectively by LC-MS/MS. Unexpectedly, comparing to other synthetic SphK1 inhibitors, SphK1 specific inhibitor, PF543 strong inhibited the DHS (+2) synthesis, indicating non-specific inhibition on SPT activity as well.

Determination of 15 endocrine disruptors in human saliva using GC-MS

VU THI HOANG VAN^{1,*}, SHIN HO-SANG²

^{1,*}Kongju National University, Department of Environmental Science,

²Kongju National University, Department of Environmental Education

*Corresponding author: vuhoang.van@gmail.com

There has been growing interest in endocrine disruptors (EDCs) as they are chemicals that can interfere with/or mimic endocrine (or hormone) systems at certain doses, acting as agonists or antagonists. These chemicals can be easily found in our environment, food, and consumer products. Many methods have been developed for detect these substances in human body, but most of them used urine or blood as the matrix. GC-MS is advisable for analyzing these substances; however, to get better separations with increased resolution and response, especially for phthalates, derivatization should be done before GC-MS.

This study is to develop a method for a simultaneous analysis of 15 EDCs in human saliva, using GC-MS and derivatization. Silylation was selected among other derivatization methods. While many silyl derivatives have limited stability with regard to hydrolysis, MTBSTFA help the formation of ter.-butyl-dimethylsilyl (ter.-BCMS) derivatives which are less sensitive to hydrolysis.

The effect of solvents, times, and temperature, pH was verified for both the derivatization and extraction method. Method validations, including linearity, accuracy, precision, recovery, LOD, LOQ, have been tested. The calibration curves were linear with the concentration range of 0.1 ppb to 100ppb ($R^2 > 0.99$).

Through this study, a rapid, sensitive and efficient method has been successfully developed for determination of 15 EDCs via human saliva.

**Chemical Compositions and Emission Characteristics of Atmospheric
Aerosols in relation to Meteorological Conditions
at Background Site of Korea during 2017**

**Lyun-kyung Kim, Jung-Min Song, Jun-Oh Bu, Sook-Young Park,
Hyo-Sun Yang, Chang-Hee Kang***

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

*Corresponding author: changhee@jejunu.ac.kr

The collection of atmospheric PM₁₀ and PM_{2.5} aerosols was made at Gosan site of Jeju Island, which is one of the background sites of Korea, in 2017. Their ionic species were analyzed in order to examine the variation of chemical compositions in relation to the different meteorological conditions. The mass concentrations of PM₁₀ and PM_{2.5} were 21.0±9.2 and 11.9±6.6 µg/m³, respectively during non-event days. The concentrations of secondary pollutants such as nss-SO₄²⁻, NO₃⁻, and NH₄⁺ were 3.38, 2.36, 1.61 µg/m³ for PM₁₀, and 3.27, 0.94, 1.42 µg/m³ for PM_{2.5}, respectively. From the study of chemical composition according to the particle sizes, the concentration ratios of PM_{2.5}/PM₁₀ for nss-SO₄²⁻ and NH₄⁺ were 0.97 and 0.88, respectively, indicating that those species were existed mainly in PM_{2.5} fine particulate matter. On the other hand, NO₃⁻, Na⁺, Cl⁻ and nss-Ca²⁺ were rich in PM₁₀ aerosol particles. During the Asian Dust periods, the concentrations of nss-Ca²⁺ and NO₃⁻ increased highly as 13.7 and 1.5 times in PM₁₀, compared to non-event days. For the haze days, the concentrations of secondary air pollutants were increased 2.3~3.7 and 3.5~3.9 times in PM₁₀ and PM_{2.5}, respectively. Furthermore, the remarkable increase of NO₃⁻ concentration was observed in PM_{2.5} during haze events. The concentrations of secondary pollutants during the mist event days were high as 0.7~1.3 and 0.9~1.0 times, respectively, in PM₁₀ and PM_{2.5} aerosols, compared to non-event days. The neutralization factors by ammonia were 0.78, 0.21, 0.84, 0.84, respectively, for non-events, Asian dust, haze and mist days in PM₁₀, besides they were 0.92, 0.47, 0.95, 0.98, respectively, in PM_{2.5}. Meanwhile, those by calcium carbonate were 0.10, 0.70, 0.05, 0.09 in PM₁₀, and 0.03, 0.27, 0.01, 0.05 in PM_{2.5}, respectively. The back trajectory analysis showed that the concentrations of secondary air pollutants and soil species of both PM₁₀ and PM_{2.5} particles were high when the airflow moved from China continent to Jeju Island.

Composition and Pollution Characteristics of Ionic Precipitation Components in Jeju Island

**Jun-Oh Bu, Soo-Young Kim, Hee-Ju Kang, Geon-Yoon Kim,
Jung-Min Song, Chang-Hee Kang***

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

*Corresponding author: changhee@jejunu.ac.kr

Trace amount of organic acids as well as major ionic components have been analyzed in precipitation at Jeju Island of Korea during 2015~2017. The total number of precipitation samples was 183, and their ionic components were analyzed by ion chromatography. From the comparison in term of ion balance, electric conductivity, and acid fraction of precipitation, their correlations showed good linearity in the range of 0.973~0.991, indicating a good quality of the analytical data. During the study periods, the volume-weighted mean pH and electric conductivity were 5.0 and 18.7 $\mu\text{S}/\text{cm}$, respectively, showing weak acidic precipitations below pH 5.5 by 78% frequency. The ionic strength of precipitation was 0.21 ± 0.21 mM, indicating 39.3% of total precipitation within a pure precipitation criteria. The volume-weighted mean concentrations ($\mu\text{eq}/\text{L}$) of the ionic species in precipitation were in the order of $\text{Cl}^- > \text{Na}^+ > \text{nss-SO}_4^{2-} > \text{NH}_4^+ > \text{NO}_3^- > \text{Mg}^{2+} > \text{H}^+ > \text{nss-Ca}^{2+} > \text{HCOO}^- > \text{K}^+ > \text{CH}_3\text{COO}^- > \text{HCO}_3^- > \text{F}^- > \text{CH}_3\text{SO}_3^-$. The major marine (Na^+ , Cl^- , Mg^{2+}), secondary pollutants (NH_4^+ , NO_3^- , nss-SO_4^{2-}) and soil (nss-Ca^{2+}) species have contributed to the total ionic components of precipitation in Jeju area by 50.5%, 34.8%, and 4.8%, respectively. The acidity contributions by sulfuric and nitric acid were 46.4% and 44.4%, respectively. Meanwhile the acidity contributions by formic and acetic acids were 5.5% and 3.8%, respectively. Based on the back trajectory analysis, the high concentrations of ionic species were mostly associated with northwesterly winds from the continental area, on the other hand, the relatively low concentrations with the winds coming from the North Pacific area.

Determination of curcumin in rat plasma using UPLC-MS/MS and its application to a pharmacokinetic study of a novel curcumin formulation

Jun Sang Yu¹, Yu Mee Han², Hee Joung Joung³, Hye Hyun Yoo^{1,★}

¹Department of Pharmacy, Hanyang University, Ansan, Korea.

²Dongoh Life Science Co., Ltd. #301B Venture Center, 303 Cheonjam-ro Wansan-gu, Jeonju-si, Jeollabuk-do, Korea

³Kyungnong Co., Ltd., 13F, Dongoh B/D., 28 Hyoryeong-ro77gil, Secho-gu, Seoul, Korea

In this study, a sensitive, simple and reliable method for the quantification of curcumin in rat plasma was developed and validated using ultra performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry (UPLC-MS/MS). The plasma samples were prepared by liquid-liquid extraction, and terfenadine was used as an internal standard (IS). Chromatographic separation was achieved using a phenomenex kinetex C18 column (2.1 X 50 mm, 2.6 μ m) with a mobile phase consisting of 0.1 % acetic acid-acetonitrile (60:40, v/v). The precursor-product ion pairs used for multiple reaction monitoring were m/z 369 -> 177 (curcumin) and m/z 472 -> 436 (IS, terfenadine). A calibration curve for curcumin was constructed over the range 1-3000 ng/mL. The developed method was specific, precise and accurate. The validated method was successfully applied to a pharmacokinetic study of Dongoh water-soluble curcumin, a new formulation of curcumin with excipients in rats.

Keywords: Curcumin, UPLC-MS/MS, Pharmacokinetics, Rats

Rapid and accurate simultaneous determination of natural toxic pyrrolizidine alkaloid in medicinal plant by UPLC-ESI-Q-TOF

Won Tae Jeong, Hyun Ki Cho, Hyung Ryeol Lee, Ki Hoon Song and Heung Bin Li*

*Department of Industrial Crop Science & Technology,
Chungbuk National University Cheongju, Chungbuk 28644, Korea

*Corresponding author: heungbin@chungbuk.ac.kr

PAs (pyrrolizidine alkaloids) are secondary metabolites biosynthesized from plants and found in some 6,000 plants. Among them, 1,2-unsaturated PAs cause hepatotoxicity and genotoxicity in humans and animals and have been reported to be widely present in medicinal plants belong to *Asteraceae*, *Boraginaceae* and *Fabaceae*. Hence there is a need for analytic method that allows dangerous plant toxins to be determined. In this study, we set up an analytical method that can be used for rapid and accurate determination of nine toxin PAs in medicinal plants using UPLC-ESI-Q-TOF (ultra pressure liquid chromatography–electrospray ionization–quadrupole–time-of-flight mass spectrometry). The compounds were eluted on a C18 column with 0.1% formic acid and acetonitrile, and separated with good resolution within 11 min. Each of the separated components was characterized by precursor ions (generated by ESI-Q-TOF) and fragmentations (produced by collision-induced dissociation, CID), which were used as a reliable database. The proposed analytical method was verified in reference to the ICH guidelines and the results showed excellent linearity ($R^2 > 0.9951$), limit of detection (2 ng/mL to 6 ng/mL), limit of quantification (6 ng/mL to 21 ng/mL), intra-day and inter-day precisions (76.9% to 103.3%) for all components. The validated UPLC-ESI-Q-TOF method was applied to real sample, and a total of eight alkaloids were detected in three plants, of which four alkaloids were identified by matching with the reference compounds and the remaining alkaloids were tentatively identified. The QuEChERS extraction method was also the most efficient method for simultaneously extracting nine alkaloids. Our proposed method can be performed within 30 minutes from extraction to analysis and will be applied to various medicinal crops.

GF-7

Surface homogeneity enhancement of 2,5-Dihydroxybenzoic acid matrix using on-target recrystallization by acetonitrile droplet in MALDI-MS dried-droplet sample preparation

원유광, 김여선, 이다빈, 박소영, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

2,5-Dihydroxybenzoic acid (DHB) is one of the most common matrices used in matrix-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry (MALDI-MS) due to its robustness and wide-range of applications. However, samples prepared with DHB using dried-droplet preparation often produce heterogeneous distribution of analyte in the dried droplet surface, caused by various effects of thermodynamics and microfluidics during the drying process. In this research, we introduce recrystallization of surface deposits using acetonitrile (ACN) as a simple and effective method for enhancing homogeneity of analyte distribution, to increase reproducibility of MALDI-MS signals. Analyte and matrices were loaded on MALDI target plate and dried in atmospheric conditions, followed by a single-step recrystallization using an ACN droplet of different volumes (0.5, 1.0 or 1.5 μ L). Preliminary optimization of recrystallizing solvent droplet's volume and drying conditions revealed significant improvements in crystal shape and size, compared to untreated droplets.

Early Bird Seminar

LC-MS/MS에 적용된 새로운 Q0 기술

김왕유

퍼킨엘머 코리아

Corresponding author: wang-yu.kim@perkinelmer.com

질량분석에 있어서 어려운 점의 하나가 이온화 효율의 일정한 관리이다. 보편적인 자외선 혹은 형광 검출기와는 달리 질량분석기는 이온화 효율에 따라 분석물질의 감도가 영향을 크게 받는다. 특히 이온소스 및 첫 번째 질량분석기로 이온을 이동하는 공간인 Q0에 적용된 기술은 질량분석기 진보에 핵심요소중의 하나로 꼽을 수 있다.

ESI 인터페이스를 통해 이온화된 물질은 질량분석기 입구로 들어가면서 여러 이온 오프셋을 거치게 되는 데, 분석에 방해되는 물질을 제거하면서 전송 효율을 높이게 된다. 현재 각 질량분석기 제조사별로 독특한 기술을 채택하고 있으나, 이온 경로에서의 오염은 피할 수 없으며 이는 결국 최종 시그널의 불안정으로 이어진다. 또한 이온 전송을 위해 적용된 축방향 전기장은 이온화된 분자들 간의 충돌로 인한 산란 가능성을 높여 각 질량대별로 세심한 튜닝 설정이 필요하게 된다.

이러한 난관을 극복하는 기술 중의 하나가 HSID™ 기술이다.(Hot Surface Induced Desolvation) 질량분석기로 들어간 이온들은 laminar flow gas 흐름에 따라 질량분석기 내부로 이송됨과 동시에 이러한 가스 흐름은 내부를 깨끗하게 유지하는 역할을 겸하게 된다. 또한 뜨거운 가스에서 에너지를 받아 완벽한 desolvation을 가능하게 한다. 그 결과 최종적으로 안정적인 시그널을 생성하며, 전체 질량 범위에서 추가적인 튜닝이 필요없게 된다.

HSID™ 기술은 농산물, 임상 및 폐수 시료와 같이 매트릭스가 복잡한 시료를 분석할 경우 장기적인 안정성을 가져오며, 추가적인 튜닝이 필요하지 않아 분석법 개발의 어려움을 덜어줄 수 있는 새로운 기술로 각광받고 있다.

유도결합플라즈마 질량분석기(ICP-MS)를 활용한 나노 입자 및 단일 세포 분석

이창환

퍼킨엘머 코리아

corresponding author: chang-hwan.lee@perkinelmer.com

Single Particle ICP-MS(SP-ICP-MS)기술의 도입 및 개발은 다양한 매트릭스와 응용들 가운데서 금속 기반 입자의 신속한 감지 및 분석을 가능하게 하는 연구의 새로운 영역을 열었습니다. SP-ICP-MS의 주요 특징은 사중극자 내에서 매우 짧은 시간의 간격 즉, microsecond(μ s) 단위의 데이터 수집 속도를 사용하여, time-resolved 방식으로 양이온들의 이산 펄스를 감지하여 측정할 수 있다는 것입니다. 이렇게 진보된 데이터 수집 기능을 통하여 나노 크기의 입자들에 대한 성분 및 크기를 정의하여 새로운 응용 범위를 꾸준히 넓혀가고 있습니다.

고체입자의 측정과 달리, 개별 세포 내의 금속 함유량을 신속하게 분석하는 방법인 Single Cell ICP-MS(SC-ICP-MS)의 기술이 최근 도입되고 있습니다. 나노 입자는 플라즈마에 들어가면 완전히 이온화 되어 ICP-MS로 검출할 수 있는 이온 구름을 생성 합니다. 이와 같이 개별 세포가 플라즈마에 들어가면 세포가 분해되고, 세포 내에 분포한 금속으로부터 생성된 이온 구름은 ICP-MS에 의해 single particle 검출과 동일한 방법으로 실시간으로 측정됩니다. SC-ICP-MS의 대표적인 응용분야는 암치료 화학요법(Cancer Chemotherapy)에서 백금(Platinum)의 세포흡수에 대한 연구입니다. 백금 함유 화합물 (cisplatin, *(SP-4-2)-diamminedichloroplatinum (III)*)은 가장 일반적으로 암 화학요법에 사용되는 화합물로 그 효과는 세포 내로의 흡수 정도와 관련이 있습니다. 세포 내로 흡수된 cisplatin 양이 증가하는 것은 더 효과적인 암 치료제로 변환되었다는 것을 의미합니다. 많은 암세포가 cisplatin과 반응 하는 동안, 몇몇의 암세포는 저항하게 되고 이에 따라 세포내로 흡수가 감소하게 됩니다. 따라서 개별 암 세포내의 백금의 함량은 치료 효과에 대한 예측 인자로서 역할을 할 수 있습니다. 이처럼 SC-ICP-MS 법은 단일세포 수준에서 약물의 흡수율을 모니터링 하여, 금속 함유 약물에 대한 세포와의 상호작용을 연구하는 데 새롭게 접목되고 있습니다.

포스터 발표 I
(2018년 11월 15일)

국내 연근해산 수산물의 PCDD/Fs, DLPCBs 및 PCNs의 잔류수준과 분포 특성

박시현, 최민규, 김정배, 이인석*

국립수산과학원 어장환경과

*Corresponding author: islee@korea.kr

폴리염화나프탈렌(Polychlorinated naphthalene, PCNs)은 2015년 스톡홀름협약에서 신규 잔류성유기오염물질(Persistent organic pollutants, POPs)로 지정된 물질이며, 다이옥신류 피씨비(Dioxin-like polychlorinated biphenyls, DLPCBs)와 마찬가지로 다이옥신(Polychlorinated dibenzo-p-dioxin and furans, PCDD/Fs)과 유사한 발암성 및 독성을 나타내는 것으로 알려져 있다. 현재까지 해양생물 내 PCDD/Fs와 DLPCBs에 대한 연구는 많이 진행되어 왔으나 PCNs에 대한 연구는 부족하다. 따라서 본 연구에서는 2016년 국내 유통된 연근해산 수산물을 대상으로 PCDD/Fs(17종), DLPCBs(12종)와 함께 PCNs(12종)의 잔류수준을 분석하고자 하였으며, 조사대상 수산물은 총 43종으로 어류 31종, 연체류 11종(이매패강 8종, 두족강 2종, 피낭류 1종) 및 갑각류 1종이다. 수산물 43종의 WHO₁₉₈₈-TEQ 농도범위는 PCDD/Fs가 불검출~0.59 pg TEQ/g ww(평균 0.10), DLPCBs는 0.00~1.03(평균 0.26), PCNs[Relative potency factor 적용, FSA (2008) 기준]은 불검출~0.09(평균 0.01) 이었으며, 총 TEQ 범위가 0.00~1.67(평균 0.37)로 선행연구와 비교해 낮은 수준을 보였다. 생물 종별 농도는 어류>피낭류>이매패강>두족강>갑각류 순으로 높게 나타나 이것은 먹이사슬의 위치, 지방량 및 생물의 생활환경에 따른 결과라 판단되며, 조사 개체 중 삼치, 청어 및 봉장어의 농도가 높았다. 총 TEQ 값에 대한 대상물질의 기여도의 경우, 피낭류를 제외한 모든 생물종에서 DLPCBs와 PCDD/Fs가 각각 70~87%와 12%~27%로 높았으며, 피낭류의 경우 PCDD/Fs가 54%로 가장 높았다. 또한, 각 물질의 이성질체 조성비를 조사한 결과, DLPCBs는 모든 생물종에서 PCB 126이 86% 이상으로 가장 높았으나, PCDD/Fs의 경우, 두족강과 갑각류를 제외한 모든 생물종에서 23478-P5CDF와 2378-T4CDF의 기여도가 각각 49~80%와 6~42%로 높았으며, 두족강과 갑각류는 2378-T4CDF가 83~94%로 가장 높은 분포도를 보였다. 또한, PCNs의 이성질체 조성비에서 갑각류를 제외한 모든 생물종에서 PCN 66/67이 65~98%로 가장 높았으나 갑각류의 경우 PCN 52가 기여율 100%를 보여 대상물질과 생물종에 따른 이성질체 분포도 차이를 보였다. 국내외 선행연구 및 본 연구 결과, 해양생물에 대한 PCDD/Fs와 PCBs의 농도는 점차 감소하는 추세이지만, 산업활동과 경제성장으로 신규 POPs 물질이 추가되고 있으므로, 기존의 POPs 물질과 더불어 PCNs을 비롯한 신규오염물질에 대한 지속적인 모니터링이 필요하다고 판단된다.

수산 환경과 양식생물 중 펜타클로로페놀(PCP) 분석방법 정립과 양식장 밀집해역 내 스크리닝

김예지¹, 성재현¹, 최민규¹, 김정배¹, 이인석^{1*}

¹국립수산과학원 어장환경과

*Corresponding author: islee@korea.kr

펜타클로로페놀(Pentachlorophenol, PCP)은 1930년대부터 목재, 페인트, 섬유 및 산업폐기물에 곰팡이, 조류, 이끼류 및 미생물의 성장을 방지하기 위해 오랜 기간 사용되어 온 물질이다. 그러나 생물에 대한 독성과 환경 내에 오래 잔류하는 특성이 알려지면서 2015년 제7차 스톡홀름협약 당사국 총회에서 신규 잔류성 유기오염물질(Persistent Organic Pollutants, POPs)로 등재되었다. 우리나라는 스톡홀름협약에 비준함에 따라 국내 POPs 물질의 체계적 관리를 위한 배출원 및 배출량 조사, 국내 관련법 개정 등 후속적 조치가 필요한 실정이나 신규 물질에 대한 연구가 부족한 상태로 신규 물질의 환경 중 잔류 및 거동 확인을 위한 주기적인 모니터링이 필요하다. 이에 따라 본 연구에서는 수산환경과 양식생물 중 PCP 조사를 위한 매체별 분석방법을 정립하고자 하였다. 또한 정립한 분석법을 바탕으로 양식어장 밀집지역에 대한 스크리닝을 수행했으며, 조사대상 물질인 PCP를 포함한 염화페놀류(Chlorophenols) 17종에 대한 잔류수준과 검출빈도에 따라 향후 모니터링 주기를 산정하고자 하였다.

PCP는 분자 내에 극성기(-OH)를 가지고 있어 GC에 직접 주입 시 분리도가 감소하고 검출 감도가 낮아지는 현상이 나타나므로 검출감도를 높이기 위해 PCP의 하이드록실기를 휘발성이 높은 유도체로 전환시키는 과정이 필요하다. 본 연구에서는 무수초산(Acetic anhydride)을 이용해 유도체화 하여 분석을 진행하였다. 해수시료는 GF/F glass fiber filters, ENVI disk를 이용하여 여과한 뒤 건조하고, 생물과 퇴적물 시료는 균질화한 뒤 동결건조 하였다. 건조된 여지와 건시료(생물:3 g, 퇴적물:10 g)를 가속 용매 추출기를 통해 Dichloromethane으로 추출 후 농축하여 Acetic anhydride를 이용하여 유도체화 한 뒤 HLB SPE 후 농축하여 GC/MS로 분석하였다.

진해만 내의 9정점에서 채취한 해수, 퇴적물 및 생물 시료의 $\sum_{17}CPs$ 잔류수준 범위는 해수에서 불검출 ~ 16.4 (평균 8.35 ± 5.36) ng/L, 퇴적물에서 2.20 ~ 10.0 (평균 5.04 ± 2.38) ng/g dw, 생물에서 불검출 ~ 40.0 (평균 7.54 ± 13.4) ng/g dw로 나타났으나 PCP는 모든 정점의 매체별 시료에서 불검출 되었다. 그 외 염화페놀류는 해수의 경우 2,3-DiCP가 84.6%, 퇴적물과 생물의 경우 2,6-DiCP가 각각 38.4%, 26.9%로 가장 큰 기여도를 보였다.

본 연구를 토대로 신규 POPs 물질인 PCP의 주기적인 모니터링을 진행하고, 나아가 조사 해역을 확대하여 PCP의 잔류수준을 조사한다면 스톡홀름협약 국가 이행 기반 구축의 기초자료로 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

국내 양식어장 퇴적물과 생물 중 잔류성유기오염물질 분포 특성

성재현¹, 이인석^{1*}

¹국립수산과학원 어장환경과

*Corresponding author: islee@korea.kr

다이옥신류(Polychlorinated dibenzo-p-dioxins; PCDDs, Polychlorinated dibenzo furans; PCDFs, Dioxin liked polychlorinated bephenyls; DLPCBs)는 내분비계장애물질 중의 하나이며 잔류성, 농축성, 장거리 이동의 가능성이 높은 잔류성유기오염물질이다. 주로 폐기물의 소각, 산업활동의 연소과정을 통해 발생하며 국제적으로 배출 저감을 위해 노력하고 있다. 브롬화난연제로 알려진 폴리브롬화디페닐에테르(Polychlorinated diphenyl ethers, PBDEs) 역시 잔류성유기오염물질로 지정되었으며, 전기전자제품, 도료, 직물 등 난연제의 사용으로 발생한다. 이와 같은 잔류성오염물질들은 강수, 습건식 침적 등의 과정을 통해 수산환경으로 유입될 뿐만 아니라, 연안에 위치한 산업시설물들에 의한 직접적인 영향으로 양식활동에게까지 영향을 미치고 있는 실정이다. 따라서 본 연구는 국내 연안 어장내 퇴적물과 양식생물 중 다이옥신류 및 PBDEs의 잔류수준과 분포 특성을 파악하였으며, 국내외 선행연구 및 국제기준과의 비교를 통하여 연안어장 관리를 위한 기초자료를 제공하고자 한다. 국내 연안어장내 퇴적물과 양식생물에 잔류하는 POPs 물질의 농도와 분포특성을 파악하기 위해 2017년 54개 정점에서 채취한 퇴적물과, 32개 정점의 연안어장내 양식생물에 대하여 \sum_{17} PCDD/Fs, \sum_{12} DLPCBs, \sum_{24} PBDEs를 분석하였다.

32개체 양식생물 분석 결과 \sum_{17} PCDD/Fs, \sum_{12} DLPCBs는 각각 0.00~0.10, 0.00~0.26 pg-TEQ/g ww 수준으로 나타났으며, 총 다이옥신류 (\sum_{17} PCDD/Fs + \sum_{12} DLPCBs) TEQ 농도는 0.00~0.26 pg-TEQ/g ww 수준으로, EU 최대허용수치인 6.5 pg-TEQ/g ww 보다 낮은 수준으로 검출되었다. \sum_{24} PBDEs 분석결과 0.00~0.48 ng/g ww 수준으로 나타났으며, 다이옥신류 분석결과에 비해 낮은 수준으로 검출되었다. 54개 정점의 퇴적물 분석 결과 \sum_{17} PCDD/Fs, \sum_{12} DLPCBs는 각각 0.00-11.9, 0.00~1.45 pg-TEQ/g dw 로 나타났으며, 총 다이옥신류 TEQ 농도는 0.03~13.3 pg-TEQ/g dw 수준으로, 캐나다 브리티시컬럼비아주의 해양 퇴적물질 예비기준(Level 1, 100 pg-TEQ/g dw)과 비교 시 낮은 수준으로 검출되었다. \sum_{24} PBDEs는 0.01~43.2 ng/g dw 수준으로 나타났으며, 기장해역에서 43.2 ng/g dw 수준으로 가장 높게 검출되었는데, 이는 2011년에 조성된 복합 산업단지의 영향을 받은 것으로 판단된다.

이성질체별 분포 특성으로 DLPCBs는 양식생물 퇴적물 모두 PCB 126의 기여율이 90%이상으로 가장 높게 나타났으며, PCDD/Fs는 PCDDs에 비해 PCDFs가 비교적 높게 나타났다. PBDEs의 경우 생물은 BDE 47, BDE 99가 각각 16%로 가장 높게 나타난 반면, 퇴적물에서는 BDE 209가 90% 이상으로 가장 우세하게 나타났는데, 이는 분자량의 차이로 인해 생물체 축적영향에 따른 차이로 판단된다.

본 연구 결과 생물, 퇴적물의 잔류성유기오염물질의 잔류수준이 국제적인 기준치에 비해 낮은 수준이긴 하지만, 지속적인 산업개발로 인한 퇴적물에서 양식생물로의 축적과 양식생물의 직접적인 섭취를 고려할 때, POPs물질의 모니터링과 저감방안 연구는 병행 되어야 할 것으로 판단된다.

국내 주요 해역별 계절별 신방오도료(Tin-free biocides) 잔류량 변동

이인석^{1,*}, 최민규¹, 김정배¹

¹국립수산과학원 어장환경과

*Corresponding author: islee@korea.kr

다양한 해양생물이 선박에 부착하는 것을 방지하기 위해 유기주석이 함유된 방오도료를 사용해왔으나, 생물축적성과 그 독성으로 인해 2003년 국내에선 사용이 금지되었다. 이에 대한 대체 방오도료로서 유기주석이 함유되지 않은 신방오도료(Tin-free biocides, TFB)가 사용되고 있다. 그러나 그 중 Irgarol 1051과 Diuron은 미세조류에 독성을 나타내 유럽연합(EU)을 중심으로 기준치를 설정해 관리하고 있다. 이에 본 연구에서는 국내 주요연안에서의 신방오도료 잔류량을 조사하고, 계절에 따른 변동을 평가하고자 하였다. 조사 대상 해역은 대형선박의 이동이 빈번한 우리나라 4대 항만(부산항, 부산신항, 울산항, 광양항, 인천항)과 양식장이 밀집한 해역(진해만, 고성자란만, 가막만, 한산만)으로 하였으며, 해수 중 TFB의 잔류량을 조사하여 항만과 양식 밀집해역 오염도를 비교도 더불어 수행하였다.

4대 항만 72정점, 양식장이 밀집한 4개 해역의 48정점과 선박 운항과 양식 활동이 거의 없는 외해에 위치한 무인도 주변 1정점을 대조해역으로 하여 해수 채취를 수행하였다. 채취한 시료 중 2종의 신방오도료(Diuron, Irgarol 1051)는 여과(GF/F 필터링)하고 Oasis HLB 카트리지로 정제한 후 액체크로마토그래피-텐덤 질량분석기로 분석하였다.

항만의 경우 부산항에서 가장 높은 농도를 보였으며, 내항에서 외항보다 높은 농도를 나타내었으며 이러한 패턴은 타 항만에서도 유사하게 나타났다. 주요 항만에서의 검출비율이 대체로 50% 이상인데 반해, 진해만을 제외한 양식장 밀집해역(고성자란만, 가막만, 한산만)에서는 내항의 1~2정점 외에는 대부분 불검출 되었다. 진해만의 경우 양식장이 밀집한 해역인 동시에 조선소, 하수처리장 방류구 등 일반적인 유해물질 오염원이 해역에 산재해 있어 대부분의 정점에서 TFB가 검출된 것으로 판단되며 정점별로는 유사한 농도 분포를 보였다. Diuron의 영국 환경질 기준과 비교했을 때 부산항 3정점에서 이를 초과하는 것으로 나타났으나, Irgarol은 부산항 외에는 검출되지 않았으며, 기준치 이하로 나타났다. 해역별로 동절기(2월)와 하절기(8월)의 해수 중 TFB 잔류농도를 비교한 결과 하절기에 더 높은 수준을 보였는데 ($p < 0.01$), 이는 선체 외부의 방오도료 성분이 해수 수온 상승과 더불어 하절기에 더 많이 용출되는 것으로 판단된다.

해수 중에 잔류하는 TFB는 유동/교환을 통해 수산환경에 잠재적인 영향을 미칠 수 있다. 따라서 항만에 대한 장기 모니터링과 수산환경, 특히 양식장이 밀집한 해역 중 TFB 정밀조사가 뒤따라야 할 것으로 판단되며, 관련 규제 정책이 마련되어야 할 것으로 판단된다. 또한 이 후 연구에서는 항만별 물동량과 항만을 주로 이용하는 선적사에 대한 정보 등이 수반되어 종합적으로 항만별 TFB 분포를 파악할 필요가 있을 것으로 보인다.

제주연안 육상 어류양식장 배출수와 수산용수 중 항생제 잔류 현황 모니터링

이미경¹, 이인석^{1*}, 최민규¹, 김정배¹

¹국립수산과학원 어장환경과

*Corresponding author: islee@korea.kr

제주 지역은 사면이 바다와 접하는 섬 지형으로 반 폐쇄적 내만 지형에 비해 상대적으로 육상기인 오염물질의 연안 체류시간이 짧고 수질상태가 양호하다는 자연 환경적 장점으로 인해 제주연안선 부근에는 육상양식장이 밀집되어있다. 양식현장에서는 생산성 향상과 감염증 치료 등의 목적으로 항생제와 같은 수산용의약품이 사용되고 있으나 이러한 항생제는 생물에 완전히 흡수되거나 대사(metabolism)되는 약물은 거의 없으므로 접종한 약물을 전부 회수하는 것은 불가능하다. 따라서 항생제 잔류에 의한 안전성 및 항생제의 유실로 인해 수질을 오염시킬 수 있는 환경문제를 야기할 수 있으며 항생제의 오/남용으로 인해 항생제 내성균 발생, 슈퍼박테리아의 출현 등의 또 다른 문제를 야기할 수 있다. 이에 본 연구에서는 6월과 8월에 제주연안 14개소 육상 어류양식장 배출수와 양식장 유입수로 사용되는 15정점의 수산용수(연안 표층수, 담/염 지하수)를 채취하여 제주연안 육상 어류(넙치가 대부분을 차지함) 양식장에서 가장 많이 사용되는 테트라사이클린(TC) 계열의 항생제 4종[Oxytetracycline(OTC), Tetracycline(TC), Chlortetracycline(CTC), Doxycycline(DC)]의 잔류농도를 분석하였으며, 채취시기에 따른 항생제 잔류량 변화를 평가하였다.

채취한 시료는 3.5M 황산으로 pH 3으로 조절하고 여과(GF/F 필터링)한 후 0.1 µg/mL Na₂-EDTA를 주입하고 정량용 표준물질(Sulfamethoxazole-¹³C₆)을 첨가하였다. 이를 Oasis HLB (200 mg, 6 cc) 카트리지와 Oasis MCX(150 mg, 6 cc) 카트리지를 결합해 진공감압장치에 장착하여 정제하였으며, 메탄올로 추출한 후 정량용 표준물질(Trimethoprim-d₉) 첨가 후 최종 부피를 1 mL로 하여 고성능액체크로마토그래프/텐덤 질량분석기(UPLC/MS/MS)로 분석하였다.

6월 배출 수 14개 중 5개에서 OTC가 1.56~14.92(평균 6.68) ng/L로 검출되었고, 지하수와 해수에서는 검출되지 않았다. 8월 배출 수 14개 중 5개에서 OTC가 1.92~380.84(평균 111.81) ng/L로 검출되었고, 마찬가지로 지하수와 해수에서는 검출되지 않았으며, 모든 시료에서 CTC, DC, TC는 검출되지 않았다. 8월의 OTC 검출 정점은 6월과 일치하였으나, 6월과 8월의 OTC 검출 농도를 비교하였을 때 8월의 검출 농도가 6월의 검출 농도에 비해 눈에 띄게 증가함을 보였다. 이는 올 여름 연일 지속되는 기록적인 폭염과 함께 고수온 현상으로 인해 양식장의 폐사율이 증가함에 따라 항생제의 사용이 증가하였을 것으로 판단된다. 또한 항생제는 병이 발생했을 때 사용하는 것이 원칙이지만 같은 정점에서의 항생제 검출은 그 부근의 양식장들이 예방 차원에서 연중 내내 항생제를 사용하고 있을 것으로 판단된다.

본 연구를 통해 육상양식장이 제주 연안 환경으로 상당 부분의 항생제를 배출하고 있는 것으로 평가되며, 자외선(UV) 공정이나 고도산화처리(AOP) 공정 등의 시스템을 마련하여 항생제의 환경 유입을 최소화 하는 방안을 검토해야 할 것으로 판단된다. 아울러 육상양식장에 대한 추가적인 조사와 더불어 연안 조사정점 확대와 주기적인 모니터링이 이루어져야 할 것으로 평가된다.

국내 상수원수 내 냄새 유발물질의 검출특성 연구

이선홍, 이은정, 윤미애, 김윤석*

한국수자원공사 수질연구센터

*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

Geosmin과 2-methylisoborneol(2-MIB)는 상수원수에서 조류와 방선균에 의해 냄새를 유발하는 대표적인 물질이며, 극미량의 농도에서도 심미적 영향을 유발한다. 이에 따라 정확도가 높은 분석법을 통해 냄새유발물질의 발생현황 파악이 필요한 실정이다. 따라서 본 연구에서는 먹는 물 수질감시항목 검사방법 중 헤드스페이스-고체상미량추출법(headspace-Solid phase microextraction)을 활용한 GC-MS분석법의 측정불확도를 추정하고 고민감도 분석법을 통해 상수원수에서의 냄새물질 검출현황을 파악하고자 하였다. 측정불확도는 표준용액의 제조과정, 검정곡선 및 표준물질과 시료의 기기 감응치를 고려하여 확장불확도를 계산하였으며, 2015-2017년까지 3년간 전국의 상수원수를 대상으로 매월 수질분석을 수행하였다. 그 결과 geosmin과 2-MIB는 각각 지점별 0.1-4.7 ng/L와 0.1-6.5 ng/L의 범위로 조사되었다. 상수원수 내 냄새 유발물질의 검출범위는 geosmin의 경우 0.3-49 ng/L, 2-MIB의 경우 0.7-38.5 ng/L로 나타났다. 수계별 월평균 검출농도를 조사한 결과 geosmin은 한강 상수원에서 7월, 낙동강 상수원에서 3월에 상대적으로 높은 검출 특성을 나타내었고, 2-MIB는 금강 상수원에서 5월과 11월, 낙동강 상수원에서 8월에 높은 검출특성을 나타내었다. 환경매질의 성상에 따라 분석결과의 오차가 발생할 수 있으며, 측정 불확도를 표기함으로써 측정값의 정확도를 높일 수 있다. 이와 같은 정확도가 높은 분석법을 바탕으로 전국 상수원수에서 냄새유발 물질의 검출특성을 파악함으로써 상수원수의 관리방안 수립 및 먹는 물 감시항목 운영 등 국가정책 활용에 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

미지 물질 확인을 위한 고도정수처리공정의 통계적 분석기법 적용

최원석¹, 윤미애¹, 이선홍¹, 김윤석¹ 최재원^{1*}

¹*K-water 융합연구원 수질연구센터

*Corresponding author: choijw@kwater.or.kr

수중에 존재하는 유기물질은 조류에서 미량오염물질까지 다양한 크기와 성분으로 구성되어 있어 이들에 대한 특성 이해는 정수처리와 안전한 수돗물 공급을 위해 매우 중요한 요소이다. 일반적인 수질 조사, 분석 수행 시 법정 수질 모니터링 항목 등 기존에 알고 있는 물질의 농도를 검출하는 방식으로 분석 수행하고 있다. 따라서 통계적 분석기법을 활용하여 수처리 공정에서의 유기물 거동 특성을 이해하고, 표준정수처리 공정과 고도정수처리 공정의 단위 공정별 효과분석, 신규 유해오염물질 처리 및 관리 등 수돗물 안전성 확보 방안에 관한 연구가 필요하다. 본 연구에서 미지 물질 확인을 위한 고도정수처리공정의 통계적 분석기법 적용을 통해 지금까지 확인할 수 없었던 정수처리공정에서 추가로 발생하는 유기화합물의 거동 특성을 규명할 수 있는 가능성을 확인하였고, 원수-응집-고도산화-염소 소독 공정에서 다양한 거동 특성을 갖는 유기화학물질을 확인할 수 있었고 각 공정에서 미세한 생성, 흡착에 대한 새로운 해석 가능성을 보였다.

안정동위원소를 활용한 상수원 오염원 추적 및 유입지천의 기여도 평가

김형석¹, 김정인¹, 최원석¹, 이선홍¹ 김윤석^{1*}

¹*K-water 융합연구원 수질연구센터

*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

수소, 탄소, 질소, 산소 등 안정동위원소를 활용한 연구가 원산지 판별, 식품진위 판별, 과학수사 및 수질오염원 추적 등의 분야에서 전 세계적으로 활발히 진행되고 있다. 본 연구에서는 질소와 산소 안정 동위원소 조성을 이용하여 질산염 오염물질의 유입 경로 추적과 유입지천에 대한 기여도를 평가하기 위해 상수원 저수지 중 한 곳을 선정하였다. 상수원으로 이용되는 저수지, 유입되는 상류 하천 4개 지점(A, B, C, D지점)과 저수지 하류 지점 등 총 6 지점에서 수질시료를 2년간 총 10회 채취하였고, Bacterial denitrification method를 이용하여 Isotope ratio mass spectrometer를 통해 질소 동위원소($\delta^{15}\text{N}$)와 산소 동위원소($\delta^{18}\text{O}$) 분석을 수행하였다. 각 지점별 $\delta^{15}\text{N}$ 과 $\delta^{18}\text{O}$ 의 평균값은 각각 A지점; 8.0‰, 1.0‰, B지점; 7.2‰, 4.8‰, C지점; 3.6‰, 3.6‰, D지점; 2.4‰, 4.1‰, 저수지; 6.1‰, 4.0‰, 저수지 하류; 6.6‰, 3.1‰로 나타났으며, 선행연구에서 질산염의 $\delta^{15}\text{N}$ 과 $\delta^{18}\text{O}$ 의 대푯값과 비교한 결과 상수원 저수지의 질산염 오염원은 토양 유기물, 화학비료, 가축분뇨로 예측되며 6개 지점의 $\delta^{15}\text{N}$ 과 $\delta^{18}\text{O}$ 의 최빈값들이 토양 유기물의 범위는 각각 2 ~ 9‰, -10 ~ 10‰로 측정되어 상수원 일대는 토양 유기물의 영향으로 판단된다. A와 B지점은 가축분뇨에 대한 기여도가 각각 95.3%와 72.7%로 나타났으며 C와 D지점은 화학비료에 대한 기여도가 각각 51.0%와 71.7%로 나타났다. 저수지와 하류지점은 가축분뇨에 대한 기여도가 각각 83.5%와 81.0%로 나타나 A, B지점과 함께 가축분뇨의 기여도가 큰 것으로 판단된다. $\delta^{15}\text{N}$ 과 $\delta^{18}\text{O}$ 의 조성 및 변화추이와 오염원별 기여도를 통해 상수원 저수지로 유입되는 하천 A, B, C, D지점 중 상수원에 대한 영향은 A와 B지점이 가장 크며 이 두 지점에 대한 정기적이고 지속적인 모니터링을 통하여 향후 수질관리에 있어 효율적인 방안을 제시할 수 있을 것으로 보인다.

분말활성탄(PAC)에 의한 과불화 화합물(PFCs) 제거방안

Removal of Perfluorinated Compounds (PFCs) by Powdered Activated Carbon (PAC)

정관조*, 이인자, 홍원해, 김준일, 윤우현, 장수경, 박영복, 김복순

서울물연구원

*Corresponding author : jgj730@seoul.go.kr

PFOA (perfluorooctanate), PFOS (perfluorooctanesulfonate) 및 PFHxS(perfluorohexanesulfonate)은 환경오염물질로 일부 상수원수와 수돗물에서 수 ng/L 수준의 농도로 검출되고 있다. PFOA, PFOS, PFHxS 등 PFCs (perfluorinated compounds)는 물과 기름에 저항성을 가지고 있어 조리기구, 포장지 등의 코팅제, 방수 의류, 세척제, 샴푸, 페인트 등 산업 전반에 광범위하게 사용되고 있으며 먹는물 음용, 식품의 섭취, PFCs 함유 제품의 사용 등 다양한 경로로 인체에 노출되고 있다. PFOA는 발암물질(2B), PFOS는 발암추정물질로 분류되어 있으며, PFHxS는 체중감소, 콜레스테롤 수치 감소, 혈액응고시간 증가, 갑상선 호르몬 변화 등에 영향을 주는 것으로 보고되고 있다.

정수처리공정에서 PFOA, PFOS 및 PFHxS은 혼화-응집, 침전, 모래여과 및 오존처리공정에서 변화가 없으며, 1년 미만 사용된 활성탄공정에서 효과적으로 제거되는 것으로 알려져 있다. 그러나 조사결과, 원수와 수돗물에서 PFOA, PFOS 및 PFHxS는 거의 유사한 농도로 나타나 표준 및 고도정수처리공정에서 거의 제거되지 않는 것으로 추정된다. 이것은 실제 대부분의 고도정수처리 정수장에서 사용하고 있는 입상활성탄이 1년 이상 사용된 것으로 PFOA, PFOS 및 PFHxS을 제거하는데 효과적이지 못하다고 판단된다. 현재 국내외 정수처리공정에서의 PFCs 제거에 대한 연구는 초기단계로 유사시 고농도의 PFCs 오염에 대처하기 위해서는 정수처리공정에서 PFCs의 실태조사 뿐만 아니라 제거방법의 연구는 매우 중요하다

이에 본 연구에서는 PFCs 오염 시 실제 정수처리공정에서 대처가 가능하도록 분말활성탄에 의한 PFCs 제거방법을 연구하였으며, 정수처리에서의 대응 방안을 제시하였다.

한강지천에서 인공감미료 실태조사

윤우현*, 정중순, 정관조, 홍원해, 김준일, 이인자, 안재찬, 김복순

서울특별시 서울물연구원

*Corresponding author: whyoon@seoul.go.kr

인공감미료는 설탕보다 감미도가 높고 칼로리가 거의 없는 식품첨가물로서 과자, 음료, 액젓, 탁주 등 식품에 광범위하게 사용되고 있다. 최근 연구에 따르면 인공감미료가 하천 등 지표수에서 검출되고 있으며 이는 사람이 섭취한 후 배출되거나 인공감미료를 사용하는 제조업시설 등에서 배출된 하·폐수가 하수처리장으로 유입된 후 완전히 제거되지 않고 하천으로 방류된 것으로 보고되고 있다. 하수방류수에는 인공감미료뿐만 아니라 의약품, 내분비계 장애물질 등이 검출되기도 하며 아직 알려지지 않은 오염물질도 존재할 가능성이 있다. 국내에서 하천, 호수 등 지표수는 수돗물을 생산하는 수원으로 사용되고 있어 지표수에서 각종 오염물질의 검출은 수돗물 음용에 부정적인 영향을 줄 수 있다.

본 연구는 한강으로 유입되는 지천에서 5종의 인공감미료의 분포를 파악하고자 LC-MS/MS를 이용하여 Acesulfame, Saccharin, Cyclamate, Aspartame, Sucralose를 분석하였다. 고체상추출을 위해 Oasis HLB(6 mL, 200 mg) 카트리지를 사용하였고, 이동상으로는 acetic acid가 첨가된 정제수와 아세트니트릴을 각각 사용하였다. 분석컬럼은 Accucore C18(100 × 2.1 mm, 2.6 μm)을 사용하였으며, ESI negative mode로 분석하였다.

인공감미료 5종을 정제수에 spike하여 7회 반복 시험한 결과 방법검출한계(MDL)는 0.001 ~ 0.005 μg/L, 정량한계(LOQ)는 0.004 ~ 0.015 μg/L의 범위를 보였고, 정밀도(precision)는 1 ~ 9%, 정확도(accuracy)는 98 ~ 102%로 양호한 결과를 얻었다.

2017년 7월부터 12월까지 한강으로 유입되는 지천 8지점에 대해 인공감미료 5종을 조사한 결과, 3종인 acesulfame, saccharin, sucralose가 검출되었다. 검출된 농도는 acesulfame 0.05 ~ 0.96 μg/L (평균 0.26 μg/L), saccharin 0.01 ~ 1.61 μg/L (평균 0.36 μg/L), sucralose 불검출 ~ 4.45 μg/L (평균 0.76 μg/L)로서 sucralose > saccharin > acesulfame 순이었으며, 지천별로 인공감미료 검출농도를 살펴본 결과 sucralose가 높게 검출된 지점에서 acesulfame도 높게 검출되어 두 성분이 동시 사용되고 saccharin은 단독으로 사용되어 배출되는 것으로 추정된다. H지천의 경우 하수처리장이 위치해 있으며, 하수방류수에서 검출된 농도는 acesulfame 0.24 ~ 1.51 μg/L (평균 0.61 μg/L), saccharin 0.03 ~ 12.84 μg/L (평균 2.59 μg/L), sucralose 4.1 ~ 7.22 μg/L (평균 5.83 μg/L)로 지천의 평균농도보다 최대 7.7배 높은 것으로 나타났다. 따라서 인공감미료의 검출여부를 활용하여 상수원의 오염원 관리에 활용할 수 있을 것이다.

**Determination of SiO₂ in rocks and sediments by
ICP-OES and microwave digestion**

이덕환, 최원명, 음철현*

한국지질자원연구원 지질자원분석센터

*Corresponding author : cheum@kigam.re.kr

본 실험에서는 다양한 매트릭스의 암석 시료 중 SiO₂를 XRF나 습식 분석법이 아닌, microwave digestion 및 ICP-OES를 이용하여 정량하는 방법을 연구하고자 하였다. ICP-OES에 의한 암석 시료 중 SiO₂ 분석을 위해 microwave digestion을 사용하여 분해되는 시료의 양, 사용되는 산, 가열 시간 및 온도 등의 시료분해과정을 최적화 하였으며 분석 결과의 정량성 확보를 위해 미국 지질조사소(USGS)의 표준물질 5종(BIR-1, QLO-1, SGR-1, SCo-1, SDO-1)이 사용되었다. 분해된 시료는 원심분리기에 의해 잔여물과 용액을 분리하여 ICP-OES로 분석 되었으며, 실험결과 98 ~ 101%의 회수율과 50 mg/kg의 방법 정량 한계를 얻을 수 있었다. 이 실험 결과에 의해 다양한 매트릭스의 암석 시료 중 SiO₂를 ICP-OES 및 microwave digestion로 분석 가능함을 확인할 수 있었으며 추후 표준물질을 구하기 어려운 난용성 매질의 광물시료인 ilmenite, chromite, barite 등의 SiO₂ 분석에 본 방법을 적용하고 다른 분석 결과와 비교해보는 추가적인 연구가 필요하다.

Optimization of microwave digestion procedure for As analysis in rocks and sediments by ICP-MS without DRC

최원명, 이덕환, 음철현*

한국지질자원연구원 지질자원분석센터

*Corresponding author: cheum@kigam.re.kr

ICP-MS에 의한 광물 중 미량의 비소(As)분석은 여러 가지 어려움이 잘 알려져 있다. 시료 분해시 휘발 손실될 수 있으며, 시료의 매트릭스에 따라 ICP-MS 분석 시 극심한 방해를 받는다는 사실이 보고되어 있기 때문이다. 본 실험에서는 microwave digestion 방법을 최적화함으로써 시료 분해 시 As의 휘발 손실을 억제함은 물론 다양한 매트릭스의 방해를 극복하여 DRC(dynamic reaction cell)을 사용하지 않고 암석 중 As를 ICP-MS로 분석하는 방법을 연구하고자 하였다. 분해되는 시료의 양, 사용되는 산, 가열 시간 및 온도 등의 시료 분해과정이 최적화 하였으며 분석 결과의 정량성 확보를 위해 미국지 질조사소(USGS)의 표준물질 (SGR-1, SCo-1, SDO-1 등)이 사용되었다. 분해된 시료는 원심분리기에 의해 잔여물과 용액을 분리하여 ICP-MS로 분석 되었으며, 실험결과 93 ~ 105%의 회수율과 1 mg/kg의 방법 정량 한계를 얻을 수 있었다. 이 실험 결과에 의해 다양한 매트릭스의 암석 시료 중 As를 DRC 모드를 사용하지 않고 ICP-MS 및 microwave digestion로 분석 가능함을 확인할 수 있었다. 추후 더 미량의 As 함량을 가지는 표준물질에 본 방법을 적용하여 DRC-ICP-MS의 분석 결과와 비교하는 추가적인 실험이 필요하다.

수질시료 중 과불화화합물 분석 방법


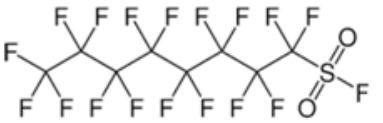

류건영^{1*}, 최승윤, 송준희

^{1*}KOTITI시험연구원

*Corresponding author: gy_ryu@kr.kotiti-global.com

매일 사람이 마시는 물은 건강과 생활환경에 있어 매우 중요한 영향을 미치는 부분으로 수질에 대한 일반인의 관심은 갈수록 높아지고 있다. 중요성과 높은 관심에도 불구하고 국내에서는 수질오염 사고가 빈번히 발생하고 있다. 우리나라는 세계적인 과불화화합물 수입국이며, 반도체 세정 및 아웃도어 제품의 내구성 발수 처리를 위한 공정이 대구, 경북지역에서 많이 이루어지고 있다. 특히 대구는 한국 최대의 섬유도시로 화학처리 공장과 염색업체들이 밀집해 있는 곳으로 산업특성으로 인해 수질 및 기타 환경이 유해물질에 노출되는 빈도가 높을 수밖에 없다.

본 연구에서 수질 시료 중 과불화화합물(Perfluorinated compounds)의 분석방법에 대한 내용을 소개하고자 하며 분석방법을 토대로 과불화화합물이 상수처리 과정에서 제거되지 않고 각 가정으로 공급되었다는 환경을 만들기 위해 과불화화합물 3종(PFOA, PFOS, PFHxS)을 임의의 농도(0.2 ppb, 1 ppb)로 조제 하였으며 각 농도별로 조제된 조제수가 정수기의 Filter system에 의해 제거되는 성능을 확인하였다.

과불화화합물 종류	Cas No.	구조식
PFOA (Perfluorooctanoic acid)	335-67-1	
PFOS (Perfluorooctane sulfonic acid)	1763-23-1	
PFHxS (Perfluorohexane sulfonic acid)	355-46-4	

가축매몰지 침출수 및 농촌지역 지하수 수질의 이화학적 특성 평가

최민영, 박선화, 이경미, 김덕현, 김문수, 정현미, 김현구*

국립환경과학원 환경기반연구부

*Corresponding author : khk228@korea.kr

본 연구는 가축매몰지 주변 침출수와 일반 농축산지역 지하수 수질특성을 비교·분석하여 침출수로 인한 지하수 오염여부 평가를 위한 과학적 근거 마련을 위해 수행되었다.

가축매몰지역 환경조사지침(환경부, '17.8월)에 따라, 2013년~2016년 매몰지 주변(5m 이내)에 설치된 관측정 수질분석데이터(153개 시료)를 5개항목(염소이온, 암모니아성질소, 질산성질소, 전기전도도, TOC)에 대하여 중점 모니터링 하였으며, 이를 1단계(매몰지 침출수 관리강화 단계), 2단계(매몰지 침출수 지속관찰 단계), 3단계(매몰지 침출수 관리 현행유지) 매몰지로 분류하였다.

지하수 수질 변화를 보다 세밀하게 모니터링 하기 위해서는 침출수 유출여부를 평가한 단계별 구분결과와 함께 침출수 영향에 따른 다양한 화학종과 관계된 지하수 수질특성 평가가 필요하다. 따라서 지하수내 주요 화학종의 비율을 Piper Diagram 등을 통하여 각 단계별로 그룹지은 매몰지 침출수 수질 및 주변지하수 수질특성을 비교분석하였다. 분석 결과, 국내 매몰지 침출수는 중탄산염이 상대적으로 높은 특성(1단계 매몰지 중 약 85%)을 보였으며, Ca-HCO₃ 유형(1단계 매몰지 중 약 68%)이 우세하게 나타났다. 이는 매몰지 조성 시에 투입한 석회석으로 인한 것으로 사료되며, 기존 국내문헌 연구결과(Kim et al., 2017)에서도 동일한 결과를 확인할 수 있다. 또한 향후 주요 양이온·음이온 등 총 20여개 항목을 비모수검증 통계방법 및 요인분석 등을 통하여 통계적 분석을 수행하고, 매몰지 침출수 및 농축산지하수의 구분지표 설정 및 해당 지표에 대한 적용 가능성을 검토하고자 한다.

솔잎가지 표면 흡착먼지의 물리화학적 특성 및 대기오염도 평가지표로서의 고찰

정다위, 최정희, 이장호*, 이수용, 이하은, 박기완, 심규영, 이종천

국립환경과학원 자연환경연구과 국가환경시료은행

*Corresponding author: ficedula01@kr

본 연구는 대기오염 영향에 따라 주변의 오염도를 식물로 평가할 수 있는 여부를 고찰하기 위한 연구이다. 국내 자생하는 소나무의 1년생 솔잎가지를 대상 평가지표로 선택하였으며, 채취지점은 공단지역 주변의 공원 2곳, 상대적으로 오염원이 적다고 예상되는 도시지역 공원 2곳을 선정하였다. 대상 채취지점에서 소나무 10 그루 이상에서 지상 2 m 이상의 솔잎가지를 채취하였다. 채취한 솔잎가지 표면에 흡착된 먼지에 대한 분석항목은 입도분포, 전자현미경의 표면촬영, 먼지제거율, 납 등 중금속, 다환방향족 탄화수소류(PAHs) 유기물질이었다. 초음파를 이용하여 탈착시킨 흡착먼지의 입도는 0.4 μm ~ 200 μm 범위로 나타났고, 10 μm 이하의 입도는 20% 수준이었다. 솔잎가지에 흡착된 먼지의 양은 0.450 mg ~ 0.825 mg 으로 조사되었고 강수장치에 의한 제거율은 10.0% ~ 27.6% 범위로 나타났다. 고주파전처리 장치로 산전처리한 후 ICP/MS로 측정된 먼지의 중금속 함량농도는 As 18.8 ~ 26.3 mg/kg, Be 0.08 ~ 0.13 mg/kg, Cd 0.06 ~ 0.08 mg/kg, Cr 4.91 ~ 17.8 mg/kg, Cu 5.26 ~ 405 mg/kg, Fe 1,930 ~ 2,670 mg/kg, Pb 3.03 ~ 28.1 mg/kg, Mn 26.9 ~ 42.8 mg/kg, Ni 2.66 ~ 10.4 mg/kg, Al 4,560 ~ 8,730 mg/kg, Ba 2,500 ~ 6,120 mg/kg, Rb 5.27 ~ 17.8 mg/kg, Sr 40.9 ~ 95.3 mg/kg, Zn 4,030 ~ 8,260 mg/kg 범위로 조사되었다. 흡착먼지의 세척액을 액-액추출, 정제한 후 GC/MS/MS로 분석한 PAHs의 함량농도(ΣPAH_{16})는 1.17 ~ 12.378 mg/kg, ΣPAH_7 은 0.147 ~ 0.741 mg/kg 범위로 조사되었다.

New analysis method for organotin compounds by Tandem-LC/MS without the derivatization

안정은*, 송윤채, 김영수, 이경철, 정남용

(재)한국의류시험연구원 환경분석본부

*Corresponding author: silky96@katri.re.kr

유기주석 화합물(Organotin compounds)은 하나 이상의 주석(Sn, Tin)과 탄소(C, Carbon) 결합의 구조를 가지는 화합물로 선박용 방어 페인트, 스포츠 웨어, 가죽제품 및 미생물 번식을 막는 살균제 등에 사용되며 이와 같이 다양한 산업분야에 널리 사용된다. 따라서 여러 채널을 통해 환경 및 인체에 유입될 수 있으며 인체에 대해서는 미량으로도 갑상선과 면역체계를 손상시키고 내분비계를 교란시킨다.

현재 사용 중인 유기주석화합물 분석법에서 사용되는 전처리 방법은 테트라에틸붕산나트륨 (Sodium tetraethylborate, NaBEt_4) 을 이용하여 유도체화 (Derivatization) 하는 방법이다. 3개 이하의 알킬그룹이 치환된 유기주석화합물은 낮은 휘발성으로 가스크로마토그래프 (Gas Chromatograph, GC) 로 직접 분석이 불가하여 4개의 알킬그룹으로 치환된 형태의 유기주석화합물 (Tetra-substituted alkyltin compounds) 로 유도체화 (Derivatization) 후 GC/MS (가스크로마토그래프/질량분석기) 로 분석한다.

유도체화 시약인 NaBEt_4 는 매우 인화성이 강한 위험 물질로 전량 해외 수입에 의존하면서도 항공운송 규제 품목으로 분류되어 있어 전량 선박운송으로 진행되며 소요 기간은 최소 3개월에서 수개월이 걸린다. 수입 진행 시 위험물 운송비가 별도로 부가 되고 시약 자체의 위험성으로 인한 제한적 사용으로 생산량도 감소하고 있어 시약조달이 상당히 어려워 매우 고단가로 거래되고 있다.

따라서 본 연구에서는 기존에 사용하던 NaBEt_4 사용하여 유도체화 하는 복잡한 전처리 방법을 사용하지 않고, 샘플에서 유기주석화합물을 추출 후 바로 Tandem-LC/MS 를 이용해 유기주석화합물을 직접 분석하는 방법을 개발하고자 한다.

본 발표에서는 개발된 'Tandem-LC/MS를 이용한 유기주석 화합물 직접 분석법' 소개 및 「화학적 시험방법의 유효성 확인을 위한 지침, KOLAS G 015: 2012」에 따라 수행한 개발된 시험방법의 유효성 검증과 결과를 보여주고자 한다.

섬유제품용 과불 발수제 및 대체 비불소 발수제의 수질 오염도 및 폐수제거성 비교

Comparison of water pollution and its eliminability between perfluoro and alternative non-PFC water repelling agents for textiles

손승환, 박광서, 김주양, 최은경*

한국생산기술연구원 환경규제기술센터

*Corresponding author: ekchoe@kitech.re.kr

국내 섬유제품용 발수제는 8:2 과불 텔로머 알코올이 아크릴에 결합한 C8 아크릴 모노머 형태의 물질이 몇 개의 글로벌 과불화합물 제조회사로부터 수입되어, 국내 조제업체에서 고분자로 합성되거나, 혹은 고분자 자체로 수입되어 최종 발수제 (고분자 에멀전 형태)로 판매되어 왔었다. 그러나 미국 EPA의 2010/2015 PFOA Stewardship Program에 의한 PFOA, PFOA로 분해될 수 있는 전구체, 탄소사슬이 PFOA보다 더 긴 PFCA에 대한 자발적 생산 중단이 실천되었고, 과불화합물의 유해성으로 인한 규제가 확대되면서 단계적으로 free PFOA 함유를 줄인 C8-과불발수제, C6-과불발수제, C6 과불-비불소계 혼합 발수제, 비불소계 발수제 등이 개발되어 대체되어 오고 있다. 본 연구에서는 과불발수제의 원료물질인 C8 과불 모노머(Perfluorooctyl ethyl acrylate) 및 대체 비불소 모노머를 동일 중량비로 함유한 에멀전액을 원액으로 하여, 이들 2종 물질의 COD_{cr}, COD_{Mn}, TOC, BOD₅을 측정하여 수질 오염도를 비교하였다. C8 과불모노머 측정값은 탄화수소 기반의 비불소 모노머의 COD_{cr}, COD_{Mn}, TOC, BOD₅ 측정값의 각 11%, 28%, 35%, 25%로 측정되면서, C8 과불사슬이 화학적 산화 및 생물학적 산화에 견고함을 간접적으로 증빙할 수 있다. 따라서, 실제 수계에 존재하면서도 일반적인 수질오염 항목인 COD, TOC, BOD로 는 잡히지 않는 숨은 물질로 존재하게 됨을 알 수 있다. 오존산화법에 의해 140 L 용량으로 폐수처리를 수행한 결과 비불소 발수물질은 COD_{Cr} 농도 기준으로 15분 처리 후 37%, 30분 처리 후 72%로 제거되는 반면, C8 과불물질은 오존처리 초기부터 수면위에 유분 형태로 떠서 처리가 불가능하였다. 폐수처리 전체과정으로 접근해보면, 유분은 막을 형성하여 생물학적 처리도 방해하고 필터막을 막히게 하여 여과 효율의 감소와 함께 탈수 효율도 저하시키게 될 뿐만 아니라, 슬러지 처리 시설 보완 등의 경비가 발생하게 된다. 오존처리 초기부터 2시간 처리기간 동안 육안으로 관찰된 C8 과불물질 시료의 유분 부유물은 원액의 노말핵산추출물질 측정값이 비불소 시료 원액의 값보다 13배 높게 측정되어 육안관찰과 측정 결과가 일치함을 보여주었다.

온돌효과를 반영한 건축자재의 휘발성유기화합물 방출특성에 관한 연구

고영환^{1,*}, 현승민¹, 김만구², 서주희², 류혜진³, 박준형³, 이영미³

¹*한국산업기술시험원, ²강원대학교, ³한국주택가구협동조합부설 한국가구시험연구원

*Corresponding author: yhko@ktl.re.kr

연구 목적

현대인들은 실내공간에서 생활하는 시간이 하루 중 80~90 % 이상을 차지하고 있으며, 실내공기 관리가 매우 중요한 요소로 사회적인 큰 관심을 모으고 있다. 실내오염을 개선하는 기본적인 방법은 오염원이 적은 건축자재를 사용하는 것이라 할 수 있으며 다양한 인증제품을 요구하는 소비자들이 늘어나고 있다. 우리나라의 고유 건축문화인 온돌식 난방은 바닥장판, 마루 등 바닥재가 가열되어 시공 초기에 오염물질 방출량이 급격히 증가 할 것으로 판단되나, 현재 시험방법은 온도상승에 대한 고려하지 않고 항온 조건에서 방출량을 도출하고 있어 난방에 의한 오염물질 방출 특성을 반영하고 있지 않고 있다. 또한 바닥재 등 자재의 이음면에서 방출되는 유해물질은 난방 시 표면과 더불어 이음면, 후면에서도 오염물질이 지속적으로 방출될 가능성이 있어 온돌효과를 고려한 시험을 통해 건축자재에 의한 실내공기질의 영향을 좀 더 정확하게 예측할 필요가 있다.

실험 방법

본 연구에 사용된 시험편은 시중에서 구매할 수 있는 바닥장판을 대상으로 하였으며 20L 소형챔버에 핫플레이트를 이용하여 바닥면을 가열하는 방식으로 바닥장판의 열을 40°C 가했을 때 와 일반 항온조건에서의 TVOC 방출 특성을 비교하였으며 1m³ 챔버 바닥 내 최대크기(1,500mm X 750mm)로 바닥장판을 펼쳐 표면적을 노출시킨 후 25 °C, 40 °C 온도조건에서 TVOC 방출량을 파악하였다. 분석방법은 실내 공기질 공정시험기준'ES02131.1b:2017'을 준용하였으며 mg/m²·h 단위로 환산하였다.

연구 결과

25 °C 조건에서 소형챔버 내 바닥장판의 TVOC 방출량은 7일 경과 후 0.176 mg/m²·h 이며 40 °C 조건에서 소형챔버 바닥면을 가열하였을 때 0.777 mg/m²·h로 확인 되었다. 또한 25 °C 조건에서 1m³ 챔버 내 바닥장판의 7일 후 TVOC 방출량은 0.327 mg/m²·h 이며 40 °C조건에서 TVOC 방출량은 0.998 mg/m²·h로 확인되었다.

고 찰

온도의 직접적인 영향을 고려하여 바닥장판에 열을 가하여 오염물질 방출시험 한 결과, 소형챔버 바닥면을 40 °C로 직접 가열하였을 때 25 °C 조건보다 약 4배 이상의 TVOC가 방출되며 1m³ 챔버를 이용하여 전체 가열했을 때와 비슷한 경향을 나타낸다. 또한 바닥장판에서 방출되는 TVOC의 주요 물질들은 열을 가했을 때 더 많은 양을 방출하는 것을 확인하였다. 열을 가하였을 때 자재에서 유해물질이 짧은 시간 더 많은 양이 방출됨에 따라 난방 등을 고려한 온도 조건변화를 통한 건축자재 방출시험방법에 관한 연구가 지속적으로 이루어져야 할 것으로 판단된다.

건축자재의 절단면 영향을 고려한 시험방법 및 시험편 채취방법 개발

Development of testing method and test specimens sampling method
considering the effect of cutting surface of building products

유혜진¹, 박준형¹, 이영미¹, 김만구^{2,*}, 서주희², 고영환³, 현승민³

¹한국주택가구협동조합부설 한국가구시험연구원, ²*강원대학교, ³한국산업기술시험원

*Corresponding author: mgkim@kangwon.ac.kr

본 연구에서는 건축자재의 제조·설치 시 절단면에서 방출되는 휘발성오염물질의 방출특성을 고려한 시험방법 및 시험편 채취방법을 개발하였다. 현행 건축자재의 방출시험방법은 표면 방출시험만을 시행하고 있어, 실제 건축자재의 시공에서 절단면이 노출되는 시료에 대해서는 휘발성오염물질의 방출특성을 파악하기 어려움이 있다.

절단면을 고려한 시험편 채취방법은 기존의 표면(전면 또는 후면), 절단(마구리)면을 포함하여, 20L 챔버의 부하율으로 고려한 사이즈(147mm×147mm)로 채취하였다. 휘발성오염물질 방출 시험방법은 소형챔버법과 동일하게 진행하였으며, 총 6면(전면, 후면, 절단면)을 노출하여 시험하였다. 또한, 동일 시료를 기존 소형챔버법과 절단면(엣지면)만 노출한 휘발성오염물질 방출실험을 통해 비교분석하였다.

S1 시험편(절단면 4면만 노출한 시험편)과 S2 시험편(표면 2면만 노출한 시험편)의 방출량을 3회 반복 측정하여 비교하였을 때 노출면적 대비 방출량은 S1 시험편의 방출량이 총휘발성유기화합물(Total Volatile Organic Compound - 이하 TVOC)의 경우 약 170배, 폼알데하이드(Formaldehyde)의 경우 약 28배 더 높게 방출되는 경향을 보였다. 노출면적 대비 방출량을 공기 중의 농도로 환산해서 비교해 본 결과 S1 시험편의 방출량이 S2 시험편의 방출량에 비해 TVOC 농도는 약 4.5배, 폼알데하이드 농도는 약 1.4배 높은 것으로 나타나 절단면을 영향을 고려한 시험방법의 개발이 필요할 것으로 판단된다.

S1 시험편의 방출량과 S2 시험편의 방출량을 합산한 값과 S3 시험편(표면 2면 및 절단면 4면 총 6면을 노출한 시험편)의 노출면적 대비 방출량의 차이는 3회 반복 측정하여 분석한 결과 TVOC는 0.007 mg/(m²·h), 폼알데하이드는 0.001 mg/(m²·h)를 나타냈다.

절단면 노출을 반영하여 시험하는 경우, 실질적으로 현장에서 사용되고 있는 제품 상태 그대로 시험편으로 제작 또는 제품 형태를 반영한 시험편을 제작하므로 실내공기 오염물질 방출 원인을 파악할 수 있으므로 이에 대한 개선 및 Source Control이 가능할 것으로 판단된다. 또한, 표면 마감 처리된 건축자재의 표면방출량과 절단면 방출량(심재들의 차별성)을 평가할 수 있다.

Development of Heavy Metal Removal Technology to Recycle Waste Liquid from OLED Process

SE Chul Hong^{1*}, Mi Young Son¹, Byung Man Chae², Seok Hwan Lee²

¹*Gumi Electronics & Information Technology Research Institute, ²KMC Research Center

*Corresponding author: hsc0684@geri.re.kr

As the size of the display market has been growing, the importance of the metal mask which determines the performance of an organic light emitting diode(OLED) panel is getting bigger. Techniques such as miniaturization and integration have becoming more important, metal masks also require materials which is thinner and smaller than before. A ferric chloride etching solution is produced by reaction of iron and hydrochloric acid, a high-quality base material having a high and low proportion of iron t and impurity enables the manufacture of a ferric chloride etching solution. While the waste etching solution can be purified by coprecipitation, hydroxides, sulfide precipitation, etc, considering the reagents, manpower and time to be supplied, it is sold as an inorganic coagulant for water treatment due to lack of economical efficiency. Particularly in Korea, it is clear that development of recycling technology in the basic material field is required as base materials which is imported occupy the highest rate due to limited resources. As the environmental regulations for the water treatment will be strengthened, the significance of development of removal technology of heavy metals in water is growing.

In this study, we optimized the removal of unnecessary heavy metals and contaminants in order to utilize the nickel produced in the OLED process. The removal efficiency of Zinc(Zn), Manganese(Mn) and Aluminium(Al) by solvent extraction method using D2EPHA organic Compounds extractant was about 95.1%, 95.6% and 96.6% were removed. Consequently, this study shows that 0.7M D2EPHA organic Compounds may be suitable extractant for heavy metal from the synthesis solution. Extraction efficiency and separation factor could be increased by controlling pH and extractant concentration.

Development and Characterization of metal complexed Melt-Blown (MB) air purification filter

Seyoung Yoon¹, Heejin Lee¹, Mihyun Lee¹, Kyong Eun Yu¹, Ji-hyun Bae², Minwook Kim²,
Woonjung Kim², Seong Ho Choi², In Soo Lee³ and Seungho Lee^{1,★}

^{1,★}Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea

²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

³Department of Biological Science and Biotechnology,
Hannam University, Daejeon 34054, Korea

★slee@hnu.kr

Air pollution by fine dust, volatile organic compound (VOC), Foshan outflow, and bacterial viruses such as influenza virus have become increasingly important issues. Among them, VOCs from automobile emission or consumption of oils and organic solvents are of particular concern because they contain carcinogenic substances.

Recently, Melt-Blown (MB) fiber material is receiving spotlight as a mask filter, but the MB fiber does not filter fine airborne pollutants and bacterial viruses.

To overcome these shortcomings, in this study, a functional processing technique was applied to the MB fiber to develop a highly antibacterial air filter, where the MB fiber was chemically treated with -COOH group on the surface to give functionality in the form of metal complex.

In this study, a commercially available MB fiber was used. The surface treatment was conformed by IR and SEM analysis.

A culture test showed that bacteria still exist after 6 hours of incubation on the MB fiber without functional treatment, whereas all bacteria were wiped out before 6 hours of incubation on the surface-treated functional MB fiber

From the results of this study, this surface-treatment technique has a potential for wide applications in the field of air purification

Characterization of electrospun nanofiber with dust-removal and antibacterial properties

**Seyoung Yoon¹, Heejin Lee¹, Mihyun Lee¹, Kyong Eun Yu¹, Ji-hyun Bae², Minwook Kim²,
Woonjung Kim², Seong Ho Choi², In Soo Lee³ and Seungho Lee^{1,*}**

^{1,*}Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea

²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

³Department of Biological Science and Biotechnology,
Hannam University, Daejeon 34054, Korea

*slee@hnu.kr

Pollution of air by fine dusts, volatile organic compounds (VOC), Foshan outflow, and bacterial viruses are becoming increasing concerns. VOCs from automobile or power plant emission are of particular concern, as they are known to be carcinogens.

Recently, with increasing interest on high-performance nanofibers, research and development activity in the field of nanofibers has expanded rapidly. Application of nanomaterials is broadened such as a filter from nonwoven fabric, miniaturization and high functionality of electronic devices, and biomedical applications.

High-performance nanofibers such as electrospun nanofibers are expected to become a new trend in the future due to its growing demand. Electrospun nanofibers, as an air filter, does not remove bacterial viruses. We have developed a metal-complexed nanofiber filter with high antibacterial activity by a functional treatment of nanofibers produced by electrospinning. The nanofiber was prepared by electrospinning with 10% solution of PVDF (polyvinylidene fluoride), which was then chemically treated with -COOH group on the surface of the nanofiber, followed by complexing a metal.

The surface treatment was confirmed by IR and SEM analysis of the nanofiber surface. The surface-treated nanofiber showed a good antibacterial activity - all bacteria died after 6 hrs of exposure to the treated nanofiber. The surface-treatment technique developed in this study may be applied in the fields of medical fibers, optoelectronic devices, sensor technologies, catalysts and filters, and air purification.

천공 방법을 이용한 건축자재 절단면으로부터 방출되는 오염물질 농도 비교 평가

조지은¹, 서주희¹, 김상욱¹, 고영환², 류혜진³, 김만구^{4,*}

¹강원대학교 환경학과, ²한국산업기술시험원,

³한국가구시험연구원, ⁴*강원대학교 환경융합학부

*Corresponding author: mgkim@kanagwon.ac.kr

건축자재 오염물질 방출 평가를 위해서 우리나라는 20 L 시험챔버법이 공정시험방법으로 시행되고 있다. 이 방법은 건축자재의 표면으로부터 방출만을 고려하고 있다. 이런 현행방법은 절단면이 필연적으로 발생하는 실제 실내공간의 오염물질 농도를 정확하게 평가할 수 없는 문제점이 있다. 절단면을 평가하는 방법은 실제 시공할 때처럼 시료를 절단하여 절단면을 노출하는 방법과 시료의 중앙에 구멍을 뚫어 절단면을 노출하는 천공방법이 있다. 이 연구에서는 천공방법을 통해 건축자재의 절단면으로부터의 방출을 고려한 시험방법으로 오염물질 농도를 비교 평가하였다.

이 연구에서 사용된 시료의 자재는 LPM-MDF(Low Press-urea Melamine impregnated paper-Medium Density Fiberboard)로서, 일반적으로 표면을 처리하여 사용한다. 표면처리를 하게 되면, 표면과 MDF 자체에서 방출되는 오염물질 농도는 각각 다르게 나타난다. 이 연구에서는 이를 비교하기 위해서 1 L 시험 챔버로 각 3개의 시험편에 대하여 7일간의 방출 시험을 하였다. 각 시료는 표면 처리한 부분만 노출시킨 것, 절단면을 표면적 대비 7.5% 노출시킨 것, 표면적 대비 10% 노출시킨 것이다. 절단면은 시료의 중앙에 구멍을 뚫어 노출시켰다. 연구는 기밀성이 확보된 1 L 시험 챔버로 진행하였다.

LPM-MDF 시료의 표면, 절단면 7.5% 노출한 시료, 절단면 10% 노출 시료의 7일차 TVOC(Total Volatile Organic Compounds) 방출강도는 각각 0.003 mg/m²·h, 0.007 mg/m²·h, 0.067 mg/m²·h 이었다. HCHO의 방출강도는 각각 0.008 mg/m²·h, 0.032 mg/m²·h, 0.069 mg/m²·h 이었다. HCHO의 방출강도와 절단면 노출 면적 간에는 높은 상관관계를 나타냈다.

단위면적당 표면의 방출강도는 TVOC 0.002 mg/m²·h, HCHO 0.011 mg/m²·h 이었다. 단위면적당 절단면의 방출강도는 TVOC 0.352 mg/m²·h, HCHO 0.456 mg/m²·h 이었다. 표면에 비해 절단면의 TVOC와 HCHO는 각각 176배, 42배 더 높은 방출강도를 나타냈다. 그러므로 절단면에 대한 방출 시험 측정이 필요하다는 것을 확인하였다. 천공 방법은 이러한 절단면을 평가하기 위한 방법으로서 유효하다고 판단된다.

**Analysis of contamination source of contaminated
soil by crude oil using GC×GC-MS**

Hyeong Won Mun¹, Ki-Jung Paeng¹

¹Department of Chemistry, Yonsei University

This study was carried out to identify contamination sources of soil contaminated with crude oil. In order to analyze soil contaminated with crude oil, we tried to optimize the existing domestic and foreign analysis methods. The soxhlet was used as a preparation method and the extraction method was set up in accordance with the sample under various conditions. GC×GC-MS was used for accurate qualitative analysis.

For the qualitative analysis, GC×GC-MS was used to classify normal alkane, cycloalkane, and PAH (poly aromatic hydrocarbon), and the characteristics of each crude oil and characteristics of contaminated soil were studied.

**Thermal Desorption GC/MS를 활용한 식품속에 함유된
휘발성 유기화합물 스크리닝**

이상미^{1*}, 이호선, 최하정, 진미정

^{1*}부산대학교 공동실험실습관

*Corresponding author: ysm9535@pusan.ac.kr

열탈착 가스크로마토그래피 질량분석기(Thermal Desorption GC/MS)는 용매 추출을 하지 않고 고체, 액체, 기체 시료에 존재하는 휘발성 유기화합물(volatile and semi-volatile compounds)을 측정할 수 있다. 이 연구는 특히 식품에 존재하는 휘발성 유기화합물이 추출과정에서 손실될 가능성을 줄이고 용매 추출의 과정 없이, 시료를 흡착제가 없는 빈 시료관에 직접 넣어서 측정하는 방법으로 분석을 진행하였다.

생활주변에서 쉽게 접할 수 있는 식품을 선택하여 다양한 식품가공공정으로 인한 휘발성 유기화합물을 스크리닝을 하고자 한다.

LC-MSMS를 이용한 생활화학제품 중 살생물제(농약) 성분 동시분석법 검토

조형욱¹, 권정환², 문준관^{3,*}

¹한경대학교 산학협력단, ²고려대학교 환경생태공학과, ^{3,*}한경대학교 식물생명환경과학과,

*Corresponding author: jkmoon@hknu.ac.kr

생활 화학제품 중 포함되어 있는 살생물제의 모니터링을 위해 LC-MSMS를 이용하여 abamectin B1 등 35종 40성분에 대한 동시분석법을 검토하였다. 시료 1g을 50 mL 원심분리관에 칭량하여 증류수 10 mL를 가하여 희석한 후 acetonitrile을 10 mL 추가하고 1분간 진탕하였다. 4 g MgSO₄, 1 g NaCl을 첨가한 후 다시 10분간 퀘쳐스 전용 균질기로 진탕하고 3,000 rpm으로 5분간 원심분리하여 물층과 유기용매층을 분리하였다. 유기용매층을 취하여 0.2 um PTFE 시린지 필터로 여과, 분석시액으로 사용하였으며, 시료액 100 µL에 완충용액 600 µL, acetonitrile 300 µL를 첨가하여 MSMS로 분석하였다.

MSMS의 특성을 고려하여 매트릭스효과(matrix effect, %)도 산출 결과, 최저 -10.2%에서 최고 7.3%로 teflubenzuron을 제외한 나머지는 매트릭스효과가 10% 이내로 matrix-matched를 하지 않고도 정량이 가능할 것으로 판단되었다. MLOD(Method LOD) 및 MLOQ(Method LOQ)의 경우, 낮은 농도를 추가하여 7반복을 시행한 후 그 결과값의 표준편차를 이용하여 산출하였으며, MLOD는 0.0021 mg/kg ~ 0.0171 mg/kg, MLOQ는 0.0062 ~ 0.0512 mg/kg으로 제품 중 유효성분이 아닌 물질을 분석하기에 적절하다고 판단되었다. 회수율 수준은 0.1 mg/kg 및 0.5 mg/kg 수준으로 시행하였으며, 0.1 mg/kg 및 0.5 mg/kg 수준에서 각각 85.4±1.8 %, 83.2±1.1 %로 동시분석법 회수율 범위인 70~120%를 만족하였다.

전혈의 금속 동시 정량 분석법 개발

이유진¹, 박준영¹, 차상원^{1,*}

¹*한국외국어대학교 화학과

*Corresponding author: swcha@hufs.ac.kr

최근 등장한 “익스포즘” 분야는 인간이 생활에서 노출되는 환경 물질을 측정하고, 측정된 물질들이 인체와 어떤 연관이 있는지 알아보는 연구이다. 전혈(whole blood)은 얻기 용이하며, 채취 절차가 간단하기 때문에 가장 널리 쓰이는 생체물질 중 하나이다. 전혈을 이용한 중금속 분석을 기술한 많은 문헌 중, 2014년 미국 질병통제예방센터 (CDC, US Centers of disease control and prevention)에서 발행된 매뉴얼은, 카드뮴, 납, 망간, 수은, 셀레늄 총 5종을 정량 분석하였다. 우리는, 이 CDC 매뉴얼을 바탕으로, 5종 이외에 익스포즘 연구에서 관심을 끌고 있는 원소들을 추가하여, 동시 정량할 수 있는 분석법을 개발하고자 하였다. 이 분석법은 동적 반응 셀(dynamic reaction cell, DRC)이 포함된 유도 결합 플라즈마 질량분석기(ICP-DRC-MS)를 기반으로 개발되었으며, 고처리량 ICP MS법을 위해 전혈의 희석 비율, 희석제의 조성, 셀 가스 등을 최적화하는 과정을 진행하였다. 이러한 과정을 통해 CDC 매뉴얼 5종을 포함한 약 10여종의 원소를 동시 정량 분석하는 방법을 개발하는 데 성공하였다.

유치(Deciduous teeth)대상 엑스포좀 연구를 위한 원소 분석법 개발

서은지, 박태민, 갈영주, 차상원*

한국외국어대학교 화학과

*Corresponding author: swcha@hufs.ac.kr

사람이 살아가는 동안 인체의 환경 노출을 측정하고 건강에 미치는 영향을 밝혀내는 연구 분야인 엑스포조믹스(exposomics)가 최근 주목을 받고 있다. 하지만, 기존의 엑스포좀 (exposome) 연구는 두 가지 주요한 문제점을 지니고 있다. 첫째, 장기적인 코호트 연구 (cohort study)를 필요로 하면서 시간과 비용이 많이 소모된다. 둘째, 산모의 혈액, 소변 및 제대혈과 같은 일반적인 생체 지표로 태아가 환경유해인자에 얼마나 직접적으로 노출되었는지 측정하는 것은 매우 어렵다. 최근에 유치는 기존의 한계점들을 극복할 수 있는 잠재성을 보여주며 신규 바이오마커로 제안되고 있다. 본 연구에서는 다양한 Inductively Coupled Plasma (ICP) Mass Spectrometry (MS)를 사용하여 치아의 원소 분석 방법을 개발하고자 시도하였다. 유치 시료에 대한 금속 원소 분석을 위해 Laser Ablation (LA) ICP MS가 사용되었으며 Mn, Ba, Sr, Zn 등 다양한 원소의 분포 정보를 얻었다. 이전 연구에서와 마찬가지로, Zn은 법랑질 바깥쪽 가장자리, 상아질 - 치수 가장자리 및 치경부 상아질에 매우 집중되어 있었다. 또한 다원소 동시 분석을 위해 다양한 dynamic reaction cell(DRC)을 사용하여 ICP DRC MS 최적화 과정을 진행하였으며, 이러한 최적화된 방법으로 산 처리한 유치 샘플에 포함된 약 10가지의 금속원소 농도를 측정하는데 성공하였다.

의약품 원료·제제 공통시험법 개발
- 대한민국약전 의약품각조 시험법 개선 연구

안재형, 방유빈, 김민선, 정래석, 이효민*

식품의약품안전처 식품의약품안전평가원 의약품연구과

*Corresponding author: hmlee0983@korea.kr

대한민국약전(KP)은 국내 시판 의약품의 품질관리를 위한 기준규격이 수재된 공정서로서 의약품 제조·품질관리 현장에서 활용되고 있다. 분석기술의 발전, 국제 조화 등에 발맞추어 약전 수재 각 품목의 기준 및 시험방법을 지속적으로 개선함으로써 대한민국약전을 우수한 수준의 공정서로 발전시키는 노력이 필수적이다.

이를 위해 본 연구에서는 KP 의약품각조에 원료와 제제가 동시에 수재된 경우, 동일한 성분을 정량하는 원료 및 제제의 정량법을 정확성·편의성이 향상된 시험법으로 통일하여 약전을 통한 의약품 제조 및 품질관리 편의성을 향상시키고자 하였다.

각조 품목의 정량법을 조사·분석하여 제제의 시험법은 HPLC이나 원료는 UV 등 보다 정확성이 요구되는 시험법인 품목을 우선 선정하였다. 대상품목은 메토카르바몰(원료·정제·주사액), 티옥트산(원료·정제) 등이며, 외국 약전(USP, EP, JP 등)을 참고하여 원료와 제제에 공통 적용이 가능한 가장 적합한 시험방법으로 밸리데이션을 수행하였다.

티옥트산의 경우 USP를 근거로 하여 '티옥트산 정'의 정량법 조작조건대로 안지름 약 4 mm, 길이 약 15 cm인 스테인레스강관에 5 μ m의 액체크로마토그래프용옥타데실릴실리카겔을 충전한 칼럼, 0.1 % 인산-아세트니트릴혼합액 (60 : 40) 조성의 이동상을 사용하여 210 nm 검출파장에서 분석을 수행하였다.

메토카르바몰 또한 USP를 근거로 안지름 약 4.6 mm, 길이 약 15 cm인 스테인레스강관에 3 μ m의 액체크로마토그래프용 옥타데실릴실리카겔을 충전한 칼럼, pH 4.5 완충액·메탄올혼합액(70 : 30) 조성의 이동상을 사용하여 274 nm 검출파장에서 분석을 수행하였다. 시험법에 대한 특이성, 직선성, 정밀성, 정확성(회수율) 등 밸리데이션을 실시하여 시험법을 개발하였으며 개발된 정량법은 유통 중인 의약품 원료와 제제를 대상으로 재현성을 확인하여 검증하였다.

연구 결과 마련된 원료와 제제의 공통 시험법은 KP 개정시 반영되어 의약품 품질관리의 효율성을 증대시키고 약전의 활용도를 제고할 수 있을 것으로 기대된다.

박층크로마토그래프법(TLC)을 이용한 열매·종자류 생약의 확인시험 확립 연구

고은혜, 최은영, 현성예, 김종환, 강주혜*

*식품의약품안전평가원 생약연구과

*Corresponding author: rudia926@korea.kr

한약(생약)의 품질관리를 위하여 「대한민국약전」과 「대한민국약전외한약(생약)규격집」에 품목별 기준 규격을 설정하고 있으며, 이 중 확인시험은 박층크로마토그래프법(Thin Layer Chromatography, TLC)을 이용한 시험법으로 신설해 나가고 있다.

이번 연구에서는 「대한민국 약전외한약(생약) 규격집」의 열매·종자류 생약에 대하여 TLC 확인시험 신설 및 개선을 검토하였다. 건물(Castaneae Semen, Castanea crenata Siebold et Zuccarini의 씨껍질을 벗긴 씨), 맥아(Hordei Fructus Germinatus, Hordeum vulgare Linné var. hexastichon Aschers의 잘 익은 열매를 발아시킨 것), 모과(Chaenomelis Fructus, Chaenomeles sinensis (Thouin) Koehne 또는 Chaenomeles speciosa (Sweet) Nakai의 잘 익은 열매), 마인(Cannabis Semen, Cannabis sativa Linné의 씨) 등 4품목에 대하여 식품의약품안전평가원 생약연구과에서 분양 중인 표준생약 성적서의 시험방법을 기반으로 유통 중인 검체를 수집하여 TLC 패턴을 비교·검토하였다. 그 결과, 각각의 품목별로 검액에서 얻은 여러 개의 반점은 표준생약표준액에서 얻은 반점과 Rf값이 같음을 확인하였다. 건물은 Rf값 0.55 부근의 보라색 반점, 맥아는 Rf값 0.5와 0.6 부근의 각각의 반점, 모과는 Rf값 0.2와 0.4 부근의 각각의 진한 보라색 반점, 마인은 Rf 값 0.4, 0.8 부근의 각각의 붉은색 반점을 중심으로 패턴을 확인하여 TLC 시험법을 확립하였다. 이 연구를 통하여 맥아, 모과, 마인에 대한 공정서 확인시험 개정(안)을 마련하였으며, 건물은 「대한민국 약전외한약(생약)규격집」에 확인시험(TLC) 신설이 완료되어 한약(생약) 품질관리에 활용될 수 있을 것이다.¹⁾

1) ^{**}(Acknowledgement) 본 연구는 2018년도 식품의약품안전평가원의 연구개발비(18171MFDS207)로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

박층크로마토그래프법(TLC)을 이용한 전초류 생약 등의 확인시험 신설 연구

최은영, 고은혜, 현성예, 김종환, 강주혜*

*식품의약품안전평가원 생약연구과

*Corresponding author: rudia926@korea.kr

한약(생약)은 「대한민국약전」과 「대한민국약전외한약(생약) 규격집」을 통해 성질과 상태, 품질 등과 그 밖에 필요한 기준을 설정하여 관리하고 있으며, 이 중 확인시험은 박층크로마토그래프법(Thin Layer Chromatography, TLC)을 이용한 시험법으로 신설해 나가고 있다.

「대한민국약전」과 「대한민국약전외한약(생약) 규격집」에 수재된 전초 및 뿌리줄기류 생약 5품목에 대하여 TLC 확인시험 신설을 검토하였다. 고량강(*Alpiniae Officinarum Rhizoma*, *Alpinia officinarum* Hance의 뿌리줄기), 광곽향(*Pogostemonis Herba*, *Pogostemon cablin* Bentham의 지상부), 목통(*Akebiae Caulis*, *Akebia quinata* Decaisne의 줄기로서 주피를 제거한 것), 마치현(*Portulacae Herba*, *Portulaca oleracea* Linné의 전초), 옥죽(*Polygonati Odorati Rhizoma*, *Polygonatum odoratum* Druce var. *pluriflorum* Ohwi 또는 기타 동속 근연식물의 뿌리줄기) 등 5품목에 대하여 식품의약품안전평가원 생약연구과에서 분양 중인 표준생약 성적서의 시험방법을 기반으로 유통 중인 검체를 수집하여 TLC 패턴을 비교·검토하였다. 그 결과 목통(Rf값 0.2 부근과 Rf값 0.6 부근의 각각의 반점), 마치현(Rf값 0.7 부근의 리놀레산, 0.8 부근의 β -sitosterol 반점), 옥죽(Rf값 0.5 부근의 β -sitosterol 반점) 등 품목별로 특정 위치의 반점을 중심으로 검액에서 얻은 반점과 표준생약표준액에서 얻은 반점의 패턴을 확인하여 TLC 시험법을 확립하였다. 이 연구를 통하여 목통 등 5품목에 대한 공정서 확인시험 개정(안)을 마련하였으며, 한약(생약) 품질관리에 활용할 수 있을 것이다.²⁾

2) *(Acknowledgement) 본 연구는 2018년도 식품의약품안전평가원의 연구개발비(18171MFDS207)로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

백출 중 아트로핀 및 스코폴라민 시험법 확립

Establishment of Analytical Method of Atropine and Scopolamine
in *Atractylodes Rhizome White*

이동원, 이해은, 김선화, 백옥진, 강주혜*

식품의약품안전평가원 생약연구과

*Corresponding author: rudia926@korea.kr

백출은 *Atractylodes japonica* Koidzumi 또는 *Atractylodes macrocephala* Koidzumi (국화과 Compositae)의 뿌리줄기로서 그대로 또는 주피를 제거한 것이다. 스코폴리아근은 미치광이풀 *Scopolia japonica* Maximowicz 또는 *Scopolia carniolica* Jacquin (가지과 Solanaceae)의 뿌리줄기이다. 백출 중에 스코폴리아근이 혼용되는 사례가 있어 이를 예방하기 위해 백출 중 스코폴리아근의 주요성분인 아트로핀(Atropine)과 스코폴라민(Scopolamine)의 시험법을 확립하였다.

백출에 대한 확인시험을 실시하였다. 검체가루 2g을 헥산으로 추출 후 여과하여 박층크로마토그래피법을 이용할 때 R_f 값이 0.3~0.6에서 녹색~녹회색의 반점이 나타나지 않았다. 검체가루 0.5g을 에탄올(95)로 추출 후 여과하여 바닐린염산시액을 넣었을 때 붉은색~적자색이 띠는 것을 확인하였다.

백출 중 아트로핀 및 스코폴라민을 확인·정량하기 위해 검체 2g을 염기성에서 에테르로 추출 후 건조하고 부르신을 내부표준액으로 하여 아트로핀 및 스코폴라민을 액체크로마토그래피를 이용하여 동시 분석하였다. 확립된 동시분석법에 대해 아트로핀 및 스코폴라민 검출한계(Limit of Detection)는 각각 0.3ug/kg, 0.3ug/kg, 정량한계(Limit of Quantitation)는 각각 1ug/kg, 1ug/kg 이었고, 혼합표준용액의 검량선은 0.5ug/kg ~ 25ug/kg 에서 직선성을 나타내었다. 백출에 아트로핀 및 스코폴라민을 첨가한 시료에 대한 회수율은 각각 106%, 105%을 나타내었고, 정확도는 각각 106%, 105%, 정밀성(상대표준편차)는 0.3%, 0.2%으로 만족할 만한 수준이었다. 확립된 시험법은 향후 백출 중 스코폴리아근 혼입여부를 판별할 수 있는 시험법으로 활용될 수 있을 것이다.

**Determination of ethylhexyl methoxycinnamate
in sunscreen products using high performance liquid chromatography**

**Kyoung-Moon Han, Haein Cheon, Soae Ji, Rheeda Lee, Chungsik Min, Sangseop Kim,
Sang-myeong Park, Yong-Kyu Choi, Hyojin Kim, Kyungwon Seo, Kyunghun Son***

Cosmetics Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation,
Cheongju, Chungbuk, Republic of Korea

*Correspondence to: juchan2@korea.kr

In the Korean Functional Cosmetics Codex (KFCC), the assay of ethylhexyl methoxycinnamate has been described by titration to measure esters in the products. However, This method has low accuracy and precision. For cosmetic ingredients, a high performance liquid chromatography (HPLC) is widely used nowadays. In this study, we developed accurate assay with simple sample preparation of ethylhexyl methoxycinnamate in sunscreen products using HPLC. The sample was extracted by methanol at room temperature. The separation was carried out by C18 column (250 mm x 4.6 mm, 5 µm) at 25°C, and a mobile phase consisted of methanol and water (90:10, volumetric). The mobile phase was eluted isocratically with 1.0 ml/min of flow rate and the samples were detected at 310 nm of UV wavelength. The method validation was performed by linearity, LOD, LOQ, accuracy and precision. The linearity was evaluated in a range of 0.5 ~ 50 µg/ml and the R² was higher than 0.9999. The LOD and LOQ showed 0.011 and 0.032 µg/ml, respectively. The intra-and inter-day accuracy ranged from 92.64 to 101.75% and precision was 101.65% with the relative standard deviation less than 1%. The sample measurement was repeated three times, the content was 95 ~ 102% and the relative standard deviation was 0.39% or less.

Keyword: Cosmetics, ethylhexyl methoxycinnamate, HPLC

Simultaneous determination of whitening components and adenosine in various cosmetic formulations by high-performance liquid chromatography coupled with photodiode array detection.

Kyoung-Moon Han, Soae Ji, Haein Cheon, Rheeda Lee, Chungsik Min, Sangseop Kim, Sang-myeong Park, Yong-Kyu Choi, Hyojin Kim, Kyungwon Seo, Kyunghun Son*

Cosmetics Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation,
Cheongju, Chungbuk, Republic of Korea

*Correspondence to: juchan2@korea.kr

In Korea, the use of ingredients in functional cosmetics is regulated by law. In this study, we focused on niacinamide and adenosine, which have the effect of whitening and anti-wrinkle improvement in functional cosmetics. They have been analyzed separately by each method in Korean Functional Cosmetics Codex (KFCC). However, a simultaneous assay was developed here with various formulations, including creams, toners, lotions and facial masks. The 70 marketed products with all formulations were monitored and analyzed by high performance liquid chromatography (HPLC) coupled with a photodiode array. The separation was performed by using a C18 column (250 mm x 4.6 mm, 5 µm) with a gradient elution of water and methanol (85:15) at 35 °C. The flow rate was 1 mL/min. Both niacinamide and adenosine were detected 263 nm wavelength. The existing KH₂PO₄ buffer was replaced with water to lower the pressure in HPLC. From the calibration curve, the LOD and LOQ of niacinamide showed as 1.111 µg/mL and 3.368 µg/mL, respectively. The LOD and LOQ of adenosine were 0.088 µg/mL and 0.266 µg/mL. The method had a good linearity with R² greater than 0.999. In addition, the precision was evaluated by relative standard deviation (RSD) of measurement, which was less than 0.8% and the recovery rate was in a range of 98.65 ~ 107.05%. The content of sample was 97% ~ 117% and measurement of the relative standard deviation (RSD) was less than 1%. They were similar to those of KFCC method.

Keyword: Cosmetics, niacinamide, adenosine, HPLC

**Validation of HPLC Method for Simultaneous Analysis of Major components in
'Galgeunhaegi-tang' Mix Soft Extract**

**Sung-Ok Moon, Ha-Yeong Lee, Min-Ju kim, Jong-Bum Kim,
Ji-Bum Lee and Hwa-Dong Lee***

National Development Institute of Korean Medicine(NIKOM)

*Corresponding author: herb@nikom.or.kr

Introduction In this study, a high performance liquid chromatography-diode array detector method was established, for simultaneous analysis of major components in Galgeunhaegi-tang Mix Extract(GHTME).

Method and Materials The column for optimizing HPLC separation was used a YMC C₁₈ column(5 μ m, 4.6 ×250 mm) at with 0.05% phosphoric acid in water (A) and 0.05% phosphoric acid in acetonitrile (B) by gradient flow. The flow rate was 1.0 mL/min and the UV wavelength was set at 210 and 230 nm. A comprehensive validation of the method, including specificity, repeatability and intermediate precision was conducted using the optimized analytical conditions. Twelve maker components of GHTME and 2 components derived from Platycodon Root and Peony Root were selected for chemical profile analysis.

Results GHTME was separated from the given analytical conditions and the specificity of the peaks was identified by comparisons of UV spectra of the selected peaks. The calculated relative standard deviations (RSDs) through repeatability assay and intermediate precision assay for peak area were below 6.50%. To develop a chemical profile analytical method of GHTME was successfully validated with specificity, repeatability and intermediate precision and this result may be a guideline for the quality control of GHTME.

Keywords Galgeunhaegi-tang Mix Extract(GHTME), HPLC, Standardization, Validation

Evaluation of phenolic compounds from viroid-free and viroid-infected apples using HPLC-PDA-ESI-MS/MS

**Thi Phuong Duyen VU¹, In Sook CHO², Kyung Tae KIM³, Seo Young YANG¹,
Young Ho KIM¹, Jong Seong KANG^{1,*}**

¹Department of Pharmacy, Chungnam National University

²Department of Horticultural and Crop Environment,
National Institute of Horticultural and Herbal Science, RDA

³Division of Bio-engineering, Dong-Eui University

^{1,*}Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

The effects of viroid infection on the content of phenolic compounds in apple peel were studied on three cultivars: "Fuji", "Gamhong", and "Hongro". Eleven compounds in samples were detected using HPLC-PDA-MS/MS and quantified using HPLC-UV at 280 nm. The optimized conditions included a mobile phase of 0.5% acetic acid in water (A) and methanol (B) under an elution program of 15% to 60% B for 60 min. In response to viroid infection, considerable increases in the content of dihydrochalcones (in all three cultivars), hydroxycinnamic acid (in "Fuji"), and flavonols (in "Hongro") were observed. The flavonols content in "Fuji" viroid-infected samples, however, decreased dramatically, leading to a low nutrition content for consumers. An effective linear discriminant model was developed to discriminate between normal and viroid-infected samples, with 98.2% accuracy and 95.5% predictive ability. In conclusion, the proposed method will be useful for identifying viroid-infected apples to evaluate the quality of apple-related products in the market.

Pattern analysis of main components of DA mixture and its composition herb material with anti-aging activities by HPLC-DAD-ESI-MS

**Hyun June KIM, Chong Woon CHO, Seo Young YANG,
Young Ho KIM and Jong Seong KANG***

Department of Pharmacy, Chungnam National University

*Corresponding author : kangjss@cnu.ac.kr

Generally, it is known that air environmental contamination including hazardous substances such as fine dust, smog, exhaust fumes and ozone etc accelerates aging of skin. Recently, consumption for anti-aging products in cosmetics is being increased according to growing interest in skin care, welfare improvement, income increment of people. In previous study, DA mixture was reported that it had anti-aging activity. DA mixture is consisted of OJ, EP, ZI, PO, AP, EJ, SB, DM as herbal materials. The simultaneous analytical method for quality control of DA mixture has no report until now. The purpose of this study is to analyze the pattern of main components in DA mixture and its composition herb material for qualitative and quantitative analysis using HPLC-DAD-MS. HPLC analysis was carried out on a HECTOR-M C18 column (250 x 4.6 mm, 5 μ m) with mobile phase of 0.1% formic acid in water (A) and 0.1% formic acid in methanol (B) under the following gradient conditions: 7 – 63% B, 0 - 90 min, and monitored at UV 330 nm and 1.0 mL/min of flow rate. Fifteen peaks were assigned by comparison of UV and MS chromatogram using HPLC-DAD-ESI-MS. The assigned peaks were identified as neochlorogenic acid, chlorogenic acid, cryptochlorogenic acid, 4-p-coumaroylquinic acid, luteoloside, (3,4)-dicaffeoylquinic acid, (3,5)-dicaffeoylquinic acid, (4,5)-dicaffeoylquinic acid, rutin, afzelin, kaempferol, wedelolactone, triclin. And these compounds were compared with peak pattern and retention time of DA mixture and its composition individual herb. Finally, The peaks among fifteen peaks in DA mixture, its composition herb material were selected as marker compounds of DA mixture as neochlorogenic acid, chlorogenic acid, (3,4)-dicaffeoylquinic acid, (3,5)-dicaffeoylquinic acid, (4,5)-dicaffeoylquinic acid, rutin, afzelin, wedelolactone. In conclusion, the selected marker compounds will be useful for the qualitative and quantitative analysis of DA mixture and its composition herb material.

Pattern analysis of the bio-converted Morus alba leaves as the resource of functional foods with anti-diabetic activity using HPLC-DAD-ESI-MS

**Tae Jeong KIM¹, Young Ho KIM¹, Chong Woon CHO¹, Cheong-Weon CHO¹,
Chang-Seon MYUNG¹, Seok Jin KIM², Hyun So CHO², Min Ho YOON³,
and Jong Seong KANG^{1,*}**

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

²MSC Co. Ltd.

³Department of Bio-environmental chemistry, Chungnam National University

*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

Bio-conversion technology is widely used to improve the pharmacological activities. In these days, our research group improved the anti-diabetic activities of the Morus alba Leaves (LM) by bioconversion process based on enzyme treatment. However, there is little research report for the analysis of bio-converted products. Especially, bio-active materials processed by enzyme treatment has no report to explain how to improve bioactivity. Therefore, The aim of this study is to compare the component pattern between normal extracts and the bio-converted products and to explain the reason how to improve bioactivity using a HPLC-DAD-MS/MS. Firstly, liquid-liquid extraction was applied to divide into water and ethyl acetate layer for better pattern analysis and minimum matrix effect. The HPLC-DAD-MS/MS analysis was performed on a Optimapak C18 column (4.6 × 250 mm, 5 μm) with mobile phase of 0.1% formic acid in water (A) and 0.1% formic acid in acetonitrile (B) under the following gradient conditions; 0 – 45 min, 15% - 20% (B) and 45 – 60 min, 20% - 45% (B) at a flow rate of 0.7 mL/min and the column oven temperature of 25 °C. In results, eight peaks in the bio-converted LM extracts were increased by the bio-conversion process. And five peaks among eight peaks were respectively assigned as trans-caffeic acid, syringaldehyde, morin 3-O-β-D-glucoopyranoside, moracin M-3'-O-β-glucoopyranoside, and astragalin by HPLC-DAD-ESI-MS/MS analysis. These compounds were reported as bio-active components with anti-diabetes and anti-oxidant activities. They showed that the contents of bio-active compounds in the bio-converted products were higher than those of normal products. Consequently, it indicates that bio-conversion technology using enzyme treatment is useful to improve the bioactivity of LM products as the resource of functional foods with anti-diabetic activity.

**Development of the HPLC analytical method of two components
in SH and CO mixture using HPLC-ELSD**

GAO DAN, Chong Woon CHO, Seo Young YANG, Young Ho KIM, and Jong Seong KANG*

College of Pharmacy Chungnam National University

*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

SH and CO have been widely used in Korea and China as a traditional herbal medicine because of its analgesic, sedative, and diuretic activities. Thus, development of the simultaneous analytical method for the effective quality control of SH and CO is needed. However, the effective HPLC analytical method to analyze the content of the mixture of SH and CO has no report until now. The aim of this study is to develop the simultaneous analytical method of main compounds for the quantification of SH and CO mixture using HPLC-ELSD. HPLC analytical condition was carried out on an Optimapak C18 column (250 × 4.6 mm, 5 μm) with mobile phase of 0.1% formic acid in water (A) and 0.1% formic acid in acetonitrile (B) under the following gradient conditions: 0 - 60 min, 12 - 40% (B) at flow rate of 1.0 mL/min. And the gas flow rate for ELSD detection was 1.5 L/min of nitrogen gas, and the drift tube temperature was set at 65 °C. The nine peaks in SO and CO mixture were assigned as morroniside and ciwujianoside A1 by comparison of the UV spectrum and MS spectrum using LC-DAD-ESI-MS. Compound morroniside and ciwujianoside A1 among nine compounds were selected as marker compounds of SO and CO mixture. The developed method was successfully validated as follows; precision and accuracy of intra-day were 0.0 ~ 1.2% and 98.3 ~ 100.3%, respectively. Those of inter-day were 0.3 ~ 1.2% and 98.3 ~ 100.1%, respectively. LODs and LOQs were 7.00 ~ 24.50 μg/mL and 10.80 ~ 38.40 μg/mL, respectively. Linearity of two compounds was 0.999 over. The contents of morroniside and ciwujianoside A1 were 136.3±0.7 μg/mL and 1839.6±17.8 μg/mL, respectively. In conclusion, the developed analytical method will be useful for the qualitative and quantitative analysis of SO and CO mixture.

Quantitative analysis of impurities in sulfur hexafluoride and octafluoropropane

**Chong Woon Cho¹, Mi Yeon Park², Hyun Jun Kim¹, Jin Hyeok Kim¹,
Tae Jung Kim¹, Jin Seog Kim², Jin Bok Lee² and Jong Seong Kang^{1,*}**

¹*Department of Pharmacy, Chungnam National University

²Center for Gas Analysis, Korea Research Institute of Standards and Science

*Corresponding authors: kangjss@cnu.ac.kr

Sulfur hexafluoride (SF₆) and octafluoropropane (C₃F₈) have been mainly used as a cleaning agent of a semiconductor in industry. In these days, these gasses have been also used as a medical apparatus gas to treat the retinal detachment by pneumatic retinopexy in ophthalmology. Sometimes, the fetal medical errors such as blindness by these gases during the treatment of retinal detachment have been reported. However, these gases as medical materials have no regulation for safety improvement by the government of each country. The purpose of this study is to inform scientific basis for safety improvement and regulation of SF₆ and C₃F₈ based on data investigation and experimental analysis. The used gas materials were purchased from Danil system, Technomek and Arcadophta companies, respectively. The impurities such as nitrogen, oxygen, carbon tetrafluoride were analyzed by various analytical instruments such as GC-AED for organohalogen carbon gas analysis, GC-PDD and GC-TCD for inorganic gas analysis and GC-MSD for the assignment of organohalogen carbon gas, main component gas, humid analyzer for humid analysis and DX -120 ion chromatography for hydrogenfluoric acid analysis. In results, Danil system products among three company products could be only analyzed. The other company products could not be analyzed because of too small amount and packing in low pressure. The main component contents of two gases were over 99.99%. And the impurity contents of C₃F₈ were oxygen (1.0 ppmv), nitrogen (1.0 ppmv), hydrogenfluoric acid (12 ppbv), humid (< 0.5 ppm) and others (24.67 ppm). While, those of SF₆ were carbon tetrafluoride (3.09 ppmv), perfluoroethane (5.25 ppmv), humid (no detection) and others (below limit of detection). All main components and impurities in two gases were suitable in an accordance with inner content criteria. And fetal toxic compounds in two gases were not detected. In conclusion, the inner content criteria of impurities and main component contents of SF₆ and C₃F₈ will useful for safety management and regulation.

Analysis of inotodiol in plasma using LC-MS/MS for pharmacokinetic study using non-compartment analysis

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

Department of Pharmacy, Chungnam National University

*Corresponding author: kangjss@cnu.ac.kr

Inotodiol is a major component of *Inonotus obliquus* (Hymenochaetaceae) and it is widely known for anti-proliferation, anti-tumor and anti-cancer activities. There are some reports about the analysis of inotodiol in *Inonotus obliquus*. However, no bioanalytical method was developed to analyze the content of inotodiol in plasma. This study aims to develop the effective bioanalytical method for the quantification of inotodiol in plasma using LC-MS/MS. LC-MS/MS analytical condition was performed on C18 column (50 x 2.1 mm, 3.5 μ m) with the isocratic mobile phase condition consisted of 0.1 % formic acid in water and acetonitrile (10 : 90, v/v) at a flow rate of 0.3 mL/min. Inotodiol was ionized under interface voltage of 4.5 kV in positive mode of electrospray ionization interface (ESI). The precursor ion of inotodiol was $[M-H_2O+H]^+$, $m/z = 425$, and its product ion was optimized as $m/z = 425 \rightarrow 247$ at CE condition of -13 V. This compound was successfully detected in standard as well as plasma extracts by LC-MS/MS analysis. The developed method was applied to plasma obtained for 5 mice after oral administration at single dose of 50 mg/kg. The mean (SD) pharmacokinetic parameters were follows: C_{max} 299.4 (24.5) ng/mL; AUC_{0-t} 12,998.1 (1168.4) ng/mL*min; $AUC_{1-\infty}$ 13,484.6 (1240.7) ng/mL*min; $t_{1/2}$ 44.8 (9.29) min; Cl/F 0.01 (0.003) mL/min/kg.

**Assessment of cytochrome P450 inhibition potential of
a new drug candidate (HY001)**

In Yong Bae¹, Min Sun Choi¹, Young Seok Gi¹, Hye Hyun Yoo^{*}

¹한양대학교 약학대학

*Corresponding author: yoohh@hanyang.ac.kr

HY001 is a new drug candidate for obesity. In this study, inhibitory effects of HY001 on the activities of cytochrome P450 (CYP) enzymes were investigated with human liver microsomes. A CYP specific substrate mixture was incubated with HY001 in human liver microsomes, and the metabolites generated by each CYP specific metabolic reaction were measured by liquid chromatography-tandem mass spectrometry. The results of direct CYP inhibition showed concentration-dependent inhibitory effects on CYP2C8 and CYP2C19 isozymes. IC₅₀ values for CYP2C8 and CYP2C19 isozymes were 26.0 μM and 22.8 μM, respectively. In the time-dependent CYP inhibition test, the IC₅₀ shift value for CYP2C9 and CYP 2C19 isozymes was 0.7 and 0.8, respectively. HY001 showed inhibitory effects in CYP2C9 and CYP2C19 at high concentrations, but the possibility of drug-drug interaction at human experimental concentration was considered to be low

Simultaneous determination of sulbactam sodium and ampicillin sodium in powder for injection by HPLC

**Xuan-Lan Mai¹, Thuy-Vy Pham¹, Ga-Hyun Han¹, Su-Jin Kum¹, Sang-Hoon Woo¹,
Jong-Seong Kang², Mi Hee Woo³, Dong-Hee Na⁴, In-Koo Chun⁵, Kyeong Ho Kim^{1,*}**

¹College of Pharmacy, Kangwon National University,

²College of Pharmacy, Chungnam National University,

³College of Pharmacy, Catholic University of Daegu,

⁴College of Pharmacy, Chungang University,

⁵The Research Foundation for Pharmaceutical Quality

*Corresponding author: kyeong@kangwon.ac.kr

A combination of sulbactam sodium (SUL) and ampicillin sodium (AMP) is prescribed as an effective treatment against various infections. From the review of literature, in most methods for the simultaneous determination of these compounds by high performance liquid chromatography (HPLC), However, the drawbacks in those method include severe tailing peak shape of AMP, abnormally high column pressure and long running time. In this study, a simple, sensitive, and selective HPLC method was developed and validated for the simultaneous quantification of SUL and AMP in injection powder. The effects of various factors, including detection wavelength, buffer pH, organic solvent concentration, were investigated. The performance of the developed method was validated in accordance with the requirements of the International Conference on Harmonization. The linearity of the calibration curves in the desired concentration range was high for both SUL and AMP ($r^2 > 0.9994$). The accuracy and precision of the method were determined by a recovery study at analysis concentrations of 80, 100, and 120%. The recovery was 98.42 – 101.36% for both analytes with the relative standard deviation were less than 2.0% at any concentration level. The validated results indicated that the new HPLC method could be successfully applied for the simultaneous determination of SUL and AMP in injection powder.

Rapid screening of multi-class illegal adulterants in lipid type supplements by UHPLC-Q/TOF-MS combined with QuEChERS methods

Bum-Hee Kim, Jisu Hur, Hyun Ji Kim, Jongki Hong*

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

A simple and high-throughput method for rapid screening of 123 illegal adulterants (25 erectile dysfunction, 23 steroids and anabolic steroids, 15 antihistamine, 17 NSAIDs, 21 diuretics, 22 weight loss) in lipid type supplements was developed based on QuEChERS sample preparation methods combined with UHPLC-Q/TOF-MS. Different cleanup approaches [QuEChERS, enhanced matrix removal-lipid (EMR) QuEChERS, dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME), and freezing-lipid filtration (FLF)] were evaluated in terms of matrix effect, recovery rate, precision and accuracy. As results, EMR-QuEChERS was shown to be the best cleanup approach. Using EMR-QuEChERS, recoveries ranged from 70%-120% for 80 of 123 adulterants. Matrix effect was lower than 20% signal suppression for all adulterants tested in softgel. Overall calibration curves for all targets were shown to be linear within dynamic range correlation coefficient $R^2 > 0.990$. Limits of detection (LOD) ranged from 0.02-19.23 ng/mL. Intra-day and inter-day variation are less than 11.5% and 20.07%, respectively. For rapid monitoring of a wide range of adulterants by UHPLC-Q/TOF MS, their MS/MS spectra were interpreted to find common ions and neutral molecule loss fragments according to similar chemical structures for applying extracted common ion chromatograms and neutral loss scan. A reduced mass tolerance window of ± 5 ppm was useful for detecting targeted and untargeted adulterants and could avoid false positive and false negative results. The established method was proved to be simple, sensitive, and effective for wide-scope screening and confirmation of adulterants in lipid type supplements.

Keywords: illegal adulterants; EMR-QuEChERS; diet supplements; rapid screening; extracted common ion chromatogram; neutral loss scan; UHPLC-Q/TOF-MS/MS

**Investigation of the effects of different brewing conditions
on *Camellia sinensis* infusions**

**Yan Jin, Seulgi Kang, Heesoo Lee, Keunbae Park, Dasom Jung,
Ke Li, Jeongmi Lee[★]**

School of Pharmacy, Sungkyunkwan University, Suwon, 16419, Republic of Korea

[★]Corresponding author: jlee0610@skku.edu

Green tea (*Camellia sinensis*) infusions brewed at 60°C and 90°C for 5-300 min were examined by antioxidant assay and non-targeted and targeted metabolomics analyses. It was found that temperature plays a relatively more important role in the antioxidant capacity of tea infusions than time does. While significant changes in the metabolic profiles were observed with different temperatures and time, the time effects became more evident at 95°C from 30 min based on ultra high performance liquid chromatography-quadrupole-time-of-flight mass spectrometric analysis. A large number of differential compounds, including amino acids, organic acids, phenolic acids, flavonoids, and catechins were identified by multivariate statistical analysis. Through their hierarchical cluster analysis, distinct profiles were detected in the infusions brewed at 95°C for longer than 30 min. It is interesting to find altering levels among isomers (p-coumaroylquinic acid, galloyl glucose, and catechin isomers) with lengthened time. Targeted analysis of catechins using ultra-high performance liquid chromatography coupled with triple quadrupole mass spectrometry showed dramatic changes; the highest total catechin level was achieved at 95°C for 10 min, and subsequent epimerization of catechins was observed. This study presented the first comprehensive characterization of green tea infusions by non-targeted and targeted analyses with relevant activity assays.

Development and validation of an analytical method for the determination of narcissoside in sea buckthorn (*Hippophae rhamnoides* L.) by HPLC-UV

**Ke Li^{1,§}, Seulgi Kang^{1,§}, Yan Jin¹, Dasom Jung¹, Heesoo Lee¹,
Keunbae Park¹, Yong Seok Choi², Jeongmi Lee^{1,*}**

¹School of Pharmacy Sungkyunkwan University

²College of Pharmacy, Dankook University

*Corresponding author: jlee0610@skku.edu

In this study, a simple and reliable analytical method for quality control of sea buckthorn (*Hippophae rhamnoides* L.) was developed and validated. To this, narcissoside, a flavonoid component was selected as a marker compound. The method was validated in terms of linearity, accuracy and precision and found to be satisfactory. The extract was chromatographed on a Phenomenex Gemini C₁₈ column (250×4.6mm, 5µm) under a gradient elution of a mobile phase containing 0.5% acetic acid in acetonitrile and 0.5% acetic acid in water at flow rate of 1.0 mL min⁻¹. Detection wavelength was set at 360 nm and column temperature was 40°C. Calibration curves were found to be linear with the range between 2.5 to 17.5 µg mL⁻¹; the linearity was excellent ($r^2 > 0.9998$); and the limit of quantification was 0.236 µg mL⁻¹. Accuracy, which was estimated by measuring the recovery at three spiked concentrations, was found in the range of 92.80–109.99%. The intra-day and inter-day precisions were expressed as relative standard deviation and were found under 3.88% and 3.28%, respectively. (¶These authors contributed equally.)

Extractive desulfurization of fuels using ammonium-based deep eutectic solvents

**Heesoo Lee, Yan Jin, Seulgi Kang, Keunbae Park,
Dasom Jung, Li Ke, Jeongmi Lee***

¹School of Pharmacy Sungkyunkwan University

*Corresponding author: jlee0610@skku.edu

SO_x produced during the combustion of fuels makes the air polluted and have dangerous environmental impact. Therefore, many countries strictly regulate the concentration of sulfur compounds not to exceed 10 ppm. With the aim of replacement of the present volatile, flammable and toxic organic solvents and expensive ionic liquids (ILs), deep eutectic solvents (DESs) have provided new opportunity for the extraction desulfurization (EDS) of fuels, because of their cheap, simple and environmentally-friendly synthesis process. In this study, EDS of model fuel containing 500 ppm of thiophene (T), benzothiophene (BT) and dibenzothiophene (DBT) as sulfur compounds was carried out using 28 different DESs. A series of DESs were synthesized using tetraalkylammonium bromide with increasing carbon number as hydrogen bond acceptors (HBAs) and alkyl diols with increasing carbon number as hydrogen bond donor (HBD). In general, high extraction efficiency was obtained from DESs composed of a long chain length HBA and a short chain length HBD. For example, the extraction efficiency for DBT could reach as high as 80.11% using a DES consisting of tetraoctylammonium bromide and ethylene glycol for one cycle. Studies on reuse and regeneration of DESs are in progress.

Investigation of stabilization/destabilization effects and mechanisms of solvents on epigallocatechin gallate

**Seulgi Kang, Yan Jin, Heesoo Lee, Keunbae Park,
Dasom Jung, Ke Li, Jeongmi Lee***

School of Pharmacy Sungkyunkwan University

*Corresponding author: jlee0610@skku.edu

(-)-Epigallocatechin gallate (EGCG) is the most abundant and potent antioxidant in green tea. While it is associated with many health benefits, it easily undergoes degradation reactions such as epimerization, oxidation and hydrolysis during thermal processing. In this study, degradation kinetics of EGCG were investigated in deep eutectic solvents (DESs) which have numerous applications as environmentally green solvents. Benign choline chloride-based DESs with different hydrogen-bond donors, urea (CU) and thiourea (CTU) were studied in comparison to water and methanol. The stability of EGCG in each solvent at 60°C resulted in the order CTU>methanol>water>CU. EGCG degradation followed a first order kinetic model at different temperature (25°C~90°C), and the temperature dependence of rate constants followed the Arrhenius equation. For CTU, methanol, water, and CU, the activation energy (E_a) was 139.64, 64.93, 72.43, 35.78 kJ/mol, respectively. The EGCG decomposition pathway in each solvent was investigated based on degradation products analyzed by UHPLC-QqQ-MS. It was attempted to understand the stabilizing/destabilizing mechanisms of the solvents using FT-IR and $^1\text{H-NMR}$ techniques, which revealed different intermolecular interactions between EGCG and DESs. The current study suggests DESs have a great promising potential as a stabilizing medium for EGCG.

Minimization of spectral differences between lab-blended and real process pharmaceutical samples with wetting strategy for Raman spectroscopy

Yoonjeong Lee¹, Sang Hoon Cho¹, Jaejin Kim², Young-Ah Woo², and Hoeil Chung^{1,*}

¹Department of Chemistry, Hanyang University, ²Quality Management, Chong Kun Dang Pharm

*Corresponding author: hoeil@hanyang.ac.kr

For robust Raman spectroscopic analysis, the preparation of a sample set incorporating wide compositional variation of each component without concentration correlation among the components is necessary. For this goal, the blending of individual components at designed concentrations in a lab is most straightforward. However, the physical presentations of lab-blended and real processed samples often differ. Many real samples are in granulized-form; while, lab samples are in just powder-form. So, Raman spectral features between these two samples would be dissimilar and this will lead to the deterioration of accuracy.

we have demonstrated a strategy of making the physical presentations of both lab-blended and real processed samples to find similar. It is the addition of water into the processed sample to dismantle the granules into powders. For the evaluation, the samples composed of esomeprazole (API), L-arginine, povidone, microcrystalline cellulose, magnesium oxide and sodium stearyl fumarate (refer as OMPS powders) were employed. The initial examination confirmed that Raman spectra of the lab-prepared and process OMPS powders were fairly dissimilar. In a meanwhile, when both samples are wetted with water, the spectral features became similar. A partial least squares (PLS) model developed using the wetted lab-blended samples accurately predicted the esomeprazole concentrations in the process samples, which were also wetted. The proposed strategy would be versatile for analysis other pharmaceutical samples.

Optimization for determination of microbeads from cosmetics and personal care products

Yeonjeong Jung, Hyunhwa Son, Jinsook Lee*

Material Technology Center, KTL, Ansan-si, Korea

*Corresponding author: ljsmaria@ktl.re.kr

Microbeads are generally defined as plastic debris smaller than 5 mm and are often added to cosmetics and personal care products as an abrasive agent in exfoliants. These beads have been reported to contaminate the marine environments and marine ecosystems. Several studies have determined microbeads from cosmetics and personal care products with various methods, but the results of analysis using various methods are low in reliability and efficiency. Therefore, we aimed to optimize for analysis of microbeads from cosmetic and personal care products. To dissolve soluble ingredients, 2 g product, with three replicates, was mixed with 500 mL water and heated on a stove with continuous stirring at 150 °C for 3 hr. The resulting solution was filtered through a 5A filter paper under vacuum system. The filters and retained microbeads were oven-dried at 50 °C to constant weight. The extracted microbeads were identified using FT-IR spectrometer and were measure the particle size, shape using laser diffraction particle size analyzer and digital microscope, respectively. Seven cosmetic products were analyzed using optimized method, and successfully identified microbeads.

황 기반의 단백질 정량분석법과 아미노산 기반의 단백질 정량분석법의 비교

김휘진^{1,3}, 정지선^{2,3}, 트란 호영^{2,3}, 임영란¹, 허성우¹, 임용현^{1,3,*}

¹한국표준과학연구원 분석화학센터, ²한국표준과학연구원 바이오센터,

³*과학기술연합대학원대학교 생물과학분석

*Corresponding author: yhyim@kriss.re.kr

단백질 정량분석은 신약 개발, 생물학적 연구, 약효 평가, 임상 연구에서 필수적이다. 정확하면서 국제단위계(SI)로의 소급성을 갖춘 단백질 정량분석법으로는 펩티드, 아미노산, 원소 기반의 단백질 정량분석방법 등이 있다. 본 연구에서는 아미노산 기반의 정량분석법과 황(S) 기반의 정량분석법을 이용하여 인슐린을 분석한 후 두 가지 방법에 대한 결과 값을 비교하였다. 우선 아미노산 기반의 분석방법은 최적화된 조건의 가수분해법을 찾아 단백질을 아미노산 단량체로 만든 후 동위원소가 표지된 아미노산을 내부표준물질로 한 동위원소희석 LC-MS법을 사용하였다. 황 기반의 분석방법은 농축동위원소(34S)를 내부표준물질로 넣은 시료를 가압 마이크로파 산분해법을 이용하여 용액화한 후 ICP-MS기기를 이용하여 34S와 32S 동위원소 비율을 측정하였다. 이때, 황 바탕값이 높기 때문에 ICP-QQQ 기기를 이용하여 분자이온 간섭을 최소화한 후 측정하였다. 또한 불순물 확인을 위해 size exclusion chromatography (SEC) ICP-MS로 황을 포함한 불순물을 분리검출하고 standard addition법을 이용하여 정량하였다. 이 두 가지 방법의 정량결과는 잘 일치하였고 이를 통해 이 두 가지 방법들이 향후 다양한 단백질표준물질의 개발과 품질관리에 활용될 수 있는 가능성을 제시하였다.

Determination of bisphenol A in Pharmaceutical Capsules

Hyub Kim*

ASC, Department of Medicine Quality Analysis

The bisphenol A (BPA) was determined in in pharmaceutical capsules sample by gas chromatography followed by tert,-butyldimethylsilyl (TBDMS) derivatization method. The bispheol A in in pharmaceutical capsules sample was dissolved with toluene in water bath at 80°C. Also, freeze filtering method (FFM) at -60°C and subsequent conversion to TBDMS derivatives were used for sensitive analysis.

A capillary gas chromatograph analysis method was described for the determination of effective components in in pharmaceutical capsules sample.

The purpose of this experiment was to investigated the composition for BPA in in pharmaceutical capsules sample.

When these methods were applied to pharmaceutical capsules samples, FFM and TBDMS derivatization will be discussed with QC method of pharmaceutical capsules sample.

Cetyl alcohol의 함량에 따른 크림제형 헤나 천연 염모제의 안정성 확인

강이영, 서현정, 연승언, 정희경, 이윤형, 정종진*

한남대학교 화학과

*Corresponding author: jongjin9@hnu.kr

현재의 크림제형 염모제는 두피 자극을 유발하는 화학성분을 함유하고 있어, 천연소재 만를 이용한 크림제형 염모제 개발이 지속적으로 시도되어 왔다. 그 중 Henna는 오랫동안 사용되었던 천연소재이지만 파우더를 물에 개어 사용하여야 하는 불편함과 장시간 방치 시 빛에 의해 쉽게 산화되어 염색이 되지 않는 문제점으로 인해, 크림제형 헤나 천연염모제 개발의 중요성이 더욱 커졌다. 본 연구에서는 파우더 형 Henna를 인체안성성이 뛰어난 소재로 유화시키고 안정화 시키는 크림제형 염모제 제조 기술을 개발하였다. 크림제형 염모제의 가장 핵심적인 유화제로는 cetyl alcohol과 polysorbate 80, lecithin, glycerine을 이용하여 크림제형을 완성하였고, 유화안정성 및 염색 효과를 극대화시키기 위해서는 cetyl alcohol의 함량을 다르게 하여 실험하였다.

분산방법으로 Homogenizer를 사용하여 효과적인 유화를 유도하였고, O/W 에멀전 제형의 염모제의 기본 크림제형을 확립하였다. 이렇게 개발된 크림제형 염모제를 DLS(Dynamic light scattering), Zeta-potential을 사용하여 에멀전 크기 및 분산도와 안정성을 측정하였고, viscometer를 이용하여 크림형 염모제에 적합한 점도 임를 확인하였습니다.

결과적으로 기본 헤나기반 크림제형에 cetyl alcohol의 함량 증가에 따라 유화안정성이 향상되고 염색 색상의 다양화를 구현하여 천연 헤나 파우더 기반 염모제를 대체할 수 있는, 크림제형 헤나 천연염모제 개발이 가능함을 보였다.

Manufacture and characterization of mascara using coffee bean extract

Jaeseon Lee¹, Jihyun Bae¹, Heejin Lee², Seongho Lee² and Woonjung Kim^{1,*}

^{1,*}Department of Chemistry, Hannam University,

²Chemtree Co. Ltd. Research Center

*Corresponding author: wjkim@hnu.kr

Recently, growing interest in human harmfulness, cosmetics using natural materials are being developed and improved. Because cosmetics are products that come into direct contact with the face or body, there is a strong interest in adding natural substances that are harmless to the human body. Among many natural cosmetics, mascara products are not easily seen. There are still some cases of mascara and poor eye health.

In this study, we applied research on coffee beans, which are natural materials instead of black iron oxide used as black pigment in mascara, and studied the possibility of products as mascara and the safety of heavy metals.

As a first step, ingredient analysis was carried out on coffee bean extract extracted with methanol and ethanol using Gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS). As a second step, mascara was produced using coffee beans extracted with ethanol. For mascara production, for comparative analysis, black iron oxide which is a raw material of commercially available mascara and coffee bean extract extracted with ethanol were produced and compared and analyzed. In the third step, the functional aspects of commercially available mascara and coffee bean mascara were confirmed and the substance properties were compared and analyzed. The color tone was measured using a color difference meter and the viscosity was analyzed using Viscometry. In the fourth step, mascara made of bean extract was analyzed by inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) to determine heavy metals including manganese (Mn), lead (Pb), cadmium (Cd) and arsenic (As). In the fifth step, we confirmed the performance of coffee bean-containing mascara and the stability of skin trouble in the test results of 10 panelists.

The results of this study showed that color and texture of coffee bean - containing mascaras were not significantly different from commercial mascaras. And Through heavy metal analysis, we were able to know that black iron oxide is harmful to the health of the eyes. Also Mascara containing coffee bean extract can be applied to natural mascara and is expected to be the foundation for research on cosmetics like shade like mascara in the future.

Analysis of the flavouring substance of Chrysanthemum Flower Essential Oil and Study on the Suitability of Perfume Materials

Dawon OH¹, Jihyun Bae¹, Mihyun Lee², Seongho Lee² and Woonjung Kim^{1,*}

¹*Department of Chemistry, Hannam University, ²Chemtree Co. Ltd. Research Center

*Corresponding author: wjkim@hnu.kr

The latest trend in the perfume market has been a steady increase in consumers seeking "Nicchia perfume." Nicchia perfume, which is more than twice as expensive as traditional perfume, is responsible for its high growth. It is expected that the popularity of the Nicchia perfume will continue to grow as more consumers seek their own brand rather than popular perfume. The chrysanthemum contains vitamins A, B1, Choline, Stachydrin and Adenine, which are known to prevent aging and maintain elasticity when applied to skin. In particular, chrysanthemum extracts are very effective for fungal acne because of their inhibition and anti-viral activity. Use of anti-inflammatory action and facial irritation are helpful.

In this study, the natural flavouring essential oils from, Chrysanthemum which is used for medicinal purposes, were extracted from a rich and unique flavor, and the components of the scent were analyzed in GC-MS. The local essential oil extraction method used the solvent extraction. The solvents used in this study were compared with ethyl ether and ethanol. Ethyl ether is relatively low in boiling points and can be extracted without adding heat. The absolute obtained from ethyl ether 3.69 g and the ethanol obtained 3.75 g. The yield was all about 1.8 % similar.

The fragrance evaluation of absolute found a significant flavouring substance through the Common Fragrance and Flavor Meter literature of the components detected with GC-MS. Also, the team used panels to express the trend through a survey of emotional adjectives. Both ethanol and ether extracts absolute received high marks in the categories 'flower scent' and 'green/ herb scent.'. Due to the remaining scent of solvent, it has been found that it prefers the scent of ethanol to the ether extracted absolute. The results of this study are expected to be applied to perfumes and aromatherapy.

Characterization of Natural Preservatives in Korean Pharmaceuticals

**Mihyun Lee¹, Seyoung Yoon¹, Heejin Lee¹, Kyong Eun Yu¹, Ji-hyun Bae²,
Woonjung Kim², Seong Ho Choi², Eun Bi Kang³, In Soo Lee³ and Seungho Lee^{1,*}**

¹*Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea,

²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea,

³Department of Biological Science and Biotechnology, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

*slee@hnu.kr

Cosmetic products usually contain preservatives as, without them, cosmetic products may be easily deteriorated and contaminated, causing serious health problems.

It has been found that commonly used synthetic preservatives cause some side effects such as contact allergies and contact dermatitis, and are also closely linked to breast cancer. Thus, natural preservatives have become a focus of attention these days. Unfortunately, replacement of synthetic preservative with a natural one is not simple due to relatively higher price and lower efficiency of natural preservatives.

Cinnamon is harmless and widely used in various products including food. In this work, the ethanol extract from omizawa cinnamon was tested for its antibacterial activity by the 'Paper Disk method' as a natural preservative for cosmetic products. The cinnamon extract was mixed at 1 w/w% with a cosmetic formulation and was tested using the 'Challenge Test'. The cinnamon extract showed an excellent antibacterial activity, where, after three days, no colony was found in the badge.

It seems possible to develop a natural preservative that can replace a synthetic preservative, and may benefit various industries including the cosmetic and food industries.

Development of solid natural sunscreen using inorganic compounds

**Heejin Lee¹, Mihyun Lee¹, Seyoung Yoon¹, Kyong Eun Yu¹,
Woonjung Kim², Seong Ho Choi², Ah Ryeong Kim³ and Seungho Lee^{1,*}**

^{1,*}Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea

²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

³Department of Cosmetic Science, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

*slee@hnu.kr

The UV-A, corresponding to the wavelength range of 315-400 nm, passes through the ozone layer, and penetrates deeply into the skin to cause skin aging, although it is relatively low in energy. The UV-B, corresponding to the wavelength range of 280-315 nm has a relatively higher energy, and is known to cause skin cancer. Use of a sunscreen is recommended to prevent problems caused by the ultraviolet rays. In selecting a sunscreen, safety and the compatibility to one's skin are more important factors to consider than the sun protection factor (SPF).

Sunscreens with organic compounds chemically absorb and block the UV rays. However, the energy released after absorption tends to affect the human body, disturbing the hormone system, causing skin allergies.

Zinc oxide is an inorganic compound, and is known to be safe for about 300 years. The United States FDA approved its use for babies under six months.

In this study, the zinc oxide was tested as an ingredient for natural sunscreen products. A natural wax was dissolved in a heating device, and then zinc oxide was added. After stirring the mixture for 1 min, the mixture was allowed to be hardened at room temperature in a sunscreen cast. The solid natural sunscreen developed in this study met the heavy metal regulation for cosmetics, and yielded the SPF value of 50 +.

It seems possible to manufacture solid natural sunscreen products using inorganic compounds. The product developed in this study will be used in a public science class, such as the 'Fun Science Experience Class' for high school and undergraduate college students.

Synthesis and characterization of vesicles containing calcein using asymmetrical flow field-flow fractionation (AF4) and multi-angle light scattering (MALS)

Hyemin Kim², Woonjung Kim², Seong Ho Choi², Lars Nilsson³, Seungho Lee^{1,*}

^{1,*}Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea

²Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, 305-811, Korea republic

³Dept of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Lund, SE-22100,Sweden

*Corresponding author: slee@hnu.kr

Vesicles are spherical shell composed of one or more phospholipid bilayers encapsulating an aqueous phase. They can incorporate both hydrophilic and lipophilic compounds inside of the membrane-like shells, and have been used in various areas including pharmaceutical, cosmetic and food industries as emulsifiers or carriers.

Characterizing the size distribution of vesicles is important in drug delivery studies as the size distribution of the vesicles affect their circulation characteristics in the blood stream and also targeting.

In this study, we prepared vesicles containing calcein, which is a fluorescent substance by a high-pressure extrusion with a polycarbonate filters of 100 nm in the pore size. Then the size distributions of the vesicles were analyzed using dynamic light scattering(DLS) and asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AsFIFFF-MALS).

Various AF4-MALS conditions were optimized for the size analysis of the vesicles, including the cross flow rate of 0.3 mL/min. The particle size distributions obtained from AsFIFFF showed that the vesicle size changes with the concentration of the lipid (0.1 to 0.5 %), while those from DLS did not show significant differences. AsFIFFF seems a better suited for size distribution of the vesicles than DLS.

Study on effect of particle size and Mica content on sun protection factor (SPF) using gravitational field-flow fractionation (GrFFF)

Jihye Kim¹, Jaeyeong Choi², Woonjung Kim¹, Seongho Choi¹, Seungho Lee^{1,*}

¹Department of chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

²Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden

*Corresponding author: slee@hnu.kr

Sunlight consists of lights of various wavelengths including infrared (IR), visible (VIS), ultraviolet (UV), X-ray and γ -ray. Although the UV content is only about 6%, the human body, especially human skin, is sensitive to UV.

UV is divided into three regions according to wavelength. They are UV-A (320-400 nm), UV-B (290-320 nm) and UV-C (100-290 nm). UV-C is almost completely absorbed by stratospheric ozone and does not reach the ground and human skin [1]. Unlike UV-C, UV-A and UV-B are not absorbed into the ozone layer, so they have a detrimental effect on the skin such as skin cancer. Approximately 90-95% of UV that reaches human skin is UV-A. UV-A is known to be a main cause of the skin aging, yielding skin darkness.

Mica is known to be effective in reducing fine lines and pores, protecting the skin from sunlight. Mica is currently used as a coloring agent in various sunscreen products. Still, there is no detailed report on the effect of mica on sun protection factor (SPF) [2].

In this study, various formulations of UV screening agents were prepared by mixing Mica at various concentrations, and the variations of SPF with the composition and particle size of Mica were examined.

Gravitational field-flow fractionation (GrFFF) was used to analyze the particle size and its distribution of mica. SPF-290AS was used for SPF measurement of various sun protection formulations. GrFFF provided size-based separation of mica particles and was useful for determining size distribution and average size of mica samples.

We have found that the mixing ratio of 3: 3: 4 of TiO₂:OMC:Mica yielded the highest SPF. Also the SPF changes with the particle size of the Mica.

[1] National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, <http://www.nifds.go.kr/en/>, Assessed 15 Jul 2016.

[2] J.J. Ahn, Kor.J. Aesthet. Cosmetol. 12 (2014) 323.

Failure Analysis of Polymeric Materials : A Case Study in Deterioration of polymers

김경문¹, 최병일, 박재현, 유석

¹한국화학융합시험연구원 고분자재료팀

19세기 초 플라스틱 등의 고분자 재료가 등장하면서 그 가공성 및 경제성 등으로 인해 금속 재료를 대체하는 구조 재료로서 금속 재료의 주요 파괴 원인이 되는 응력(Stress), 부식(Corrosion), 수소취성(Hydrogen Embrittlement)과는 달리 소재 열화(Deterioration), 케미칼, ESC(Environmental Stress Cracking), 피로(Fatigue) 등에 의해 파괴되는 사례가 더 많은 것으로 보고되고 있다. 고분자 재료는 금속 재료와는 달리, 자외선과 열, 오존 등에 의한 산화 반응에 의해 그 성능이 저하되며, 이러한 메커니즘은 많은 논문과 문헌에서 발표되었다.

본 연구에서는 다양한 고분자의 열화 요인별로 발생한 고분자 제품의 고장 원인에 대해 규명하고, 그 원인을 규명하는데 있어 사용된 여러 가지 분석 기법을 소개하고자 한다.

고순도 알루미늄(99.999% 중 미량 불순물 원소 분석법 개발에 대한 연구

김은화^{1,2}, 고청아¹, 민형식¹, 한명섭¹, 허성우¹, 임영란¹, 김태규², 이경석^{1,*}

¹한국표준과학연구원 분석화학표준센터, ²부산대학교 화학과

*Corresponding author: kslee@kriss.re.kr

알루미늄은 가장 일반적으로 발견되는 산화 알루미늄 (Al₂O₃) 중 하나로, 첨단 산업 소재로 널리 사용되고 있다. 특히 99.999% 이상의 화학적 순도를 가진 고순도 알루미늄이 요구되는데 이는 불순물이 잉곳(ingot) 결정 성장을 방해하고, 결정 특성을 변형시키기 때문이다. 이에 따라 알루미늄 중 미량의 불순물 원소 분석이 필수적이지만 고순도 알루미늄의 본질적인 안정성 때문에 시료 용해가 복잡하고 어려울 뿐 아니라 고농도의 알루미늄에 의한 측정 저해로 인해 분석 방법이 거의 보고되지 않고 있다. 본 연구에서는 내부표준물질이 결합된 질량기반 표준물 첨가법(GSAM-IS, Gravimetric Standard Addition Method with Internal Standard)과 유도결합플라즈마 발광분광법을 이용하여 고순도 알루미늄 중 철, 실리콘, 마그네슘의 함량을 결정하였고, 인증표준물질(CRM)로 개발 중에 있다. 먼저 시료 전처리과정을 염산 기반의 가압 마이크로웨이브 산 분해법을 통해 최적화시켰고 그 결과 전체 시료 준비 시간을 8시간 이내로 단축시켰다. 과량의 알루미늄 기질내의 미량 원소를 분석하기 위해 ICP-OES를 사용하였으며 이는 ICP-MS와 비교하여 보다 신뢰성 있는 신호세기를 보였다. 그 이유로 ICP-MS에서는 알루미늄이 침착되고 콘 오리피스가 막혀 심각한 신호세기 감소를 초래했기 때문이다. 인증절차와 인증값의 유효성을 확인하기 위하여 병간, 병내 균질도를 확인하였고, NMIJ CRM-8007a 고순도 알루미늄 값과 비교하여 일치하는 결과값을 얻었다. 본 분석방법을 통해 개발된 KRISS 알루미늄 CRM은 원소 분석 실험실에 측정 결과의 신뢰성을 높이고 측정소급성을 제공하는데 기여할 것으로 기대된다.

The thermal and mechanical properties of silica-aerogel in polyurethane

정영희¹, 변진원¹, 조유정¹, 신혜철¹, 한상원¹, 김형진², 고혜인², 정정설^{1*}

¹*한국화학융합시험연구원, ²전남대학교 신화학소재공학과

*Corresponding author: jsyk38317@ktr.or.kr

Silica-aerogel-polyurethane foams were prepared by varying the weight ratio of the silica aerogel (0, 2, 4 wt%). The thermal conductivity of the silica-aerogel-polyurethane foam was measured by LFA(NETZSCH, LFA 467) at different temperature(25 °C, 50 °C, 75 °C) to confirm the insulation performance depending on the amount of silica aerogel and temperature. Also, Dynamic mechanical property testing(Tensile vibration, KS M ISO 6721-4) was performed at -50 °C ~ 50 °C by using DMTS(GABO, EPLEXOR) to compare the mechanical property of the silica-aerogel polyurethane foams. The testing results showed the effects of insulation property of silica aerogel in polyurethane at high temperature and enhancement of mechanical properties.

Ferro-Silicon 중 SiC 정량분석기술

이재우*, 정성욱, 장영석, 양정환

(재)포항산업과학연구원 분석평가그룹 화학조성섹션

*Corresponding author: myway81@rist.re.kr

Ferro-Alloy 제품군 가운데 Ferro-Silicon은 철강재 제품을 생산하기 위한 제강공정에서 탈산화제와 환원제로 주로 사용되며, 탄소강 제조공정에서는 흑연화촉진제로 이용되는 중요한 부 원료이다. 수요가 원하는 품질을 갖춘 철강제품을 생산하기 위해서는 제조공정에 투입되는 Ferro-Silicon의 품질을 유지하는 것이 매우 중요하다. Ferro-Silicon의 품질을 평가하기 위해서는 불순물의 화학조성을 정확하게 분석하는 것이 필요하다. 특히 저탄소 합금철 생산시 Ferro-Silicon 내 주요 불순물인 SiC가 제품 품질에 큰 영향을 끼치는 것으로 알려져 있으며, 이를 해결하기 위해 생산 현장에서는 Ferro-Silicon 중 불순물 SiC의 정확한 함량 분석을 요구하고 있다.

본 연구에서는 Ferro-Silicon 내 불순물 SiC를 분석하기 위해 1) 중량법, 2) 유도결합플라즈마 원자방출분광법(ICP-AES, Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectroscopy)을 사용하였다. 시험방법의 유효성 검증을 위해 Ferro-Silicon 자가 표준물질을 시료와 함께 3회 전처리하여 Ferro-Silicon 내 SiC 함량을 측정하였다. 시료 전처리 방법으로 불산 및 질산으로 시료를 용해, 건조한 후, Metal Si 및 SiO₂를 휘발시켰다. 염산으로 용해 후 B 여과지로 여과하여 중량법의 경우 잔사의 무게를 측정하여 SiC를 정량하였고, ICP-AES 측정방법으로는 잔사를 탄산나트륨과 붕산 3+1로 혼합한 용제로 전기로에서 용융 및 염산으로 용해 후 Si의 파장 251.611 nm에서 나타나는 신호의 세기를 측정한 후 측정값을 SiC 질량 환산

Factor 1.428을 곱해 SiC를 정량하였다. 2가지 방법 모두 자가 표준물질 내의 SiC 회수율 값이 약 97 % ~ 102 %, 재현정밀도 약 2 % 이하를 나타내었다. 이를 통해 Ferro-Silicon 내의 SiC를 분석하기 위한 2가지 방법이 모두 유효성이 있는 것을 확인하였다.

알루미늄노실리케이트 광물 중 알칼리금속 정량분석기술

양정환*, 정성욱, 하상수, 김성남

(재)포항산업과학연구원 분석평가그룹 화학조성섹션

*Corresponding author: yjh315@rist.re.kr

알루미늄노실리케이트(Aluminosilicate)는 제올라이트(Zeolite) 또는 비석이라고도 하며 알루미늄 산화물과 규산 산화물 결합으로 생겨난 음이온을 알칼리 금속과 알칼리 토금속이 결합되어 있는 광물이다. 즉 결정질 알루미늄 규산염광물을 의미한다. 알루미늄노실리케이트는 결정구조 내에 알칼리 금속의 양이온을 함유하고 있어 외부의 다른 양이온과 자유롭게 교환되는 이온 교환제로 사용되며 최근 리튬이온전지의 수요로 리튬을 함유하고 있는 알루미늄노실리케이트 광물이 원료로 사용되고 있다. 따라서 알루미늄노실리케이트 중 알칼리금속의 함량을 정확하게 분석하는 것이 중요하다.

본 연구에서는 알루미늄노실리케이트 중 알칼리금속인 Li, Na, K를 정량하기 위해 1) 원자흡수 분광법(AAS, Atomic Absorption Spectroscopy), 2) 유도결합플라즈마 원자방출분광법(ICP-AES, Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectroscopy)을 사용하였다. 시료의 전처리는 2가지 방법으로 인증표준물질(CRM, Certified Reference Material)을 시료와 함께 1) 왕수로 Li, Na, K를 용출하였으며, 2) 불산 및 질산과 과염소산분해 후 건조하여 염을 염산으로 용해하였다. 위의 2가지 전처리방법을 AAS, ICP-AES 측정법으로 하였으며 원소 및 파장을 Li(670.784 nm), Na(589.592 nm), K(766.490 nm)로 선택하여 정량하였다. 특히 ICP-AES에서는 RF Power의 변화와 Radial, Axial 2가지 모드로 정량을 하여 비교하였다. 그 결과 ICP-AES에서 RF Power를 낮춤에 따라 Axial 모드에서 R2값이 1에 가까워짐을 확인하였으며 Radial 모드와 AAS에서 R2값 0.999 이상의 직선성을 얻을 수 있었다. 또한 2가지 전처리방법 모두 회수율 95 % 이상과 재현정밀도 약 3 % 이하를 나타내었으며 분석방법의 유효성검증(Method Validation)을 통해 위의 방법 모두 알루미늄노실리케이트 중 Li, Na, K를 정량하기에 적합함을 확인하였다.

합성 다이아몬드의 국내 유통현황과 제조방법에 따른 특성 분석

이보현*, 이영주

서울주얼리지원센터(SJC) 감정연구소

*Corresponding author: bohyunlee@hanmail.net

1990년대 초반부터 다양한 제조사들(Chatham, Gemesis, Apollo 등)이 독자적인 기술로 무색에 가까운 보석용 품질의 다이아몬드를 발표·생산하기 시작하였고, 다양한 제조방식을 통한 고속성장 및 고품질화를 통해 보석용 합성다이아몬드가 주얼리시장에 등장하게 되었다. 1990년대부터 2000년대 초에는 고속성장을 통한 고품질의 무색 다이아몬드들이 크기에 대한 기록 갱신을 통해 주목을 끌었으나, 2010년대에는 고온고압(HPHT) 합성 장비를 활용한 중국에서의 대량 생산 및 제조 급증으로 인해 보석품질의 멜레 크기(직경 1.0~3.0mm) 합성 다이아몬드가 전 세계적으로 큰 이슈가 되었다.

국내에서는 2016년 9월에 서울주얼리지원센터를 통해 합성 멜레 다이아몬드의 첫 유통이 확인되었으며, 확인된 무색의 합성 멜레 다이아몬드는 모두 고온고압(HPHT)법으로 제조된 것들이었다. 고온고압법으로 합성된 무색 다이아몬드의 경우, 다이아몬드 내에 함유된 붕소(B)로 인해 자외선 조사에 강한 인광을 띄므로 그 감별이 상대적으로 용이한 편이다. 반면, 화학기상증착(CVD)법으로 제조된 다이아몬드는 빠르게 확인할 수 있는 고유하고 일관된 감별 특징은 없지만, 지금까지는 주로 큰 크기의 스톤들이 유통되었기 때문에 추가적인 정밀검사를 통해 감별은 가능한 상태였다. 더불어 합성 및 가공(연마) 단가상의 문제로 유통이 많지 않았기에 CVD법으로 제조된 멜레 합성 다이아몬드는 국내 주얼리 업계 내에서 크게 각인되어 있지 않은 상태이다. 그러나 최근 멜레 크기의 CVD합성 다이아몬드가 유통됨이 확인되었다.

본 연구에서는 합성 다이아몬드의 제조방법에 따른 분석방법, 합성 다이아몬드의 크기별 분류에 따른 분석방법 및 제품 형태로 세팅된 경우의 분석방법을 소개하고자 한다. 더불어 CVD합성 다이아몬드의 유통에 대한 국내에서의 공식 보고가 없기에 서울주얼리지원센터(SJC)에 의뢰된 합성 다이아몬드(Colorless, Gray, Violet, Blue color)의 소개 및 분석 결과 보고를 통해 국내 주얼리 시장에 경각심을 일깨우고자 한다.

CVD합성 다이아몬드의 경우, 다양한 형광 및 인광 특성을 가지고 있기 때문에 단순한 루미네스스(Luminescence) 특성만으로 감별하기에는 위험이 따르므로, 내부 구조 확인을 통한 증상성장 이력 관찰과 함께 CVD합성 다이아몬드의 고유한 특징인 [Si-V] 결함(737nm)을 함께 확인하였다.

매 달 1건 꼴로 의뢰되고 있는 CVD합성 다이아몬드의 유통 현황과 감별방법, 분석한계와 문제점에 대해 주얼리 업계에서 지속적인 연구와 보고가 필요한 시점이라 할 수 있겠다.

미세먼지 필터창호의 구조적 화학적 분석

김주영¹, 이준균^{1*}

¹*한국생산기술연구원

*Corresponding author: leejk@kitech.re.kr

미세먼지는 공장단지에서 발생하는 직경 2.5 μm 이하의 미세한 유해물질이며 황산염 및 질산염 등으로 구성되어 공기와 혼합 후 국내로 유입된다. 미세먼지를 흡입 할 경우 각종 호흡기 질환 및 피부 트러블 들로 인해 건강에 악영향을 끼침으로써 뇌졸중이나 치매, 부정맥을 일으키는 원인이 되기도 한다. 미세먼지를 제거하기 위해 P2.5이하 급 미세먼지 필터에 대한 기술개발이 진행되고 있으며, 에어컨 및 공기 청정기 등 필터에 적용되고 있다. 근래 미세먼지 필터가 새로이 창호가 도입됨에 따라, 2.5 μm 이하의 미세먼지 필터의 적정성을 위해 중국산, 네덜란드산, 국산 미세먼지필터창호의 광학 및 전자현미경을 통한 구조적분석과 FT-IR과 DSC를 통해 pore size, 재질과 발수도 분석을 하였다. 화학적 분석 한 결과 3개 샘플 모두 polyester로 이루어져 있는 것으로 판단된다. 중국산 네덜란드산은 멀티필라멘트 구조로 국산은 모노필라멘트 구조로 되어있으며, 중국산과 네덜란드산은 동일하게 1.1 \times 0.2mm로 직조되어 있으며, 국산은 구조로 1 \times 1mm직조 형태의 outer 부분과 0.25 \times 0.25mm 직조 형태의 inter 부분으로 되어 있다. 물에 대한 접촉각은 중국산의 경우 135° 네덜란드산은 124° 국산 outer는 114° inter는 108°로 확인되었다. 필터효율에 따른 pre filter, medium filter, hepa filter 구분을 위해 AFI SFCTION-1,2규격에 의거하여 에어필터 성능 측정할 예정이다.

**Friction resistance-related surface analysis after various riblet patterns
on aluminum foil, plastic, and iron specimens**

이준균

한국생산기술연구원 스마트섬유그룹

Librets are known as the most successful way to reduce friction resistance. The riblet shape was manufactured by transferring to aluminum foil, plastic, and iron specimens. Three-dimensional surface morphology was analyzed by SEM, contact angle, abrasion resistance, etc. were evaluated. The friction coefficient were measured with a steel ball as a counterpart (medium: salt water 1%). Due to this there may be chemical reactions with the steel which may have an influence to the friction. The friction behavior is not in the steady state position after 1 h testing time. The steel based materials and the foil shows similar friction coefficient (~ 0.5). A significant lower friction (~ 0.24) was measured for the plastic board. I would like to examine whether it can be applied to yacht, aircraft, textile in future.

국내 현무암 및 화강암 암석시료의 주성분 및 미량성분 정량분석

Quantitative Analysis of Major and Trace Elements in Korean Basalt and Granite Rock Samples

김건한, 정은숙, 이현아*, 김현구*, 임경미*, 유지혜*, 최병인**, 안상호**

대덕분석기술연구소, *한국세라믹기술원 분석·인증센터

**한국지질자원연구원 기술사업화센터

한반도의 약 30 %를 차지하고 있는 화성암류는 그중 85 % 이상인 화강암류이며 나머지는 현무암류로 이루어져 있으며 우리나라에는 백두산에서 마천령산맥의 대부분과 연천에서 추가령 사이의 저지대, 황해도의 신제, 제주도, 울릉도, 독도, 해금강 등지에 분포되어있다. 화강암의 분포는 한국에는 옥천대·경상분지 및 영남 변성암대에 이와 같은 화강암체가 다수 분포한다. 그리고 현무암은 FeO, MgO 함량이 높으며 화강암은 SiO₂ 함량이 높다. 현무암은 단단하고 열에 강하여 맷돌, 축대, 주춧돌 등에 사용되며, 화강암은 단단하고 열과 화학변화에 강하며 주로 건축용 자재, 축대, 비석, 돌기둥 등에 쓰인다.

이와 같이 다양하게 분포 되어있는 화강암 및 현무암의 주성분 분석 및 미량에 대한 정량분석은 지구 화학적 조사 및 활용에 필요한 자료를 얻기 위해서 필수적이며, 이에 본 연구에서는 한국의 대표적인 현무암과 화강암을 선택하여 주성분 및 미량성분의 함량을 화학분석 및 ICP-AES, ICP/MS, XRF에 의한 정량분석으로 비교분석하였다.

코팅 적층 박막의 표면·계면 특성분석을 위한 SAICAS 시험방법

정재학* 추의성, 조인진

(주)성문시스텍 한국분석과학연구소

*Corresponding author: jh3370@naver.com

글로벌 경쟁력이 요구되는 자동차, 전자, 반도체, 디스플레이, 이차전지, 정밀화학, 조선, 소재부품 등의 산업분야에서 점점 높아지고 있는 소형화 경량화에 의한 박막화, 적층화로 각 박막층 및 계면에 대한 물리적 특성평가(부착력, 경도 등), 화학적 평가(화학/구조 분석 등) 뿐만 아니라 Depth profile 분석(깊이별 결합력, 불균일도 등)에 대한 정성/정량적인 평가 필요성이 높아지고 있으나 코팅 박막에 대한 종합적인 평가는 현실적으로 어려운 상황이다. 이러한 코팅 및 적층기술의 비약적인 발전에 따른 적층 박막에 대한 종합적인 평가기술은 필수로 요구되었으며, 다양한 산업 및 학계의 다양한 요구에 부응하기 위하여 다층박막에 대한 물성측정 및 전처리방법으로 새로운 시험방법인 SAICAS (Surface And Interfacial Characterizing Analysis System) 법이 최근 많이 활용되고 있다.

SAICAS법은 예리한 칼날을 사용하여 시료의 표면으로부터 단층 또는 다층의 계면을 향하여 "경사면 절삭방식"으로 진행됨에 따라 "표면·계면 특성 분석 장치"로 명명되어 사용되고 있다. SAICAS법¹⁾⁻²⁾은 각종 피착체의 경사절삭단계에서 전단항복강도를 측정하고, 계면박리 단계에서는 박리강도를 측정할 수 있으며, 또 경사절삭단계의 경사절삭면을 이용하여 단층막, 다층막의 깊이방향에 따른 재료조성의 분석면의 확대노출 용도로도 사용 가능하다. 측정대상물은 광학필름, 반도체박막, 증착막, 도금막, 금속산화물, 플라스틱, 라미네이트필름, 도장막, 세라믹 등으로, 벌크로는 경사재료와 자외선·전자선·이온빔·방사선 등의 조사재료 또는 열화재료, 성형재료의 표층강도, 스킨·코어층, 웰드강도의 평가 등에도 이용할 수 있다.

즉, SAICAS 시험법은 예리한 다이아몬드 Blade Tip(칼날 폭: 100 μm ~ 4 mm, Rake Angle=-10° ~ +40°, Clearance Angle=10° ~ 20°)을 사용하여 3차원 경사절삭 및 2차원 수평이동을 하면서 측정되는 정밀한 수평힘(Fh), 수직힘(Fv), 변위(Depth)값들의 정량화에 의해 박막 코팅층에 대한 물성 정량분석(박리강도, 전단강도, 깊이별 분석)이 가능할 뿐만 아니라 나노 단위의 정밀한 제어를 통한 극저도 3차원 경사절삭을 통해 단면을 수백배 ~ 수천배 이상 확대가 가능하여 그동안 박막의 단면분석에 적용이 어려웠던 화학적 분석(Micro-FT-IR, Raman, ESCA, TOF-SIMS 등)을 위한 단면확대 전처리 및 Micro Sampling도 가능하여 다층박막의 종합적인 평가를 지원할 수 있다.

본 발표에서는 소형화/경량화/고기능화가 필요한 반도체/디스플레이/이차전지/태양전지/자동차/선박/항공기/스마트 폰/가전제품/전자재료/PCB/MLCC/광학필름 등 다양한 분야 적용되는 다층 코팅막 및 적층 도장막 표면/계면의 종합시험평가방법인 SAICAS법에 대해 소개하고자 한다.

[1] F. Saito, etc Surface & Coating Tech. 205 (2010) 419-422, "An improved method for the measurement of adhesion energy by using a nano-cutting machine"

[2] 변승우, 이용민, 한국전기화학학회 Vol. 21, No. 2 (2018) 28-38 "SAICAS를 이용한 리튬이차전지용 복합전극 결합특성 분석"

Development and characterization of eco-friendly industrial materials using oyster shell

**Kihyun Kim¹, Jihyun Bae¹, Younghee Lee², Dongwon Chang²,
Seongho Lee¹ and Woonjung Kim^{1,*}**

^{1,*}Department of Chemistry, Hannam University, ²OKMTech Co. Ltd

*Corresponding author : wjkim@hnu.kr

Oyster shells produce 280,000 tons of water each year, but their processing limitations have adversely affected the environment, aquaculture and tourism. In addition, substitute materials are needed due to depletion of natural aggregates such as sand, crushed stone, and stone flour, and rising costs, which are necessary for manufacturing various block products for construction and civil engineering. Therefore, by recycling oyster shells, cost reduction and environmental problems can be solved. However, in order to recycle the oyster shell into the block, it is necessary to maintain the physical properties such as compressive strength and absorption ratio stably.

In this study, polymeric hardeners to prepare a block. The size of the oyster shell was divided into three sizes to investigate the effect of size distribution of oyster shell on water uptake and compressive strength. In addition, cement produced 25 % of the oyster shell mass, 10 % of the polymer hardener, 10 % of the cement mass, and 20 % of the water and polymer hardener, based on 100 g of oyster shell. In order to confirm the hazard of oyster shell and cement before the experiment, heavy metals were analyzed by inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS), and 8 heavy metals respectively. Brunauer Emmett Teller (BET) analysis was performed to measure the specific surface area, internal pore size and volume according to the size of oyster shell, and differential scanning calorimetry (DSC) was used to characterize the polymer hardener. Also, pH, density, viscosity, and conductivity were measured to characterize the polymer curing agent. As a result of the BET measurement, the specific surface area was measured to be lower as the size increased, and the correlation was found to be lower as the density increased. However, the block produced by recycling oyster shells has a high water absorption rate due to its porous nature.

The EVA-Acryl-Latex composite polymer curing agent developed in this study confirmed the possibility of securing the water absorption and compressive strength in block production of recycled oyster shells. As a result, the EVA-Acryl-Latex composite polymer developed in this study can maintain the compressive strength and absorption rate, which are the physical characteristics for recycling the oyster shell to the block, so as to increase the recycling rate of oyster shell, and environmental problems.

Characterization of ceria nanoparticles using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF)

Jihyun Bae¹, Byeongjun Kim¹, Se Young Ahn², Seungho Lee¹ and Woonjung Kim^{1,*}

^{1,*}Department of Chemistry, Hannam University, ²MS Materials Co. Ltd.

*Corresponding author: wjkim@hnu.kr

As semiconductors become smaller, high-precision nanoscale polishing is required. Therefore, the quality of the slurry, which is the material used for polishing, determines the quality of the polishing. Slurry production is a complex technology requiring both chemical and mechanical factors. The particle size is controlled through the milling process, which is a slurry production method. In this process, many scratches are generated depending on the particle shape, large particle size, wide size distribution. In addition, the bubbles generated during the milling process affect the dispersion of the ceria, which may cause the size change due to the dispersion failure. Therefore, it is very important to analyze the size of the ceria particles. Commonly used size analysis methods are dynamic light scattering (DLS) and scanning electron microscope (SEM). We compared and analyzed the particle size of the ceria by using asymmetrical flow field-flow fractionation (AF4) based on the separation mechanism.

We synthesized a dispersant and prepared a slurry using the synthesised dispersant. The stability of the slurry was investigated by adding antifoaming agent. The stability test according to antifoaming agent content was evaluated by pH, Conductivity, Viscosity and size analysis at 60 °C for 10 days.

As a result of the study, it was confirmed that coagulation occurred in SMA 2000 and 3000 except for SMA 1000 when the dispersant was added after the addition of antifoaming agent. Therefore, SMA was selected as the most stable dispersant. For the stability study of the dispersant content, 5% was selected as the smallest standard deviation of the size change and the highest conductivity. In the stability evaluation of antifoaming agent, it was confirmed that there was no significant change in pH, conductivity, viscosity and DLS results. However, AF4 analysis showed that the difference in size distribution was observed when base and antifoaming agent-D were used, and large particles were found.

In this study, AF4 based analytical techniques are expected to be very useful in industries where particle size has a great influence on product quality.

Size and Characterization of High Viscosity Carbon Black Dispersion Using asymmetrical flow field-flow fractionation(AF4)

Kisuck Sung¹, Jihyun Bae¹, Minwook Kim¹, Jongjin Jung¹, Seongho Lee²
and Woonjung Kim^{1,*}

¹*Department of Chemistry, Hannam University, ²Chemtree Co. Ltd. Research Center

*Corresponding author: wjkim@hnu.kr

High viscosity carbon black dispersions have been actively developed with various grades of products along with the development of dispersing methods, and thus the market has changed steadily. High viscosity carbon black dispersions are used as important raw materials in tire, rubber, color filter ink, paint, cosmetics and plastics industries. Particularly, it is used as a material added to give rubber reinforcing effect, but carbon black greatly affects the physical properties of the product depending on the size and shape of the particles. Therefore, it is necessary to analyze the exact size and shape. It is very difficult to select the dispersing agent and dispersion time in the organic solvent and aqueous dispersion of the high viscosity carbon black dispersion. The reason for this is that in the dispersion process, the carbon black has a poor thermal stability, so it is important to select the accurate dispersion time when the dispersion is easily aggregated. The purpose of this study is to analyze the dispersion of carbon black by using styrene maleic acid (SMA), which has excellent thermal stability, and to analyze the size change of high viscosity carbon black dispersion by using AF4.

Carbon black : SMA : distilled water was stirred at a ratio of 1 : 15 : 84 for 1 hour. In addition, milling was performed at 1500 rpm using a basket mill, and the physical properties were measured at each time of dispersion, and the stability with time was observed for 11 days at 60°C. pH, conductivity, viscosity, and color meter were measured. Size distribution was measured using DLS and AF4. Also, the shape of the carbon black particles was confirmed by SEM. As a result, the viscosities of the high viscosity carbon black dispersions were in the range of 1,000 ~ 1,600 mPa · s and the size distributions were in the range of 100 ~ 300 nm. The average pH was 8 ~ 9 and the conductivity was 200 ~ 600 (us / cm). As a result of SEM, the particles showed a spherical structure rather than a spherical shape. As a result, DLS and SEM did not provide accurate information on the dispersion mechanism, while the results of the color meter and AF4 were able to provide information on the optimum dispersant and dispersion time of the high viscosity carbon black dispersion. Therefore, the results of this study are expected to be a new analytical method for the research and product development of highly viscous carbon black dispersants with high utility.

Ligand effect of ZAIS[(ZnxAgyInz)S2] synthesis

Yoonhyoung Lee, Hyunjung Seo, Soonhee Sul, Jongjin Jung*

Department of Chemistry, Hannam University

*Corresponding author: jongjin9@hnu.kr

Quantum dots (QDs) have been highlighted in biomedical application due to its narrow emission band, long-term photability, and high brightness. However, there is a limit to the bio application because it is made up of heavy metals such as cadmium and lead which is highly toxic. To compensate the defect, ZAIS[(ZnxAgyInz)S2] Nanoparticles (NCs) synthesis method was developed using the ultrasonic method. ZAIS can control wavelength by changing composition and also have low toxicity since they do not contain heavy metals.

We usually used dodecylamine(C 12, linear) when synthesizing. This time, We selected several primary amine series ligands to find out about the ligand effect. Based on changes in the length of the saturation ligands(C 8, 12, 14, 16, 18) carbon chain in the primary amine series and added oleylamine(C 18, double bond) to compare fluorescent wavelength and intensity that depend on the presence of double bond by UV-vis, PL. Saturation ligand tended to decrease the fluorescent intensity and red shift as the carbon chain grew longer. When comparing the two ligand octadecylamine(linear) and oleylamine(double bond) with C 18, PL intensity was at least 3 times higher. The results of these experiments show that when ZAIS is synthesized, ligand is a factor that affects fluorescence emission wavelength and intensity.

Determination of optimum ratio of Ag, In, Zn components in ZAIS nanocrystal synthesis for its high fluorescence performance at the specific emission wavelength

Heekyoung Jung, Seungeon Yeon, Soonhee Sul, Jongjin Jung*

한남대학교 화학과

*Corresponding author: Jongjin9@hnu.kr

나노미터 크기의 반도체 나노 결정(QD)은 광 안정성과 우수한 광 물리적 특징을 가지고 있지만, 카드뮴, 셀레늄, 그리고 텔루륨과 같은 독성 중금속물질을 포함하고 있어서 생체응용에 심각한 제한을 받고 있다.

따라서 독성중금속이 포함되지 않은 InP, InP/ZnS, CuInS₂, AgInS₂ 및 ZnS-AgInS₂ (ZAIS)와 같은 나노입자 합성이 연구되어 왔고, 이들 무독성 형광나노입자는 QD보다 긴 형광 수명과 높은 밝기를 포함한 우수한 광특성을 가지고 있다.

그 중 Ag, In, Zn 구성 비율에 따라 wavelength 조절이 가능한 ZAIS는 많은 연구가 되어 왔지만, 각 조성의 구성 비율이 fluorescence intensity 에 어떤 영향을 미치는지는 아직까지 정확하게 분석되지 않았다. 이 전 연구에서 보여준 ZAIS 나노입자의 구성비율에 따른 wavelength와 intensity 변화를 보여준 library를 분석해 본 결과 Zn가 30% 이상의 구성 비율을 가지면 quantum yield가 현저히 떨어진다는 사실을 발견했으며 특히나 Zn의 비율이 10% 정도 일 때 가장 높은 형광세기 (fluorescence intensity)를 보임을 관찰할 수 있었다.

따라서 본 연구에서는 Ag, In, Zn의 구성비율에 전부 변화를 주거나 특정 두 요소를 고정시킨 후 Zn의 구성비율에 변화를 가한 기존 연구와는 달리, Zn를 0.1비율에 고정시키고 In, Ag 비율을 변화시켜 quantum intensity 와 emission wavelength가 어떠한 영향을 받는지 분석하였다.

이와 같이, 유효 구성비율에 제한을 둔 새로운 ZAIS 나노입자 library를 구축한 결과, 특정 emission wavelength 별로 최고의 형광세기, 양자효율, FWHM을 가진 최적의 구성비율이 존재함을 알게 되었다.

결론적으로 본 연구에서는 형광을 띠게 하는 유효구성 성분비로 제한한 새로운 유효 ZAIS 나노입자 library를 구축하여 나노입자의 형광특성을 비교 분석하였으며, 특정 방출파장에 있어서 최고의 형광특성을 위한 최적 Ag, In, Zn의 구성비율 지정할 수 있음을 보여주었다.

**Analysis of sonochemical parameters(power and concentration)
effects on $(\text{Zn}_x\text{Ag}_y\text{In}_z)\text{S}_2$ synthetic mechanism**

Jinee Choi, Seungeon Yeon, Soonhee Sul, Jongjin Jung*

한남대학교 화학과

*Corresponding author: jongjin9@hnu.kr

Quantum Dot (QD) is a semiconductor crystal with nanometer scale that produces its own light. Fact that characteristics of emission wavelengths that are determined by brightness, stability, and size of QD are applied to bio imaging technologies has received much attention. To address this problem, among low-toxic nano crystal without including a specific heavy metal, we have a fast $(\text{Zn}_x\text{Ag}_y\text{In}_z)\text{S}_2$ (ZIAS) method with higher-performance mineral properties and lower toxicity rates. In addition, the experiment was conducted in order to find the optimal composite conditions by adding the combination power of the sonicator and the precursor concentration, unlike the reference literature. As a result, ZIAS, with the highest intensity in the red, yellow and green areas, had the highest intensity at 30% and 40% power. We also found that unlike the existing Reference Waves, we could have high intensity at different wavelengths. Therefore, our research shows that highest fluorescence and QD yield in other ZIASs require optimal composite conditions.

Study on elution behavior of non-spherical gold nanoparticles in asymmetrical flow field-flow fractionation(AsFIFFF)

Jangjae Lee¹, Jaeyeong Choi³, Joontaek Park², Emad S. Goda¹ and Seongho Lee^{1,*}

¹Department of Chemistry, Hannam University, Deajeon, 305-811, Korea republic

²Dept. Of Chem. &Biochem. Engineering, Missouri University of Sci. & Technol. USA

³Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Lund, Sweden

*Corresponding author: slee@hnu.kr

The necessity of shape-based particle separation techniques has recently increased in nanotechnology and biomedical applications, such as the preparation of nanoparticles with shape-specific physico-chemical properties^[1] and the sorting of cells according to their status^[2].

Asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF or AF4) is a diffusion-based separation technique that has been used widely for characterization of various types of colloidal particles and macromolecules. In AF4, the particles (or molecules) of different sizes migrate down the channel at different velocities due to the difference in their diffusion coefficients, yielding a size-based separation. The size is calculated on the assumption that the components are spherical.

It is expected that non-spherical particles may show different elution behaviors from those of spherical particles. Non-spherical particles have the aspect ratios that are not equal to 1, and would make different diffusional motion along the direction of both their major and minor axis, while spherical particles have a uniform diffusional motion in all directions.

In this study, three type of gold nanoparticles of different shapes (sphere^[3], rod^[4], bipyramid^[5]) were synthesized. Then the size and shape of them were analyzed by dynamic light scattering (DLS) and field emission scanning electron microscope (FE-SEM). Then the sizes determined by DLS were compared with those obtained by FFF.

[1] V. Sharma, K. Park and M. Srinivasarao, *Materials Science and Engineering: R: Reports* **2009**, 65, 1-38.

[2] S. Mitragotri and J. Lahann, *Nat Mater* **2009**, 8, 15-23.

[3] N. N. Long, L. V. Vu, C. D. Kiem, S. C. Doanh, C. T. Nguyet, P. T. Hang, N. D. Thien and L. M. Quynh, *Journal of Physics: Conference Series* **2009**, 187, 012026.

[4] O. T. T. Nguyen, C. H. Le, L. D. Pham, H. S. Nguyen and C. V. Hoang, *Communications in Physics* **2017**, 27, 131.

[5] J. Li, C. Kan, Y. Liu, J. Xu, C. Wang, Y. Ni and S. Ke, *Journal of Advances in Nanomaterials* **2017**, 2, 219-227.

Synthesis of ZAIS(ZnS-AgInS₂) nanocrystal and characterization using thermal field-flow fractionation (ThFFF) and Dynamic light scattering (DLS)

Eunhee Jeon¹, Dongsup Song¹, Hyunjung Seo¹, Jongjin Jung^{1,★} and Seungho Lee^{1,★}

¹Department of chemistry, Hannam University

★Corresponding authors: jongjin9@hnu.kr, slee@hnu.kr

Quantum dots (QD) are metal-containing nanoparticles generally in spherical shape. Their sizes are usually tunable, and they have unique photochemical properties with intense fluorescence at visible wavelengths (490–680 nm). This unique optical property results from quantum confinement effects within the extremely small metalloid core (generally 2–7 nm in diameter).^[1]

Most luminescent nanoparticles contain highly toxic elements, such as Cd, Se, Pb and Te, limiting the range of their applications.^[2]

The ZAIS (ZnS-AgInS₂) nanocrystals, one of QDs, is known to be less toxic than other QDs, and also has unique optical character that can be effectively utilized for display and biomedical applications.^[3]

Field-flow fractionation (FFF) is unique to other separation techniques in that it can separate materials over a wide colloidal size range while maintaining high resolution. In this study, ZAIS nanocrystals were synthesized at various conditions. Then thermal field-flow fractionation (ThFFF) was employed for size characterization of the ZAIS nanocrystals. The dynamic light scattering (DLS) was also employed for stability test as well as the size characterization of the ZAIS nanocrystals. Results from ThFFF were compared to those from DLS.

It was found that ThFFF is a good (if not better) alternative to DLS for determination of the particle size distribution (PSD) of the ZAIS nanocrystals. Its application may be easily extended for size-analysis of various types of QDs.

[1] H. E. Pace, E. K. Leshner and J. F. Ranville, *Environmental Toxicology and Chemistry* **2010**, 29, 1338-1344.

[2] T. Torimoto, T. Adachi, K. I. Okazaki, M. Sakuraoka, T. Shibayama, B. Ohtani, A. Kudo and S. Kuwabata, *Journal of the American Chemical Society* **2007**, 129, 12388-12389.

[3] S. J. Lee, Y. Kim, J. Jung, M. A. Kim, N. Kim, S. J. Lee, S. K. Kim, Y.-R. Kim and J. K. Park, *Journal of Materials Chemistry* **2012**, 22, 11957.

연속주조법으로 제조한 구리합금의 미세조직 특성

Microstructure Characteristics of Copper Alloys Prepared
by Continuous Casting Method

오석진^{1*}, 오종명, 정경채, 국승우, 김기호, 김기환, 박정용

¹한국원자력연구원,

*sjoh@kaeri.re.kr

방사성 금속 및 합금을 봉(Rod), 판형(Plate), 원통형(Tube)등 다양한 형상으로 제조하기 위한 선행 연구단계로 연속주조를 이용한 방법을 적용하여 비교적 용해 및 주조가 용이한 구리합금으로 대체하여 연속주조 기술 축적과 조건을 모사하고자 하였다. 연속주조는 특히 고방사선량과 장수명 원소 및 고용한도를 초과하는 원소들의 처리가 보다 용이하며 합금 조성은 화학양론적으로 비교적 쉽게 제어할 수 있으며 용해 잔탕이 남지 않는 장점으로 제조공정도 다른 공정과 비교하여 단순하며 원격제어가 가능할 것으로 판단된다. 산화하기 쉬운 우라늄 및 합금들은 초기 진공을 실시하여 가열 시에는 불활성 분위기에서 가압으로 휘발원소 및 산화를 제어하여 용해주조를 실시한다. 이러한 용해방법을 적용할 경우 적절한 방법이 연속주조라고 판단하며 용해주조 시 실험 변수를 뚜렷이 구분할 수 있는 실험 조건을 적용하고자 우라늄과 용융점이 커다란 차이가 나지 않는 모의 연료심 성분은 구리합금을 선정하였다. 초기 연속주조 형태는 구리봉 합금을 제조하였으며 새로운 연속주조 냉각 및 인출 조건을 선정하여 인출속도에 따른 미세조직의 특성과 제조 공정조건을 확보하였다, 연속주조 장치의 몰드는 냉각수를 공급하여 냉각금형 자켓의 적정 온도 구배를 선정하여 고액계면이 형성되도록 하고 인출하는 시스템으로 구성되어 있기에 냉각이 비교적 빠르게 형성되면 인출 시 파단이 쉽게 일어나고, 온도 구배가 고온에서 형성되면 출탕이 누설되어 봉 제조가 이루어 지지 않은 것은 잘 알려져 있다.

**유해대기오염물질(HAPs) 중 휘발성유기화합물(14종)
100 nmol/mol 컬럼에 따른 분석영향평가**

전신배^{1,2}, 김용두¹, 강지환¹, 이상일^{1,2,*}

¹한국표준과학연구원 가스분석표준센터, ²과학기술연합대학원대학교(UST) 측정과학과

*Corresponding author: slee@kriss.re.kr

유해대기오염물질(HAPs, Hazardous Air Pollutants)은 사람의 건강과 동식물의 생육에 직간접적인 유해를 끼친다. 특히 호흡기를 통하여 인체에 흡수되는 유입과정으로 인하여 사람에게 매우 치명적이고 직접적인 영향을 미친다. 우리나라 환경부에서는 대기오염물질을 관리하기 위해 대기환경보전법 규정에 따라 총 11개 종류의 측정망을 운영하고 있고 총 188종의 HAPs 중 대기 농도수준, 독성 및 발암성 등의 인체 유해도, 측정 용이성 등을 검토하여 VOCs(Volatile Organic Compounds) 물질 중 14종과 PAHs(Polycyclic Aromatic Hydrocarbon) 중 7종을 측정대상물질로 선정하였다. 2018년부터는 기존 14종의 VOCs의 오염물질에 Vinyl chloride, 1,2-Dichloroethane, Acrylonitrile 이 추가되어 총 17종의 유해대기오염물질을 측정하고 있다. 측정된 유해대기오염물질을 정확하게 분석을 하려면 인증표준물질의 개발이 필수적이다. 이러한 표준물질의 인증을 위한 분석법을 확립하여야한다. 따라서 본 연구에서는 대기 중에 유해대기오염물질인 VOCs 14종을 GC/FID를 이용하여 3가지(DB-1, DB-WAX, VOCOL) 서로 다른 컬럼의 크로마토그램을 비교하여 14종의 성분이 분리가 되고 정성적인 평가를 할 수 있는 객관적인 근거자료를 이용하여 분석법을 확립하고 추후 추가되는 3종의 물질을 포함한 HAPs 17종에 대한 대기수준(5 nmol/mol수준)의 인증표준물질을 개발하는데 필요한 순도분석, 제조일치성, 안정도 평가에 대한 올바른 방법을 제시하려고 한다.

표준가스 제조 시 액체시료 주입장치에 따른 분석 영향 평가

강지환¹, 김용두¹, 이상일^{1,2,*}

¹한국표준과학연구원 가스분석표준센터, ²과학기술연합대학원대학교(UST) 측정과학과

*Corresponding author : slee@kriss.re.kr

표준가스 제조에는 국제표준화기구(ISO, International Organization for Standardization)의 ISO 6142-1(가스분석-검정가스 혼합물의 제조(중량법)) 절차에 따라 제조가 이루어진다. 이 가이드는 국제규정에 따라 중량법을 이용한 표준가스 제조 절차가 기술되어 있다. 액체시료를 이용한 표준가스 제조 시에도 중량법을 활용하여 제조 한다. 이 방법은 액체시료를 채취한 실린지의 질량을 측정하고 실린더에 주입 후 빈 실린지의 질량을 측정하여 주입 전후의 질량 차이로 액체 시료의 주입량을 계산할 수 있다. 실린지에 채취된 액체시료를 실린더에 주입하기 위해서는 별도의 주입장치가 필요하다. 기존 주입장치와 제조 방법은 주입장치(특히 1006564150000 표준가스 제조용 액체 주입장치)에서 설명되어 있다. 하지만 기존 방법의 경우 주입장치 외벽을 가열하며, 시료가 수평으로 주입됨에 따라 장치 내벽에 남아 있을지 모르는 미량의 시료는 알 수 없다는 단점이 있다. 이러한 단점은 중량법 측정에 있어서 정확한 질량 측정을 할 수 없으며, 제조 재현성 불확도를 증가시키는 문제를 야기 시킬 수 있다.

본 연구에서는 이러한 문제점을 개선하기 위하여 제조 장치 표면에 액체시료가 닿지 않고 실린더 내부로 주입되도록 신규 주입장치를 개발하였다. n-Hexane 시약으로 기존 주입장치와 신규 주입장치를 각각 10 $\mu\text{mol/mol}$ 수준으로 제조하여 비교 분석하였으며, 분석 결과 신규 주입 장치가 기존 주입장치 보다 1 % 높은 결과를 보였다. 이러한 분석 결과는 액체 시료 주입 시 기존 주입장치 내부 표면에 실린더로 주입되지 않은 미량 시료가 영향을 미친 것으로 보인다. 향후 분석 결과를 바탕으로 다른 액체 시료들을 이용하여 주입장치에 따른 분석 영향을 평가하여 신규 주입장치를 활용할 예정이다.

Quantification of cholesterol in beef and tuna powder by isotope dilution liquid chromatography-tandem mass spectrometry

Hwashim Lee^{1,*}, Sanga Lee², Seulgi Lee²

¹Division of Chemical and Medical Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science,

²Hanbat National University, Department of Chemistry

*Corresponding author: eclhs@kriss.re.kr

An isotope dilution liquid chromatography tandem mass spectrometry (ID-LC/MS/MS) was developed as a primary method for the quantitative analysis of cholesterol in beef powder. As internal standard, cholesterol-d₄ was spiked in beef and tuna powder. In order to release cholesterol out of cholesteryl ester in beef and tuna powder, saponification was carried out. Saponification conditions were optimized with heating temperature, reaction time and the concentration of KOH. The optimum conditions were as follows; heating temperature was 70°C, reaction time was 180 min and the concentration of KOH was 1 mL of 8 M KOH for about 0.1 g beef powder sample. Extraction of cholesterol out of sample solution was carried out with hexane using liquid-liquid extraction. Chromatographic analysis was carried out by Thermo C₁₈ column. Mobile phase was 0.1 % acetic acid in Methanol/Water (v/v, 99/1) and flow rate was 0.3 mL/min. Cholesterol and cholesterol-d₄ were monitored at mass transfer m/z 369 → 259 and 373 → 263 respectively. Expanded uncertainty of the measurement result of cholesterol in beef powder was approximately 2.5 % within a 95 % confidence level.

Method validation for the purity assignment of L-phenylalanine by mass balance method

Hwashim Lee^{*}, Sujin Park

Division of Chemical and Medical Metrology, Korea Research Institute of Standards and Science

^{*}Corresponding author: eclhs@kriss.re.kr

In general, purity analysis is the first process for the establishment of traceability to SI unit in chemical measurement. The mass balance method is a major method for the purity assignment to pure chemical materials. The aims of this work are to develop and validate a method for the purity assignment of L-phenylalanine by the mass balance method and to develop a certified reference material for the establishment of traceability to SI unit in the quantification of amino acids. In the mass balance method, impurities are categorized into four classes as follows: total related structure impurities, water, residual organic solvents, and nonvolatiles/inorganics. In this study, total related structure impurities were characterized by HPLC-UV, water was determined by a Karl-Fisher coulometer, total residual solvents were measured by GC-FID, and nonvolatiles/inorganics were checked by TGA. Purity assignment of pure commercial materials for the development of a certified reference material was also performed according to this method. L-phenylalanine with the assigned value and the uncertainty determined in this way can be used as a primary calibrator of reference measurement systems in order to establish the metrological traceability of routine measurements such as in-vitro diagnostic, food, and drug analyses

**저농도 (10 $\mu\text{mol/mol}$) 산소 질소 인증표준물질 개발
: GC-TCD를 이용한 미량 가스 분석 방법**

Developing low concentration of oxygen and nitrogen (10 $\mu\text{mol/mol}$) certified reference material
: Low concentration gas analysis using GC-TCD

안병수^{1,2}, 이진홍², 이진복¹, 문동민¹, 김진석¹, 홍기룡^{1,*}

¹한국표준과학연구원 가스분석표준센터, ²충남대학교 환경공학과

*Corresponding author: khong@kriss.re.kr

산업이 고도화됨에 따라 공정들은 정밀해지고, 높은 순도의 고압가스가 요구된다. 고순도 원료가스 생산자는 불순물 총량이 1 $\mu\text{mol/mol}$ 이하인 99.9999 % (6N) 의 초고순도를 넘어서, 99.99999 % (7N) 수준의 가스 순도를 제공하고 있다. 가스의 순도분석은 불순물을 정량한 후 합산하는 방식으로 이루어 지는데, 이 때 불순물 정량에는 극저농도의 인증표준물질이 필요하다. 저농도 인증표준물질은 주로 헬륨 바탕가스로 개발되고 있으며, 분석대상 가스종은 H_2 , O_2 , N_2 , CH_4 , CO , CO_2 등이다. 이 중 산소, 질소는 대기의 주성분을 이루고 있기 때문에 제조 시 주의하지 않으면 불순물 혼입이 일어날 수 있는 대표적인 가스종이다.

이 연구의 목적은 불순물 분석을 위한 저농도 산소 질소 인증표준물질을 개발하는 것이다. 인증표준 물질을 개발하기 위한 첫 번째 단계로 원료가스인 산소와 질소 및 헬륨의 순도분석을 진행하였다. 제조된 혼합가스의 상호비교를 위한 분석에는 열전도도 검출기가 장착된 기체크로마토그래피를 사용하였고, 운반 가스는 고순도 헬륨을 사용했다. 분리검출을 위한 컬럼은 Molesieve 5A가 사용되었다. 무기 가스의 순도분석은 보통 감도가 좋은 GC-PDD를 이용하는데, 직선성이 떨어지는 문제가 있다. 이에 본 연구에서는 직선성이 우수한 GC-TCD를 이용하였으며 Vent Line에 Restrictor를 설치하고 Loop Size를 키워 감도를 개선하여 1 $\mu\text{mol/mol}$ 수준까지 정량이 가능하였다.

본 연구에서는 10 $\mu\text{mol/mol}$ 수준의 산소 질소 인증표준물질의 중량법 제조불확도와 비교분석 불확도 및 개발 도중 부적격 처리된 실린더들의 불순물 특성 등을 보고하고자 한다.

GC-TCD를 이용한 네온 분자량 측정

Absolute Neon Molecular Weight Measurement using GC-TCD

김정은^{1,2}, 양인석², 김진석³, 문동민³, 홍기룡^{3,*}

¹과학기술연합대학원대학교 측정과학과, ²한국표준과학연구원 열유체표준센터,

³한국표준과학연구원 가스분석표준센터

분자량은 분자를 구성하고 있는 원소들의 동위원소 비율에 의존한다. 일반적으로 동위원소 측정에는 질량분석기 (Mass Spectrometer)를 사용하지만, 본 연구에서는 가스 분석 분야에서 일반적으로 가장 많이 사용되는 GC-TCD (Gas Chromatography-Thermal Conductivity Detector)를 활용하여 네온의 분자량을 측정하고자 한다. 열전도도 (Thermal Conductivity)는 열전도를 나타내는 물질의 고유한 성질이며, 기체 분자량과 분자 구조에 따라 열전도도가 다르다. 따라서 운반기체와 시료가 같은 종류의 기체라고 하더라도 분자량에 차이가 생기면 열전도도에 차이가 생긴다.

일반적인 GC-TCD의 운반기체는 헬륨이나 질소를 주로 사용하지만, 본 연구에서는 불순물이 가장 적은 고순도 네온 가스를 사용하였다. 시료로는 원산지가 다른 고순도 네온 가스를 사용하였다. 측정 대상 시료는 분자량을 모르는 고순도 네온 가스 3병과 이전에 정확한 동위원소 비율과 절대 분자량(Absolute Isotope Ratio)이 보고된 3병의 네온 가스이다. 이것들을 기준 표준물질로 사용하였다.

네온 기준물질의 분석 결과, 분자량에 따른 직선성이 확인되었다. 시료로 사용된 3종의 네온 시료의 분자량은 네온 기준물질의 직선성에 대입하여 확인하였다. 계산된 각 시료들의 분자량은 각각 20.18311(2), 20.18025(2) 그리고 20.17935(2) $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ 이었다. GC-TCD를 보유한 연구실에서 이 방법으로 정확한 분자량을 알고 있는 두 개의 네온 동위원소 표준 시료만 있다면 네온 가스의 분자량을 확인할 수 있다. 한국표준과학연구원은 분자량을 측정하고자 하는 실험실에 언제든지 고순도 네온 표준물질을 제공할 예정이다.

TD-GC/MS를 이용한 건강한 한국인의 호흡 가스 분석

김다은^{1,2}, 이성광¹, 김달호^{2,*}

¹한남대학교 화학과, ^{2,*}한국표준과학연구원 가스분석표준센터

우리가 숨 쉴 때 내뿜는 호기 호흡 가스에 미량으로 포함되어 있는 휘발성 유기 화합물(Volatile organic compounds, VOCs)은 체내 대사과정의 산물이다. 따라서 우리 몸의 건강 상태를 대변할 수 있기 때문에 건강 상태를 판단하는 생체표지자(Biomarker)로써 활용 될 수 있다. 호흡 가스의 VOCs를 통한 질병 진단은 검진자의 고통을 줄이고 검진 시간과 비용 면에서 장점을 가진다. 하지만 호흡 가스의 성분들이 질병과 명확한 관련이 있는지 확인하기 위해서는 호흡 가스 성분 측정의 정확성과 재현성을 뒷받침 할 수 있는 분석방법의 확립이 필요하다. 또한 현재까지 한국인의 호흡 가스를 대상으로 한 연구는 미미하기 때문에 본 연구에서는 이런 점에 착안하여 한국인을 대상으로, 정확하고 재현성 있는 분석법을 확립하기 위한 연구를 진행하였다.

본 연구에서는 호흡 가스의 채취와 분석 방법을 최적화하였다. 호흡 가스를 채취할 때 비강과 구강을 통해 채취하는 방법을 비교하고, 호흡 가스에 포함된 수분을 제거하며 채취하는 방법과 그렇지 않았을 때의 차이를 비교하여 어떤 방법이 호기 호흡을 채취하는데 가장 적절한지 알아보았다. 또한 테들러 백 등 호흡 가스 채취에 사용하는 다양한 용기들의 영향을 평가 하였다. 분석을 위해 TD-GC/MS (Thermal desorption-GC/MS)와 TD-GC/FID를 비교하였으며 분석 조건을 최적화하였다. 최적화 된 방법을 바탕으로 하여 건강한 한국인의 호기 호흡에 포함된 VOCs의 종류를 확인하였다. 또한 한국 표준과학연구원에서 제조된 표준 가스를 사용하여 호기 호흡에 포함된 VOCs를 정량하였다.

Halogen 규격(IEC 62321-3-2) 개정을 위한 분석법 개발

이우람¹, 류건영¹, 정재학^{2,*}

¹KOTIT시험연구원, ²*성문시스텍

*Corresponding author: jh3370@naver.com

전기전자제품 관련 산업분야에 대한 유해물질규제는 점점 강화되고 있으며, 그에 따른 전기전자 및 소비자제품에 대한 유해물질 시험분석방법의 개발이 지속적으로 진행되고 있다. 전기전자 제품에 대한 국제표준화는 현재 IEC TC 111 WG3에서 주도적으로 진행되고 있으며 전기전자 제품 내 Halogen 물질에 대한 시험분석은 IEC 62321-3-2(Determination of certain substances in electrotechnical products - Part 3-2: Screening - Total bromine in polymers and electronics by combustion - Ion Chromatography)로 진행 하고 있으며, Halogen 물질 중 Bromine만 시험법에 기술되어 있다. 관련 규격에 대한 물질을 추가하고자 2015년부터 표준에 대한 개정이 진행 중에 있다.

본 연구에서 기존 Halogen 물질에 대한 시험방법 소개와 국제표준화 진행 현황에 대해 간략히 소개하고자 하며 개정 전 IEC 62321-3-2 시험법을 적용하여 추가물질인 Chlorine, Fluorine, Iodine 물질에 대한 시험분석 결과에 대해 기술하였다. 특히 Iodine의 경우 회수율을 높이기 위해 기존 분석방법에서 흡수용액의 조건을 변경하여 분석을 진행하였다. 변경된 조건 및 시험분석 데이터에 대한 내용을 기술하였으며 그 결과를 바탕으로 IEC 62321-3-2 표준 개정에 적용하고자 한다.

저농도 HF 표준가스의 안정성 향상

이선영, 나예슬, 이상호*

주식회사 리가스

*Corresponding author: shlee@rigas.co.kr

HF 성분의 경우 환경적으로 매우 중요시되는 성분이며 소량 누출 시에도 인체에 치명적인 영향을 미치므로 정확한 측정을 하기 위한 표준가스 개발이 요구되고 있는 실정이다. 그러나 HF는 강한 흡착성 및 반응성을 가진 성분으로 저농도 고압가스상으로 제조하였을 때 실린더 내면과의 반응 등의 이유로 농도 안정성이 유지되기가 매우 어려운 성분이며, 농도가 낮을수록 농도감소 현상이 더 크게 나타나므로 신뢰성 있는 저농도의 표준가스 제공이 어려웠다. 이러한 문제점을 해결하기 위해 자체적으로 개발한 실린더 내면 처리 방법을 도입하여 HF 표준가스에 대한 안정성을 확보하고자 하였다.

특수 처리된 실린더에 ISO 6142에 의거하여 절대측정방법인 Gravimetric Method로 5 $\mu\text{mol/mol}$ ~25 $\mu\text{mol/mol}$ 수준의 HF 표준가스를 제조하였으며 FT-IR 분석장비를 이용하여 분석을 진행하였다. 장기 안정성 평가를 위해 시간의 추이에 따른 표준가스의 농도변화 여부를 확인하였다. 또한 소급성 확립을 위해 자사에서 개발한 반응성 기체 흡수 시스템(특허번호 제 10-2016-0006491호)을 이용하여 KRISS CRM Fluoride ion (CRM No. 105-01-001), 과 비교 분석을 진행하였다. 분석 결과 시간의 추이에 따른 HF 표준가스의 농도는 불확도 내에서 일치하여 안정성이 확립되었다고 평가되며, 이를 통해 1년 이상의 유효기간을 제공하는 것이 가능해졌다.

본 연구를 통해 국제 표준과의 소급성이 확보되고 안정성이 향상된 표준가스를 공급할 수 있게 되었다.

자연동위원소분석 및 응용연구

Natural Radionuclide Analysis Method and its Application Study

윤윤열

한국지질자원연구원, 지질환경연구본부, 지하수연구센터

자연계에서는 우주선에 의해 여러종류의 동위원소들이 생성이 된다. 이러한 환경방사성 동위원소들은 일반적으로 알파분광법(α -spectrometry), 액체섬광 계수법(liquid scintillation counting) 및 감마분광법(γ -spectrometry)를 사용하는데 그 중 알파분광법은 동위원소 분석에 가장 용이한 방법으로 사용되고 있다. 그러나 시료 전처리 과정이 복잡하고 시간이 오래 걸리는 단점이 있다. 액체섬광계수법은 간편하게 동위원소를 측정하는 분석법이나 분해능이 안좋은 단점이 있으며, 감마분광법의 경우 높은 분해능과 시료 전처리과정이 거의 필요 없어 많이 활용되는 분석법이다.

본 연구에서는 우주방사선에 의해 생성되는 H-3, C-14, Be-7, S-35 의 분석법과 지하수 연대 측정에 사용되는 응용방법에 대하여 연구하였다.

The effect of increasing wet bulb temperature on HANARO

Sung-Woo Lee[★], Won-Ho In, Ho-Young Choi

Korea Atomic Energy Research Institute

[★]swlee2881@kaeri.re.kr

The HANARO is a multi-purpose research reactor and has been operated since 1995. The secondary cooling system of the HANARO consists of three pumps, cooling tower, basket strainer, valve, piping and so on. The heat generated by the nuclear fuel is lastly cooled by the cooling tower. If the wet bulb temperature exceeds 28°C, the temperature of the secondary cooling water at the cooling tower can be reached to 33°C. In that case, the power of HANARO is automatically decreased by the Reactor Regulating System. Thus, the wet bulb temperature must lower than 28°C for normal operation. But, due to global warming, wet bulb temperature has risen. This problem decreases operability of HANARO. Therefore, we analyzed increasing wet bulb temperature and this effect on HANARO.

EPMA를 이용한 U-Zr 핵연료의 반정량 분석

정양홍¹, 백승제, 안상복

한국원자력연구원

*Corresponding author: nyhjung@kaeri.re.kr

전자탐침미세분석기(EPMA)를 이용하여 조사 또는 미조사 핵연료를 분석할 경우 극히 미세한 크기의 물질조성을 분석하기는 쉽지 않다. 대개의 경우 이차전자상이나 BSE 사진으로 물질의 크기 정도나 또는 특정원소에 대한 전반적인 분포도를 확인하는 작업인 Image Mapping 기능을 사용하여 대략적인 분포 정도의 확인으로 대체된다. 그러나 특정 원소에 대한 분포를 도표로 나타낸 이미지를 이용하여 극히 미세한 크기의 물질 분포 및 대략적인 조성을 분석할 수 있다. 이는 미세한 크기의 특정 물질에 대한 조성을 분석할 수 있는 기법으로 반정량 분석법이라 부른다. 물론 정량분석법으로 측정할 수도 있겠지만, 이차 전자상으로도 분별하기 힘든 크기의 물질의 분포와 그 크기에서 위치를 맞추고 일정시간동안 전자빔을 인가할 경우 위치의 변화 등으로 발생할 수 있는 어려움으로 분석결과에 대한 신뢰성이 저하되지만, 반정량분석법으로 측정할 경우 넓은 영역에 대한 특정 원소의 전체 분포를 한번에 분간할 수 있고, 원하는 위치의 조성을 간단하게 분석할 수 있는 장점이 있다.

U-Zr 핵연료에 미량의 첨가물을 주입한 후 첨가물의 거동을 확인하고 또한 그들의 조성을 분석하기 위한 연구를 수행하였다. 특히 결정립의 크기에 영향을 미치는 Cr, Mn, 등의 첨가제를 주입한 시료에 대한 분석시험을 수행하였다. EPMA의 정량분석은 표준시료를 사용하여 특정원소에 대한 X-ray를 CPS(Count per second)의 비율로 분석하는 분석법이다. 일반적인 분석법은 동일한 인가조건과 기기의 환경에서 표준시료를 이용하여 미지시료에서 측정된 X-ray를 비교하여 조성을 분석한다. 그러나 반정량 방법은 동일한 전압에서 측정된 특정원소에 대한 X-ray를 데이터 저장고에 저장하였다가 X-ray의 세기로 표기되는 Image Mapping자료에 적용하는 기법이다. 이는 충분한 시간동안 획득한 자료를 기 저장되어 있는 X-ray의 세기와 비교하기 위해 선행되는 여러 가지 조건들을 적절히 조절한다면 이해될 수 있는 분석결과를 얻을 수 있다.

열이온화질량분석기에 의한 조사핵연료 시료 중의 세륨 동위원소 비 측정

박양순*, 김정석, 하영경

한국원자력연구원 원자력화학연구부

*Corresponding author: nyspark@kaeri.re.kr

사용후핵연료의 연소도 측정에 세륨을 활용하기 위하여 세륨 동위원소 비 분석을 검토하였다. 세륨 동위원소 비 분석에 사용된 열이온화질량분석기(TIMMS)는 Thermo Fisher Scientific 사의 TRITON 모델로 8개의 파라데이 컵이 장착되어 있어 세륨의 모든 동위원소를 동시에 측정 할 수 있었다. 시료 중의 세륨 양이온을 만드는데 사용한 필라멘트는 한 쌍의 레늄 필라멘트로 각각 기화필라멘트와 이온화필라멘트로 활용되었다. 조사핵연료 시료는 이산화우라늄 펠렛으로서 핫셀에서 용해한 후 세륨만 분리하여 준비하였다. 시료의 동위원소 측정 결과, 세륨과 함께 네오디뮴 불순물에 의한 Nd-144 동위원소가 함께 검출되었다. 그러나 기화필라멘트의 온도를 올림에 따라 세륨이 먼저 기화되기 시작하고 네오디뮴이 뒤를 이어 기화되는 특성을 나타냈다. 그러므로 네오디뮴의 영향이 없는 부분의 값을 취함으로써 세륨 동위원소 비를 분석 할 수 있었다. 이렇게 얻은 Ce-144 값은 감마계측 값과 비교하였을 때 일치하였다. 즉, 불순물로 존재하는 네오디뮴 동위원소의 간섭 없이 조사핵연료 시료 중의 세륨 동위원소 비 측정이 가능함을 확인하였다.

열이온화질량분석에 사용되는 레늄 필라멘트의 불순물(Ce, Nd, Sm) 분석

박양순*, 김종윤

한국원자력연구원 원자력화학연구부

*Corresponding author: nyspark@kaeri.re.kr

사용후핵연료의 연소도를 측정하기 위하여 시료를 용해하고 네오디뮴을 분리하여 동위원소비를 분석한다. 네오디뮴 동위원소 분석 시, 세륨과 사마륨에 의한 동중원소가 오차를 발생시키므로 주의해야한다. 세륨과 사마륨은 사용후핵연료에 포함되어 있어 이들의 완벽한 분리가 필요하며, 시료를 로딩하는 필라멘트와 산용액에도 불순물로 포함되지 않도록 해야 한다. 본 연구에서는 레늄 필라멘트에 네오디뮴과 세륨, 사마륨이 불순물로 얼마나 존재하는지와 가열에 의해 쉽게 제거 가능한지를 확인해 보고자 하였다. 분석에 사용된 열이온화질량분석기(TIMs)는 Thermo Fisher Scientific 사의 TRITON 모델이었고, 장착되어 있는 1개의 이차전자증배관(SEM) 검출기를 사용하여 질량을 변경하면서 측정하였다. 레늄 필라멘트의 네오디뮴과 세륨, 사마륨에 대해 질량 분석한 결과, 극미량의 사마륨과 그보다 10배 많은 네오디뮴과 100배 많은 세륨이 검출되었다. 측정을 완료한 필라멘트에 대해 두 번째 측정을 했을 때 첫 번째 측정한 값의 1/1,000 - 1/100 로 감소하였다. 세 번째 측정 시에는 더 이상 감소하지 않았다. 즉, 레늄 필라멘트를 사전에 5,000 mA까지 올렸다가 내리는 것만으로도 필라멘트에 포함되어있는 불순물(Ce, Nd, Sm)을 현저하게 제거 할 수 있었다. 이후에 제거되지 않고 남아있는 불순물은 본 실험에 사용되는 시료 양과 비교하여 분석결과에 거의 영향을 미치지 않을 것으로 판단되었다.

Identification and structural elucidation of a new synthetic cannabinoid in powder product found in an airmail package: DMBA-CHMINACA

Ji Hyun Lee¹, Aeran Jung¹, Han Na Park¹, Changhee Lee¹, Suresh Mandava², Sung-jun Lim³, Byoung-bok Lim³, Sung-Kwan Park¹, Jongkook Lee^{2,★}, Hoil Kang^{1,★}

¹Advanced Analysis Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation,
Ministry of Food and Drug Safety

²College of Pharmacy, Kangwon National University

³Laboratory and Scientific Service, Incheon Airport Customs, Korea Customs Service

★ Corresponding author: jkl@kangwon.ac.kr (J. Lee)

kanghi79@gmail.com (H. Kang)

The recent rise in the abuse of new synthetic cannabinoids has become a worldwide issue. Although synthetic cannabinoids are being used for medical purpose, they have been adulterated in herbal products and dietary supplements which are available for purchase via the Internet and through international postal services. In spite of great efforts and the cooperation of authorities in most countries to protect public health from the toxic effects of synthetic cannabinoid, new synthetic cannabinoids have recently emerged, for example, MDMB(N)-Bz-F and APINAC, in a herbal product and a white powder-type product were identified in 2016. Since unapproved synthetic cannabinoids have not been assessed pharmacologically and toxicologically, new substances should be screened and identified to protect a public health.

In this study, An active metabolite of ADB-CHMINACA and MDMB-CHMINACA was identified for the first time in a powder-type product found in an airmail package. The structure of compound 1 was elucidated by a combination of gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS), liquid chromatography-high resolution mass spectrometry (LC-HRMS), infrared (IR) spectroscopy, and nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy. Compound 1 was proven to be an analogue of MDMB-CHMINACA, an indazole-based synthetic cannabinoid. The methyl ester group in MDMB-CHMINACA was replaced with a carboxylic acid group in compound 1. Compound 1 was determined as -[1-(cyclohexylmethyl)-1*H*-indazole-3-carboxamido]-3,3-dimethylbutanoic acid and named as DMBA-CHMINACA.

SPME-GC/MS 를 이용한 문서 내 잉크 작성 시기 분석

김은영, 손경진, 강동영, 고원건*, 김민정¹

연세대학교 공동기기원, ¹대검찰청 과학수사담당관실

*Corresponding author: wongun@yonsei.ac.kr

잉크 분석은 각종 문서의 법의학 검사에서 필수적인 부분이다. 최근 계약서, 유언장, 비즈니스 기록과 같은 각종 문서의 위조 범위가 더욱 증가하고 교묘해져서 사회적으로 큰 문제가 되고 있다. 본 연구에서는 시중에서 판매되는 보편적인 볼펜으로 작성한 문서의 잉크성분을 확인하여 데이터베이스를 구축하고, 지표 물질의 감소정도를 확인하여 문서의 작성 시기를 감별하고자 한다.

문서 작성 시기 판별연구는 분석에 변수가 많은 만큼 분석기술이 부족한 상황이다. 단순히 스펙트럼 비교를 기반으로 한 기존 연구와는 달리 SPME-GC/MS (solid phase micro extraction-gas chromatography/mass spectrometer)를 이용하여 정확한 물질을 규명하여 분석하였다. 문서 감정에서는 문서 훼손 최소화가 중요한 이슈이기 때문에 가능한 적은양의 시료 분석이 필요한데, SPME의 농축효과로 인해 일반 GC-MS 분석법에 비해 적은 양으로 분석이 가능하였다.

먼저 볼펜 9종을 선정하여 SPME-GC/MS로 분석하여 각 볼펜잉크에서 검출되는 물질을 확인하여 데이터베이스를 구축하였다. 구축된 데이터베이스로 각 펜의 주요 물질을 선정 한 뒤, 볼펜 9종에 대하여 기간별로 문서를 작성하고 SPME-GC/MS로 분석하여 작성 시기 별 선정된 주요 물질의 감소 여부를 확인하였다.

분석 결과 주요 물질은 각 펜에서 가장 높게 검출되는 물질들로 선정하였으며, benzyl alcohol, 2-phenoxyethanol, 3-methoxy-3-methylbutanol, 1-phenoxypropan-2-ol 로 선정하였다. 검출된 주요 물질의 감소여부를 그래프로 작성하여 감소 곡선을 얻고, 구해진 곡선의 식으로 잉크 작성 시기 예측이 가능하도록 제시하였다.

Blood and urinary pharmacokinetics of detomidine in horse

Youngbeom Kwak¹, Man Bae Huh^{1,*}, Hyun Chul Lee¹

¹Korea Racing Laboratory, Korea Racing Authority

Detomidine is a sedative drug used especially for the treatment of horse races, among large animals. In order to confirm the detection period of detomidine, detomidine injection was intravenously injected at 30 ug/kg in 3 horses and blood was collected 8 hours and urine collected for 4 days. The samples were extracted after hydrolysis with β -Glucuronidase, detomidine and 3-hydroxy detomidine metabolites, which are metabolites of detomidine, were analyzed by LC MS/MS MRM method. The maximum concentration of Detomidine was reached 4 hours after injection in blood, and the maximum detection time was 3 days for Detomidine metabolite in urine on LOD basis.

Decomposition effects on beta-hydroxybutyrate levels in postmortem spleen

**Ah Ram Choi^{1,2}, Sang Chul Huh¹, Woo-Yong Park¹, Jin Mee Jung¹,
Kyoung-Min Kim¹, Su Hyeon Lee¹, Jong Shin Park¹, Nam Yee Kim¹, Ji-Sook Min³,
Hyun Kyoung Ju^{1,*}, Sunyoung Bae^{2,*}**

^{1,*}Seoul institute, National Forensic Service, ^{2,*}Department of Chemistry, Seoul Women's University,

³Department of chemical analysis, National Forensic Service

^{1,*}Corresponding author: nia1998@snu.ac.kr

^{2,*}Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

Beta-hydroxybutyrate (BHB) is a key metabolite for the determination of ketoacidosis which occurs in alcoholism, starvation and Type 1 diabetes. In hot summer, decomposed bodies often found in crime scenes or sudden death cases. In these cases, it is difficult to collect blood samples from putrefied postmortem specimen, and the level of BHB has been investigated with tissues such as spleen, liver, and muscle. However, the level of BHB related with a degree of decomposition has not been studied well. Thus, in this study, the change of BHB concentration depending on the decomposition was investigated with ultra-high performance liquid chromatography-mass spectrometer (UHPLC-MS). Firstly, fifteen postmortem spleen samples were collected from dead bodies that have not been decomposed, and the spleen samples incubated at 40 °C for 0hr, 24hr, 48hr and 72hr. Each 100 mg of spleen samples was extracted with 100% cold acetonitrile and isotope labeled BHB-¹³C₄ was used as an internal standard. The chromatographic separation was performed using HSS T3 column (2.1×100 mm, 3 μm) and the gradient elution program was applied with 0.2% formic acid and methanol. Also, for the determination of decomposition progress, the ethanol and n-propanol which are biomarkers for body decays was quantified with gas chromatography-flame ionization detector (GC/FID). As results, the levels of ethanol and n-propanol were slightly increased and the ethanol levels were determined within 20 times of n-propanol levels. However, the significant changes of BHB levels were not observed depending on postmortem time at 40 °C. The further studies are needed according to decomposition conditions, such as humidity, micro organisms, and chemical process.

포스터 발표 II
(2018년 11월 16일)

과자류 중 지방산 유래 유해물질 분석법 연구

황소정, 양세희, 정유경, 김형수, 이동호*

식품의약품안전평가원 식품위해평가부 신중유해물질팀

*Corresponding author: jungyk60@korea.kr

식품의 지방은 높은 온도에 의해 지방산 유래 유해물질인 3-MCPD ester, 2-MCPD ester 및 Glycidyl ester로 생성된다고 알려져 있다. 유지류는 정제 시 높은 온도에서 제조·가공되며 정제유나 정제유가 포함된 가공 식품에서 지방산 유래 유해물질이 발견될 수 있다. 식용유지 중 팜유가 지방산 유래 유해물질이 가장 높다고 보고되어 있으며 가공식품 중 팜유를 함유한 식품은 다양하다. 이러한 가공 식품에 대한 지방산 유래 유해물질에 대한 연구가 보다 많이 필요함에 따라 본 연구에서는 유지를 함유한 과자류에 대한 지방산 유래 유해물질 분석과 실태조사를 수행하였다. 국내 유통 과자류(100건)에 대한 분석법 적용 및 실태조사 결과 유탕처리, 유처리, 일반 과자로 분류하였을 때 유탕처리 과자류가 지방산 유래 유해물질이 가장 높은 경향을 나타내었으며 유처리 과자류와 일반 과자류는 유탕처리 과자류 보다 지방산 유래 유해물질이 낮은 경향을 보였다. 이는 식품유형별 제조공정의 차이, 원료의 차이에 의해 기인한 것으로 사료된다. 대부분의 식품은 유지를 함유하고 있기 때문에 제조·가공에 따라 유해물질의 섭취정도를 확인하는 것이 필요하며 현재 지방산 유래 유해물질에 대한 기준이 마련되지 않았으나 이에 대한 기준 규격 마련 및 안전성 확보가 필요할 것으로 판단된다.

Development of simultaneous analysis methods for anti-gout compounds illegally adulterated in dietary supplements by UPLC and LC-ESI-MS/MS

Nam-Sook Kim, Sun-Hee Moon, Ji-Hee Kim, Sung-Kwan Park and Hoil Kang*

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

*Corresponding author: hoilkang@korea.kr

The rising aging population and increasingly westernized eating habits in Korea have played large roles in the increasing number of people suffering from gout. Those of them who want to treat gout are usually to take suitable medicines as prescribed by a doctor. Not only that, some people who need to prevent this disease even search for dietary supplements because the medicines may have some side-effects when long-term used. Unfortunately, some cases on dietary supplements in which unauthorized pharmaceutical compounds were contained intentionally have been continuously reported. Thus, it should be essential to investigate the illegal compounds adulterated in dietary supplements distributed on/off-line markets. In this study, simultaneous analysis methods of 6 anti-gout compounds which may be adulterated in illegally dietary supplements were developed and validated using ultra performance liquid chromatography (UPLC) and liquid chromatography tandem mass spectrometry (LC-MS/MS). The UPLC method was validated as follows. The limits of detection (LODs) and limits of quantitation (LOQs) ranged from 0.15 to 0.70 µg/mL and 0.45 to 2.10 µg/mL, respectively. The correlation coefficient, R^2 , for confirming the linearity was more than 0.999. The precision was $\leq 3.47\%$ (intra and inter-day), and the accuracy was 90.66~106.62% (intra and inter-day), respectively. The mean recoveries of target compounds which were spiked in four dosage forms such as liquid, powder, tablet, and capsule ranged from 81.20 to 109.60%, respectively. The relative standard deviation (RSD) of stability was $\leq 2.5\%$. Also, the LC-ESI-MS/MS method was developed using electro spray ionization mode and multiple reaction monitoring (MRM). For the method validation, LODs (0.10~5.00 ng/mL), LOQs (0.30~15.00 ng/mL), linearity ($R^2 \geq 0.998$), precision (intra and inter-day, $\leq 7.45\%$), accuracy (intra and inter-day, 96.26~110.44%), recoveries (80.81~117.62%) and stability ($\leq 11.72\%$) were evaluated, respectively. The proposed methods were complying with the established international guideline.

Ergot alkaloids monitoring in food in local market by LC-MS/MS

Bom Nae Lee, Eun A Chong, So Young Chun, Sheen Hee Kim, Gil Jin Kang

Food Contaminants Division, National Institute of Food & Drug Safety Evaluation,
Ministry of Food and Drug Safety

Ergot alkaloids(EAs) are large group of compounds produced by fungi that attack a wide variety of grass species, including small grains. The major ergot fungus is *Claviceps* which produces sclerotia in several grass species with *C. purpurea* being the most commonly found species. Ergotism is one of the oldest known mycotoxicosis with ancient records of its occurrence. We have no regulations for ergot in Food stuffs, but it can controlled as foreign matters(fungi). The aim of this study is to monitor residues of 12 ergot alkaloids(ergometrine, ergosine, ergotamine, ergocornine, ergocryptine, ergocristine and their epimers)in grains like rye, wheat, oat etc by LC-MS/MS. Ergot alkaloids were detected in 46 sample out of 200 samples(oats and its processed products). All ergot alkaloids are detected, and the most frequently detected substance was ergocristinine. For after, determine exposure assessment of ergot alkaloids in food by using the monitoring data.

Monitoring of illegally added drugs in adulterated foods

임무송*, 김은정, 임지은, 신호숙, 최현철

경인지방식품의약품안전청 시험분석센터 유해물질분석과

*Corresponding author: moosong@korea.kr

Drugs such as sexual enhancing, slimming, muscular strengthening, relaxing, analgesic drug and their analogues are illegal to be included in food since abusive intake of the drugs via food without medical prescription can cause life-threatening side effects. So we have undertaken to monitor drug compounds illegally added to general foods and health functional foods.

In this study, we investigated the 48 different chemical compounds including anti-impotence drugs, anti-obesity drugs, analgesics, relaxing drugs and their analogues in 166 food samples purchased in the overseas internet sites (137 samples) and in local market (29 samples). A new analysis method was developed and fully validated for 11 compounds. Chemical analysis of drugs in food samples was performed using LC/PDA and was confirmed with LC/MS/MS. Illegal compounds were detected in 73 samples, all detected samples are purchased from overseas internet suppliers. 2 compounds are detected in 11 samples and even 3 compounds are detected in 1 sample. This study revealed that the levels of illegally added drugs are very various among detected samples and even extremely exceed the recommended dose. In conclusion, to ensure food safety, monitoring of illegally added in adulterated foods is continuously needed.

**Simultaneous analysis of multi residue pesticides in agricultural commodities
by Gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS/MS)**

**Hye Soon Kang, Eun Jeong Kim, Moo Song Lim, Dong Hyuk Seo, Eun Jung Jang,
Young-Seok Oh, Yonhun Lee, Hyun-cheol Choi^{1,*}**

¹Division of Hazardous Substances Analysis,
Gyeongin Regional Office of Food and Drug Safety, Incheon 22133, Korea

*Corresponding author: chchyun@korea.kr

Pesticides are an essential part of preventing crops and livestock from damaging pests and increasing agricultural productivity.

While beneficial, pesticides pose a potential risk to human health as well as food safety and the environment.

The use of pesticides is increasing to increase pests and to protect agricultural productivity due to global warming.

So we are trying to find an efficient and rapid pesticide analysis method to protect human health.

Ministry of food and drug safety (MFDS) has developed a new method for the simultaneous analysis of 39 pesticides using GC-MS/MS.

The pesticides included in this study belong to different chemical families of insecticides, herbicides, fungicides and so on.

In order to verify this new method, recovery, precision, accuracy, linearity, and limit of quantitation (LOQ) were tested in 5 different matrices(Rice, Potato, Mandrine, Green pepper, Bean).

The recoveries obtained at fortified levels of 0.01~0.1 mg/kg were 70~120% for pesticides, with relative standard deviations (RSDs) of $\leq 20\%$, with a few exceptions. This method we have developed can quickly and accurately analyze 55 kinds of pesticides used in livestock products.

Monitoring of Veterinary Drug Residues in Fishery Products by Liquid Chromatography-Mass Spectrometry

**Yong Woo Shin^{*}, Myung-Hee Kang, Mi-Ran Kim, Jin-Seon Shin, Mi-Ok Kim,
Il-young Ahn, Yooyoung Jung, Ji-Hye Shin, Hyeon-Cheol Choi**

Hazardous Substances Analysis Division, Gyeongin Regional Office of Food and Drug Safety,
Incheon 22133, Republic of Korea

Veterinary drugs are used to treat bacterial diseases and growth-promoting substances in fishery products. However, overuse and misuse of veterinary drugs could be bring on results of antibiotic residues in their tissues, which can be a potential health risk to human. Thus, we optimized and validated the method for the analysis of 75 target residues (69 parent drugs, 6 metabolites) by liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS/MS) in fishery products. Extraction was performed with EDTA in Ammonium acetate buffer solution and clean-up was done by C₁₈ and primary secondary amine (PSA). The method was validated for specificity, precision, recovery and linearity according to CODEX guideline (CAC/GL-71, 2009). The validation was conducted at three concentrations (1/2 × MRL, 1 × MRL, 2 × MRL) in samples (flatfish, eel and shrimp). As a result, recovery was 70.8~151.5%, 53.8~143.3%, 75.0~147.0% in flatfish, eel and Shrimp respectively. The validated method was applied for screening analysis of 75 target residues in 12 kinds of fishery products collected from local markets in Korea. In conclusion, 17 veterinary drugs were detected in 54 out of 120 samples, none of veterinary drugs exceeded Maximum Residue Limits (MRLs) in fishery products.

Analytical Method Development for the Determination of Astaxanthin by LC-MS/MS in Dietary Supplements

**Ji Eun Park, Mi Hyune Oh^{*}, Yang Sun Kim, Jin Hee Lee, Eun Joo Koo,
Eun Hee Keum, Mee Hyun Cho, Mi Sook Kim, Ga Young Jung, Hye Young Lee**

Imported Food Analysis Division, Gyeongin Regional Food and Drug Administration,
Ministry of Food and Drug Safety

*Corresponding author: mihyuneoh@korea.kr

Astaxanthin from *Haematococcus pluvialis* introduces mainly monoesterified(70–90%) and diesterified fatty acid ester astaxanthin(5–25%) instead of 'free' astaxanthin(5–10%). Accurate quantification of esterified astaxanthin is difficult. Thus, esterified astaxanthin must first be hydrolyzed by either a chemical or enzymatic procedure to yield all free astaxanthin. The enzymatic hydrolysis method is preferable as it is simple, complete and does not oxidize the astaxanthin molecule when performed carefully. Various systems have been developed and validated for the analysis of free astaxanthin.

We have developed a viable method which can be used for the characterization and quantification of dietary supplement formulation containing astaxanthin. This method was designed using enzymatic hydrolysis and liquid chromatographic-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) to improve the sensitivity.

The method was validated for linearity, precision and accuracy using both astaxanthin and its related health functional foods(dietary supplements). It was proved to be suitable for routine quantitative analysis of commercially available astaxanthin products. We will argue that this research is evidence-based approach to assessment,thereby contributing to amendment of astaxanthin testing method for the Korean Health Functional Food Code.

Monitoring of illegal adulterants and drugs in direct oversea-purchased foods

**Jung Eun Lee^{*}, Woo Jin Cho, So Young Won, Do Hyeong Kim, In Seon Kim,
Jae Hee Hyun, Kyeong Wook Kim, Jae I Kim, Dong Sul Kim, Woo Seong Kim**

Center for Food & Drug Analysis, Busan Regional Korea Food and Drug Safety

Illegal adulterants and drugs have been detected in general or functional foods up to recently. Analogues with the modified chemical structure similar to that of anti-obesity drugs are used as adulterants of non-prescription slimming products to evade government inspection.

The purpose of this study is to monitor of illegal adulterants and drugs in functional foods to ensure food safety.

We monitored 109 food items advertised as slimming products or sexual enhancement products in offline and online markets. Dissolved 1~10g of samples in MeOH and sonicated for 30 min. Filtered MeOH solvent using 0.2 μm syringe filter and analysed 35 illegal compounds using LC/PDA and confirmed with LC/MS/MS.

Analyses of 35 illegal adulterants including anti-impotence drug, anti-obesity drugs and their analogues were achieved using LC/PDA and confirmed with LC/MS/MS. Yohimbine, icariin, sennosides or melatonin was detected in 24 food items with range of 2.90~14.10 mg/g, 0.07~0.65 mg/g, 0.40~1.67 mg/g, 2.36 mg/g, respectively. These results indicated that a sustainable monitoring of illegal adulterants in various foodstuffs is required for the safety management.

The results of this study will contributed to reinforcement the food safety management system by preventing the distribution of foods containing illegal adulterants.

Development of a new multiresidue analytical method with LC-MS/MS for detection of veterinary drugs in fishery products

Eunhye Lee, Sunhee Park, Jaewan Park, Youngji Jung, Hyunjeong You, Joonshik Park, Sookhee Ha, Jaeyoung Shim, Kwangsoo Yoo, Gyeongyeol Kim, Juyoung Hwang, Miran Noh, Kwangsoo Lee, Dongsul Kim and Changhee Lee*

Center for Food and Drug Analysis, Busan Regional Office of Food and Drug Safety,
Ministry of Food and Drug Safety, Republic of Korea

*Corresponding author : chlee65@korea.kr

High density aquaculture requires the use of veterinary drugs as therapeutic agents against diseases. Although the use of these drugs has the advantage of increasing production, their abuse and misuse can result in various problems such as ecosystem contamination by resistant bacteria and drug residues. In Korean Food Code, the analytical methods were established to detect and monitor the residues of veterinary drugs with MRLs in both imported and domestic fishery products. In this study, a new multiresidue analytical method using liquid chromatography with tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) was developed to prepare for the introduction of the positive list system (PLS), and to detect unauthorized veterinary drugs that used in livestock production and can be used illegally in fish farms. The analytical method with simple sample preparation using dispersive SPE(C18) purification was developed and validated using three different matrixes (shrimp, eel and flat fish) according to the Codex guidelines (CAC/GL 71-2009). We also performed the monitoring experiment of target veterinary drugs using developed method. No detectable target veterinary drugs was found in the 150 samples including eel, mudloach, flat fish, rockfish, salmon and shrimp collected from local markets in Korea. The results suggest that the developed method in this study is sufficient for use as a screening method for target veterinary drugs to manage food safety.

저장기간 및 품종에 따른 쌀 중 솔비톨 변화량 분석

박섯별, 조지미, 박희일, 최현주, 이현선, 이민경, 이동필, 이성우*, 김재호

국립농산물품질관리원 전남지원 품질관리과

*Corresponding author: sw2222@korea.kr

매년 햅쌀이 수확되는 시기에 햅쌀의 가격이 비싸다는 것을 악용하여 햅쌀과 묵은쌀을 혼합 판매하는 등의 부정 유통에 따른 소비자의 피해가 발생되고 있다. 그러나, 현재의 G·O·P법에 의한 쌀의 신선도 감정법은 정확한 신구곡 판별 및 혼합 정도의 판별에는 한계가 있다. 이에 따라 본 실험은 신구곡 판별의 지표물질로 선정된 솔비톨의 함량을 수확년도 및 월별 쌀 중의 솔비톨 함량 비교를 통하여 신구곡의 정확한 판별에 목적이 있다.

쌀 중 솔비톨 분석 방법은 쌀 한알의 무게를 측정하고 여기에 증류수와 쇠구슬을 넣고 가열·진탕·원심분리 하여 쌀 시료액 중 당알콜 솔비톨을 추출하여 여과 후, 여과액 중 솔비톨의 함량을 질량분석기로 분석하였다. 시료는 2017년 에 수확하여 전국 농협 미곡종합처리장에서 보관하고 있는 2017년산 28종의 벼를 채취 후 상온 보관하였고, 보관시료 중 500 g 씩 분석을 위해 매월 백미로 도정하였다. 도정이 끝난 백미는 시료 별로 각각 무작위 추출 된 24개의 낱알을 전처리하여 분석하였다. 분석 결과 쌀의 솔비톨 함량은 평균 1.79~25.80 mg/kg 이었다. 9월 백미 내 솔비톨 함량은 초기 2월 도정 백미에 비하여 약 14.4배 증가하였다. 솔비톨의 월별 증가폭은 대부분의 품종에서 6월에서 7월에 함량 변화가 가장 컸으며, 6월에 비하여 7월 솔비톨 함량이 평균 약 1.8배 증가하는 것으로 조사되었다.

추가적으로 12월 까지 월별 솔비톨 변화량에 대한 연구를 진행 중이며, 이러한 분석 결과를 바탕으로 쌀의 정확한 신구곡 연산판별 및 혼입비율에 대한 분석 자료로 활용될 수 있을 것으로 사료된다.

Development and Validation of Pyribencarb and Pyriofenone using LC-MS/MS in Fruiting and Vegetable

Hyo Young Kim, Chai Uk Lim, Su Min Hong, Dong-Ho Kim, Hyunjeong Cho*

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

*Corresponding author: hjcho201@korea.kr

Pyribencarb and Pyriofenone is used to control spotted mite on strawberry and korean melon. We developed the method for these fungicides to vitalization of our agricultural products export. Korea's major exporting countries are U.S.A, Japan, Hongkong and so on. These countries enforce Positive list system or Zero tolerance by technical barriers to trade. To safely export, the quantitative limit of the method must meet the 10 µg/kg level.

A Multiresidue method for pyribencarb and pyriofenone has been developed using the QuEChERS EN method with liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) in 5 agricultural commodities (Apple, Paprika, Pear, Strawberry, and Tomato). To validate developed method, all commodities spiked with two concentration levels of 10 and 100 µg/kg. The recoveries were within 70 ~ 120% with the relative standard deviation (RSD) of 20% and the limit of quantification (LOQ) of methods were below 10 µg/kg, and the correlation coefficient (R^2) of matrix-matched standards were > 0.99. The recoveries, LOQ, and repeatability achieved, meet the needs of tolerance level monitoring of these pesticides in the agricultural export product.

Rapid Determination of Mandestrobin, Norflurazon using Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry in Fresh Produce

Hyunjeong Cho^{*}, Hyo Young Kim, Chai Uk Lim, Su Min Hong, Dong-Ho Kim

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

^{*}Corresponding author: hjcho201@korea.kr

Rapid residue method for mandestrobin used an agricultural fungicide to control of disease such as Brown Rot in peers, and norflurazon that used as selective preemergent herbicides to control germinating annual grasses has been needed to ensure the safety of the fresh domestic produce for export. Rapid simultaneous method of Mandestrobin and Norflurazon was developed for harmonization of Positive List System(PLS) or Zero Tolerance for agricultural chemical residues of the countries that we export fresh produce. It was modified from the QuEChERS EN method with high-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) in agricultural commodities such as apple, strawberry, pear, paprika, and tomato). In the result of analyzing all commodities spiked with two concentration levels of 10 and 100 µg/kg for validation of developed method, the recoveries were within 76.7 ~ 109.3% with relative standard deviations (RSD) of <10%, and the limit of quantification (LOQ) of the method was below 1.0 µg/kg in all commodities. At this time, linear calibration functions with correlation coefficients were obtained $r^2 > 0.998$. The developed method is highly sensitive and accurate as well; also it is satisfied the quantification level for PLS.

**Survey on the Residues of Natural Growth Promoter in Livestock
Manure Compost by using LC-MS/MS**

**Hee-Chang Shin^{1,*}, Song-Yi Gu¹, Dae-Jung Kim¹, Yong-Kyoung Kim¹, Jae-Min An²,
Kyong-Suk Hong¹ and Dong-Ho Kim¹**

¹Division of Safety Analysis, Experiment & Research Institute National Agricultural Products Quality
Management Service,

²Division of Quality Management, Gyeongbuk Provincial Office National Agriculture Products Quality
Management Service

*Corresponding author: cafestol@korea.kr

Hormones that can promote the growth of livestock are divided into two types of natural hormones and synthetic hormones. For example, there are 6 kinds of growth promoters approved for cattle, 3 kinds of natural hormones such as estradiol, progesterone and testosterone, and 3 kinds of synthetic hormones such as zeranol, trenbolone acetate and melengestrol acetate. In the case of pigs, the synthetic hormone (ractopamine) is allowed, but the use of natural/synthetic growth promoters is prohibited in poultry. Growth promoters used in livestock are used to increase the productivity of livestock, but there is a risk that they remain in the livestock for up to 200 days. However, since the growth promoters administered into their body mostly excrete the feces, it is considered safe for the livestock products used in accordance with the appropriate standards. Nonetheless, the growth promoter can be a problem in agriculture, since the feces of livestock are recycled as compost. What is composted under appropriate conditions does not remain, because the growth promoters are decomposed, but the growth promoters are not relieved if it is composted under some inappropriate conditions. Therefore, we would like to conduct a residual survey on natural growth promoters, potentially harmful substances that are likely to remain in the livestock manure compost used in agriculture. Using the simultaneous analysis 13 types of growth promoter established in the previous study, these were analyzed qualitatively and quantitatively. As a result of this study, a trace amount of natural growth promoters were detected in some livestock manure compost. As growth promoters have been detected in livestock manure compost produced under inappropriate conditions, additional research is needed.

Simultaneous Analysis and Measurement of Uncertainty Estimation of Six Isoflavones in Cheonggukjang by LC-MS/MS

**Mi Jin Lee, Jeong Min Lee, Soo Min Park, Soon Kil Cho,
Jong Sung Ahn, Ho Jin Kim***

National Agricultural Products Quality Management Service

*Corresponding author: rex7878@korea.kr

A novel and simple method for detecting six isoflavones in Cheonggukjang using liquid chromatography-electrospray tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) was developed. The method validation was performed in terms of linearity, sensitivity, selectivity, accuracy and precision. The limits of detection (LODs) for the instrument employed in these experiments ranged from 0.15 μ g/kg to 1.50 μ g/kg, and the limits of quantification (LOQs) ranged from 0.50 μ g/kg to 5.00 μ g/kg. The average recoveries of the six isoflavones ranged from 82.3% to 98.9%. Before assessing the uncertainty of the measurements, we identified the factors that affect the measured value using quantitative analysis to determine how each factor affects the measurement result. It was found that the sample weighing, standard material purity, dilution, calibration curve and reproducibility factor affect the uncertainty of measurement. The developed method was specific and reliable. Therefore, the method is suitable for the routine analysis of isoflavones in Cheonggukjang.

Development of an IAC and HPLC-FLD method for the detection and quantification of three group mycotoxins in animal feed

Jeong Min Lee, Mi Jin Lee, Soo Min Park, Soon Kil Cho, Jong Sung Ahn, Ho Jin Kim[★]

National Agricultural Products Quality Management Service

[★]Corresponding author: rex7878@korea.kr

A technique combining rapid High-performance liquid chromatography with fluorescence detector (HPLC-FLD) using immunoaffinity chromatography (IAC) was developed for simultaneous determination of three group mycotoxins in animal feed. The chromatographic peaks of the three group mycotoxins were successfully identified by comparing their retention times and FLD wavelength with reference standards. Method validation was performed in terms of linearity, sensitivity, selectivity, accuracy, and precision. The chromatograms of the mycotoxins indicate successful separation of all eleven compounds in <20 min. The resolution and symmetry values were found to be in the range of 2.7~18.5 and 1.1~1.6. The limits of detection (LOD) was 0.20 to 1.01 µg/kg, and limits of quantification (LOQ) were 0.66 to 3.33 µg/kg. The average recoveries of the three group mycotoxins ranged from 91.11 to 106.14%. Method replication resulted in intra-day and inter-day peak area variation of <5.2%. The developed method was specific and reliable and is suited for the routine analysis of mycotoxins in animal feed.

건식회화를 이용한 식품의 전처리법 연구

김은지¹, 최성화¹, 이민영¹, 이유리¹, 최은미¹, 박경수^{1*}

¹한국과학기술연구원 특성분석센터

*Corresponding author: pks6475@kist.re.kr

건식회화(Dry ashing)는 일정온도로 가열된 전기회화로로 유기물을 산화분해하여 전처리하는 방법이다. 건식회화는 백금제, 니켈제 등의 용기에 채취하여 회화하여 재화시킨 후, 무기원소정량을 위한 용액으로 조제되며, 습식분해법에 비교하여 다량의 시료채취가 가능하다는 장점이 있다.

건식회화를 이용한 전처리법을 연구하기 위해, CRM을 사용하여 실험을 진행하였다. 분석법 확인을 위해 spinach leaves, rice flour를 matrix로 하는 CRM을 사용하였다. 시료는 NIST에서 구입했으며 Al, Ni, Pb, Cd, As의 회수율 실험을 통해 분석법에 대한 신뢰도를 확인하였다.

본 연구에서는, IR Lamp로 예비 탄화한 다음, 전기로를 이용하여 건식회화를 진행하였다. 기기측정으로는 ICP-MS를 사용하였고, 측정결과를 바탕으로 회수율을 계산하였다.

회수율 실험 결과, Al, Ni, Pb, Cd, As의 건식회화 회수율은 AOAC 가이드라인에 충족되지 않은 것으로 확인되었다.

식품의 매질 별 Sn, Al 분석법 비교 연구

최성화¹, 이민영¹, 이유리¹, 김은지¹, 최은미¹, 박경수^{1*}

¹한국과학기술연구원 특성분석센터

*Corresponding author: pks6475@kist.re.kr

식품 중 비교적 고농도로 함유되어 있는 Sn, Al의 최적 분석법을 확립하기 위하여, 식품 중 다양한 매트릭스로 실험을 진행하였다. 분석법 확인을 위하여 영국에서 실시하는 FAPAS 숙련도 프로그램에 참여하였고, 참여한 matrix는 tomato leave fortified, spinach leaves, rice flour, bovine liver로 다양한 매트릭스를 반영하여 실험하였다. 그 결과, 모든 시료에서 절대값 2이하로 만족스러운 결과로 분석 결과의 신뢰도를 확인하였다.

또한, 기존 Sn, Al분석법 확인을 위하여 식품공전, AOAC, FDA, EN을 확인하였고, 각 기관 별로 전처리 단계부터 기기 분석까지의 실험을 진행하였다. Sn 분석의 경우, 각 기관들은 전처리 방법에 대하여 습식분해법 (황산-질산법과 마이크로웨이브법), 건식회화법, 용매추출법 등을 제시하고 있으며, 기기 측정으로는 AAS, ICP-OES, ICP-MS를 이용하도록 제시되어 있다. Al 은 제시된 바 없다.

Al과 Sn의 유효성 검증을 위하여, 습식분해법과 건식회화법으로 전처리를 진행하였고, 측정 장비로는 ICP-MS, ICP-OES, AAS를 이용하여 실험하였다.

그 결과, 마이크로웨이브를 이용한 전처리를 방법과 ICP-MS로 측정한 결과가 가장 우수함을 확인하였다. Al의 회수율은 88.1-98.8%로 확인되었으며, RSD는 3.66-15.1%, MLD 0.089-0.530 mg/kg, MQL 0.296-1.76 mg/kg으로 확인되었고, Sn의 회수율은 87.5%, RSD 28.59%, MLD 0.017 mg/kg, MQL 0.056 mg/kg 으로 확인되었다.

LC-MS/MS를 이용한 식약 공용 원료의 지표성분 확인

김형주*, 안수진, 이아영, 민승식, 인상환

국립과학수사연구원 법독성학과

*Corresponding author: khjloveu@gmail.com

식품의 기준 및 규격에 의하면, 식품에 사용할 수 있는 원료 목록 중 식품과 생약 공용으로 사용 가능한 농, 임산물은 113종 지정되어 있다(2017 5월). 식품과 생약에 공용 사용이 가능한 원료를 식품 원료로 사용하여 가공식품을 제조하였을 때 몇 가지 문제점이 발생할 수 있는데, 그 중 하나는 위 원료들을 사용한 가공식품에 대한 한의학적 효능을 포함한 과대광고이고 두 번째는 위 원료들이 사용되었다고 표시된 가공식품에 실제로 원료가 사용되었는지 등 허위표시 여부이다. 가공식품에 발생 가능한 유해성에 대한 규제는 식품의 기준 및 규격을 통해 관리되고 있으나, 가공식품에 사용된 원료의 함유 여부 확인에 대해서는 제시하고 있지 않다. 분석 대상은 식품과 생약을 공용으로 사용 가능한 농, 임산물 중 산수유, 오미자, 참당귀, 감초 및 갈근 총 5종이며, 그 지표성분으로는 대한약전 등을 참고하여 산수유(Loganin, Morroniside), 오미자(Schisandrin, Gomisin A, Gomisin N), 참당귀(Nodakenin, Decursin, Decursinol angelate), 감초(Glycyrrhizic acid, Liquiritigenin, Licoricidin), 갈근(Puerarin, Daidzin) 총 13가지 지표성분을 선정하였다. 가공식품 중 위 성분들을 분석하기 위해 SPE(Solid phase extraction) 방법으로 전처리 후, LC-MS/MS(3200 QTRAP, AB Sciex)를 이용하여 positive 및 negative mode에서 분석하였다. 기기분석을 위한 컬럼은 Cadenza CL-C18(3 x 100mm, 3 μ m)를 사용하였으며, 이동상은 A: 2 mM Ammonium formate, 0.2% Formic acid in DW와 B: 2 mM Ammonium formate, 0.2% Formic acid in 95% Acetonitrile을 사용하였다. Positive mode에서 각 성분은 [M+H]⁺의 형태(gomisin A는 [M-OH]⁺)로 나타났으며, precursor 및 product ion은 Puerarin(417.2→297.2, 267.2), Daidzin(417.2→255.2, 199.3), Nodakenin(409.2→247.2, 229.2), Schisandrin(433.3→415.3, 384.4), Gomisin A(399.2→368.2, 330.3), Decursin(329.2→229.3, 83.1), Decursinol angelate(329.2→229.2, 55.2), Gomisin N(401.3→300.1, 331.2)이었다. Negative mode에서 각 성분은 [M-H]⁻의 형태로 나타났으며, precursor 및 product ion은 Morroniside(404.9→154.8, 100.9), Loganin(388.9→227.2, 127.6), Glycyrrhizic acid(821.1→350.9, 193.4), Liquiritigenin(254.9 → 119.6, 134.9), Licoricidin(423.0 → 202.9, 176.7)로 나타났다. 같은 종이나 유사원료가 같은 지표성분을 함유할 수 있으므로, 가공식품 중 해당 원료 함유 여부의 더 정확한 확인을 위해 성분 스크리닝 및 프로파일링을 통한 다변량통계분석 등 추가적인 연구가 필요하다.

Sorbic acid, benzoic acid and propionic acid contents of aquatic products distributed in Korean market

장광주, 김단비, 유미영, 이상희*

한국식품연구원

*Corresponding author: shlee@kfri.re.kr

Food preservatives (benzoic acid, sorbic and propionic acid) may be contained in raw materials or processed commodities, so that the judgment whether the addition was done artificially or not is difficult. Therefore, survey for acquirement of various data base related to natural preservatives in fishery is necessary to ensure for food safety. In this study, sorbic acid, benzoic acid and propionic acid were extracted in fish products and analyzed high-performance liquid chromatography-photodiode detection array (HPLC-PDA) and gas chromatography-mass spectrometry (GC/MS). The methods showed good results on terms of linearity, LOD, LOQ, accuracy and precision. In this method validation for ensure the reliability, the recovery rate of such as seaweed, shrimp and mackerel were 80-100% and RSDs(%) was below 15%. As are result of monitoring the samples obtained from the South Korean market, propionic acid was detected in most samples, but sorbic acid was detected in some seasoned products and benzoic acid was detected in some fish sauces. The results obtained in this study provide fundamental data regarding naturally occurring preservatives in fishery. Moreover, these database in fishery could be used as important data for the judgment that they are naturally originated preservatives.

This research was supported by a grant (16162MFDS603) from Ministry of Food and Drug Safety in 2018.

Evaluation of assay conditions for the performance of Enzyme Linked Aptamer Assay

Soyeon Kwon¹, Insook Rhee^{2,*}

¹Department of Chemistry, Seoul Women's university

*Corresponding author: irpaeng@swu.ac.kr

Aptamer is synthetic oligonucleotides as chemical antibodies. There are several advantages compared with antibodies. So, there are widely used in many ways. However, aptamer has been studied for a much shorter time than antibodies. thus, a number of detailed and diverse studies are needed.

In order to stabilize the aptamer, we should optimize conditions such as ionic strength of the buffer, immobilization strategy, incubation time, temperature and etc. We conducted the methods of enzyme linked aptamer assay (ELAA) based on hybridization of aptamer on the stabilization condition of the aptamer. A 76mer DNA aptamer was utilized as a capture binder and 18mer probe of complementary oligonucleotides as a detector. The effect of Tween-20, which interferes with the binding of tetracycline (TC) to the aptamer, was confirmed by the absence of signal gap according to TC concentration. The addition of 1 mM MgCl₂ on the buffer used in the wash step to remove the previous step reagent showed high sensitivity. Additionally, other factors of assay conditions on ELAA were investigated.

High-resolution NMR spectroscopy for classification of various beverages

Ji-Ho Jeong, Ji-Sun Kim, Hyun-Jun Jang and Yongae Kim*

Department of Chemistry, Hankuk University of Foreign Studies

*Corresponding author: yakim@hufs.ac.kr

Most analytical studies of food and beverage have focused on the composition, raw materials, geographical origin and quality control of these products. Beer has been a very popular fermented beverage for thousands of years. The particular characteristics of beer depends on malted grains, hops, yeast, water, the exact recipe, and the timing for the brewing process. And Tea is the most popular beverage and consumed widely throughout the world. The five main types of tea were white, green, oolong, black and pu-erh were also classified by their fermentation. There are not special analytical tools for classifying various beverages, it depends on the sensory results of evaluation methods by professional beverage taster. Since it has limitation to exact classify of beverage quality and types by using sensory results, the analytical techniques and chemometric analysis focused on metabolites of beverages are needed. High-resolution Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spectroscopy has many applications in the analysis of food and beverage products, especially in combination with multivariate analysis. In this study, we will analyze the ^1H NMR spectra of beer and teas with principal component analysis (PCA) and partial least squares (PLS) methods and defined the possibility of using ^1H NMR experiments with multivariate analysis as quality control tool for various beverages.

Effect of black pepper (*Piper nigrum* L.) extract on the metabolic activity of turmeric (*Curcuma longa* L.) extract in human lung cancer cells: analysis by UPLC-ESI-Q-TOF/MS

조현기, 정원태, 임흥빈*

충북대학교 특용식물학과

*Corresponding author: heungbin@chungbuk.ac.kr

Turmeric (*Curcuma longa* L.) and black pepper (*Piper nigrum* L.) have traditionally been used as Asian medicinal and culinary herb. Curcumin, a major compound of turmeric, has been known to have antitumor activity. However, curcumin is bioavailable because it is rapidly metabolized and released from the body. Therefore, the addition of adjuvants such as piperine, a potent inhibitor of drug metabolism, is one of the ways to increase the bioavailability of curcumin. The yields of turmeric and black pepper ethanolic extracts (TM and BP) are 18.2 and 8.2% (w/w), respectively. The EC₅₀ values of A549 and NCI-H292 cells exposed to TM were 77.8 µg/mL and 92.0 µg/mL, respectively. No significant cytotoxicity was observed up to the 400 µg/mL in the A549 and NCI-H292 exposed to BP. Based on the central composite design, the co-treatment of TM and BP enhanced the cytotoxicity of A549 and NCI-H292 cells. The optimal combination concentration (optimal EC₅₀ value) of TM and BP calculated by the response surface methodology assay were 48.5 and 241.7 µg/mL. The combination index assay confirmed that the cytotoxic effect at optimal combination concentration was due to the synergistic effect. In order to confirm the interaction between TM and BP, we measured the amount of curcumin that changes with time, and assumed structural changes during co-treatment of TM and BP on lung cancer cells using a UPLC-ESI-Q-TOF/MS. In conclusion, we hypothesized that co-treatment of TM and BP enhanced cytotoxicity more than single treatment of TM on lung cancer cells, and cell death was synergetic cytotoxicity effects associated with curcumin metabolism.

담배의 물리적 특성에 따른 타르 및 니코틴 양

임현희^{1*}, 신호상²

¹공주대학교 약물남용연구소, ²공주대학교 환경교육과

*Corresponding author: cwawd@hanmail.net

국내 판매되고 있는 담배는 형태와 종류가 다양하다. 길이, 무게부터 필터 종류, 필터 흡의 수 등 소비자의 기호에 맞게 다양한 제품을 출시하고 있다. 이러한 물리적인 조성의 변화만으로도 담배에 함유된 니코틴과 타르의 흡입량을 조절할 수 가 있다. 따라서 이 연구에서는 담배의 물리적 특성에 따른 니코틴과 타르의 관계를 조사하였다.

담배는 국내 인구수에 따라 전국적으로 20개 지역을 선정하였고, 대상 브랜드는 판매순위 상위 60개 제품을 선정하였다. 물리적 특성을 평가하기 위해 길이, 무게, 직경, 흡인저항, 희석률, 필터 흡수등을 조사하였다. 길이, 무게, 직경은 전자정밀측정기로 측정하였고, 흡인저항 및 희석률은 자동측정장비로 측정하였다. 필터 흡수는 현미경으로 관찰하여 그 수를 세었다. 각 분석 결과를 토대로 서로의 상관성을 비교하였다. 결과적으로 담배의 물리적 특성에 따라 타르 및 니코틴의 양이 상관성 있게 나타나는 것을 확인하였다. 이를 통해 담배회사의 물리적 조절이 타르 및 니코틴의 양에 어떠한 영향을 미치는지 파악할 수 있었다.

Characterization of anthocyanin in red wine using asymmetrical flow field-flow fractionation(AsFIFFF) and HPLC

**Dongsup Song¹, Daniel Osorio², Jaeyeong Choi³, J. Mauricio Peñarrieta^{2,*},
Lars Nilsson^{3,*} and Seunggho Lee^{1,*}**

¹Department of Chemistry, Hannam University, Korea

²Carrera de Ciencias Químicas, San Andrés University, La Paz, Bolivia

³Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden

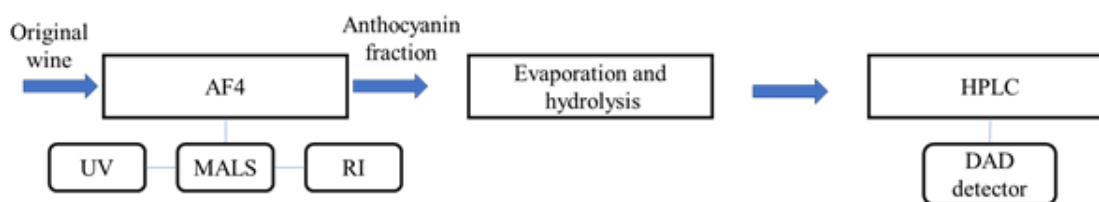
*Corresponding author: slee@hnu.kr

Anthocyanin is one of the most powerful antioxidants. Anthocyanin has various types. In this study, the type and the content of anthocyanin in red wine were determined.

Five commercial red wines were chosen for comparisons, one French wine and four Argentinian wines. First, a wine sample was injected into an asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) to separate the components in the sample. Each wine sample showed four main peaks at 13.5, 15.5, 21, and 34 min by a refractive index (RI) detector. In generally, anthocyanin has its maximum absorbance at 525 nm.^[1] The peaks at 15.5 and 34 min showed the UV response at 525 nm. As the peak at 34 min showed broad UV spectrum with poor reproducibility, probably due to anthocyanin trapped in polysaccharide, the peak at 15.5 were chosen for further analysis.

The anthocyanin fraction (the peak eluting at 15.5 min) from AsFIFFF fractogram was collected, and injected into HPLC (C₁₈, 2.7µm100 mm) for quantitative analysis after a sample preparation procedure shown in Scheme 1 below, which includes evaporation and hydrolysis^[2].

There were significant differences found among the AsFIFFF fractions collected from tested wine samples of various sources in both the type and the content of anthocyanin. The total contents of anthocyanin in various wine samples determined by HPLC were lower (about one-half) than those found previously. This is probably due to the anthocyanin molecules being smaller than the cutoff molar mass (10 kDa) of the AsFIFFF membrane. AsFIFFF provided a useful tool for separation of anthocyanin from red wine, and HPLC provided a tool for quantitative analysis of the anthocyanin.



Scheme 1. experimental procedure

[1] J. M. P. Loria, *Antioxidants in Bolivian Plant Foods*, **2009**, p.

[2] A. Vernhet, S. Dubascoux, B. Cabane, H. Fulcrand, E. Dubreucq and C. Poncet-Legrand, *Anal Bioanal Chem* **2011**, *401*, 1559-1569.

Fluorescence-labelling for analysis of proteinaceous matter in food using asymmetrical field flow-fractionation (AsFFFF) coupled with multiple detectors

Meiyu Zhang¹, Jaeyeong Choi², Lars Nilsson^{2,*}, and Seungho Lee^{1,*}

¹Department of Chemistry, Hannam University

²Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University

*Corresponding authors: lars.nilsson@food.lth.se, slee@hnu.kr

Gum Acacia (GA) is a type of heterogeneous polysaccharide, which is extensively used in various industries such as food, soft drink, pharmaceuticals, cosmetics, ink industry due to its remarkable emulsifying and flavor stabilizing properties. The emulsification property of GA is known to be closely related to the composition of the proteinaceous components in it^[1]. Analysis of proteinaceous matter in gum acacia is thus of great interest.

In this study, fluorescence-labelling was employed for asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFFFF) analysis of the proteinaceous matter in GA. Detectors such as multi angle light scattering (MALS), differential refractometer (dRI) and fluorescence detector (FL) were coupled on-line with AsFFFF, yielding molecular weight (MW), molecular weight distribution (MWD), rms radius, content of the proteinaceous matter content and its distribution in GA.

Results showed that, the labelling efficiency was influenced by pH and derivatization time. Higher pH is favorable to labelling efficiency due to deprotonation of the amine groups on side chains of amino acids. Highest labelling efficiency was observed at pH 11. This fluorescence-labelling method was proved to be effective and specific for determination of peptides, polypeptides and proteins in food in low concentrations.

[1] R. C. Randall, G. O. Phillips and P. A. Williams, *Topics in Catalysis* **1988**, 2, 131-140.

Determination of conformation of a polysaccharide (Gum Acacia) with asymmetrical flow field-flow fractionation coupled online with light scattering detectors

Meiyu Zhang¹, Bobae Kim¹, Jaeyeong Choi², Lars Nilsson^{2,*}, and Seungho Lee^{1,*}

¹Department of Chemistry, Hannam University

²Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University

*Corresponding authors: lars.nilsson@food.lth.se, slee@hnu.kr

Gum acacia, a highly heterogeneous polysaccharide, is of three major populations (named 'population-1, 2, and 3', respectively), i.e. an arabinogalactan-peptide (AG), an arabinogalactan-protein (AGP) and a glycoprotein (GP) fraction defined on a hydrophobic separation criterium^[1]. They differ in their molecular weight, molecular size, conformation and protein content.

In this study, five GA solutions (prepared with or without filtration and in various pH environment) was separated and characterized by asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) coupled online with multiangle light scattering (MALS), and refractive index detector (dRI), yielding molecular weight distribution, rms radius, hydrodynamic radius, and conformation of the population-1 and 2.

Results showed that the population-1 has a stable and highly branched structure, which agrees with the inner interspersed branched network conformation of AG fraction. The conformation of the population-1 was almost unaffected by filtration or pH change. For the population-2, filtration can break the spherical structure associated by AGP molecules. Also, alkaline condition can cause degradation of AGP. It seems a special attention is required for analysis of GA due to its sensitivity to shear force and pH.

[1] D. Renard, L. Lavenant-Gourgeon, A. Lapp, M. Nigen and C. Sanchez, *Carbohydrate polymers* **2014**, *112*, 648-661.

Characterization of non-solvent precipitated starch using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multiple detectors

Catalina Fuentes^{a,b*}, Hisfazilah Saari^a, Jaeyeong Choi^c, Seungho Lee^c, Malin Sjö^a, Marie Wahlgren^a and Lars Nilsson^a

^aFood Technology, Engineering and Nutrition, Faculty of Engineering LTH, Lund University, PO Box 124, S-221 00 Lund, Sweden.

^bSchool of Chemistry, Faculty of Pure and Natural Science, Universidad Mayor de San Andres (UMSA), PO Box 330, Cota Cota 27 St., La Paz, Bolivia

^cDepartment of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Republic of Korea

In recent years there is a large interest in producing starch nanoparticles (NPs), these NPs can be generated via non-solvent precipitation of dissolved starch (non-SPS). Currently, little is known about the behavior of starch NPs and non-SPS as a finished product i.e. when they are re-dispersed in an aqueous environment. For this reason, the aim of this study was to investigate the influence of the non-SPS preparation method on the size, molar mass (M), apparent density (ρ_{app}) and conformation when they are subjected to different dissolution/dispersion procedures using asymmetrical flow field-flow fractionation (AF4). Three non-SPS materials were prepared using ethanol as a precipitant of waxy maize starch (WM). The WM was either untreated (SP) or pre-treated via acid-hydrolysis (AHSP). In addition, SP was chemically modified using n-octenyl succinic anhydride (OSA), yielding surface-active OSASP. AF4 is a versatile separation method that has been proved suitable for the analysis of NPs and polymers. It is especially powerful when connected to detectors like differential refractive index (dRI) and multiangle light scattering (MALS). The results showed that the molar mass and size depended on the type of non-SPS with a decrease in the order: SP > OSASP > AHSP upon re-dispersion in different media. Moreover, different types of non-SPS materials displayed different conformational properties. The results show that, even though non-SPS displays particles in the dry state, they dissolve or partly dissolve, upon re-dispersion in an aqueous environment at room temperature, and behave similar to dissolved polymers.

Separation efficiency of glycogen and pullulan in asymmetric flow field-flow fractionation: Difference between conventional focusing and hydrodynamic-relaxation frit inlet

**Catalina Fuentes^{a,b*}, Jaeyeong Choi^{a,c}, Claudia Zielke^a, J. Mauricio Peñarrieta^b,
Seungho Lee^c and Lars Nilsson^a**

^aDepartment of Food Technology, Engineering and Nutrition, Faculty of Engineering, Lund University, PO Box 124, S-22100 Lund, Sweden.

^bSchool of Chemistry, Faculty of Pure and Natural Science, Universidad Mayor de San Andres (UMSA), PO Box 330, Cota Cota 27 St., La Paz, Bolivia.

^cDepartment of Chemistry, Hannam University, Daejeon 3054, Republic of Korea.

Field-flow fractionation (FFF) is a family of separation and characterization techniques, among which the most commonly used technique is asymmetric flow field-flow fractionation (AF4). In AF4, the separation channel is formed by a solid wall on the top and a permeable wall on the bottom. After the sample injection into the channel, a focusing/relaxation step is required. During this step, the sample is focused and relaxed by two counter-directed flows (one from the channel inlet and the other from the channel outlet) at a position somewhat downstream of the sample injection point. This step allows sample components to establish a diffusion-dependent equilibrium concentration profile. However, the focusing step might, in some cases, cause a loss of sample due to adsorption onto the accumulation wall (i.e. the membrane) or aggregation of sample components. An increase in the sample concentration during the focusing step may also prove to be detrimental to the separation of samples that are highly sensitive to overloading effects. For this reason, a modified AF4 channel equipped with Frit Inlet (FI-AF4) has been designed. The main advantage of the AF4-FI channel is to bypass the focusing step. This allows the sample injection mass to be increased, still avoiding overloading effects. Application of FI-AF4 could be particularly beneficial for the analysis of large or branched polymers, which may be easily overloaded. In this study, the plate height and the sample recovery were examined and compared between FI-AF4 and a conventional AF4 channel with bio-macromolecules such as BSA, glycogen, and pullulan.

Optimization of technical methods for applying new technique to biomolecule separation: Electrical Asymmetrical Flow Field-Flow Fractionation (EAF4)

Jaeyeong Choi¹, Catalina Sandra Fuentes Zenteno¹, Mats Leeman², and Lars Nilsson¹

¹Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden

²SOLVE Research and Consultancy AB, Lund, Sweden

Electrical asymmetrical flow field-flow fractionation (EAF4) is new sub-techniques in field-flow fractionation (FFF). It is a combination of asymmetrical flow field-flow fractionation (AF4) and electrical field-flow fractionation (EFFFF) in one separation channel. The combination enables separation based on both diffusion coefficient and surface charge of samples.

However, to use this, it is necessary to optimize various parameters such as carrier liquid composition, electric field strength, and cross flow rate. Among them, the composition of the carrier liquid is very important because the pH and conductivity of the carrier liquid are changed when the electric field is applied. This phenomenon also causes a change in the baseline of the concentration detectors (UV and dRI) and can, thus, affect detection.

In this work, we studied the effects of carrier liquid composition and experimental methods for the accurate analysis of biomolecules using EAF4 coupled with multi-angle light scattering (EAF4-MALS). The results show the necessity of using a buffer system to reduce the change in the pH and conductivity of the carrier liquid when the electrical field is applied. In the case of using regular carrier liquid such as salt system such as NaNO₃, it was confirmed that applying the electric field before the start of elution can produce better results.

Study on stability and structure of protein-based drug using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AF4-MALS) and small-angle X-ray scattering (SAXS)

**Jaeyeong Choi¹, Christopher Söderberg², Vilhelm Ek²,
Marie Wahlgren¹, and Lars Nilsson¹**

¹Department of Food Technology, Engineering and Nutrition, Lund University, Sweden,

²Research Institutes of Sweden (RISE), Stockholm, Sweden,

³Swedish Orphan Biovitrum AB (SOBI), Stockholm, Sweden

Protein-based drugs have a high molecular weight compared to small organic drug compounds, and are commonly used for targeted drug delivery systems. They might have two or more binding sites depending on their design. The binding sites are divided into a site that binds to the transporter in the blood (primarily HSA) and a site that binds to the target. The study of the stability of protein-based drugs (such as deamidation and/or aggregation) and binding between the protein-based drug and transporter is essential to understand the efficiency and safety for drug delivery systems.

In this work, the deamidation and aggregation of a protein-based drug, designed to have human serum albumin (HSA) binding sites, were studied using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multi-angle light scattering (AF4-MALS). The characterization was performed with different aqueous systems and storage time. We investigated the molar binding ratio of our protein-based drug and HSA. Furthermore, using small angle X-ray scattering (SAXS), we could study the structure of the complex between the protein-based drug and HSA.

The results show that the deamidation rate varies depending on the aqueous system and storage time. The maximum binding molar ratio of our protein-based drug and HSA was found to be 1.4 to 1. And the mixtures show similar structures up to a mole ratio < 1 while changes occur at mole ratio > 1 .

벤토나이트 함유 크림제형 헤나 천연염모제의 점도변화 및 염색효과에 미치는 영향 연구

박아림, 강이영, 설순희, 연승언, 서현정 정종진*

한남대학교 화학과

*Corresponding author: jongjin9@hnu.kr

우리가 흔히 사용하는 크림제형 염색제들은 화학성분을 이용해서 만들기 때문에 민감성 두피를 가지고 있는 사람들에게 자극이 심할뿐더러 알레르기와 같은 부작용을 유발할 수 있고 모발을 상하게 할 수 있다. 따라서 두피에 자극이 없는 천연 염모제에 대한 필요성이 대두되어 왔고, Henna는 좋은 천연염모제 소재로 사용되어 왔다. 하지만 Henna 파우더를 물에 개는 과정에서 많은 시간과 노동력이 필요하고, 헤어샵 위주의 판매방식은 시간과 비용을 증가시켜, 본 소재 사용의 한계점으로 지적되어 왔다. 본 연구에서는 Polysorbate 80과 lecithin 혼합 유화제 및 cetyl alcohol 유화보조제 사용으로 확립한 크림제형 헤나 천연염모제를 기본제형으로 하여 벤토나이트를 첨가시켜 크림제형 천연염모제의 점도변화 및 유화안정성에 대한 기여도와 염색효과를 탐색하고자 하였다.

우선 천연염모제의 주 소재인 Hena 파우더는 붉은 오렌지 염료 분자가 있는 헤나 잎을 햇볕에 잘 말려 가루로 곱게 빻아 만든 염색제로, 불순물을 거르기 위해서 sieve에 거르는 단계를 거친다. 이후 Polysorbate 80과 lecithin 조합의 유화제와 각종 보조성분을 첨가한 후, cetyl alcohol의 함량을 조정하여 표준 유화안정성과 표준 염색효과를 정하였다. 이후 벤토나이트를 함량별로 첨가하여 점도변화와 원심분리를 통한 유화안정성을 측정하였다.

결론적으로 적정점도와 유화안정성에 대한 범위를 정함에 따라 적정 벤토나이트 함유량을 결정할 수 있었다. 이후 인모염색을 진행하고 점도계로 색상변화를 측정하여 대조군과 비교해본 결과, 염색시간을 절반으로 단축할 수 있었고 염색시간에 따라 색상변화도 다양하게 부여할 수 있음을 확인하였다.

**ZAIS[Zn_xAg_yIn_z]S₂]-Herceptin complex Fluorescent Nanoparticles
for target specific imaging**

**Hyun Jeong Seo¹, Soon Hee Seol¹, Yoon Hyoung Lee¹, Joung Kyu Park²,
Seung-jae Lee², Younggyu Kim³, Jongjin Jung^{1,*}**

¹Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, Korea

²Korea Research Institute of Chemical Technology (KRICT), Daejeon, Korea

³LuMiMac, Seoul, Korea

*Correspondence: jongjin9@hnu.kr

Heavy metal – free ZAIS{Zn_xAg_yIn_z}S₂ nanocrystals (NCs) have been paid attention in biomedical application due to their monochromatic emissions, tunable wavelength and low toxicity. Herein, Heavy metal -free ZAIS nanoparticle was synthesized via the sonochemical approach and utilized as a new biological probe. Before using ZAIS Nanoparticles (NPs) as bioprobes, it was necessary to modify the surface of hydrophobic particles to convert to hydrophilic particles. Such a surface treatment uses a compound such as MPA (mercaptopropionic acid).

When MPA-coated ZAIS NPs are added directly with an antibody, ZAISNPs form aggregates. To overcome the problem, we introduce a simple and easy method for the surface modification of ZAIS NPs with a stable and inert biopolymers. We used BSA(Bovine Serum Albumin) as a coating biomaterial for ZAIS-MPA. ZAIS-MPA was simply passivated with BSA, which tested for its stability. As a result, it was confirmed that BSA biopolymers coat and protect ZAIS NPs for a long period of time in a physiological aqueous solution. Then add human antibody to NCs (ZAIS-MPA-BSA) for target-specific imaging. The antibody are not passivate to the ZAIS after treatment with saturated BSA concentration. Because the BSA concentration is too high, there is no site for the antibody to attach to the nanoparticle. Therefore, it is advantageous to prepare intermediate complexes by treating the ZAIS nanoparticles with albumin at a subsaturation concentration and then adding the antibody to make the ZAIS-MPA-BSA-antibody complex. In this study, experiments using Herceptin antibodies recognizing HER-2, a membrane protein related to breast cancer cell (SK-BR3 cell), were conducted.

This study show that ZAIS NCs-Herceptin complex can be used effectively in biological fields such as biology, medicine and diagnostics

**Analysis of sonochemical parameters and various ligands effects
on $(\text{Zn}_x\text{Ag}_y\text{In}_z)\text{S}_2$ synthetic mechanism**

Seung Eon Yeon¹, Soon Hee Sul², Hyun Jung Seo¹, Joung Kyu Park², Jong Jin Jung¹

¹Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, Korea (the Republic of Korea)

²Korea Research Institute of Chemical Technology (KRICT), Daejeon, Korea (the Republic of Korea)

★Corresponding author : jongjin9@hnu.kr

Although quantum dot (QD), a semiconductor nanocrystal (NC) exhibits excellent photophysical properties such as broad absorption bands, tunable emission bands and good photostabilities, its toxic heavy metal component (cadmium, selenium or tellurium) have limited its biological applications.

Thus, diverse approaches have been reported to synthesize the high performance heavy metal-free fluorescence nanocrystals, for example, InP, InP/ZnS, CuInS₂, AgInS₂ and ZnS-AgInS₂ (ZAIS). In particular, ZAIS has excellent properties including long fluorescence lifetime and higher brightness than QDs without photoblinking. Moreover, its emission wavelength can be controlled by the composition ratio without size-dependent bandgap change, different from QD.

Here, we applied the sonochemical approach to the synthesis of $(\text{Zn}_x\text{Ag}_y\text{In}_z)\text{S}_2$ (ZAIS) NC, which is simple, rapid, and efficient to create a library of ZAIS containing the information of fluorescence colors and intensities according to ratios of each component – Zn, Ag, In. However, several sonochemical parameters such as ultrasonic power, temperature and reaction time are still not well established in detail for the high performance ZAIS synthesis. Therefore, we investigated these controlling factors to find out optimal reaction conditions of ZAIS synthesis.

In addition, we observed the effects of ligands as a solvent, stabilizer and capping reagent on the synthesis of ZAIS. Dodecylamine, Tri-Octyl Phosphine Oxide(TOPO), Tri-Octyl Phosphine(TOP), Dodecanoic acid and Oleylamine were used to analyze its role for the fluorescence intensity and wavelength shift, as well as the long-term stability. Especially, we showed that dodecylamine and oleylamine contributed to the high performance and stability of ZAIS NC. As the ligand length is longer, the emission wavelength tends to shift to the longer wavelength. We further showed how the ligand structure with / without unsaturated carbon affect the feature of ZAIS NC.

Study on size variation of liposomes under osmotic pressure using asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) - multi-angle light scattering (MALS)

김민욱¹, 김운중, 이승호, 정종진*

한남대학교 화학과

*Corresponding author: jongjin9@hnu.kr

Liposome has been used for drug delivery, cosmetics, and foods due to easy control of the size, robust similarity to biological membrane, and low toxicity. Especially, the size and stability of liposomes under osmotic stress are of great importance because of leakage of contents and vesicle disruption in drug delivery. Measurement of the size and shape of liposome has been usually performed using transmission electron microscope (TEM) and atomic force microscopy (AFM) etc. However, its cost and complicated process has limited facile characterization of liposome. Thus, we utilized asymmetrical flow field-flow fractionation (AsFIFFF) and dynamic light scattering (DLS) for the facile prediction of size, its distribution and shape variations.

In this study, we confirmed the size and shape variations of liposomes using AsFIFFF-MALS, DLS-Zeta and Cryo-SEM under osmotic pressure. The stability of liposome was enhanced as the lipid concentration is higher and the storage temperature is lower. The results of AsFIFFF showed that, the liposome turned into a rod-like shape in the hypertonic condition and a sphere-like one in the hypotonic solution. Based on these results, we assessed the correlation between the shape of liposome and efficiency of its cell membrane fusion in various osmosis conditions by encapsulating fluorescence dyes in liposomes. This study gave us the insight into both the stability of liposome and its release efficiency under osmotic pressure, in addition to optimal conditions for liposome preparation when it is used for a practical drug formulation

**SERS combined with electrochemical modulation for gallbladder diseases
identification using Au nanodendrites/screen printed electrode**

Tung Duy Vu, Eunjin Jang, Chang-Hwan Eum and Hoeil Chung*

Department of Chemistry, Hanyang University

*Corresponding author: hoeil@hanyang.ac.kr

A screen-printed electrode (SPE) incorporating three-dimensional gold nanodendrites (AuNDs) has been developed by simple electrodeposition of Au onto SPE for surface-enhanced Raman scattering (SERS) identification of gallbladder diseases. The adoption of AuNDs was to achieve high SERS efficiency since the dendrites have a hierarchical structure with high population of edges; therefore, there are many SERS hot spots within the structure. Bile juice samples acquired from patients were pre-treated with a chloroform-methanol mixture solution to simplify the composition by separation into organic, aqueous and precipitation phases. The aqueous phase was mixed with an electrolyte solution and then dropped on the working surface of tSPE. Different electrochemical potentials were applied to the bile juice sample on SPE surface and SERS spectra were collected with the changing of applied potential. Since components in bile juice samples would react differently with AuNDs surface at various electrochemical potentials, the SERS peak shapes were varied. Therefore, more component-detail information could be provided by this way. Finally, principal component analysis (PCA) was used for the discrimination of gallbladder diseases ranging from cancer, polyp and stone. The combination of electrochemical modulation and SERS would expect to enhance the discrimination accuracy potentially.

Profiling of bile acids and histamine in gastric juice by UHPLC-MS/MS combined with polarity tuning derivatization : diagnosis of gastric disease

Kean-hee Ko, Wonwoong Lee, Jinhee Um, Jongki Hong*

College of Pharmacy, Kyung Hee University,

*Corresponding author: jhong@khu.ac.kr

Some of BAs such as cholic acid (CA), deoxycholic acid (DCA), chenodeoxycholic acid (CDCA), ursodeoxycholic acid (UDCA), and lithocholic acid (LCA) in gastrointestinal tract are closely related to gastrointestinal disease due to combination with farnesoid X receptor. High levels of these BAs in gastric juice can influence excessive change from histidine to histamine, which can promote gastric tumorigenesis. Therefore, the development of analytical method for simultaneous determination of 5 bile acids (CA, DCA, CDCA, UDCA, and LCA), histamine, and histidine in gastric juice is crucial to understand etiological mechanism of gastric disease. Here, we established an ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry (UHPLC-MS/MS) method to precisely profile free BAs, histamine, and histidine in human gastric juice. For sample preparation, simple lyophilization process and two step derivatization using benzylation and amidation were applied for gastric juice (50 μ L). In this strategy, benzoyl chloride (BzCl) and 2-dimethylethylenediamine (DMED) were employed to selectively derivatize the carboxyl acid and the amine groups, respectively. Interestingly, DMED amidation considerably improved ionization efficiency of BAs in positive ionization mode. All target analytes were successfully separated on C18 column within 12 min and sensitively detected in multiple reaction monitoring (MRM) mode. To accurately quantify target analytes, isotopic dilution calibration using 7 isotopically labeled internal standards were attempted. The developed method was validated in terms of linearity, limits of detection (LODs) and quantification (LOQs), precision, accuracy, and recovery using simulated gastric fluid (SGF). Overall linear correlation coefficients (r^2) were higher than 0.99. The LODs and LOQs ranged from 0.76 – 2.05 ng/mL and 2.56 – 6.83 ng/mL, respectively. Intra- and inter-day precision and accuracy were less than 20%. Recovery of all analytes was higher than 70% at three different concentration levels. Established analytical method was applied to simultaneously profile 5 BAs, histamine, and histidine in gastric juices of patients with superficial gastritis (CSG), chronic atrophic gastritis (CAG), intestinal metaplasia (IM), and gastric cancer (GC). In conclusion, this method provides reliable quantification of 5 BAs, histamine, and histidine in human gastric juice and will be expected to diagnose gastric disease in clinical applications.

High-Sensitive Quantitative Detection of Alpha-Fetoprotein in Nanoscale Region by Superlocalization TIRS Nanoscopy

Seungah Lee, Seong Ho Kang^{*}

Department of Applied Chemistry, Kyung Hee University

^{*}Corresponding author: shkang@khu.ac.kr

Super-localization of immunoplasmonic nanoprobe on antibody-bound gold nano dot along the x , y coordinates was determined using total internal reflection scattering-based superlocalization nanoscopy. 20-nm silver nanoparticles as nanoprobe and 100-nm gold dot as substrate were selectively acquired in the evanescent field layer by wavelength-dependent plasmonic scattering using two illumination lasers (405 nm and 635 nm, respectively). Alpha-fetoprotein (AFP), a liver cancer-related model protein, was immobilized as a target molecule on the gold nanodot arrays. The centroid position of a localized immunoplasmonic nanoprobe on the gold was resolved at less than 10 nm of spatial resolution by applying 2D Gaussian fitting to its point spread function. This method showed enhanced sensitive quantification with a limit of detection of 7.04 zM. This method was demonstrated to be an effective tool for super-localizing individual protein molecules and interactions in nanoscale regions and was a reliable method for the ultra-sensitive quantitative detection of disease-related protein molecules as a nanosensor and for diagnosis at the single-molecule level.

단백질 분석을 위한 종이 분무 이온화 질량분석법 최적화

박태민, 차상원*

한국외국어대학교 화학과

*Corresponding author: swcha@hufs.ac.kr

종이 분무 이온화법(paper spray ionization, PSI)은 질량 분석(mass spectrometry, MS)에 사용되는 대기압상 추출 및 이온화방법이다. 종이 분무 이온화법은 시료 받침대 및 종이 전자 분무 팁으로 평면 삼각형 모양의 종이를 사용한다. 종이 분무 이온화방법을 사용함으로써 단백질은 이온화 될 수 있으며, 분석 물질이 쪼개지지 않고 연성 이온화되는 것은 비공유 단백질 복합체를 검출함으로써 입증되었다. 본 연구에서는 단백질의 감도 높은 분석을 위해 종이 분무 이온화법의 다양한 실험 조건들을 최적화하였다. 최적화 실험은 인슐린(insulin), 유비퀴틴(ubiquitin), 시토크롬 C(cytochrome C) 및 탄산 탈수 효소(carbonic anhydrase)를 비롯한 다양한 크기의 단백질에 대해 수행되었다. 시료를 엮는 방법, 용매 종류, 분사되는 용매에 포함된 물의 함량 및 종이 종류와 같은 실험 변수를 최적화하였다. 최적화 과정을 통해 이 연구에서 실험한 대부분의 매개 변수가 단백질 신호 강도와 전하 상태 분포(charge state distribution, CSD)에 큰 영향을 미치는 것으로 나타났다. 예를 들어, 용매에 포함된 물의 함량은 단백질 신호 강도와 반비례 관계에 있고, 아민 유도체화 미립자로 코팅 된 종이 팁은 기존 여과지(filter paper)로 만든 종이 팁보다 높은 전하 상태 분포를 검출했다. 또한, 분무 용매의 최적화된 물의 함량은 주어진 단백질의 크기와 관련 될 수 있음이 밝혀졌다.

Home built double resonance probes for non-spinning Solid-state NMR

Ji-Ho Jeong, Ji-Sun Kim and Yongae Kim*

Department of Chemistry, Hankuk University of Foreign Studies

*Corresponding author: yakim@hufs.ac.kr

Solid state NMR has seen a constant increase in popularity since the NMR had been first invented because it hurdled the biggest problem; inherent lack of resolution relative to solution state NMR; with many techniques. Solid state NMR serves many insights for organic and inorganic chemistry, where is used as a powerful tool to study local dynamics, kinetics as well as thermodynamics of a variety of systems. The assemblies of the NMR spectroscopy are magnet, computer, console and the probe. Of course, many factors of each assembly determine the performance of the NMR spectroscopy. Especially, the probe is the interface between a sample and the spectrometer. Its high solidity and flexibility are very important elements for supporting the maximum performances of the NMR spectrometer. Above all, the choice of probe suitable for various types of samples is needed for getting right results from NMR experiments. So we made the elaborate solid-state NMR probes for diverse sample analysis such as characterizing membrane proteins and defining of molecular dynamics in high tech devices. Here, we present the optimized design, construction, and efficiency of a home-built 400 MHz wide-bore (WB) & narrow bore (NB) ^1H - ^{15}N solid-state NMR probe and a home-built 800 MHz NB ^1H - ^{15}N solid-state NMR probe for lossy samples. We will also announce a home-built 400 MHz and 500 MHz NB ^{19}F - ^{13}C solid-state NMR probes for analyzing nano-materials and LCD panel respectively and 600 MHz NB ^{19}F - ^7Li solid-state NMR probes with solenoidal coil for investigating Li-ion battery. These were the first application for the in-situ analysis of LCD panel and in-situ analysis of Li ion battery pack samples. And finally we will introduce our recent commission task project "Development of sample dependent Solid-state NMR probe for the analysis of nano materials".

Headspace in-tube microextraction of volatile compounds by capillary electrophoresis-electrospray ionization-mass spectrometry

Sunkyung Jeong, Doo Soo Chung*

Seoul national university, Department of chemistry, Seoul, 08826, Korea

*Corresponding author: dschung@snu.ac.kr

Capillary electrophoresis/mass spectrometry (CE/MS) is a powerful analytical tool combining high performance separation of CE and information-rich MS. Headspace in-tube microextraction (HS-ITME) is a simplest possible scheme of liquid phase microextraction, providing sample cleanup and enrichment for volatile compounds. As a means of improving the power of CE/MS further, HS-ITME was in-line coupled with CE/MS. When HS-ITME was coupled with CE/electrospray (ESI)-MS, the capillary outlet is exposed to the open air and there was a problem of air plug formation due to evaporation of the run buffer in the capillary. By running a small amount of the sheath liquid during extraction, the evaporation problem was solved. Then without any physical modification of the CE/MS setup, dichlorophenols and trichlorophenols in an acidified aqueous solution were enriched into a basic acceptor plug at the entrance of the capillary. The chlorophenols were enriched about 20-300 times with a 20-min HS-ITME at 25°C, and successfully analyzed by CE/MS.

- [1] H. R. Lee, S. M. Cho, J. Kim, and D. S. Chung, *J. Chromatogr. A* (2014) 117
- [2] S. Terabe, *Anal. Chem.* (2004) 76
- [3] S. M. Cho, B. S. Park, W. S. Jung, S. W. Lee, Y. Jung, and D. S. Chung, *Talanta*. (2016) 729
- [4] G. Bonvin, J. Schappler and S. Rudaz, *J. Chromatogr. A* (2012) 17

In vitro evaluation for metabolic stability and CYP inhibitory activity of asperchalsine A using liquid chromatography-tandem mass spectrometry

Young Seok Ji¹, Min Sun Choi¹, Jun Sang Yu¹, Yonghui Zhang², Hye Hyun Yoo¹*

¹*Department of Pharmacy, Hanyang University, Korea,

²Department of Science and Technology, Huazhong, China

*Corresponding author: yoohh@hanyang.ac.kr

Asperchalsine A is bioactive compound isolated from *Aspergillus flavipes extract*. It exhibits various pharmacological effects such as anticancer, HCV-1 inhibition, and leukemia cell inhibition activities. In this study, as part of an in vitro pharmacokinetic study, the metabolic stability of Asperchalsine A in rat, mouse, dog, monkey and human liver microsomes was evaluated and the effects of *Aspergillus flavipes extracts* and Asperchalsine A on CYP enzyme-mediated drug metabolism were evaluated to predict the potential for drug interactions with *Aspergillus flavipes extracts* and asperchalsine A. The cocktail probe assay based on liquid chromatography-tandem mass spectrometry was conducted to measure the CYP inhibitory effect of *Aspergillus flavipes extract* and Asperchalsine A. As a result, *Aspergillus flavipes extract* and Asperchalsine A exhibited inhibitory effect on recombinant CYP1A2, 2A6, 2B6, 2D6, 2C8, 2C9, 2C19, and 3A4 isozyme and CYP 2D6 isozyme, respectively. These results will provide useful information for further in vivo pharmacokinetic and metabolism studies.

Characterization of *in vitro* metabolites of 5F-ADB: Detection of their metabolites in human liver microsomes by LC/QTOF MS

**Gi Beom Kim¹, In Sook Kim¹, Jeong Hoon Park¹, Eun Kyu Lee¹,
Moonhee Jang², Wonkyung Yang², Hye Hyun Yoo^{1,*}**

¹Institute of Pharmaceutical Science and Technology and College of Pharmacy,
Hanyang University, Ansan, Gyeonggi-do 15588, Korea

²National Forensic Service, 139 Jiyang-ro, Yangcheon-gu, Seoul 158-707, Republic of Korea

*Corresponding author: yoohh@hanyang.ac.kr

5F-ADB (methyl 2-[1-(5-fluoropentyl)-1H-indazole-3-carboxamido]-3,3-dimethylbutanoate) has emerged in recent years as a recreational substance with psychostimulant properties. In this study, the *in vitro* metabolism of 5F-ADB was investigated with human liver microsomes, and the reaction mixture was analyzed using liquid chromatography-quadrupole time-of-flight mass spectrometry (LC-Q-TOF/MS). The incubation mixture was extracted using a solid phase extraction. Chromatographic separation was achieved using a C18 column (2.1 × 150 mm, 3.5 μm, Waters, Ireland) with a mobile phase consisting of 10mM formic acid/methanol adopting gradient elution at a flow rate of 0.2 mL/min. The mass spectrometer was operated in positive electrospray ionization mode. The metabolites were structurally characterized on the basis of accurate mass analysis and MS/MS fragmentation patterns. As a result, a total of 10 metabolites was identified. The major biotransformation reactions included defluorination, hydroxylation and oxidation. These results provide helpful information establishing biomarkers in case of 5F-ADB ingestion.

Keywords : 5F-ADB; metabolite; new psychoactive substance; human liver microsomes; LC/QTOF MS

Characteristic analysis of the sweet-tasting protein brazzein expressed in transgenic tobacco plants

Seon Yeong Jo, Hyo-Eun Choi, Ji-In Lee, Kwang-Hoon Kong*

Laboratory of Biomolecular Chemistry,
Department of Chemistry, College of Natural Sciences, Chung-Ang University

*Corresponding author: khkong@cau.ac.kr

There are various expression systems that can be used for the expression of recombinant proteins. These include bacterial, yeast, insect, mammalian cell culture and transgenic animals or plants. Among them transgenic plants are presumably the most suitable host for mass-production of recombinant proteins for many reasons. First, it is possible to produce protein unlimitedly by light, soil and water. Second, continuous cultivation is possible with phyto-agar. Third, removing the source of human infection makes the transformation safe. Fourth, unlike other expression systems, there are intracellular organelles that allow post-translational modification. It can also be stored in seed for a long time. For these reasons, we used the plant expression system for the expression of brazzein. Among the various plants for the expression of recombinant proteins, tobacco plant was selected for mass production of brazzein because of its fast growth and non cross-contamination.

In order to compare the expression levels of recombinant brazzein, four expression vectors were designed and constructed to transform the wild type tobacco using *Agrobacterium*. To identify the expression level of transformed tobacco, 46 transgenic tobacco plants were obtained through ELISA experiments. From the results, five plants with the highest expression level of brazzein were selected for each transformant line, then its gene and mRNA expression were confirmed by PCR, semi-quantitative RT-PCR and RT-qPCR. Tobacco plants containing the gene of pBI-BZ2 without the KDEL sequence were all higher in mRNA expression levels and brazzein expression levels than pBI-BZ1 tobacco plant with the KDEL sequence. In addition, the tobacco plants containing the gene of pBI-BZ3 with the signal sequence showed lower mRNA expression level than the pBI-BZ4 tobacco plant, but the expression level of brazzein was higher. While the pBI-BZ4 transformants transfer brazzein to the cytoplasm, pBI-BZ3 transformants transfer brazzein to the endoplasmic reticulum lumen and therefore reduce the probability of protein degradation. This suggests that higher expression level of pBI-BZ3 transformants was the result of probability reduction of protein degradation.

**Analysis and optimization of expression conditions for mass production
of a sweet protein in *Kluyveromyces lactis***

Se-Woong Park, Jae-Seok Kang, Sung-Jun Lee, Kwang-Hoon Kong*

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

*Corresponding author: khkong@cau.ac.kr

In order to produce a sweet protein in large quantities, we produced recombinant protein through secretory expression in *Kluyveromyces lactis*, which is GRAS, and established simple purification steps, an important factor to consider in mass production in the food industry. It is generally considered difficult, the protein expression using these complex medium, to be scaled up to industrial scale due to high costs of complex medium and complex steps of purification regarding the expression of a variety of other proteins by unknown nutrients.

We optimized carbon source, nitrogen source, inducer concentration, expression pH, temperature, and induced time of the chemically defined minimal medium. As carbon source we used glucose, glycerol, and lactose. For nitrogen source, ammonium sulfate, ammonium nitrate, and ammonium chloride.

By using the optimized conditions, a sweet protein of high purity was secreted. In order to obtain the protein samples of high purity to be used on a commercial scale, simple purification processes and further work to scale up the culture process needs to be conducted. We found the pH, the temperature, and the elemental composition of carbon: nitrogen: phosphorous: sulfur of the optimal conditions for cell growth. The conditions for the optimal expression of a sweet protein, the pH, the temperature, the glucose/galactose ratio, and the C/N ratio were also identified. All expression levels were confirmed by SDS-PAGE and densitometry analysis. The amount of the protein expressed in the chemically defined medium was slightly lower but the purity was significantly higher, which makes it clearly superior to the culture medium.

From these results, the chemically defined minimal medium to achieve highest purity and the scale up were fixed.

감미단백질 브라제인의 루프 부분에서 파생된 펩타이드의 기능 분석

김한슬, 조현주, 김수연, 공광훈*

중앙대학교 화학과, 생명분자화학연구실
vCorresponding author: khkong@cau.ac.kr

소금(NaCl)은 음식물의 조리 및 가공에 있어서, 음식물예의 맛 부여, 음식물의 보존성 향상 등의 중요한 역할을 한다. 하지만, 나트륨의 과다섭취는 뇌졸중, 심장질환 등 성인병의 주원인이며, 세계 암 연구기금 및 미국암연구소 보고서에 소금 및 짠 음식 섭취는 위암 발생의 2등급 위험요인으로 규정하고 있는 만큼 소금을 대체할 수 있는 조미료의 개발은 필수적이다.

감미단백질 브라제인의 단맛을 나타내는 주요 부분으로 예측되는 유연성이 높은 loop영역을 중심으로 다양한 펩타이드를 디자인하였다. 디자인한 10개의 펩타이드에 대해 훈련된 14명의 패널을 대상으로 맛 시험을 실시한 결과, 10개의 펩타이드 중 3개의 펩타이드에서 짠맛을 나타내었다. 이들 펩타이드들의 구조를 확인하기 위해 PEP-FOLD 프로그램을 이용하였으며 이를 통해 펩타이드들의 안정한 구조를 예측하였다.

짠맛을 나타내었던 3개의 펩타이드가 어떠한 메커니즘으로 짠맛을 나타내는 지를 분석하기 위해 분자모델링을 실시하였다. 결합연구에 사용되고 있는 Autodock vina 프로그램을 이용하여 최근 연구 결과에서 짠맛을 유도한다고 시사된 쓴맛수용체 TRPV1(Transient receptor potential cation channel)과 3개의 짠맛 펩타이드와의 상호작용을 연구하였다. 그 결과, 3개의 펩타이드가 쓴맛수용체 TRPV1의 TM1-4의 기저부에 결합함으로써 짠맛이 유도되었다고 예상하였다.

이러한 짠맛을 가진 새로운 짠맛 펩타이드의 발견은 성인병 등 여러 질병의 주원인인 소금의 대체물으로써 향후 전망이 기대된다.

Synthesis of new calix[4]arene derived chiral stationary phase for the resolution of chiral amino acid and amino alcohol

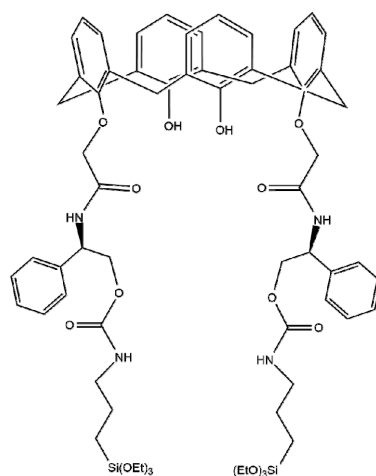
김규리¹, 허규성¹, 유정재¹, 류재정^{2,*}

¹경북대학교 화학과, ^{2,*}경북대학교 화학교육과

*Corresponding author: jjryoo@knu.ac.kr

Various amino alcohol 3,5-dinitrobenzoyl(DNB) C₃-symmetric derived chiral stationary phase(CSPs) were reported to separate chiral amino acid and amino alcohol.¹⁻³

In this study, we prepared calix[4]arene derived new CSP(CSP 1) by using ethyl bromoacetate and (R)-phenylglycinol for the resolution of chiral amino acid and amino alcohol.



CSP 1

1. J.J. Ryoo et al. *Chirality* 2002, 14, 329.
2. J.J. Ryoo et al. *J Chromatogr. A* 2003, 987, 429.
3. J.J. Ryoo et al. *Chirality* 2016, 28, 186.

The influence of Ultrasonication on Chiral Separation by High Performance Liquid Chromatography(HPLC)

Jae Hwan Lee¹, Jae Jeong Ryu^{2,*}

¹Department of Science Education, Graduate School, Kyung Pook National University

^{2,*}Science Education, Kyung Pook National University

*Corresponding author: jjryoo@knu.ac.kr

A technique for resolving enantiomers on three different types of chiral columns under ultrasonication was investigated. From the comparison of the chromatographic results under sonic condition with those under non-sonic condition, we found that the ultrasound decreased the elution time in chiral chromatography at all temperatures(25°C and 50°C) and improved the enantioselectivity at high temperature. For the first time, Gradient method of ultrasonic irradiation was introduced and the effect of watt density(watt per liter) ranging from 0 to 50 on chiral separation were also examined. In this study, we confirmed that the ultrasound served as an effective external field in chromatography.

디스크 확산법을 이용한 약용식물(양제근, 어성초) 추출물의 *Staphylococcus aureus*,
Candida albicans 에 대한 항균 능력 측정

신태섭, 이학수, 조남준*

한국기술교육대학교 에너지신소재화학공학과

*Corresponding author: njuncho@koreatech.ac.kr

최근 생활용품에 사용되는 화학 항균제로 인해 생활용품 사용에 대한 인체 유해성 논란이 커지고 있다. 생활용품에 사회적 이슈로 인해 소비자들의 소비패턴 변화에 따라 시장 트렌드 또한 변화되어 가고 있다. 한편 2008년부터 생활용품 첨가물질에 대한 '전성분 표시제'를 시행하고 있었으나, 위와 같은 사회적 문제가 이슈 됨에 따라 2016년 '위해우려제품 지정 및 안전·표시기준'을 시행하여 법적 규제를 강화하고 있다. 이에 산업계에서는 논란이 되고 있는 화학 항균제를 대체하기 위해 천연식물에서 추출한 천연 항균제 및 이를 활용한 친환경 제품 개발에 많은 관심을 보이고 있다.

본 연구에서는 화학 항균제를 대체하기 위한 천연 항균 성분의 항균능력을 평가하고자 하였다. 항균 성분을 다량 포함하는 것으로 알려진 양제근, 어성초를 다양한 조건에서 추출, 추출물을 디스크 확산법을 이용하여 *Staphylococcus aureus*, *Candida albicans*에 대한 항균능력을 측정하였다.

실험 결과, 어성초는 *Staphylococcus aureus*, *Candida albicans*에 대해 항균 능력을 보이는 것으로 나타났으나, 양제근의 경우, *Staphylococcus aureus*에만 항균 능력을 보이는 것으로 나타났다.

PF-049 [일반]

***In-vivo* isotopic glucose labeling of glycan in fungi using metabolic isotope labeling of polysaccharides with isotopic glucose for quantitative mass spectrometry**

Soo-Hyun Choi, Ji-Yeon Kim, and Jae-Min Lim[★]

Changwon National University, Changwon 51140, South Korea

[★]Corresponding author: jmlim@changwon.ac.kr

N-glycosylation is one of the most important post-translational modifications occurring in living animals and fungi. Animal N-linked glycans and fungi N-linked glycans differ in structure, amount, and role. In the case of animals, N-linked glycans have heterogeneous structures and have specific functions involved in cell-cell recognition, cell division, cell development, cell transport, cell differentiation, immune response and other many important biological phenomena depending on their structures. On the other hand, in the case of fungi, N-linked glycan mediated biological functions remain obscure. In this work, the structure of the fungal N-linked glycan was confirmed by mass spectrometry. In addition, the identified glycans were labeled using the MILPIG (Metabolic Isotope Labeling of Polysaccharides with Isotopic Glucose) method. The MILPIG method is *in-vivo* labeling method that allows fungi to produce heavy-labeled glycans by using carbon source as heavy isotope glucose ($^{13}\text{C}_1$ -glucose).

DLLME-GC/MS를 이용한 소변 중 파라벤 4종과 20종의 페놀 동시분석법

이정이¹, 신호상^{2,*}

¹공주대학교 환경과학과, ^{2,*}공주대학교 환경교육과

*Corresponding author: hshin@kongju.ac.kr

파라벤은 향균 방부제로 널리 사용되고, 비스페놀 A, 트리클로산 및 페닐페놀은 소독제, 선스크린 및 중합체에 사용되는데, 이들은 내분비계 장애물질로 의심되는 물질들이다. 따라서 이러한 물질들에 대한 노출량을 알아보기 위해 추출 용매 dichloromethane 200uL와 분산 용매 methanol 1.0mL를 사용하여 소변에서 4종의 파라벤과 20종의 페놀 및 BTEX의 바이오마커 물질을 동시분석하는 간단하고 효율적인 DLLME-GC/MS 분석법을 개발하였다.

용매의 종류 및 부피 외에도, 시료의 부피, 가수분해 온도, pH과 같은 추출 효율에 영향을 미치는 몇 가지 중요한 매개 변수를 조사하였다. 최적 조건은 시료 부피 5mL, 가수분해 온도 37°C 및 pH 5로 조사되었다. 이러한 조건 하에서, 직선성 R²의 값은 0.9855-0.9999였고, 그 범위는 0.5-100 ug/L이내였다. 개발된 방법의 검출 한계(LOD)는 0.09-1.0 ug/L 이었고, 정확도는 89.1-120%, 정밀도는 4.9-17.1% 이었다. 이 분석법은 실제 소변 시료에서도 성공적으로 적용되었다.

PF-051 [일반]

**Ionic liquid matrix in matrix-assisted laser desorption/ionization
mass spectrometry of iso-maltooligosaccharide**

한솔, 김다희, 김여선, 박소영, 원유광, 이다빈, 최혜민, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Recently, ionic liquid matrix (ILM) has been introduced as a potential alternative to the conventional matrices such as 2,5-dihydroxybenzoic acid (DHB), α -cyano-4-hydroxycinnamic acid (CHCA) and sinapic acid in matrix-assisted laser desorption/ionisation mass spectrometry (MALDI-MS). In general, ILM was made by mixing conventional organic acid matrices and base molecules. By promoting proton transfer between the analytes and the matrix, the samples with ILM are ionized and detected in the MALDI-MS effectively.

In this study, we are trying to find out the dependence of the loading amount on the intensity using ILM in MALDI-MS analysis of iso-maltooligosaccharide. ILM was prepared by mixing DHB and N-Ethylaniline in a 1:1 molar ratio to analyze iso-maltooligosaccharide. NaCl was added as a cationization agent. The peaks of iso-maltooligosaccharide were observed at m/z 365, m/z 527, m/z 689, m/z 851, m/z 1013, m/z 1175, m/z 1337, and m/z 1499. The effects of NaCl amounts on the MALDI mass spectra of iso-maltooligosaccharides was investigated. Detailed experimental results will be presented during the session.

**Effect of graphite matrix concentration on sucrose
analysis using MALDI-MS**

박소영, 이다빈, 김여선, 원유광, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

In this study, sucrose is analyzed using graphite as a matrix in matrix-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry (MALDI-MS). Graphite is known to have higher energy transfer efficiency than 2,5-dihydroxybenzoic acid or α -cyano-4-hydroxycinnamic acid in MALDI-MS. The concentration of the graphite matrix was diluted 10 times, 100 times, 1000 times, and 10000 times, starting at 10 mg/mL. The cationization agent stock solution was 100 mM NaCl solution, and the stock solution was 100 mM sucrose solution. Graphite matrix, 100 mM sucrose stock solution, and 100 mM cation solution were sequentially loaded and dried on a MALDI plate. An adduct form of sucrose with a sodium ion at m/z 365 and a fragment peak derived from sucrose at m/z 203 were observed using a graphite matrix in MALDI MS. Generally, the ratio of the intensity for the peak at m/z 365 to the intensity for the peak at m/z 203 were observed to increase as the concentration of graphite matrix decreases.

Effects of drying process and matrix on qualitative analysis of protein using MALDI-MS

최혜민, 이다빈, 박소영, 원유광, 한솔, 김여선, 김다희, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Freeze vacuum drying (FVD) is known to result in the homogeneous distribution of analytes because the analyte-matrix mixtures are quickly frozen and then dried under vacuum. Therefore, analyzing the random sample spots prepared using FVD yields similar results. On the other hands, conventional sample drying processes such as air drying (AD) and vacuum drying (VD) are less reproducible because these processes produce heterogeneous distribution of sample. In this experiment, spot images and mass spectra of several common proteins such as cytochrome *c*, myoglobin and bovine serum albumin, immunoglobulin G are compared using several different matrices (2,5-dihydroxybenzoic acid, α -cyano-hydroxycinnamic acid, sinapic acid, and 2-nitrophenol) prepared using either AD, VD or FVD. When analyzing the sweets spot of AD, VD or FVD, AD and VD provide better efficient protein qualification. The effect of acid additives such as phosphoric acid, nitric acid, sulfuric acid, hydrochloric acid, and trifluoroacetic acid was also investigated using the most effective matrix (2-nitrophenol) by comparing the MALDI mass spectra, where HCl was found to be generally the most effective acid additive.

Effects of temperature and acetonitrile amount on protein tryptic digestion with microwave irradiation

김여선, 이다빈, 박소영, 원유광, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Trypsin, one of the most common proteases, cleaves exclusively at C-terminus of amino acid Lysine and Arginine. Organic solvents are often added for the trypsin digestion to modify native proteins to denatured proteins, and this tendency makes it effective to digest proteins. In this study, we investigated the digestion efficiency of trypsin for the digestion of bovine serum albumin and horse skeletal muscle myoglobin. Tryptic digestion was performed with microwave irradiation under different digestion times (10, 20, 30, 40, and 50 min) and different incubation temperatures (25 °C, 37 °C, and 55 °C). In addition, conventional digestion was conducted using gentle mixing at 37 °C for 16 h. Digested peptides were analyzed using matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry. To find out the effects of temperature and acetonitrile amount on tryptic digestion under different conditions such as ACN amount, incubation temperatures, and digestion times, the sequence coverage (SC) value and missed cleavage (MC) ratio were compared. Similar SC values were obtained under most conditions except when the samples were digested with 20% ACN at 55 °C, which provided the lowest SC values. MC ratio of both proteins get larger as the ACN amount get bigger under the same temperature. However, as the temperature increases under the 0% ACN, the MC ratio of MYG becomes larger while the MC ratio of BSA becomes smaller.

Effects of microwave irradiation time on Microwave-Assisted Weak Acid Protein Hydrolysis

김여선, 이다빈, 박소영, 원유광, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Weak acid hydrolysis of proteins (WAHP) is a process of using weak acid solutions at high temperatures to hydrolyze proteins. Since the WAHP occurs slowly at room temperature, a high temperature such as 100 °C. While strongly acidic solutions induce complete hydrolysis of the protein, WAHP mainly cleaves the aspartyl moiety at the C-terminus. In this study, a microwave irradiation was used to performed the WAHP of bovine serum albumin (BSA) WAHP for different times (0-60 min) to investigate the relationship between the microwave irradiation time and the effect of WAHP, where BSA in 50 mM ammonium bicarbonate was hydrolyzed at 100 W in a microwave oven using 2% formic acid. Using 1-D gel electrophoresis, we were able to observe the efficiency of WAHP for different hydrolysis times.

Differentiation of disaccharide isomers by MALDI-TOF MS analysis

이다빈, 김여선, 한솔, 최혜민, 박소영, 원유광, 김다희, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Disaccharides are compounds formed by bonding two monosaccharides by a glycosidic bond. Depending on the type of glycosidic linkage and monosaccharide, the property of the disaccharide changes. The analysis of disaccharide isomers using mass spectrometry is very difficult because they have the same molecular weight. Usually tandem mass spectrometry and ion mobility spectrometry are used to differentiate the isomers.

In this work, the disaccharide isomers (gentiobiose, isomaltose, meliobiose, lactose, maltose, cellobiose and sucrose) are differentiated by matrix assisted laser desorption/ionization-time of flight mass spectrometry (MALDI-TOF MS). When graphite oxide is used as MALDI matrix, the disaccharide is detected with a monosaccharide

peak that is produced by cleavage of the glycosidic bond. We think that there is a specific cleavage pattern for each isomer, the specific cleavage patterns of the isomers may be used to differentiate the isomers. As a result, we have found that there are specific cleavage patterns, especially in lactose and sucrose.

A Study on Synthesis of Molecularly Imprinted Fiber for Di-2-ethylhexyl phthalate Extraction

Soyoung Ahn, Sunyoung Bae*

Department of Chemistry, Seoul Woman's University

*Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

Molecularly imprinted polymers (MIPs) can be described as tailored materials with high selectivity for target molecules. Since it has synthetic recognition binding and detection sites. Among various strategies have been developed to prepare the MIP, the most widely used method is bulk polymerization. However, the monolith obtained from polymerization must be ground and sieved, which is a rather time consuming and the irregular particles have a heterogeneous binding site distribution. It might have poor site accessibility and exhibit a low separation efficiency to the target molecule. In this study, we develop a novel molecular imprinted(MI) fiber using molecular imprinting method. Monoliths produced by in-situ polymerization directly in the column have advantages over other methods due to rapid mass transfer, easy preparation, and low consumption of materials. Di-2-ethylhexyl phthalate(DEHP), a form of endocrine disrupting chemicals, used as a template was dissolved in porogen solvent. And a monomer, a cross-linker, and an initiator were sequentially added to previous solution. Then it was injected into the capillary column that was silylated and placed in the oven under thermal condition. After synthesis, the template inside of the polymer was removed using removal solution to generate MI fiber. Non molecular imprinted(NI) fiber was prepared at the same manner without template. The physicochemical properties of the fiber were characterized by swelling, shrinking, surface morphology, melting point, and sorption tests.

Keywords: Molecularly imprinted polymer, Di-2-ethylhexyl phthalate, Molecular Imprinted fiber

Analysis of volatile compounds in Maehwa tea by Gas Chromatography

Sehyun Kim, Sunyoung Bae*

Department of Chemistry, Seoul Women's University

*Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

Maehwa, a deciduous arboreous tree of rosaceae, has been used as medicine for diarrhea and uncinariasis, and its delicate scent gives stability. Volatile compounds from Maehwa essential oil have been characterized such as benzyl alcohol, benzyl aldehyde, benzyl acetate and eugenol etc. In this study, head space-solid phase microextraction (HS-SPME) was applied to analyze volatile organic compounds of Maehwa tea infused in H₂O. At the optimum condition, volatile organic compounds of Maehwa tea were characterized by Gas Chromatography Mass Spectrometer (GC/MS). Extraction conditions of SPME were optimized by Gas Chromatography-Flame Ionization Detector (GC-FID) including saturation time, extraction temperature, and desorption time.

Keywords: Maehwa tea, Volatile compounds, Head space-solid phase microextraction, Gas Chromatography Mass Spectrometer

Optimization of 5-hydroxymethyl-2-furaldehyde Adsorption Conditions Using Molecularly Imprinted Polymer

Hyeyoung Jung, Sunyoung Bae*

Department of Chemistry, Seoul Women's University

*Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

Bio-liquid was generated by hydrothermal carbonization (HTC) which is a thermal treatment using moisture containing biomass at relatively low temperature. In this byproduct, 5-hydroxymethyl-2-furaldehyde (5-HMF) is contained, a value-added product that is used as an intermediate in various fields. The general method to extract 5-HMF from aqueous phase is liquid-liquid extraction (LLE). However, LLE has disadvantages requiring solvent usage, intensive labor. Furthermore, target compound can not be selectively extracted. To overcome these problems the molecularly imprinted polymer (MIP) was prepared as an absorbent which adsorbs 5-HMF selectively. In this study, adsorption conditions of 5-HMF on MIP prepared by bulk polymerization were optimized. Adsorption isotherm test was conducted by mixing various concentrations of 5-HMF were mixed with MIP (90:1 ratio, v/v) at 25°C until equilibrium was reached. After centrifugation, 5-HMF concentration in the separant of the mixture was analyzed using Gas Chromatography-Flame Ionization Detector (GC-FID) with internal standard. To compare the adsorption amount contributed to binding cavity of MIP, non-molecularly imprinted polymer (NIP) was synthesized adsorption isotherm test was conducted following the same procedure as MIP. The maximum adsorption capacity was computed and the selectivity test was also performed.

Keyword: Bio-liquid, 5-hydroxymethyl-2-furaldehyde, Molecularly imprinted polymer, Sorption isotherm

A Study on Selective Recognition of Zn on Ion Imprinted Polymer (ZIIP)

Yelin Lee, Soyoung Ahn, Sunyoung Bae*

Department of Chemistry, Seoul Women's University

*Corresponding author: sbae@swu.ac.kr

In order to adsorb Zn ions selectively, we have synthesized and characterized ZIIP. ZIIP was synthesized by bulk polymerization of 4-vinylpyridine as a monomer and ethylene glycol dimethacrylate as a crosslinker in the presence of benzoyl peroxide as a initiator. Non-Zn Ion Imprinted Polymer (NZIIP) was prepared in the same condition without Zn ion. The Zn ions were removed from ZIIP by leaching with methanol:acetic acid (9:1, v/v) solution to make cavities which can bind Zn ion selectively. Surface morphology and particle size of ZIIP and NZIIP were confirmed by Scanning Electron Microscope (SEM). Presence of Zn ion on ZIIP and NZIIP were investigated by Fourier Transform Infrared spectroscopy (FT-IR) and X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS). A colorimetric detection method was used to confirm the adsorption of Zn ion by difference between the initial and the supernatant of the solution. Diphenylthiocarbazone (dithizone) was used as an color developing agent. A high correlation coefficient (R^2) value was obtained between the wavelength shift of dithizone-Zn complex and the Zn ion concentration. Adsorption isotherm studies indicated that Sigmoidal Langmuir isotherm equation was fitted well. The maximum Zn sorption capacity on ZIIP was 92.0 mmol/g and Langmuir constant related to affinity of ZIIP was 14.9 dm³/mmol which is 3 times higher than that of NZIIP. In conclusion, one-pot synthesis of ZIIP was successfully synthesized to extract Zn ion from the solution containing Zn ions. It can be utilized to remove specific ions from the solution. For the future work, Zn detection by changing color of ZIIP will be investigated.

Keywords: Zn ion imprinted polymer, Bulk polymerization, Sigmoidal langmuir, Dithizone-Zn complex

Direct Competitive Enzyme-Linked Immunosorbent Assay for Determination of Symmetric Dimethylarginine

Jimin Oh, Mihyun Kim, Insook Rhee[★]

Department of chemistry, Seoul Women's University

[★]Corresponding author: irpaeng@swu.ac.kr

Symmetric Dimethylarginine (SDMA) is the structural isomer of the endogenous nitric oxide synthase (NOS) inhibitor asymmetric dimethylarginine (ADMA). SDMA, equal to serum creatinine, can serve as a marker of renal function, but SDMA seems to be more than a simple indicator of renal function. SDMA has been shown to increase earlier than creatinine, and unlike creatinine, SDMA is not impacted by physical factors. Therefore, determination of SDMA can be used as a bio-marker of early stages of chronic kidney disease.

Enzyme-linked immunosorbent assay (ELISA) is an immunological technique with several advantages as simplicity, sensitivity, specificity. This method makes the effective determination of target possible in a complex matrix without lengthy extraction steps.

To detect SDMA quantitatively, horseradish peroxidase (HRP) was coupled to free SDMA. In this synthesis, we used the aldehyde groups of HRP via schiff base bonding and then, the conjugate was reduced by reducing reagent. The initial ratio of SDMA-HRP conjugate is 1:100 (HRP:SDMA), and the conjugate is used as a tracer to detect SDMA by competing with free analyte.

From this study, we expect that this developed method can apply to the ELISA test kit with good sensitivity for determination of SDMA in workplace.

Normalization of $\delta^{18}\text{O}$ value of drinking water against VSMOW2-SLAP2 scale with uncertainty assessment

Taewan Kim¹, Jeongsoon Lee^{2,*}, and Jeong Sik Lim^{2,*}

¹Science of Measurement, University of Science and Technology (UST),

²Center for gas analysis, Korea Research Institute of Standards and Science (KRISS)

*Corresponding authors: Jeongsoon Lee(leejs@kriss.re.kr) and Jeong Sik Lim(lim.jeongsik@kriss.re.kr)

Despite the stable isotopes have been used in various research fields there were no reports detailed information of calibration methods and uncertainty assessment about assigned value. We measured oxygen stable isotope ratio of drinking water using Gas Chromatography Isotope Ratio Mass Spectrometry (GC/IRMS). The $\delta^{18}\text{O}$ value of the drinking waters was normalized based on VSMOW2, SLAP2, and GSIP scale by carbonate equilibria for 24 hours. The isotope ratio responses of dummy sample was drifted as much as 0.145‰ due to a significant decrease of injected sample amount as injection proceed. The autodilution technique improved measurement precision of the $\delta^{18}\text{O}$ of dummy sample from 0.0464‰ to 0.0250‰. The autodilution of injection concentration of equilibrated CO_2 also helped to improve measurement precision of isotope ratio response. Additionally, measurement reliability was assessed using various statistical approaches. One-way ANOVA analysis was performed to confirm the significant difference of repeated measurement results using statistical software. Normalization uncertainties were then assessed by various normalization schemes including 2-pointed and 3-pointed standard values of VSMOW2, SLAP2, and GSIP standards. Equivalent results among those were turned out with similar extents of normalization uncertainties. In case of 2-point normalization, measurement precisions regarding standards and normalization sample possessed most of the uncertainty contribution. Nevertheless, in 3-point normalization, an uncertainty of certified $\delta^{18}\text{O}$ of GSIP, 0.09‰, reported three times worse than both certified $\delta^{18}\text{O}$ of VSMOW2 and SLAP2, 0.02‰, contributed one third to the normalization uncertainty. This results suggest that uncertainties regarding normalization scheme may be improved.

Non-Voigt Line Shape 함수 프로그래밍 개발에 대한 유효성 평가 및 1.39 μm 영역 수증기의 분광학적 특성 평가

김예라^{1,2}, 이정순^{1,2}, 박미연^{1,2}, 김상우¹, 김태완^{1,2}, 김가해¹, 임정식^{2,*}

¹한국표준과학연구원 가스분석센터, ²과학기술연합대학원대학교(UST)

*Corresponding author: lim.jeongsik@kriss.re.kr

분광학 방법을 이용한 가스 정밀 분석 분야는 분자의 흡수라인(absorption lines shape)을 얼마나 정확히 모델링 하는지에 따라 좌우된다. 흡수 스펙트럼에 대한 정확한 모델 함수를 이용하여 분자의 oscillator strength와 broadening coefficient, instrument line shape에 대한 신뢰성 높은 정보 등을 도출할 수 있다.

다양한 측정 장비의 개발로 인해, 장비 분해능이 지속적으로 발전하고 있으며, 이에 따라 분석할 수 있는 범위도 확대되고 있다. 그러나, 전통적으로 사용하였던 모델링함수인 voigt function은 여러 현상들을 재현하는데 한계를 가지고 있으며, 절대성에 대한 의문이 제기되고 있다. 이러한 한계를 극복하기 위해, HITRAN(High-Resolution Transmission Molecular Absorption Database), TCOON(Total Carbon Column Observing Network), NDACC(Network for the Detection of Atmospheric Composition Change)과 같은 다양한 분광학 및 원격 분광학 커뮤니티에서는 reference model function에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다.

non-Voigt 현상인 분자 속도에 따른 퍼짐 정도의 변화, 충돌 과정에서의 속도 변화 그리고 진동 전이 상태의 에너지 상태변화 등 퍼짐등을 모사하기 위해, 최근 Hartmann-Tran 이 개발한 pCqSDHCP(Partially Correlated Quadratic Speed Dependent Hard Collision Profile)이 화두로 떠오르고 있다. pCqSDHCP 함수는 이러한 분자들의 현상을 모사함과 동시에 수식이 간단하며, 컴퓨팅 시간에 대한 효율을 줄일 수 있다. 또한 하위의 다양한 함수 즉, Voigt, Rautian, Speed-dependent Voigt, Speed-dependent Rautian 등으로 유도가 가능하며, 다양한 함수로의 근성이 용이하다는 장점이 있다.

본 연구에서는 흡수라인 분석의 정확성을 높이기 위해, pCqSDHCP 모델링 함수 이용을 위한, 흡수라인 피팅 프로그래밍을 개발하였다. 또한 TDLAS(Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy)기법을 이용한, 1.39 μm 영역의 water vapor absorption spectrum을 측정하여, 이를 통해, pCqSDHCP 모델링 함수의 유효성 평가를 진행함과 동시에 water vapor의 oscillator strength 및 broadening coefficient와 같은 분자의 특성평가를 진행하였다.

- [1] 김예라, "1.39 μm 영역의 수증기 다이오드 레이저 흡수분광학을 이용한 Non-Voigt Line Shape 함수의 유효성 평가", '과학기술연합대학원대학교(UST) 석사 학위 논문, 2018.
- [2] S. Casadio, A. Dehn. Journal of Annals of Geophysics 56 (2013) ag-6535.
- [2] N.H. Ngo, D. Lisak. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 129 (2013) 89–100.
- [3] H. Tran, N.H. Ngo. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 129 (2013) 199–203.
- [4] R.V.Kochanov, I.E.Gordon. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 177 (2016) 15–30.

GC/MS에 의한 PNG 중 고탄화수소 분석방법 개선 연구

윤은규¹, 김용두², 배현길², 우진춘², 이강진^{1*}

¹한국가스공사 가스연구원 기술지원센터, ²한국표준과학연구원 삶의질표준본부

*Corresponding author: kjlee@kogas.or.kr

천연가스는 생산지에서 소비지까지의 수송방법에 따라 LNG(Liquified Natural Gas)와 PNG(Pipeline Natural Gas)로 구분되며, 우리나라의 경우 지리적 특수성으로 인해 가스전에서 생산된 천연가스를 액화하여 해상 수송하는 방식의 LNG 의존도가 거의 100 %에 달한다. 그러나 최근 대북 긴장완화에 따른 남·북·러시아 PNG 사업 추진이 재논의 되고 있고 러시아 PNG의 국내 도입이 가시화됨에 따라 이에 대비한 PNG 품질 측정 기술력 확보는 매우 중요한 사항이다.

에너지 정책 측면에서 PNG의 도입은 높은 경제성 및 수급 안정성의 등의 강점을 지니고 있으나, 액화 공정에서 고순도로 정제되는 LNG에 비하여 PNG는 다양한 미량 성분 및 불순물을 함유하고 있어 가스품질 관리에 많은 주의가 필요하다. 특히 응축물 형성으로 가스 설비의 안전 문제를 야기시킬 수 있는 고탄화수소 성분에 대해서는 더욱 정확한 분석 및 정밀 관리가 요구된다.

현재 한국가스공사에서 천연가스 고탄화수소 분석용으로 운영 중인 장비는 GC-TCD 및 FID로 일반 실험실 기기와 현장 설치용 온라인 가스 분석기를 사용하고 있다. PNG의 경우에는 다양한 고탄화수소 이성질체가 존재하고 미량의 미지성분 및 불순물 간섭에 의해 성분 분리 식별이 쉽지 않은데, 표준가스 또한 대표 이성질체에 대해서만 개발이 완료된 상태이기 때문에 일반 가스크로마토그래프(GC) 만으로는 PNG 중 고탄화수소 조성에 대한 정확한 분석이 불가능하다.

따라서 본 연구에서는 가스크로마토그래프 질량분석기(GC-MS)에 의한 정성·정량분석기법으로 C6 ~ C10까지의 천연가스 고탄화수소류에 대한 상세 분석을 수행하고 분석방법을 확립하였다. 분석에 사용된 시료 가스는 현재 동해가스전에서 PNG 형태로 국내 배관망에 일부 도입되고 있는 동해-1 가스를 직접 샘플링하여 사용하였으며, 한국표준과학연구원에서 개발된 고탄화수소류(C6 ~ C10) 가스 인증표준물질(CRM)을 표준가스로 이용하여 농도를 정량하였다. 분석 결과 시료가스 중 고탄화수소의 농도는 Hexane 780 $\mu\text{mol/mol}$, Heptane 280 $\mu\text{mol/mol}$, Octane 28 $\mu\text{mol/mol}$, Nonane 2 $\mu\text{mol/mol}$, 그리고 Decane 0.2 $\mu\text{mol/mol}$ 수준으로 나타났다.

GC-MS에 의해 확립된 고탄화수소 분석방법은 기존 실험실용 GC-FID에 직접 적용하여 응용함으로써 일반 GC에서도 검증된 방법에 따른 정확한 고탄화수소 함량 분석이 가능하도록 분석법을 개선할 수 있었으며, 또한 공급배관에 직접 설치하여 운영되는 온라인 가스분석기에 대해서는 분석결과 비교를 통한 성능 검증에 활용함으로써 정확하고 신뢰성 있는 고탄화수소 분석기 운영·관리에 크게 기여할 것으로 기대된다.

기능성 소재 합성을 통한 난연섬유 개발 및 분석

이진경¹

¹한국화학융합시험연구원

본 연구는 기능성 소재 합성을 통하여 자동차, 철도 차량, 해양수송 선박, 항공 수송 분야에 사용되는 모든 종류의 직물 테이프와 인테리어 내장재 섬유 소재를 포함하고 있다. 직물 소재 테이프에 적용되고 있는 아세테이트 섬유의 경우 인체 친화적인 소재로서 담배필터로 사용되고 있으며 가격이 저렴하고 절연성이 우수하여 자동차, 전자제품 섬유직물소재의 테이프에 일부 적용되고 있지만, 일반섬유와 같이 화재에 취약하여 난연성이 없는 단점이 있다. 난연제는 플라스틱의 내연소성을 개량하기 위하여 첨가되는 첨가제로, 때에 따라서 플라스틱 성형품의 표면에 도포될 수도 있다. 난연제는 가연성 물질에 첨가되어 점화에 대한 저항성을 향상시키고 연소를 억제하거나 지연시킬 수 있고, 화재가 시작되는 것을 방지하거나 또는 크게 지연시키는 것과 같이 두 가지 방식으로 작용된다. 본 개발 대상 기술은 내열성이 요구되는 소재에 적용될 수 있으며, 고성능 친환경적인 문제를 해결할 수 있다. 섬유소재에 난연성을 부여하는 주요 난연제로는 aluminumtrihydrate와 같은 금속 수화물 무기계 난연제와 브롬 또는 염소를 함유하고 있는 할로겐계 화합물, 인산에스테르를 중심으로 하는 인계화합물과 멜라민시아누레이드와 같은 질소계 화합물이 있다. 내장재용 섬유에 난연성을 부여하기 위하여 무기계(나노입자함유)난연제 50% 함량에 인계, 질소계 난연제를 실리콘계 바인더에 혼합 교반하여 함침, 코팅된 섬유를 열처리(Thermal curing)한다. Si-OR의 표면개질을 위하여 80°C에서 reflux를 통하여 가수분해 반응 및 condensation 반응을 하여 난연특성을 가지는 소재를 개발 할 수 있다. 무기계 난연제 배합 비율을 달리하여 난연성 제어기술을 확보 할 수 있다.

분석 방법으로는 내열안정성 확인을 위하여 Tg, DSC, GPC 등으로 고분자 합성 확인을 하고, 난연등급에 대한 확인을 위하여 고분자수지 제품의 수직방향으로 불꽃을 가했을 때, 제품의 연소 양상 및 주위의 화염 전파 정도를 평가한다. 난연성탄화길이, 잔신, 잔염시간 등을 확인하여 난연특성에 대한 개발을 진행하였다. 기계적 물성을 확인하기 위하여 인장강도, 굴곡강도를 측정을 통하여 평가를 진행하였다. 개발물질의 유해성 평가는 HBCDD, DEHP, PBB, PBDE 등 유럽에서 규제하고 있는 유해물질 시험을 진행하였다. CIC 분석기를 이용하여 인, 염소, 브롬분석을 진행하였고, 목표치는 0.09이하이며, ICP-OES Q 분석기를 통하여 HBCDD, DEHP, PBB, PBDE 등을 분석하였다. HBCDD, DEHP, PBB, PBDE 목표치는 농도는 0.1이하 이다.

자동차 도장 물성과 그에 따른 시험 방법

김이현¹

¹한국화학융합시험연구원

자동차의 외관 보호를 위해 외부 부품에 도장이 사용된다. 자동차의 경우 운행 시 여러 가지 환경에 노출되게 되는데, 이에 따라 각각의 자동차 업체의 경우 제품의 품질을 확인 하기 위해서 그에 맞는 시험을 진행하여 신뢰성평가를 진행하게 된다. 여기에서는 그에 따른 대표적인 시험인 Cross Hatch Test, Humidity Environment, Stone Impact Resistance, Salt Spray Fog Test 를 소개한다.

**Discrimination of geographic origin from Paper mulberry bast fiber by
NIR and MIR spectra data coupled with PLS-DA**

Kyung Ju Jang, In Hee Go, So Yoon Jung, Seon Hwa Jeong*

*Restoration Technology Division, National Research Institute of Cultural Heritage

*Corresponding author: jeongsh0707@korea.kr

This study aimed to establish partial least square discriminant analysis(PLS-DA) models for discrimination of geographic origin of the Paper mulberry(*Broussonetia kazinoki* Siebold) bast fiber. In order to perform this, 10 Paper mulberry bast fiber samples from different Korea regions were collected. Then, the samples were analyzed by Fourier Transform Near Infrared spectroscopy (FT-NIR) and Fourier Transform Mid Infrared Reflectance spectroscopy (FT-MIR). The models classified by cross validation, Q^2 , accuracy, sensitivity and specificity were calculated to evaluate the classification performance of PLS-DA models. The prediction accuracy for discrimination of origin in leave one out cross-validation of FT-IR and FT-NIR coupled with PLS-DA model was 72% and 100%, respectively. Furthermore, FT-NIR coupled with PLS-DA model showed clearer separation, higher performance in confusion matrix than FT-IR coupled with PLS-DA model. These results showed that the FT-NIR model was more suitable for the classification of samples origin than FT-IR model. FT-NIR spectra coupled with PLS-DA model can be applied to achieve for discriminating of origin in mulberry inner barks.

수질 중 다환방향족 탄화수소류 벤조(a)피렌의 숙련도 시험용 개발

최원석¹, 이선홍¹ 김윤석^{1*}

¹*K-water 융합연구원 수질연구센터

*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

숙련도 시험은 시험능력 평가 외에 시험결과의 품질관리 보증 수단 중 하나이다. 다환 방향족 탄화수소 류 중 하나인 벤조(a)피렌은 국내에서 먹는 물 감시항목기준항목으로 명시되어있으며, 연 1회의 검사주기를 가지고 있다. 본 벤조(a)피렌은일반적인 전처리 방법으로 액-액 추출법이 사용되며, 기기분석법으로는 가스크로마토그래프-질량분석법(GC/MS)를 이용한 질량분석법과 고성능 액체크로마토그래피-형광광도법이 주로 사용되고 있다. 국내 수질공정시험기준에 의하면, 벤조(a)피렌의 정량한계는 0.000 01 mg/L이며 정확도는 75% ~ 125% 수준으로 분석되고 있다

본 연구에서는 수질 중 벤조(a)피렌 분석에 사용하는 형광검출기 부착의 고성능액체크로마토그래피(UPLC-FLD)를 사용하였고, 균질성 및 안정성은 KS Q ISO 13528 부속서 B를 기반으로 확인 하였다. 표준물질은 인증표준물질을 구매하여 K-water연구원에서 자체 제조하였다.

균질성의 경우 통계적분석법인 분산분석 (일원배치법)을 이용한 결과 균질성이 확보되었음을 확인였다. 안정성의 경우, 시료 운송기간 등을 감안하여 시료 제조 후 약 60일간 6시점에서 냉장, 실온 그리고 가혹 조건에서 ISO 13528 Stability check를 이용하여 숙련도 시료의 안정성을 평가한 결과, 평균 차이값이 $0.3\sigma_{pt}$ 보다 작으므로 제조 시료의 안정성은 숙련도 시료로서의 조건을 만족한 것으로 판단되었다. 따라서 본 연구에서는 제조한 수질 중 유기인계 농약류 시료가 숙련도시험을 운영함에 있어서 적합한 것으로 판단된다.

REACH에 기반한 다성분 물질 확인 사례 연구

Case study on substance identification of multi-constituent substance based on REACH

박광서, 최은경*

한국생산기술연구원 환경규제기술센터

*Corresponding author: ekchoe@kitech.re.kr

유럽 新화학물질관리제도(REACH)의 물질 등록에 있어 물질 확인(Substance Identification)은 필수적이며 이의 중요성은 등록될 물질이 무엇이며, 어떤 물질들이 동질하여 공동등록을 할 수 있는지를 정할 수 있기 때문이다. Joint submission은 등록 문서 수를 줄여 평가 소요시간을 줄이고, 유해성 자료를 공유할 수 있어 시간 및 비용 절감을 가져온다. 그러나, 물질명이 같더라도 제조회사에 따라 주 성분(main constituents)의 성분비 및 불순물(특히 드물게 CMR 불순물의 함유 여부) 등의 차이가 있어 화학 분석을 수행하지 않고서는 물질의 동질성(sameness)을 보장할 수 없다. 물질 유형은 크게 Mono-constituent, Multi-constituent 및 UVCB(Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials)의 3개 유형으로 구분하는데, 본 연구에서는 유럽 화학물질청 자료로부터 이들의 사례를 조사해보고, 국내에서 유통되고 있는 Perfluoroalkyl ethyl acrylate (CAS No. CAS 65605-70-1)의 물질확인을 위한 일련의 화학분석을 수행한 후, REACH에 기반한 SIP(Substance Identity Profile)를 제시해보기로 한다. 대상 물질을 약 0.5 %로 메틸 알코올에 희석하여 LC-MS 분석을 수행한 결과 (Electrospray ionization, Candeza Cd-C18 컬럼 (2.0 × 150 mm, 3 μm), 이동상 A:B=80:20(A: 0.1% Formic acid 첨가된 ACN, B: 0.1% Formic acid 첨가된 증류수) CF₂CF₂⁻ (m.w:100.0)의 차이를 보이는 C8, C10 및 C12-ethyl acrylate 성분이 피크면적비로 각 69%, 17.2%, 3.2% 함유된 다성분 물질이며, CMR로 분류되는 PFOA의 타겟 분석 결과 0.85 μg/kg (ppb)이 함유되어 있었으며, 다른 0.1% 이상의 불순물은 CMR 여부의 확인이 필요하다.

Qualitative analysis of polyol in Polyurethane foam using Matrix-assisted laser desorption/ionization-Time of flight (MALDI-TOF)

Yoo Yeongsuk¹, Lee Jaeyong², Lee Seunghwa², Lim Mi Ja², Chung Joo Hee³,
Ahn Yun Gyong³, Cho Kun¹*

¹*Biomedical Omics Group, Korea Basic Science Institute

²Research and Business development, Kumho petrochemical

³Seoul Center, Korea Basic Science Institute

*Corresponding author: chokun@kbsi.re.kr

Polyurethane foam is used to widely industrial fields with other materials because of outstanding insulation. It has much different form (ex. soft form, hard form, coating, special adhesives, sealant and elastomer). Polyurethane could be obtained by reaction among polyol, additives (ex. diisocyanate or polymeric isocyanate) and catalysts. The various types of polyurethane could be synthesized from many kinds of polyol and diisocyanates. Thus, it is important to research physical and chemical property of polyol in polyurethane foam.

Recently, modern analytical methods (ex. GPC, NMR, GC) were used to analyze polyol. In this research, MALDI-TOF (Matrix-assisted laser desorption/ionization-Time of flight) method was applied for MS and MS/MS analysis to obtain m/z (mass to charge ratio) value and structure information of various polyol.

From MS results, we got MS spectrum and m/z values of various polyols according to acid and alcohol types. Also, we could confirm structure information of polyols from fragment pattern results. MALDI-TOF was a potential technique to analyze polyol in polyurethane foam

1-Propanol의 28일간 분석모니터링 및 Mice을 이용한 반복흡입독성 연구

임철홍*, 조은상², 이성배^{1,*}, 박찬혁¹, 박가영¹

¹산업안전보건연구원 흡입독성연구센터 흡입시험연구부,

²산업안전보건연구원 흡입독성연구센터 병리검사부

*Corresponding author: sblee@kosha.or.kr

FTIR 장비를 사용하여 1-Propanol의 분석조건을 확립하고, 1-Propanol을 암·수 B6C3F1 마우스에 28일간 반복흡입 노출 시 나타나는 독성을 확인하고자 본 연구를 수행하였다. 시험의 군구성은 대조군과 노출군 T1, T2, T3군으로 구성하였으며 각 군당 실험동물은 암·수 각각 5마리씩 총 40마리를 사용하였으며, 여기에 사용되는 실험동물은 동물실험윤리위원회의 심의 및 승인을 득하였다. 1-propanol을 증기화하여 각각 100, 400 및 1,600 ppm으로 OECD Guideline, 국립환경과학원, 고용노동부 고시에 따라 1일 6시간, 주 5일, 28일간 반복 전신흡입 노출시켰다.

시험기간 동안 동물사육 및 흡입챔버 환경(온도, 습도, 산소농도, 환기량 등)은 시험가이드라인에서 제시하는 범위를 충족하였다. 흡입챔버 내 시험물질의 농도는 균질하였으며, 400 ppm 농도에서 시험물질이 목표농도에 95% 도달하는 시간 T95는 21.3분이었다. 시험기간 중 흡입챔버 내 시험물질의 실측농도는 T1군, T2군, T3군 각각 102.3±5.11 ppm, 402.8±7.86 ppm, 1,586.4±46.60 ppm이었다.

28일 반복노출 기간 동안 암·수 마우스의 일반증상, 체중변화, 사료섭취량에서 시험물질과 관련된 영향은 확인되지 않았다. 혈액학적 검사 결과, 암컷 T1군 및 T3군에서 상대비율호염기구(BASO%)가 유의적으로 감소하였으나 용량의존성은 없었고, 혈액생화학적 검사에서 대조군과 유의적인 차이는 나타나지 않았다. 절대 및 상대적 장기 중량 측정 결과 암컷 T2군의 비장 절대중량이 유의적으로 증가하였으나, 상대중량에서 대조군과 유의성이 없는 것으로 나타났고, 변화의 폭이 미미하여 시험물질과 관련 없는 것으로 판단되었다. 육안 소견으로 수컷의 T2군 및 T3군에서 흉부 피부의 탈모가 각각 1례씩 있었으나, 조직병리학적 검사 결과 이상 소견을 나타내지 않았고 자연병변으로 판단되었다. 이 외의 동물에 대한 조직병리학적 검사에서 시험물질과 관련된 이상 소견은 관찰되지 않았다.

이상의 연구 결과 본 시험 조건하에서 시험물질 최고 노출 농도인 1,600 ppm에서도 시험물질과 관련된 독성학적인 영향이 나타나지 않았으므로 1-propanol의 28일 반복흡입독성의 무영향 농도는 1,600 ppm 초과로 판단되었다.

바이오알코올 혼합연료에 따른 특성 분석 연구

김신^{1*}, 이돈민¹, 이미은¹

¹한국석유관리원 석유기술연구소

*Corresponding author: shinnala@kpetro.or.kr

국제 에너지 정책은 자국 내 에너지 독립 또는 자립화를 위한 에너지원 확보 및 화석연료에 대한 의존성 탈피를 목적으로 추진되고 있다. 이러한 목적의 최종 에너지원으로는 자연계에서 발생하는 자연 순환형 에너지로서 환경오염원 배출제로를 목적으로 한다. 하지만 현재 기술력 및 경제성에 부합하는 탄소 제로화 연료의 상용화는 보다 많은 시간이 필요할 것으로 전문가들은 예측하고 있다. 이에 미래에너지원 확보를 위하여 국제 사회에서는 환경보호 등 다양한 목표치를 설정하고 있으며 우리나라도 2030년 배출전망치 대비 37%달성을 목표로 설정하였다. 이러한 목표치 달성을 위해서는 국제 사회에서 인정하는 연료의 사용이 불가피하게 되었으며 내부적으로 '35년 신재생에너지 보급비율 11% 달성 및 제4차 신재생에너지 기본계획에서 수송부문 신재생에너지 연료 혼합의무화제도(Renewable Fuel Standard, RFS)를 시행하고 있다. 미래에너지원으로의 전환 이전, 과도기에 필요한 연료로는 생태계에서 발생하는 에너지를 현 수송부문에 적용 가능한 바이오에너지가 가장 현실적이다. 다양한 국가에서는 이러한 바이오에너지를 연료화하기 위하여 각국의 상황을 반영한 연구를 수행하고 있으며 검증 단계를 거친 연료는 상용화되어 왔다. 우리나라의 경우도 수송부문 경유의 대체 가능한 바이오디젤을 제도화하여 의무혼합하고 있으나 이 외에 연료에 대한 대체연료 보급은 미진한 상태이다.

본 연구에서는 다양한 국가에서 이미 상용화된 바이오에탄올과 도입 가능한 바이오부탄올의 연료적 특성을 국내 실정에 맞춰 평가를 수행하였으며 석유 및 석유대체연료 사업법 상 자동차용 휘발유에 대한 품질기준 항목별 분석을 통해 최적 혼합비율 도출에 필요한 물리·화학적 특성을 확인하였다.

석·연탄 품질 검사 자료로 바라본 한국의 무연탄

서의영*, 권순동, 조진선, 서지혜

한국광해관리공단 분석센터

*Corresponding author: eyseo@mireco.or.kr

무연탄은 한국의 유일한 부존에너지로서 오랫동안 국민경제에 큰 영향을 미쳤으나 경제성장에 따른 청정연료 선호, 비경제성 및 환경에 대한 우려로 그 수요기반의 대부분을 상실하였다. 이에 따라 경쟁력 없는 탄광을 단계적으로 폐쇄하고 경제성이 있는 탄광만을 합리적으로 육성하는 석탄산업합리화사업이 추진되어, 1988년 당시 347개소이던 탄광이 현재는 5개소만이 운영되고 있다. 현재 연간 생산량은 150만톤으로 1988년 생산량(2,430만톤)의 6.2% 수준에 불과하다.

정부는 석·연탄 분야의 합리적인 정책수립 기반근거(석탄산업통계 등)를 마련하기 위해 「석탄산업법」 시행규칙 제 17조 및 「행정권한의위임 및 위탁에 관한 규정」 제 50조 1항에 따라 한국광해관리공단을 국내 석탄품질관리 법정검사기관으로 지정하였다. 이에 따라 한국광해관리공단은 국내에서 생산되는 무연탄을 대상으로 연간 약 2000건의 분석을 실시하고 있다. 분석항목은 공업분석 4성분(휘발분, 회분, 수분, 고정탄소), 발열량 및 황으로, KS(한국산업규격), ISO(국제규격) 및 ASTM(미국규격)에 따라 분석을 실시하고 있다.

본 연구는 기존 열량분석에 의존하던 방식을 벗어나 각각의 광업소에서 생산되는 석탄의 물성과 특성을 평가, 비교하기 위해 수행되었다. 2016년 각각의 광업소에서 수송한 무연탄의 분석결과(1,230여개의 데이터) 중 두 개의 광업소를 선정하여 이들 간의 특성을 비교하였다. 선정된 두 개의 광업소(A, B)에서 생산되는 무연탄은 모두 높은 회분과 낮은 고정탄소 함량을 가진다. A 광업소의 출하탄은 B 광업소 출하탄에 비해 발열량과 고정탄소 함량이 높고 회분이 낮아 연소성과 연소 최고 온도가 높지만, 연소지속시간이 짧으며 화재강도가 낮은 특성을 보였다. 특히 회분의 함량이 낮고 고정탄소의 함량이 높아 수분과의 반응성이 낮을 것으로 판단된다. 반면, B 광업소는 고정탄소 함량이 낮고, 회분이 높아 상대적으로 연소성과 연소 최고 온도가 낮지만 회분이 높아 연소지속시간이 길고 화재강도가 높은 특성을 보였다. A 와 B 광업소 출하탄의 연료비(고정탄소/휘발분)는 각각 18.08 및 10.45로, A 광업소의 출하탄이 연료로서의 가치가 더 높은 것으로 판단된다.

본 연구를 통해 각 광업소에서 출하되는 석탄의 물성에 관한 기초자료를 확립하고 이를 비교·평가함으로써 석탄의 사용용도에 적합한 탄을 선정하는 등 석탄의 활용기술 활성화에 도움이 되고자 하였다.

PF-074 [일반]

A quantification and mechanism study on anhydride in the polyimide film via one and two dimensional NMR technique

Euiyoung Shin, Seunghwan Paek, Hyun Namgoong

Analysis & Evaluation Research Team, R&D Division, KOLON INDUSTRIES,INC

NMR [Nuclear Magnetic Resonance] is one of the most important analytical method covering the chemical structure, dynamics as well as quantitative measurement in the compound.

Quantitative NMR [qNMR] experiment is widely used to many fields such as pharmaceutical, food and polymer industry. The absolute quantification of anhydride in the polyimide is crucial for the good quality of final film. The purity of PMDA is determined by ^1H qNMR using the internal standard of maleic acid, which is complimentary with chromatography. Along with quantitative analysis the interconversion of 6FDA anhydride into acid susceptible to moisture has studied via ^1H NMR. In order to get the reliable and repeatable purity analysis of 6FDA, the mass spectroscopy[LC/MS] as well as NMR measurement after methylation of anhydride are done. The reactivity at elevated temperature and exposed to with and without water is successfully analyzed by one and two dimensional NMR techniques.

Identification and Simultaneous Quantification of Marker Compounds in Herbal Extract using LC-MS/MS

Sun Ho Chung^{*}, Woo Jung Kim, Jun Ho Shin, Han Na Cha, Jong Suk Lee

Department of Infrastructure Support Team, Biocenter,
Gyeonggido Business & Science Accelerator(GBSA)

^{*}Corresponding author: csh@gbsa.or.kr

Chemical standardization of herbal extract is needed for quality control and to facilitate the design of clinical trials. To address this issue, methods based on liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) were developed for detection, characterization and quantitative analysis of marker compounds in four herbal extracts and their mixture.

The LC-MS/MS system was operated using an electrospray ionization probe in positive/negative ion mode; multiple reaction ion monitoring (MRM) mode. Eight Marker Compounds were identified in extract by comparing their retention times and the three independent MRM precursor/product ion transitions with those of corresponding reference standards. The ion of monitor ; m/z 249.2→231.1 for atractylenolide III, $m/z=353.2→191.2$ for chlorogenic acid, m/z 255.1→119.0 for liquiritigenin, m/z 417.2→255.2 for liquiritin, m/z 579.3→272.2 for narirutin, $m/z=609.3→301.2$ for hesperidin, m/z 845.5→799.4 for ginsenoside Rg1, $m/z=955.5→793.3$ for ginsenoside Ro, respectively.

Various validation parameters, such as linearity, limit of detection, limit of quantification, accuracy and precision(intra-and interday variation) were successfully obtained. The linear range of compounds was 0.02-2.0 ug/ml($r^2=0.9998$ or higher) and the RSD of the overall inter and inter-day precisions were less than 8%.

This assay showed excellent sensitivity, accuracy and precision and may be used to address the need for quality control and standardization of herbal extract.

LC-MS based rapid secondary metabolite profiling and its anti-inflammatory activities

**Jun Ho Shin¹, Sun Ho Chung¹, Hanna Cha¹, Woo Jung Kim¹,
Young Ok Kim², Jun Sik Lee³ and Jong Suk Lee^{1,*}**

¹Biocenter, Gyeonggido Business & Science Accelerator,

²Biotechnology Research Division, National Institute of Fisheries Science (NIFS),

³Department of Life Science, Immunology Research Lab, BK21-plus Research Team
for Bioactive Control Technology, College of Natural Sciences, Chosun University

*Corresponding author: leejs@gbsa.or.kr

The ocean is a rich resource of flora, fauna, food, and biological products. We found a wild-type bacterial strain such as *Pseudoalteromonas* sp.M2 from marine water and isolated various secondary metabolites. This strain was produced various secondary metabolites as quinolone alkaloids, we identified seven 4-hydroxy-2-alkylquinoline secondary metabolites (pseudane-III, IV, V, VI, VII, VIII, and IX) by high-resolution and tandem mass spectrometry.

Recent studies reported that various compounds derived from natural products can regulate immune responses including inflammation. However, the anti-inflammatory effects and mechanism of pseudane-VII in macrophages are still unknown. In this study, we investigated the anti-inflammatory effects of pseudane-VII. In present study, Pseudane-VII elicited anti-inflammatory effects by inhibiting ERK, JNK, p38, and nuclear factor (NF)-kB-p65 phosphorylation. Consistently, pseudane-VII was also shown to inhibit the LPS-stimulated release of IL-1 β and expression of iNOS in mice. These results suggest that pseudane-VII exerted anti-inflammatory effects on LPS-stimulated macrophage activation *via* inhibition of ERK, JNK, p38 MAPK phosphorylation, and pro-inflammatory gene expression. These findings may provide a new approaches in the effort to develop anti-inflammatory therapeutics.

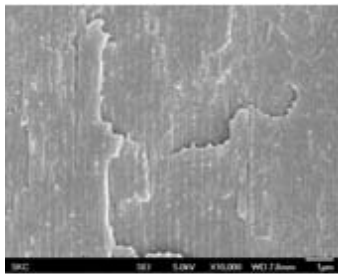
다층 Film 전처리 방법에 따른 전자주사현미경 단면 관찰

한재철¹, 양영모¹

¹SKC R&D 센터
jchan@sk.com

Film 단면 측정을 위한 종래의 film 파단 기술은 blade를 이용하여 절단하거나 액체질소를 이용하여 저온에서 파단하는 방법을 이용하고 있다. 하지만 blade를 이용하면 blade로부터 film에 압력이 가해져서 대부분 film 단면이 손상을 입고 특히, pore를 가진 film을 파단할 경우는 film의 pore를 그대로 보존하면서 절단하기 어렵다. 이러한 film 파단 기술의 단점을 보완하기 위해 액체질소를 이용하여 film을 저온에서 파단하게 되는데 이 방법도 파단된 film으로부터 측정하기에 적당한 파단 부위를 찾는 것이 상당히 어려운 실정이다. 따라서 film을 고정하고 액체질소를 이용하여 film의 원하는 부위를 냉각하여 파단할 수 있는 film 전처리 장비를 고안하였다.

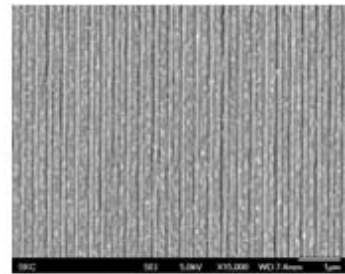
상기 장비를 사용하여 다층 film을 파단한 결과 층간 변형이 없어서 명확한 전자주사현미경(SEM) 단면 관찰이 가능하게 되었다.



종래 방법



전처리 장비



개선 이미지

- 절단하고자 하는 film의 모든 면을 동일한 힘과 동일한 거리로 고정할 수 있는 장치가 film 양쪽에 위치
- 한 개의 장치는 고정되어 있으며 고정된 film을 동일한 방향과 동일한 힘으로 당길 수 있도록 다른 하나의 장치에는 sled와 sled rail이 존재
- Film 고정 장치 사이에는 측정하고자 하는 film 파단 부위를 냉각할 수 있는 액체질소 reservoir로 구성

Analysis of content of quinoline in tar oil

Hye-mi Kim*

Analysis Research Center, KCC Central Research Institute

*khm1025@kccworld.co.kr

Quinoline (CAS 91-22-5), and a mixture containing more than 0.1%, is a toxic substance according to Article 3 of the 'Enforcement decree of the act on registration, evaluation, etc. of chemicals' and article 2 of 'Enforcement decree of the chemicals control act'. Quinoline is carcinogenic and can cause germ cell mutations. We have studied the quantitative analysis of quinoline in tar oil used as a fuel in our company.

Tar oil is obtained by distilling coal tar, and coal tar contains 0.3-0.5% quinoline. Since Coal tar is a mixture of various hydrocarbon components, it is difficult to separate and analyze using gas chromatography mass spectrometry (GC-MS). Even when measured using SIM mode (Selective Ion Monitoring), the target ion of quinoline overlaps with the fragments of the tar oil component, so the selectivity is poor and it is not separated. Liquid chromatography mass spectrometry (LC-MS) is advantageous for the determination of complex compounds because the molecular ion can be detected and the selectivity can be increased when using the MRM (Multiple Reaction Monitoring) mode. In this way, we tried to utilize it for the monitoring process to improve the quality of raw materials through analysis of toxic substances in tar oil.

Analysis of Cu metal oxidation and study on adhesion characteristics of Cu/EMC interface

Han-jung Cho, Hyun-wook Kong

Analysis Research Center, KCC Central Research Institute

We would like to propose a road map for oxide film analysis of copper metal materials. Copper is widely used in automobile, electric, electronic, construction, and manufacturing industries. Especially in semiconductor package materials, copper is one of the materials constituting the lead frame in the package. During the manufacturing process, copper is accompanied by thermal oxidation due to heat, which changes the adhesion characteristics between Cu/EMC interface. We standardize the analytical method for Cu oxide films(CuO(II) or Cu₂O(I)) and investigate their properties through Cu/EMC interface adhesion strength tests by thermal oxidation.

The copper with a purity of 99.9% was thermally oxidized by using an electric furnace at atmospheric pressure air atmosphere to confirm characteristics according to each process condition. The temperature of the electric furnace was maintained at 100°C, 200°C, 250°C and 300°C for 1hour. There are thickness, surface structure, component, physical characteristics and morphological analysis methods for analyzing oxide film. The analytical results were obtained using FE-SEM(Field emission scanning electron microscopy), FIB-STEM(Focused ion beam scanning transmission electron microscopy), XPS(X-ray photoelectron spectroscopy) and XRD(X-ray diffraction) including physical property equipment.

A study on the factors affecting adhesion mechanism of hetero-polymersystems by adhesion failure analysis

So-Hyun Kim¹, Jong-Woo Lee¹ and Kyu-Ho Kim^{1,*}

¹Analysis research center, KCC Central Research Institute, Yongin 16891, Korea

*Corresponding author: haja@kccworld.co.kr

The plastics usage in automotive applications continues to grow, due to their excellent features regarding flexibility, high-impact and strength. They are mainly used to make cars more energy efficient by reducing weight, and they provide excellent durability, corrosion resistance, toughness, design flexibility, resiliency and high performance at low cost.

Paints for plastics suffer many of the same problems as those applied on metals, but they also have a number of their own defects. One of the difficulties in painting plastics is that there are so many different types of plastics in use, each with its own surface properties and paintability. Due to low surface energies and polarities, many plastics tend to experience more wetting and adhesion problems than metals.

To solve this problem, chlorinated polyolefin(CPO) adhesion promoters are widely used as adhesion-promoting resins for coatings applied on plastic substrates. Despite the use of CPO as an adhesion promoter, other factors can also affect the adhesion between coating and plastic substrate interface.

In this experiment, we have performed adhesion failure analysis of two kinds of plastic substrates (PC/PBT blending alloy, PA6) coated with CPO-based paint. Through failure analysis, different critical factors that can affect adhesion behavior of coating and plastic substrates interface were found.

In this study, two factors were examined in detail. First of all, the blending alloy plastics of surface composition can influence overall adhesion performance. In addition, having a lot of amide functional groups on the surface can also improve adhesion performance. These two parameters can play a significant role in adhesion mechanism.

**Study of the mechanism of can swelling of urethane hardener
using NMR Spectroscopy and TG-MASS**

Jin-Kyoung Kim¹, So-Hyun Kim¹ and Kyu-Ho Kim^{1,*}

¹Analysis research center, KCC Central Research Institute, Yongin 16891, Korea

*Corresponding author: haja@kccworld.co.kr

Typically in two-pack polyurethane coating systems, poly-isocyanate is used as the hardener which becomes an integral part of the polyurethane polymer when mixed with the polyol resin. Poly-isocyanate is a chemically reactive material in the curing agent, -NCO group of poly-isocyanate react with compound containing active hydrogen. In some of the reactions, CO₂ is released which assists in the formation of Polyurethane forms. In summer, we observed the swelling of the can of the poly-isocyanate type hardener during storage. NMR data confirmed that urea group generated by the reaction of isocyanate group in poly-isocyanate with water. To examine the influence of moisture and temperature on reactivity of -NCO and active hydrogen, we monitored the amount of gas generation using TG-MASS. The CO₂ gas is generated rapidly at room temperature and is terminated within 35°C in water added curing agent. These TG-MASS results showed that moisture is important factor than temperature and it is important to block moisture to prevent can swelling in summer. From both the multi-dimensional NMR and TG-MASS analysis, useful information may be obtained not only in the detailed reaction of poly-isocyanate with water but also in various complexed polymer reaction systems.

유도체화를 통한 신경전달물질의 고성능 액체 크로마토그래피-질량분석기 동시분석법 개발

조요셉^{1,2}, 임혜인^{3,4}, 유제욱², 윤상선², 손정현^{*1,5}

¹한국과학기술연구원 도핑콘트롤센터, ²연세대학교 의과학과,

³한국과학기술연구원 치매DTC융합연구단,

⁴과학기술연합대학원대학교 생체신경과학과,

⁵과학기술연합대학원대학교 생물화학과

*Corresponding author: son.junghyun@kist.re.kr

신경전달물질은 신체 내에서 생리학적으로 중요한 역할을 담당하고 있으며, 이로 인해 여러 질병들이 유발될 수 있다. 따라서 이를 정확히 측정하는 것은 질병의 진단 및 치료 단계를 나타내 줄 수 있으므로 필수적이다. 그러나 신경전달물질은 안정성이 낮고 이온화 효율이 좋지 못하여 분석에 어려움이 있어, 이를 개선하고자 연구를 진행하였다. 분석대상물질은 dopamine을 비롯한 신경전달물질들과 그 대사체, 총 22가지이며 C18 컬럼을 이용한 고성능 액체 크로마토그래피-질량분석기로 분석하였다. 샘플은 쥐의 뇌 조직을 제공받아 이용하였으며, 이를 유도체화와 액체-액체추출법을 이용하여 처리하였다. 안정성을 높이기 위해 산성으로 pH를 조절하였으며, 동시분석을 통하여 분석시간은 5분으로 설정하였다. 분석 결과, 유도체화를 통해 감도가 크게 증가되어 기존 분석법대비 검출한계를 크게 낮추었으며, 따라서 아주 소량의 샘플만으로도 분석이 가능하게 하였다. 또한 C18컬럼에서 선택성, 분리효율이 증가하였고, 동시분석을 통해 분석시간을 감소시켰으며, 각 조직 부위에 따른 농도차이가 명확히 관찰되었다. 이 동시분석법은 신체 내 신경전달물질의 측정에 있어 뛰어난 결과를 보이며, 이는 임상분야를 비롯한 다양한 분야에서 응용될 수 있을 것으로 예상된다. 현재 뇌 조직 외에 다양한 생체 조직에서도 이 동시분석법 적용 연구가 진행되고 있다.

인공지능을 이용한 도핑 진단법 개발 (iD²)

박진우^{1,2}, 손정현^{1,3,*}

¹한국과학기술연구원 도핑컨트롤센터, ²한양대학교 생명과학과,

³과학기술연합대학교 한국과학기술연구원 스쿨

*Corresponding author: son.junghyun@kist.re.kr

기존의 도핑 진단법은 세간에 이미 알려진 금지 약물의 데이터와 비교 대조하는 '표적 분석법'이며 적발 회피 목적으로 음성적으로 개발된 디자이너 약물은 검출할 수 없다는 단점이 있다. 그러나 인공지능을 이용한 도핑 진단은 알려지지 않은 새로운 약물의 복용까지 검출할 수 있을 것으로 기대되고 있다. 우리는 머신 러닝 프로그램으로서 MATLAB 분류 학습기 프로그램을 이용하여 도핑 진단 프로그램 (Intelligent Doping Diagnosis, iD²)을 개발하였다. Agilent GC-QQQ 내에 저장되어 있는 데이터로부터 2017년부터 2018년까지 분석 케이스 중 외인성 동화 스테로이드 중 많이 적발되었던 상위 4개 약물 (stanozolol, clenbuterol, epitrenbolone, drostanolone)에 대한 peak의 머무름 시간과 면적값을 얻었으며, 도핑컨트롤센터에 구축된 α -LIMS로부터 각 케이스의 진단 결과를 얻었다. 케이스가 특정 약물에 대해 양성을 보인 경우 케이스의 레이블은 그 약물의 이름으로 하였고, 모든 약물에 대해 음성을 보인 경우 레이블은 'negative'라고 지정하였다. 각 분석 케이스는 training data와 test data로 배분되었고, 이렇게 만들어진 두 가지 데이터는 MATLAB에 전송되었다. 머신 러닝 프로그램은 training data로 학습을 수행하였다. 우리는 각 약물별로 생성된 학습 알고리즘 중 높은 정확도를 보인 상위 10~14개에 드는 알고리즘을 선택했고, 각 알고리즘마다 test data를 적용하여 어떤 레이블을 예측할 것인지 관찰하였다. 각 약물별로 선택된 알고리즘 중 조밀 트리, 중간 트리, 성긴 트리, 앙상블 배깅 트리, 앙상블 부분 공간 kNN 등 5가지가 4가지 약물에 공통적으로 포함되었고, 이 5가지 알고리즘은 test data의 레이블을 97.5%의 정확도로 예측하였다. 우리는 도핑 진단에서 인공지능을 활용할 수 있다는 가능성을 볼 수 있었다. 우리는 인간의 대사체학적 데이터베이스를 머신 러닝에 활용한다면 알려지지 않은 약물의 복용 여부까지 진단할 수 있을 것으로 기대하고 있다.

혈청 시료 중 단당류 분석법 개발

박진우^{1,2}, 한보영^{1,3}, 김병주⁴, 정지선⁵, 권오승^{1,6}, 손정현^{1,6,*}

¹한국과학기술연구원 도핑컨트롤센터, ²한양대학교 생명과학과,

³연세대학교 의과학과, ⁴한국표준과학연구원 분석화학표준센터,

⁵한국표준과학연구원 바이오분석표준센터, ⁶과학기술연합대학교 한국과학기술연구원 스쿨

*Corresponding author: son.junghyun@kist.re.kr

인간의 혈액 중 단당류의 구성은 당뇨병, 유전성 대사이상질환과 같은 질병의 이환에 따라 변화한다. 따라서 혈장 시료 중의 단당류를 프로파일링하는 분석법을 개발하여 질병 진단에 활용한다면 질병 예방과 국민의 보건 증진에 기여할 수 있다. 따라서 우리는 혈장 시료에서 8가지 단당류(D-Glucose, D-Fructose, D-Mannose, D-Galactose, L-Arabinose, D-Xylose, D-Ribose, D- α -Glucose)를 동시 분석하는 분석법을 개발하였다.

분석기기는 LC-MS/MS를 채택하였다. 이는 고감도, 고분해능이면서 별도의 유도체화 과정이 필요 없으며, 또한 단당류 간에 유사한 화학적 구조 특성상 같은 m/z 이온쌍을 가지더라도 크로마토그래피 상의 머무름 시간의 차이로 구분할 수 있다는 장점에 따른 것이다. 이동상 용매는 0.1% ammonium hydroxide 수용액과 acetonitrile을 사용하였고 정지상은 HILICpak column을 사용했다. 시료의 단백질을 제거하기 위해 가하는 acetonitrile의 양, injection volume, gradient elution, MS condition 등을 조절하면서 분석법을 최적화하였다. 개발된 분석법은 직선성, 검출한계 및 정량한계, 회수율, 캐리오버, 일내와 일간 정확성 및 정밀성 등을 검토하여 유효성을 검증하였다.

개발된 분석법은 3개 병원과 시료 제작업체에서 제공한 혈청시료를 분석하는 데에 실제로 활용되었고, 또한 당뇨병 진단에 활용할 인증표준물질(Certified Reference Material; CRM)을 제작하는 데에도 활용되었다. 또한 측정 불확도도 추정하여 기준에 만족하는 것을 확인하였다.

Urine metabolomics in male pattern baldness; androgens and bile acids profiling by LC-MS/MS

Haksoon Kim^{1,2}, Jeongae Lee¹, Han Bin Oh², Bong Chul Chung¹

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

²Department of chemistry, Sogang University

Male pattern baldness is one of androgenic alopecia caused by androgen, the steroid hormones, and hereditary factors. Bile acid is made from cholesterol in liver and its chemical structure belongs to steroids. According to one case report, a male injected ATX-101, containing one of the bile acid, into the fat of the jaw area and alopecia was observed at the injection site. Therefore, we will investigate whether there is a difference between bile acid and steroid levels in the MPB and the control.

For metabolic profiling of androgens and bile acids, liquid chromatography-mass spectrometry based analysis method was developed and applied to the quantitative profiling of androgens and bile acids from urine samples of two groups. 40 samples were taken from each group to compare the target levels. In this study, solid-phase extraction and liquid-liquid extraction steps were combined during the sample preparation. β -Glucuronidase/arylsulfatase was also used in the enzyme hydrolysis step. Chemical derivatization was performed for simultaneous determination of androgen and bile acid. All analytes were separated and measured using selected reaction monitoring in the positive ion mode within a run time of 25 min.

In the quantitative profiling, level of bile acids showed that MPB group is higher than control group. Among the androgen, testosterone, epitestosterone and pregnenolone's level were not significantly different between two groups, but level of dihydrotestosterone and dehydroepiandrosterone in MPB group was higher than controls.

The mass spectrometry-based quantitative profiling method used herein has great potential for the metabolism study of various inflammatory diseases.

**Performance characterization of bimodal cation exchange/hydrophilic interaction
LC-ESI/MS/MS by mobile phase composition**

**Seunghwa Lee^{1,2}, Sang Moon Han^{1,2}, Byungjoo Kim³, Oh-Seung Kwon¹,
Ki Hun Kim^{1,*}, Jaeick Lee^{1,*}**

¹Doping Control Center, Korea Institute of Science and Technology

²Department of Chemistry, Research Institute for Natural Sciences, Korea University

³Analytical Chemistry Center, Division of Metrology for Quality Life,
Korea Research Institute of Standards and Science

*Corresponding author: jaeicklee@kist.re.kr, kihun.kim@kist.re.kr

Mixed-mode chromatography (MMC) is being expanded field for analysis of biological fluid due to its unique selectivity. Among of various MMC applications, ion exchange/hydrophilic interaction liquid chromatography (IEX/HILIC) is especially useful to analyze polar compounds without derivatization or ion pairing but the practical information about the retention behavior is not provided as well as the variety of column selection. In this study, we investigated the chromatographic behavior of amino acids in the CEX/RP mixed-mode column by modification of mobile phase and column temperature. Low concentration of buffer salt (< 50mM) caused increased retention, and especially positively charged amino acids were not eluted by excessive interaction with the negatively charged stationary phase at a moderate salt concentration (< 20 mM). Acid modifier of formic acid or acetic acid showed similar influence on the separation of amino acids, and low acid concentration (< 0.5%) caused a peak broadening by additional ion exchange with silanol group at high pH. For organic solvent composition, aprotic solvent such as tetrahydrofuran or acetonitrile could give an appropriate retention, but protic solvent highly reduced the retention of most of amino acid except positively charged amino acids. The column temperature caused significant difference to only hydrophobic amino acids. This study provides a novel and practical information for optimization or development of application with CEX/HILIC column for polar analytes such as amino acids.

* This work was supported in part by Korea Research Institute of Standards and Science and in part by an intramural grant from Korea Institute of Science and Technology.

Identification of in-vitro metabolites of bolasterone (7 α ,17 α -dimethyltestosterone) by ultra high-performance liquid chromatography/orbitrap mass spectrometer

**Anca Raluca Muresan^{1,2}, Khandoker Asiqur Rahaman^{1,2}, Hophil Min¹,
Hyein Kim¹, and Oh-Seung Kwon^{1,2,*}**

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

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

*Corresponding author: oskwon@kist.re.kr

Bolasterone (7 α ,17 α -dimethyltestosterone) is a typical steroid drug that is often illegally used in different kinds of sports disciplines including horses. Identification of phase I and II metabolites could be more useful tools to identify various metabolic pathways in order to develop long-term biomarkers for anti-doping analysis. In this study, we investigated phase I and phase II metabolites of designer steroid bolasterone (MW 316), generated through *in-vitro* conditions (rat liver microsomes) identified by using an ultra high-performance liquid chromatography/Orbitrap mass spectrometer (Q-Exactive). A full scan and further various dd-MS/MS modes were used to elucidate more detailed structural information for the metabolites. We have characterized several metabolites based on their retention times in the chromatograms and compared their mass spectra. A total of 9 metabolites were identified, 8 of them being found in phase I metabolism and 1 phase II metabolism reaction. For the phase I metabolites, 7 are mono-hydroxylated (M1, M3-M8 as m/z 333 of [M⁺+H]⁺) and 1 di-hydroxylated (M2 as m/z 349 of [M⁺+H]⁺) metabolites. The mono-hydroxylation occurred at A, B or D rings of the chemical structures, with unknown positions of hydroxylation to the di-hydroxylated metabolite yet. By the Phase II reaction, the glucuronide-conjugated metabolite at the D ring (M9 as m/z 493 of [M⁺+H]⁺) was identified. These metabolites identified may be useful biomarkers in screening bolasterone in urine with the purpose of anti-doping analysis. The further *in-vivo* (animal, human) studies will be conducted to get more insights into biotransformation pathways of bolasterone, and to find better biomarkers for anti-doping analysis.

Determination of Arsenic in Heavy Oil by ICP-MS

조금중, 최제남, 성정문

Analysis Lab, Platform Tech. R&D Center, Institute of Technology Innovation, SK Innovation

원유 내 Trace Metal은 촉매독으로 작용하여 촉매 수명을 단축시키므로 이들 원소에 대한 정량 분석은 Refinery 산업에 매우 중요하다. 특히 As(Arsenic)은 소량으로도 촉매 Deactivation을 유발하며, 토양 및 대기 유해 물질로 분류되고 있어 정량 분석의 필요성이 강조되고 있다. 휘발성 원소인 As은 산전처리 과정에서 쉽게 휘발되어 손실이 발생하므로, 휘발로 인한 손실이 없는 유기용매 희석법을 이용하여 ICP-MS로 검출한계 0.1 ppb까지의 분석법($R^2=0.999$, Recovery=95~105%)을 정립하였다.

Light 유분에 함유된 As은 NMP를 유기용매로 사용하였으며, Heavy 유분에 대해서는 Solubility를 고려하여 Xylene을 유기용매로 사용하여 분석을 진행하였다. Xylene의 높은 휘발성으로 인하여 Plasma가 불안정해지는 문제는 Cold Chamber 사용하고 공급 Gas의 Ratio를 조정하여 해결하였다. As 분석시의 간섭에 대해서는 Oxygen DRC mode와 KED Mode를 사용하여 검증하였다. 정립된 분석법을 적용하여 개별 원유 17종의 As 함량을 비교 분석하였으며, 개별 원유 3종에 대해서는 Fraction별 As 분포를 분석하여 공정 영향성을 검토하였다.

Analysis of Cashew Nuts Shell Liquid (CNSL) contents from Power Bio-Fuel Oil using Metal capillary GC Column

Don-Min Lee^{1,*}, In-Ha Hwang¹, Jung-Min Lee¹

¹Research Institute of Petroleum Technology, Korea Petroleum Quality & Distribution Authority,
Chungcheongbuk-do, 28115, Korea

*Corresponding author: donmin@kpetro.or.kr

To reduce the effects of greenhouse gas (GHG) emissions, the government has announced a special platform of technologies as parts of an effort to minimize global climate change. As further efforts, power bio-fuel oil have been introduced to power producers to meet RPS(Renewable Portfolio Standards) quota in power generation area.

It is known that power bio-fuel oil has different properties depending on its feedstock such as plant or animal derived oil. Recently Cashew Nut Shell Liquid (CNSL) has been used because of its cheap price comparing with other resources. Although CNSL's price competitiveness, there is a restriction to be used as the fuel. Cardanol is a phenolic lipid and the main component of CNSL and the lipid can be easily converted into soot precursors which are related with smoke generation in the chimney flue during combustion process. Therefore, it is important to detect CNSL's presence in the power bio-fuel to maximize the environmental positive effects.

To analyze the power bio-fuel oil, Gas Chromatography is applied in this study. To prevent inlet area's contamination, cool-on-column system is adopted instead of split/splitless mode and metal capillary column is used to secure reliable resolution and to minimize column bleeding at higher temperature (>400C). After modifying the analysis conditions (injection volume, oven condition etc.,) it is possible to figure out the cardanol's presence through GC-FID analysis.

Nonspecific inhibition of PF543 on Serine Palmitoyltransferase Activity Detecting by LC-MS/MS

**Maftuna Shamshiddinova¹, Dong-Jae Baek², Kyung-Ran Min¹,
Khilola Nazrullaeva¹ and Yong-Moon Lee¹**

¹College of Pharmacy, Chungbuk National University, Cheongju, Korea

²College of Pharmacy, Mokpo National University, Mokpo, Korea
ymleefn@cbnu.ac.kr

Introduction: The sphingolipid rheostat which has been suggested the balance of sphingolipid metabolites, ceramide (Cer) and sphingosine 1-phosphate (S1P) in cells might determine the cell death or cell proliferation. This rheostat theory has long been accepted in the research for pathogenesis of various cancers and their treatment by enhancing Cer accumulation in cancer cells. The sphingolipid rheostat of Cer increase is generally observed by the *de novo* synthesis from serine palmitoyl transferase (SPT) activation, the activation of sphingomyelinase (SMase) and the inhibition of sphingosine kinases (SphKs). Thus, there have been several efforts to develop SphKs inhibitors which is able to change the sphingolipid rheostat greatly by increasing Cer and lowering S1P levels. In this study, several synthetic SphK1 inhibitors of PF543 derivatives were tested to evaluate their specificities by monitoring the influence on SPT activity. The selected PF543 analogs (DPF543, RB0035, RB012, RB040, A013) on SPT activity was investigated by measuring isotope-labeled dihydrosphingosine (DHS) product in HaCaT cells.

Methods: HaCaT cells were cultured in Dulbecco's modified Eagle's medium supplemented with 10% fetal bovine serum in a humidified incubator at 37°C with 5% CO₂, and confluent cells were used for the experiments. Cells were incubated for 24 hours with 10µM of different SphK1 inhibitors. Cells were harvested and lysate. 200µg HaCaT cells protein was incubated at 37°C for 15 min with 200µL of 0.1 M HEPES buffer containing 5mM DTT, 50µM pyridoxal phosphate, 100 µM palmitoyl-CoA, 7,6 mM -Ser (3,3-D2). Reaction was stopped by adding 2 ml 0.5N NH₄OH. After adding 25 pmol C17- SPH (IS), lipids were extracted by adding 2.5 ml chloroform methanol (2:1) and vortexed vigorously. After centrifugation at 4000g for 5 min, the upper aqueous phase was removed, and the lower organic phase was washed with 5 ml water twice. The organic phase was dried under nitrogen gas and reconstituted in 100 µl MeOH. Lipid from samples were injected and eluted from column C18, 4.6 X 50 mm, 2.7 µm particle size column with 50%-98% methanol gradient generated from mobile phase A (2% formic acid and 2 mM ammonium formate in water) and mobile phase B (2% formic acid and 1 mM ammonium formate in MeOH).

Results: The mass spectrometer was operated in multiple reaction monitoring positive ionization mode, monitored the following transitions: m/z 286.2>268.2 for C17-SPH and 304.3>286.3 for DHS (+2). Data were collected and processed using Xcalibur software. Impact of PF543 derivatives on SPT activity was calculated in comparison with control by using the ratio between DHS (+2) and IS areas. In comparison with a control, PF543, RB0035 and RB012 showed 91% inhibition of SPT. In case of DPF543, the DHS (+2) yield was decreased to 82%. RB040 and A013 was moderately inhibit the SPT activity up to 69%.

Conclusion: We developed the SPT activity assay by incubating D,D- L-serine in the media and then measured corresponding product, DHS (+2) selectively by LC-MS/MS. Unexpectedly, comparing to other synthetic SphK1 inhibitors, SphK1 specific inhibitor, PF543 strong inhibited the DHS (+2) synthesis, indicating non-specific inhibition on SPT activity as well.

Determination of 15 endocrine disruptors in human saliva using GC-MS

VU THI HOANG VAN^{1,*}, SHIN HO-SANG²

^{1,*}Kongju National University, Department of Environmental Science,

²Kongju National University, Department of Environmental Education

*Corresponding author: vuhoang.van@gmail.com

There has been growing interest in endocrine disruptors (EDCs) as they are chemicals that can interfere with/or mimic endocrine (or hormone) systems at certain doses, acting as agonists or antagonists. These chemicals can be easily found in our environment, food, and consumer products. Many methods have been developed for detect these substances in human body, but most of them used urine or blood as the matrix. GC-MS is advisable for analyzing these substances; however, to get better separations with increased resolution and response, especially for phthalates, derivatization should be done before GC-MS.

This study is to develop a method for a simultaneous analysis of 15 EDCs in human saliva, using GC-MS and derivatization. Silylation was selected among other derivatization methods. While many silyl derivatives have limited stability with regard to hydrolysis, MTBSTFA help the formation of ter.-butyl-dimethylsilyl (ter.-BCMS) derivatives which are less sensitive to hydrolysis.

The effect of solvents, times, and temperature, pH was verified for both the derivatization and extraction method. Method validations, including linearity, accuracy, precision, recovery, LOD, LOQ, have been tested. The calibration curves were linear with the concentration range of 0.1 ppb to 100ppb ($R^2 > 0.99$).

Through this study, a rapid, sensitive and efficient method has been successfully developed for determination of 15 EDCs via human saliva.

Chemical Compositions and Emission Characteristics of Atmospheric Aerosols in relation to Meteorological Conditions at Background Site of Korea during 2017

Lyun-kyung Kim, Jung-Min Song, Jun-Oh Bu, Sook-Young Park,
Hyo-Sun Yang, Chang-Hee Kang*

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

*Corresponding author: changhee@jejunu.ac.kr

The collection of atmospheric PM₁₀ and PM_{2.5} aerosols was made at Gosan site of Jeju Island, which is one of the background sites of Korea, in 2017. Their ionic species were analyzed in order to examine the variation of chemical compositions in relation to the different meteorological conditions. The mass concentrations of PM₁₀ and PM_{2.5} were 21.0±9.2 and 11.9±6.6 µg/m³, respectively during non-event days. The concentrations of secondary pollutants such as nss-SO₄²⁻, NO₃⁻, and NH₄⁺ were 3.38, 2.36, 1.61 µg/m³ for PM₁₀, and 3.27, 0.94, 1.42 µg/m³ for PM_{2.5}, respectively. From the study of chemical composition according to the particle sizes, the concentration ratios of PM_{2.5}/PM₁₀ for nss-SO₄²⁻ and NH₄⁺ were 0.97, 0.88, respectively, indicating that those species were existed mainly in PM_{2.5} fine particulate matter. On the other hand, NO₃⁻, Na⁺, Cl⁻ and nss-Ca²⁺ were rich in PM₁₀ aerosol particles. During the Asian Dust periods, the concentrations of nss-Ca²⁺ and NO₃⁻ increased highly as 13.7 and 1.5 times in PM₁₀, compared to non-event days. For the haze days, the concentrations of secondary air pollutants were increased 2.3~3.7 and 3.5~3.9 times in PM₁₀ and PM_{2.5}, respectively. Furthermore, the remarkable increase of NO₃⁻ concentration was observed in PM_{2.5} during haze events. The concentrations of secondary pollutants during the mist event days were high as 0.7~1.3 and 0.9~1.0 times, respectively, in PM₁₀ and PM_{2.5} aerosols, compared to non-event days. The neutralization factors by ammonia were 0.78, 0.21, 0.84, 0.84, respectively, for non-events, Asian dust, haze and mist days in PM₁₀, besides they were 0.92, 0.47, 0.95, 0.98, respectively, in PM_{2.5}. Meanwhile, those by calcium carbonate were 0.10, 0.70, 0.05, 0.09 in PM₁₀, and 0.03, 0.27, 0.01, 0.05 in PM_{2.5}, respectively. The back trajectory analysis showed that the concentrations of secondary air pollutants and soil species of both PM₁₀ and PM_{2.5} particles were high when the airflow moved from China continent to Jeju Island.

Composition and Pollution Characteristics of Ionic Precipitation Components in Jeju Island

Jun-Oh Bu, Soo-Young Kim, Hee-Ju Kang, Geon-Yoon Kim,
Jung-Min Song, Chang-Hee Kang*

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

*Corresponding author: changhee@jejunu.ac.kr

Trace amount of organic acids as well as major ionic components have been analyzed in precipitation at Jeju Island of Korea during 2015~2017. The total number of precipitation samples was 183, and their ionic components were analyzed by ion chromatography. From the comparison in term of ion balance, electric conductivity, and acid fraction of precipitation, their correlations showed good linearity in the range of 0.973~0.991, indicating a good quality of the analytical data. During the study periods, the volume-weighted mean pH and electric conductivity were 5.0 and 18.7 $\mu\text{S}/\text{cm}$, respectively, showing weak acidic precipitations below pH 5.5 by 78% frequency. The ionic strength of precipitation was 0.21 ± 0.21 mM, indicating 39.3% of total precipitation within a pure precipitation criteria. The volume-weighted mean concentrations ($\mu\text{eq}/\text{L}$) of the ionic species in precipitation were in the order of $\text{Cl}^- > \text{Na}^+ > \text{nss-SO}_4^{2-} > \text{NH}_4^+ > \text{NO}_3^- > \text{Mg}^{2+} > \text{H}^+ > \text{nss-Ca}^{2+} > \text{HCOO}^- > \text{K}^+ > \text{CH}_3\text{COO}^- > \text{HCO}_3^- > \text{F}^- > \text{CH}_3\text{SO}_3^-$. The major marine (Na^+ , Cl^- , Mg^{2+}), secondary pollutants (NH_4^+ , NO_3^- , nss-SO_4^{2-}) and soil (nss-Ca^{2+}) species have contributed to the total ionic components of precipitation in Jeju area by 50.5%, 34.8%, and 4.8%, respectively. The acidity contributions by sulfuric and nitric acid were 46.4% and 44.4%, respectively. Meanwhile the acidity contributions by formic and acetic acids were 5.5% and 3.8%, respectively. Based on the back trajectory analysis, the high concentrations of ionic species were mostly associated with northwesterly winds from the continental area, on the other hand, the relatively low concentrations with the winds coming from the North Pacific area.

Determination of curcumin in rat plasma using UPLC-MS/MS and its application to a pharmacokinetic study of a novel curcumin formulation

Jun Sang Yu¹, Yu Mee Han², Hee Joung Joung³, Hye Hyun Yoo^{1,★}

¹Department of Pharmacy, Hanyang University, Ansan, Korea.

²Dongoh Life Science Co., Ltd. #301B Venture Center, 303 Cheonjam-ro Wansan-gu, Jeonju-si, Jeollabuk-do, Korea

³Kyungnong Co., Ltd., 13F, Dongoh B/D., 28 Hyoryeong-ro77gil, Secho-gu, Seoul, Korea

In this study, a sensitive, simple and reliable method for the quantification of curcumin in rat plasma was developed and validated using ultra performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry (UPLC-MS/MS). The plasma samples were prepared by liquid-liquid extraction, and terfenadine was used as an internal standard (IS). Chromatographic separation was achieved using a phenomenex kinetex C18 column (2.1 X 50 mm, 2.6 μ m) with a mobile phase consisting of 0.1 % acetic acid-acetonitrile (60:40, v/v). The precursor-product ion pairs used for multiple reaction monitoring were m/z 369 \rightarrow 177 (curcumin) and m/z 472 \rightarrow 436 (IS, terfenadine). A calibration curve for curcumin was constructed over the range 1-3000 ng/mL. The developed method was specific, precise and accurate. The validated method was successfully applied to a pharmacokinetic study of Dongoh water-soluble curcumin, a new formulation of curcumin with excipients in rats.

Keywords: Curcumin, UPLC-MS/MS, Pharmacokinetics, Rats

Rapid and accurate simultaneous determination of natural toxic pyrrolizidine alkaloid in medicinal plant by UPLC-ESI-Q-TOF

Won Tae Jeong, Hyun Ki Cho, Hyung Ryeol Lee, Ki Hoon Song and Heung Bin Li*

*Department of Industrial Crop Science & Technology,
Chungbuk National University Cheongju, Chungbuk 28644, Korea

*Corresponding author: heungbin@chungbuk.ac.kr

PAs (pyrrolizidine alkaloids) are secondary metabolites biosynthesized from plants and found in some 6,000 plants. Among them, 1,2-unsaturated PAs cause hepatotoxicity and genotoxicity in humans and animals and have been reported to be widely present in medicinal plants belong to *Asteraceae*, *Boraginaceae* and *Fabaceae*. Hence there is a need for analytic method that allows dangerous plant toxins to be determined. In this study, we set up an analytical method that can be used for rapid and accurate determination of nine toxin PAs in medicinal plants using UPLC-ESI-Q-TOF (ultra pressure liquid chromatography–electrospray ionization–quadrupole–time-of-flight mass spectrometry). The compounds were eluted on a C18 column with 0.1% formic acid and acetonitrile, and separated with good resolution within 11 min. Each of the separated components was characterized by precursor ions (generated by ESI-Q-TOF) and fragmentations (produced by collision-induced dissociation, CID), which were used as a reliable database. The proposed analytical method was verified in reference to the ICH guidelines and the results showed excellent linearity ($R^2 > 0.9951$), limit of detection (2 ng/mL to 6 ng/mL), limit of quantification (6 ng/mL to 21 ng/mL), intra-day and inter-day precisions (76.9% to 103.3%) for all components. The validated UPLC-ESI-Q-TOF method was applied to real sample, and a total of eight alkaloids were detected in three plants, of which four alkaloids were identified by matching with the reference compounds and the remaining alkaloids were tentatively identified. The QuEChERS extraction method was also the most efficient method for simultaneously extracting nine alkaloids. Our proposed method can be performed within 30 minutes from extraction to analysis and will be applied to various medicinal crops.

**Surface homogeneity enhancement of 2,5-Dihydroxybenzoic acid matrix
using on-target recrystallization by acetonitrile droplet in MALDI-MS dried-droplet
sample preparation**

원유광, 김여선, 이다빈, 박소영, 한솔, 최혜민, 김다희, 김정권*

충남대학교 화학과

*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

2,5-Dihydroxybenzoic acid (DHB) is one of the most common matrices used in matrix-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry (MALDI-MS) due to its robustness and wide-range of applications. However, samples prepared with DHB using dried-droplet preparation often produce heterogeneous distribution of analyte in the dried droplet surface, caused by various effects of thermodynamics and microfluidics during the drying process. In this research, we introduce recrystallization of surface deposits using acetonitrile (ACN) as a simple and effective method for enhancing homogeneity of analyte distribution, to increase reproducibility of MALDI-MS signals. Analyte and matrices were loaded on MALDI target plate and dried in atmospheric conditions, followed by a single-step recrystallization using an ACN droplet of different volumes (0.5, 1.0 or 1.5 μL). Preliminary optimization of recrystallizing solvent droplet's volume and drying conditions revealed significant improvements in crystal shape and size, compared to untreated droplets.

인 명 색 인

ㄱ		김다희	PF-055	김영희	SPⅢ-3
갈영주	PT-028	김다희	PF-056	김영희	SPⅢ-4
강동영	PT-094	김다희	PF-096	김예라	PF-063
강이영	PT-053	김단비	PF-019	김예지	PT-002
강이영	PF-031	김달호	PT-085	김왕유	Early Bird I
강종성	SPIV-1	김덕현	PT-014	김용두	PT-079
강주혜	PT-030	김동현	SPVI-3	김용두	PT-080
강주혜	PT-031	김만구	PT-018	김용두	PF-064
강주혜	PT-032	김만구	PT-019	김윤중	PF-034
강지환	PT-079	김만구	PT-023	김윤석	PT-006
강지환	PT-080	김문수	PT-014	김윤석	PT-007
고영환	PT-018	김민선	PT-029	김윤석	PT-008
고영환	PT-019	김민영	SS-3	김윤석	PF-068
고영환	PT-023	김민욱	PF-034	김윤지	PIIV-1
고원건	PT-094	김민정	PT-094	김윤지	PIIV-2
고은혜	PT-030	김병주	PF-084	김은영	PT-094
고은혜	PT-031	김보라	SPⅢ-3	김은정	PF-004
고재필	SPVI-2	김보라	SPⅢ-4	김은지	PF-016
고청아	PT-061	김복순	PT-009	김은지	PF-017
고혜인	PT-062	김복순	PT-010	김은화	PT-061
공광훈	PF-045	김상우	PF-063	김이혁	PF-066
국승우	PT-078	김상욱	PT-023	김인환	수상강연
권순동	PF-073	김선혜	PIⅢ-1	김재우	SPVI-1
권오승	PF-084	김선화	PT-032	김재호	PF-010
권정환	PT-026	김성남	PIⅢ-1	김정권	GF-7
김가해	PF-063	김성남	PT-064	김정권	PF-051
김건한	PT-068	김세훈	SPV-3	김정권	PF-052
김경문	PT-060	김수연	PF-045	김정권	PF-053
김경민	SPIⅢ-2	김수훈	PIIV-1	김정권	PF-054
김경호	SPIV-1	김수훈	PIIV-2	김정권	PF-055
김경호	SPIV-2	김숙현	SP I -3	김정권	PF-056
김규리	PF-046	김신	PF-072	김정권	PF-096
김기호	PT-078	김여선	GF-7	김정배	PT-001
김기환	PT-078	김여선	PF-051	김정배	PT-002
김남이	SPⅢ-2	김여선	PF-052	김정배	PT-004
김다운	PT-085	김여선	PF-053	김정배	PT-005
김다희	GF-7	김여선	PF-054	김정석	PT-091
김다희	PF-051	김여선	PF-055	김정은	PT-084
김다희	PF-052	김여선	PF-056	김정인	PT-008
김다희	PF-053	김여선	PF-096	김종윤	PT-092
김다희	PF-054	김영수	PT-016	김종환	PT-030

김중환	PT-031	민형식	PT-061	방유빈	PT-029
김주양	PT-017			배옥남	SS-3
김주영	PT-066	ㄴ		배현길	PF-064
김주훈	PIII-2	박가영	PF-071	백송이	SPII-3
김준일	PT-009	박경수	PF-016	백승제	PT-090
김준일	PT-010	박경수	PF-017	백승훈	SS-3
김진석	PT-083	박광서	PT-017	백옥진	PT-032
김진석	PT-084	박광서	PF-069	변진원	PT-062
김찬식	SPIII-4	박기완	PT-015	ㄷ	
김태규	PT-061	박미연	PF-063		
김태완	PF-063	박삿별	PF-010	서은지	PT-028
김한솔	PF-045	박선화	PT-014	서의영	PF-073
김현구	PT-014	박소영	GF-7	서주희	PT-018
김현구	PT-068	박소영	PF-051	서주희	PT-019
김현식	SPVI-3	박소영	PF-052	서주희	PT-023
김현지	SPIII-3	박소영	PF-053	서지혜	PF-073
김현지	SPIII-4	박소영	PF-054	서현정	PT-053
김형석	PT-008	박소영	PF-055	서현정	PF-031
김형수	PF-001	박소영	PF-056	설순희	PF-031
김형주	PF-018	박소영	PF-096	성재현	PT-002
김형진	PT-062	박시현	PT-001	성재현	PT-003
김휘진	PT-051	박신화	SPVI-2	성정문	PF-088
ㄹ		박아림	PF-031	손경진	PT-094
		박양순	PT-091	손병서	SPVI-3
나동희	SPIV-1	박양순	PT-092	손승환	PT-017
나동희	SPIV-3	박영복	PT-009	손정현	PF-082
나예슬	PT-087	박우용	SPIII-2	손정현	PF-083
ㄺ		박재현	PT-060	손정현	PF-084
		박재홍	SPIV-4	송윤채	PT-016
류건영	PT-013	박정용	PT-078	송준희	PT-013
류건영	PT-086	박종신	SPIII-2	신태섭	PF-048
류재정	PF-046	박준영	PT-027	신혜철	PT-062
류태인	SPIII-3	박준형	PT-018	신호상	PF-023
류태인	SPIII-4	박준형	PT-019	신호상	PF-050
류혜진	PT-018	박중철	SPVI-2	신효숙	PF-004
류혜진	PT-023	박진우	PF-083	심규영	PT-015
ㄻ		박진우	PF-084	ㅇ	
		박찬혁	PF-071		
문동민	PT-083	박춘화	SPIII-3	안건태	SPVI-2
문동민	PT-084	박춘화	SPIII-4	안병수	PT-083
문준관	PT-026	박태민	PT-028	안상복	PT-090
문혜미	SPVI-1	박태민	PF-038	안상호	PT-068
민승식	PF-018	박혜진	SS-3	안수진	PF-018
민형식	SP I -3	박희일	PF-010	안재찬	PT-010

안재형	PT-029	이경철	PT-016	이우람	PT-086
안정은	PT-016	이누리	PII-2	이유리	PF-016
양세희	PF-001	이다빈	GF-7	이유리	PF-017
양영모	PF-077	이다빈	PF-051	이유진	PT-027
양인석	PT-084	이다빈	PF-052	이윤형	PT-053
양정환	PIII-1	이다빈	PF-053	이은정	PT-006
양정환	PT-063	이다빈	PF-054	이인석	PT-001
양정환	PT-064	이다빈	PF-055	이인석	PT-002
양중석	SP I -4	이다빈	PF-056	이인석	PT-003
양지연	SP I -4	이다빈	PF-096	이인석	PT-004
연승언	PT-053	이덕환	PT-011	이인석	PT-005
연승언	PF-031	이덕환	PT-012	이인자	PT-009
오석진	PT-078	이돈민	PF-072	이인자	PT-010
오종명	PT-078	이동원	PT-032	이장호	PT-015
우미희	SPIV-1	이동필	PF-010	이재우	PT-063
우진춘	PF-064	이동호	PF-001	이정순	PF-063
원유광	GF-7	이미경	PT-005	이정이	PF-050
원유광	PF-051	이미은	PF-072	이종천	PT-015
원유광	PF-052	이민경	PF-010	이준균	PT-066
원유광	PF-053	이민영	PF-016	이준균	PT-067
원유광	PF-054	이민영	PF-017	이진경	PF-065
원유광	PF-055	이병훈	PII-2	이진복	PT-083
원유광	PF-056	이보현	PT-065	이진홍	PT-083
원유광	PF-096	이상규	SS-2	이진환	SPIII-3
유미영	PF-019	이상미	PT-025	이진환	SPIII-4
유석	PT-060	이상일	PT-079	이창환	Early Bird II
유정재	PF-046	이상일	PT-080	이하은	PT-015
유제욱	PF-082	이상호	PT-087	이학수	PF-048
유지혜	PT-068	이상희	PF-019	이학준	SPV-3
유혜진	PT-019	이선영	PT-087	이현선	PF-010
윤미애	PT-006	이선홍	PT-006	이현아	PT-068
윤미애	PT-007	이선홍	PT-007	이혜은	PT-032
윤상선	PF-082	이선홍	PT-008	이호선	PII-2
윤우현	PT-009	이선홍	PF-068	이호선	PT-025
윤우현	PT-010	이성광	PII-2	이호성	SPII-4
윤윤열	PT-088	이성광	PT-085	이효민	PT-029
윤은규	PF-064	이성배	PF-071	인상환	PF-018
윤은영	PIIV-1	이성우	PF-010	임경미	PT-068
윤은영	PIIV-2	이수용	PT-015	임명철	SP I -3
음철현	PT-011	이수현	SPIII-2	임무송	PF-004
음철현	PT-012	이승구	PII-1	임영란	SP I -3
이강진	PF-064	이승호	PF-034	임영란	PT-051
이경미	PT-014	이아영	PF-018	임영란	PT-061
이경석	SP I -3	이영미	PT-018	임용현	SP I -3
이경석	SPII-4	이영미	PT-019	임용현	SPII-4
이경석	PT-061	이영주	PT-065	임용현	PT-051

임정식 PF-063
 임지은 PF-004
 임철홍 PF-071
 임현희 PF-023
 임혜인 PF-082
 임호섭 SS-1
 임흥빈 PF-022

ㄷ

장광주 PF-019
 장수경 PT-009
 장영석 PT-063
 전신배 PT-079
 전인구 SPIV-1
 전지영 PII-2
 정경채 PT-078
 정관조 PT-009
 정관조 PT-010
 정남용 PT-016
 정다위 PT-015
 정래석 PT-029
 정성욱 PIII-1
 정성욱 PT-063
 정성욱 PT-064
 정세훈 SPVI-4
 정양홍 PT-090
 정영희 PT-062
 정원태 PF-022
 정유경 PF-001
 정은숙 PT-068
 정재학 PIII-3
 정재학 PT-069
 정재학 PT-086
 정정설 PT-062
 정종순 PT-010
 정종진 PT-053
 정종진 PF-031
 정종진 PF-034
 정지선 PT-051
 정지선 PF-084
 정진미 SPIII-2
 정현미 PT-014
 정희경 PT-053
 조금중 PF-088

조남준 PF-048
 조다희 SPVI-2
 조요셉 PF-082
 조유정 PT-062
 조은민 PIIIV-1
 조은민 PIIIV-2
 조은상 PF-071
 조인진 PT-069
 조지미 PF-010
 조지은 PT-023
 조진선 PF-073
 조태훈 PIII-2
 조현기 PF-022
 조현주 PF-045
 조형욱 PT-026
 주영원 PIII-2
 주현경 SPIII-2
 진경식 PII-3
 진미정 PII-2
 진미정 PT-025

ㄹ

차상원 PT-027
 차상원 PT-028
 차상원 PF-038
 최민규 PT-001
 최민규 PT-002
 최민규 PT-004
 최민규 PT-005
 최민영 PT-014
 최병인 PT-068
 최병일 PT-060
 최성화 PF-016
 최성화 PF-017
 최승윤 PT-013
 최원명 PT-011
 최원명 PT-012
 최원석 PT-007
 최원석 PT-008
 최원석 PF-068
 최은경 PT-017
 최은경 PF-069
 최은미 PF-016
 최은미 PF-017

최은영 PT-030
 최은영 PT-031
 최재원 PT-007
 최재하 PII-3
 최정희 PT-015
 최제남 PF-088
 최하정 PII-2
 최하정 PT-025
 최현영 SPVI-2
 최현주 PF-010
 최현철 PF-004
 최혜민 GF-7
 최혜민 PF-051
 최혜민 PF-052
 최혜민 PF-053
 최혜민 PF-054
 최혜민 PF-055
 최혜민 PF-056
 최혜민 PF-096
 주의성 PT-069

ㄴ

트란 호영 PT-051

ㄷ

표성수 SPV-4
 표재성 SS-3

ㄹ

하상수 PT-064
 하영경 PT-091
 한명섭 SP I-3
 한명섭 PT-061
 한보영 PF-084
 한상원 PT-062
 한솔 GF-7
 한솔 PF-051
 한솔 PF-052
 한솔 PF-053
 한솔 PF-054
 한솔 PF-055
 한솔 PF-056
 한솔 PF-096
 한재철 PF-077

허규성	PF-046	Chai Uk Lim	PF-012	E	
허상철	SPIII-2	Chang-Hee Kang	GF-3	Emad S. Goda	PT-076
허성우	SP I -3	Chang-Hee Kang	GF-4	Euiyoung Shin	PF-074
허성우	PT-051	Chang-Hee Kang	PF-092	Eun A Chong	PF-003
허성우	PT-061	Chang-Hee Kang	PF-093	Eun Bi Kang	PT-056
현성예	PT-030	Changhee Lee	PT-093	Eun Hee Keum	PF-007
현성예	PT-031	Changhee Lee	PF-009	Eun Jeong Kim	PF-005
현승민	PT-018	Chang-Hwan Eum	PF-035	Eun Joo Koo	PF-007
현승민	PT-019	Chang-Seon MYUNG	PT-038	Eun Jung Jang	PF-005
홍기룡	PT-083	Cheong-Weon CHO	PT-038	Eun Kyu Lee	PF-042
홍기룡	PT-084	Chong Woon CHO	PT-037	Eunhee Jeon	PT-077
홍원해	PT-009	Chong Woon CHO	PT-038	Eunhye Lee	PF-009
홍원해	PT-010	Chong Woon CHO	PT-039	Eunjin Jang	PF-035
황보람	SP I -4	Chong Woon Cho	PT-040	G	
황소정	PF-001	Chong Woon CHO	PT-041	Ga Young Jung	PF-007
황승울	SPIII-3	Christopher Söderberg	PF-030	Ga-Hyun Han	PT-043
황승울	SPIII-4	Chungsik Min	PT-033	GAO DAN	PT-039
황의진	SP I -3	Chungsik Min	PT-034	Geon-Yoon Kim	GF-4
황의진	SPII-4	Claudia Zielke	PF-028	Geon-Yoon Kim	PF-093
황정현	SPV-1	D		Gi Beom Kim	PF-042
A		Dae-Jung Kim	PF-013	Gil Jin Kang	PF-003
Aeran Jung	PT-093	Daniel Osorio	PF-024	Gyeongyeol Kim	PF-009
Ah Ram Choi	PT-096	Dasom Jung	PT-045	H	
Ah Ryeong Kim	PT-057	Dasom Jung	PT-046	Haein Cheon	PT-033
Anca Raluca Muresan	PF-087	Dasom Jung	PT-047	Haein Cheon	PT-034
B		Dasom Jung	PT-048	Haksoon Kim	PF-085
Bo Young Han	SPII-1	Dawon OH	PT-055	Han Bin Oh	PF-085
Bobae Kim	PF-026	Do Hyeong Kim	PF-008	Han Na Cha	PF-075
Bom Nae Lee	PF-003	Dong Hyuk Seo	PF-005	Han Na Park	PT-093
Bong Chul Chung	PF-085	Dong Sul Kim	PF-008	Han-jung Cho	PF-079
Bum-Hee Kim	PT-044	Dong-Hee Na	PT-043	Hanna Cha	PF-076
Byeongjun Kim	PT-071	Dong-Ho Kim	PII-4	Ha-Yeong Lee	PT-035
Byoung-bok Lim	PT-093	Dong-Ho Kim	PF-011	Hee Joung Joung	GF-5
Byung Man Chae	PT-020	Dong-Ho Kim	PF-012	Hee Joung Joung	PF-094
Byungjoo Kim	PF-086	Dong-Ho Kim	PF-013	Hee-Chang Shin	PF-013
C		Dong-Jae Baek	GF-1	Heejin Lee	PT-021
Catalina Fuentes	PF-027	Dong-Jae Baek	PF-090	Heejin Lee	PT-022
Catalina Fuentes	PF-028	Dongsul Kim	PF-009	Heejin Lee	PT-054
Catalina Sandra Fuentes Zenteno	PF-029	Dongsup Song	PT-077	Heejin Lee	PT-056
Chae Uk Lim	PII-4	Dongsup Song	PF-024	Heejin Lee	PT-057
Chai Uk Lim	PF-011	Dongwon Chang	PT-070	Hee-Ju Kang	GF-4
		Don-Min Lee	PF-089	Hee-Ju Kang	PF-093
		Doo Soo Chung	PF-040		

Heekyoung Jung	PT-074	Hyojin Kim	PT-034	In-Koo Chun	PT-043
Heesoo Lee	PT-045	Hyo-Sun Yang	GF-3	Insook Rhee	PF-020
Heesoo Lee	PT-046	Hyo-Sun Yang	PF-092	Insook Rhee	PF-061
Heesoo Lee	PT-047	Hyub Kim	PT-052		
Heesoo Lee	PT-048	Hyun Chul Lee	PT-095	J	
Heung Bin Li	GF-6	Hyun Jeong Seo	PF-032	J. Mauricio Peñarrieta	PF-024
Heung Bin Li	PF-095	Hyun Ji Kim	PT-044	J. Mauricio Peñarrieta	PF-028
Hisfazilah Saari	PF-027	Hyun Jun Kim	PT-040	Jae Hee Hyun	PF-008
Ho Jin Kim	PF-014	Hyun June KIM	PT-037	Jae Hwan Lee	PF-047
Ho Jin Kim	PF-015	Hyun Jung Seo	PF-033	Jae I Kim	PF-008
Hoeil Chung	PT-049	Hyun Ki Cho	GF-6	Jae Jeong Ryu	PF-047
Hoeil Chung	PF-035	Hyun Ki Cho	PF-095	Jaeick Lee	PF-086
Hoil Kang	PT-093	Hyun Kyoung Ju	PT-096	Jaejin Kim	PT-049
Hoil Kang	PF-002	Hyun Namgoong	PF-074	Jae-Min An	PF-013
Hophil Min	PF-087	Hyun So CHO	PT-038	Jae-Min Lim	PF-049
HO-SANG SHIN	GF-2	Hyun-cheol Choi	PF-005	Jae-Seok Kang	PF-044
HO-SANG SHIN	PF-091	Hyung Ryeol Lee	GF-6	Jaeseon Lee	PT-054
Ho-Young Choi	PT-089	Hyung Ryeol Lee	PF-095	Jaewan Park	PF-009
Hwa-Dong Lee	PT-035	Hyunhwa Son	PT-050	Jaeyong Lee	PF-070
Hwashim Lee	PT-081	Hyunjeong Cho	PII-4	Jaeyeong Choi	PT-059
Hwashim Lee	PT-082	Hyunjeong Cho	PF-011	Jaeyeong Choi	PT-076
Hye Hyun Yoo	PII-1	Hyunjeong Cho	PF-012	Jaeyeong Choi	PF-024
Hye Hyun Yoo	GF-5	Hyunjeong You	PF-009	Jaeyeong Choi	PF-025
Hye Hyun Yoo	PT-042	Hyun-Joo Jo	PF-043	Jaeyeong Choi	PF-026
Hye Hyun Yoo	PF-041	Hyun-Jun Jang	PF-021	Jaeyeong Choi	PF-027
Hye Hyun Yoo	PF-042	Hyunjung Seo	PT-073	Jaeyeong Choi	PF-028
Hye Hyun Yoo	PF-094	Hyunjung Seo	PT-077	Jaeyeong Choi	PF-029
Hye Soon Kang	PF-005	Hyun-wook Kong	PF-079	Jaeyeong Choi	PF-030
Hye Won Choi	PF-043			Jaeyoung Shim	PF-009
Hye Young Lee	PF-007	I		Jangjae Lee	PT-076
Hyein Kim	PF-087	Il-young Ahn	PF-006	Jeong Hoon Park	PF-042
Hye-mi Kim	PF-078	In Hee Go	PF-067	Jeong Min Lee	PF-014
Hyemin Kim	PT-058	In Seon Kim	PF-008	Jeong Min Lee	PF-015
Hyeon-Cheol Choi	PF-006	In Soo Lee	PT-021	Jeong Sik Lim	PF-062
Hyeong Won Mun	PT-024	In Soo Lee	PT-022	Jeongae Lee	PF-085
Hyeyoung Jung	PF-059	In Soo Lee	PT-056	Jeongmi Lee	PT-045
Hyo Young Kim	PII-4	In Sook CHO	PT-036	Jeongmi Lee	PT-046
Hyo Young Kim	PF-011	In Sook Kim	PF-042	Jeongmi Lee	PT-047
Hyo Young Kim	PF-012	In Yong Bae	PT-042	Jeongmi Lee	PT-048
Hyojin Kim	PT-033	In-Ha Hwang	PF-089	Jeongsoon Lee	PF-062

Ji Eun Park	PF-007	Jong Sung Ahn	PF-015	Keunbae Park	PT-048
Ji Hyun Lee	PT-093	Jong-Bum Kim	PT-035	Khandoker Asiqur Rahamar	PF-087
Ji-Bum Lee	PT-035	Jongjin Jung	PT-072	Khilola Nazrullaeva	GF-1
Ji-Hee Kim	PF-002	Jongjin Jung	PT-073	Khilola Nazrullaeva	PF-090
Ji-Ho Jeong	PF-021	Jongjin Jung	PT-074	Ki Hoon Song	GF-6
Ji-Ho Jeong	PF-039	Jongjin Jung	PT-075	Ki Hoon Song	PF-095
Jihye Kim	SPⅡ-2	Jongjin Jung	PT-077	Ki Hun Kim	PF-086
Jihye Kim	PT-059	Jongjin Jung	PF-032	Kihwan Choi	SPⅡ-2
Ji-Hye Shin	PF-006	Jongki Hong	PT-044	Kihyun Kim	PT-070
Jihyun Bae	PT-054	Jongki Hong	PF-036	Ki-Jung Paeng	PT-024
Jihyun Bae	PT-055	Jongkook Lee	PT-093	Kisuck Sung	PT-072
Jihyun Bae	PT-070	Jong-Seong Kang	PT-043	Kun Cho	PF-070
Jihyun Bae	PT-071	Jong-Woo Lee	PF-080	Kwang-Hoon Kong	PF-043
Jihyun Bae	PT-072	Joo Hee Chung	PF-070	Kwang-Hoon Kong	PF-044
Ji-hyun Bae	PT-021	Joonshik Park	PF-009	Kwangsoo Lee	PF-009
Ji-hyun Bae	PT-022	Joontaek Park	PT-076	Kwangsoo Yoo	PF-009
Ji-hyun Bae	PT-056	Joung Kyu Park	PF-032	Kyeong Ho Kim	PT-043
Jimin Oh	PF-061	Joung Kyu Park	PF-033	Kyeong Wook Kim	PF-008
Jin Bok Lee	PT-040	Jun Ho Shin	PF-075	Kyong Eun Yu	PT-021
Jin Hee Lee	PF-007	Jun Ho Shin	PF-076	Kyong Eun Yu	PT-022
Jin Hyeok Kim	PT-040	Jun Sang Yu	GF-5	Kyong Eun Yu	PT-056
Jin Hyeok KIM	PT-041	Jun Sang Yu	PF-041	Kyong Eun Yu	PT-057
Jin Mee Jung	PT-096	Jun Sang Yu	PF-094	Kyong-Suk Hong	PF-013
Jin Seog Kim	PT-040	Jun Sik Lee	PF-076	Kyoung-Min Kim	PT-096
Jinee Choi	PT-075	Jung Hee Han	SPV-2	Kyoung-Moon Han	PT-033
Jinhee Um	PF-036	Jung Eun Lee	PF-008	Kyoung-Moon Han	PT-034
Jin-Kyoung Kim	PF-081	Jung-Min Lee	PF-089	Kyu-Ho Kim	PF-080
Jin-Seon Shin	PF-006	Jung-Min Song	GF-3	Kyu-Ho Kim	PF-081
Ji-Sook Min	PT-096	Jung-Min Song	GF-4	Kyung Ju Jang	PF-067
Jinsook Lee	PT-050	Jung-Min Song	PF-092	Kyung Tae KIM	PT-036
Jisu Hur	PT-044	Jung-Min Song	PF-093	Kyunghun Son	PT-033
Ji-Sun Kim	PF-021	Jun-Oh Bu	GF-3	Kyunghun Son	PT-034
Ji-Sun Kim	PF-039	Jun-Oh Bu	GF-4	Kyung-Ran Min	GF-1
Ji-Yeon Kim	PF-049	Jun-Oh Bu	PF-092	Kyung-Ran Min	PF-090
Jong Jin Jung	PF-033	Jun-Oh Bu	PF-093	Kyungwon Seo	PT-033
Jong Seong KANG	PT-036	Juyoung Hwang	PF-009	Kyungwon Seo	PT-034
Jong Seong KANG	PT-037				
Jong Seong KANG	PT-038	K		L	
Jong Seong KANG	PT-039	Ke Li	PT-045	Lars Nilsson	SP I -1
Jong Seong Kang	PT-040	Ke Li	PT-046	Lars Nilsson	PT-058
Jong Seong KANG	PT-041	Ke Li	PT-048	Lars Nilsson	PF-024
Jong Shin Park	PT-096	Kean-hee Ko	PF-036	Lars Nilsson	PF-025
Jong Suk Lee	PF-075	Keunbae Park	PT-045	Lars Nilsson	PF-026
Jong Suk Lee	PF-076	Keunbae Park	PT-046	Lars Nilsson	PF-027
Jong Sung Ahn	PF-014	Keunbae Park	PT-047	Lars Nilsson	PF-028

Lars Nilsson	PF-029	Myung-Hee Kang	PF-006	Seongho Lee	PT-054
Lars Nilsson	PF-030			Seongho Lee	PT-055
Li Ke	PT-047	N		Seongho Lee	PT-070
Lyun-kyung Kim	GF-3	Nam Yee Kim	PT-096	Seongho Lee	PT-072
Lyun-kyung Kim	PF-092	Nam-Sook Kim	PF-002	Seongho Lee	PT-076
M		O		Seong-Kyu Ahn	SP II-1
Maftuna Shamshiddinova	GF-1	Oh-Seung Kwon	PF-086	Seul Ki Han	SP II-1
Maftuna Shamshiddinova	PF-090	Oh-Seung Kwon	PF-087	Seulgi Kang	PT-045
Malin Sjöo	PF-027			Seulgi Kang	PT-046
Man Bae Huh	PT-095	R		Seulgi Kang	PT-047
Marie Wahlgren	PF-027	Rheeda Lee	PT-033	Seulgi Kang	PT-048
Marie Wahlgren	PF-030	Rheeda Lee	PT-034	Seulgi Lee	PT-081
Mats Leeman	PF-029			Seung Eon Yeon	PF-033
Mee Hyun Cho	PF-007	S		Seungah Lee	PF-037
Meiyu Zhang	PF-025	Sang Chul Bae	SP V-2	Seungeon Yeon	PT-074
Meiyu Zhang	PF-026	Sang Chul Huh	PT-096	Seungeon Yeon	PT-075
Mi Hee Woo	PT-043	Sang Hoon Cho	PT-049	Seungho Lee	PT-021
Mi Hyune Oh	PF-007	Sang Moon Han	PF-086	Seungho Lee	PT-022
Mi Ja Lim	PF-070	Sanga Lee	PT-081	Seungho Lee	PT-056
Mi Jin Lee	PF-014	Sang-Hoon Woo	PT-043	Seungho Lee	PT-057
Mi Jin Lee	PF-015	Sang-myeong Park	PT-033	Seungho Lee	PT-058
Mi Sook Kim	PF-007	Sang-myeong Park	PT-034	Seungho Lee	PT-059
Mi Yeon Park	PT-040	Sangseop Kim	PT-033	Seungho Lee	PT-071
Mi Young Son	PT-020	Sangseop Kim	PT-034	Seungho Lee	PT-077
Mi-Hyun Ka	SP I -2	SE Chul Hong	PT-020	Seungho Lee	PF-024
Mihyun Kim	PF-061	Se Young Ahn	PT-071	Seungho Lee	PF-025
Mihyun Lee	PT-022	Se-Hwan Park	SP II-1	Seungho Lee	PF-026
Mihyun Lee	PT-055	Sehyun Kim	PF-058	Seungho Lee	PF-027
Mihyun Lee	PT-056	Seo Young YANG	PT-036	Seungho Lee	PF-028
Mihyun Lee	PT-057	Seo Young YANG	PT-037	Seunghwa Lee	PF-086
Mihyun Lee	PT-021	Seo Young YANG	PT-039	Seunghwa Lee	PF-070
Min Ho YOON	PT-038	Seok Hwan Lee	PT-020	Seunghwan Paek	PF-074
Min Sun Choi	PT-042	Seok Jin KIM	PT-038	Seung-jae Lee	PF-032
Min Sun Choi	PF-041	Seon Hwa Jeong	PF-067	Se-Woong Park	PF-044
Min-Ju kim	PT-035	Seon Yeong Jo	PF-043	Seyoung Yoon	PT-021
Minwook Kim	PT-021	Seong Ho Choi	PT-021	Seyoung Yoon	PT-022
Minwook Kim	PT-022	Seong Ho Choi	PT-022	Seyoung Yoon	PT-056
Minwook Kim	PT-072	Seong Ho Choi	PT-056	Seyoung Yoon	PT-057
Mi-Ok Kim	PF-006	Seong Ho Choi	PT-057	Sheen Hee Kim	PF-003
Mi-Ran Kim	PF-006	Seong Ho Choi	PT-058	So Yoon Jung	PF-067
Miran Noh	PF-009	Seong Ho Kang	PIIV-3	So Young Chun	PF-003
Moo Song Lim	PF-005	Seong Ho Kang	PF-037	So Young Won	PF-008
Moonhee Jang	PF-042	Seongho Choi	PT-059	Soae Ji	PT-033
				Soae Ji	PT-034

So-Hyun Kim	PF-080	T		Yan Jin	PT-047
So-Hyun Kim	PF-081	Tae Jeong KIM	PT-038	Yan Jin	PT-048
Song-Yi Gu	PF-013	Tae Jung Kim	PT-040	Yang Sun Kim	PF-007
Soo Min Park	PF-014	Tae Myung Sung	SPⅢ-1	Yelin Lee	PF-060
Soo Min Park	PF-015	Tae-Hong Park	SPII-2	Yeongsuk Yoo	PF-070
Soo-Hyun Choi	PF-049	Taewan Kim	PF-062	Yeonjeong Jung	PT-050
Sookhee Ha	PF-009	Thi Phuong Duyen VU	PT-036	Yong Seok Choi	PT-046
Sook-Young Park	GF-3	Thuy-Vy Pham	PT-043	Yong Woo Shin	PF-006
Sook-Young Park	PF-092	Tsuyoshi Tanaka	PII-1	Yongae Kim	PF-021
Soon Hee Seol	PF-032	Tung Duy Vu	PF-035	Yongae Kim	PF-039
Soon Hee Sul	PF-033	V		Yonghui Zhang	PF-041
Soon Kil Cho	PF-014	Vilhelm Ek	PF-030	Yong-Kyoung Kim	PF-013
Soon Kil Cho	PF-015	VU THI HOANG VAN	GF-2	Yong-Kyu Choi	PT-033
Soonhee Seol	PT-074	VU THI HOANG VAN	PF-091	Yong-Kyu Choi	PT-034
Soonhee Sul	PT-073	W		Yong-Moon Lee	GF-1
Soonhee Sul	PT-075	Won Tae Jeong	GF-6	Yong-Moon Lee	PF-090
Soo-Young Kim	GF-4	Won Tae Jeong	PF-095	Yonhun Lee	PF-005
Soo-Young Kim	PF-093	Won-Ho In	PT-089	Yoon Hyoung Lee	PF-032
Soyeon Kwon	PF-020	Wonkyung Yang	PF-042	Yoonhyoung Lee	PT-073
Soyoung Ahn	PF-057	Wonwoong Lee	PF-036	Yoonjeong Lee	PT-049
Soyoung Ahn	PF-060	Woo Jin Cho	PF-008	Yooyoung Jung	PF-006
Su Hyeon Lee	PT-096	Woo Jung Kim	PF-075	Young Ho KIM	PT-036
Su Min Hong	PF-012	Woo Jung Kim	PF-076	Young Ho KIM	PT-037
Su-Jin Kum	PT-043	Woo Seong Kim	PF-008	Young Ho KIM	PT-038
Sujin Park	PT-082	Woonjung Kim	PT-021	Young Ho KIM	PT-039
Sumin Hong	PII-4	Woonjung Kim	PT-022	Young Ok Kim	PF-076
Su Min Hong	PF-011	Woonjung Kim	PT-022	Young Seok Gi	PT-042
Sun Ho Chung	PF-075	Woonjung Kim	PT-054	Young Seok Ji	PF-041
Sun Ho Chung	PF-076	Woonjung Kim	PT-055	Young-Ah Woo	PT-049
Sung-Jun Lee	PF-044	Woonjung Kim	PT-055	Youngbeom Kwak	PT-095
Sung-jun Lim	PT-093	Woonjung Kim	PT-056	Younggyu Kim	PF-032
Sung-Kwan Park	PT-093	Woonjung Kim	PT-057	Younghee Lee	PT-070
Sung-Kwan Park	PF-002	Woonjung Kim	PT-058	Youngji Jung	PF-009
Sung-Ok Moon	PT-035	Woonjung Kim	PT-059	Young-Seok Oh	PF-005
Sung-Woo Lee	PT-089	Woonjung Kim	PT-070	Yu Mee Han	GF-5
Sun-Hee Moon	PF-002	Woonjung Kim	PT-071	Yu Mee Han	PF-094
Sunhee Park	PF-009	Woonjung Kim	PT-072	Yun Gyong Ahn	PF-070
Sunkyung Jeong	PF-040	Woo-Yong Park	PT-096		
Sunyoung Bae	PT-096	X			
Sunyoung Bae	PF-057	Xuan-Lan Mai	PT-043		
Sunyoung Bae	PF-058	Y			
Sunyoung Bae	PF-059	Yan Jin	PT-045		
Sunyoung Bae	PF-060	Yan Jin	PT-046		
Suresh Kumar Chakkarapani	PIIV-3				
Suresh Mandava	PT-093				

총회 식순

일 시: 2018. 11. 15(목), 17:40

장 소: 대명리조트 거제마리 A동 지하 3층 그랜드볼룸

사 회: 배선영 사무총장

개 회

국민의례

개회사 (한국분석과학회 이승호 회장)

시상

- DI 분석과학상
- 성문 우수 논문상
- Leco 젊은 분석과학자상
- 우수 구두 발표 상
- 우수 포스터 상

결산 및 업무 보고

- 2018년도 업무 보고
- 2018년도 수입 · 지출 현황
- 2019년도 임원(안)
- 차기 수석부회장 선거 결과
- 2019년도 사업계획서(안)
- 2019년도 예산(안)

심의 안건 및 토의

- 기타 안건 및 토의

폐회 선언

- 학회기 전달

제61회 추계 학술대회 상

DI 분석과학상

대구대학교 김인환 교수

귀하는 다년간 분석과학 분야의 학술연구에 전념하여 우수한 논문을 다수 발표하였을 뿐만 아니라, 본 학회의 발전에 크게 공헌하였으므로 이 상패를 드립니다.

2018년 11월 15일
사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

성문 우수 논문상

한양대학교, (주)에이스엔
김기현, 안지원, 김용현, 송희남

본 학회의 Analytical Science & Technology에 게재된 「약취성 유기지방산 성분의 분석기술」이라는 논문이 피 인용지수가 높은 우수 논문으로 선정되어, 본 학회의 발전에 지대한 공헌을 하였기에 이 상패를 드립니다.

2018년 11월 15일
사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

Leco 젊은 분석과학자상

한양대학교 유혜현 교수

귀하는 분석과학 관련 분야의 연구 업적이 탁월하며 학문적 창의성과 잠재력이 많은 젊은 분석과학자에게 수여하는 학술상 수상자로 선정되었기에 이 상패를 드립니다.

2018년 11월 15일
사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

우수 구두 발표 상

충북대학교 Maftuna Shamshiddinova

귀하는 2018년도 제60회 춘계 학술대회에서 「HPLC separation of carnosine enantiomers by using pre-column derivatization method」 라는 논문을 발표하여 우수 구두 발표 상으로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2018년 11월 15일

사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

우수 구두 발표 상

한양대학교 배 인 용

귀하는 2018년도 제60회 춘계 학술대회에서 「Validation of analytical method for determination of HSG4112(S) and HSG4112(R) using UPLC-MS/MS」 라는 논문을 발표하여 우수 구두 발표 상으로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2018년 11월 15일

사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

우수 구두 발표 상

한양대학교 Tung Duy Vu

귀하는 2018년도 제60회 춘계 학술대회에서 「Nickel foam caging Ag-Au bimetallic nanostructure as a SERS substrate」 라는 논문을 발표하여 우수 구두 발표 상으로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2018년 11월 15일

사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

우수 구두 발표 상

중앙대학교 안 진 영

귀하는 2018년도 제60회 춘계 학술대회에서 「Determination of phthalate metabolites in human milk for environmental monitoring research」 라는 논문을 발표하여 우수 구두 발표 상으로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2018년 11월 15일

사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

우수 포스터 상

경희대학교 **【허지수, 박나현, 김범희, 홍종기】**

위 연구진은 2018년도 제60회 춘계 학술대회에서 「Rapid screening and confirmation of 98 illegal adulterants in dietary supplement and sp using extracted common ion chromatograms and neutral loss scan by UHPLC-Q/TOF-MS」 라는 논문을 발표하여 우수 포스터로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2018년 11월 15일

사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

우수 포스터 상

한국과학기술연합대학원대학교, 한국표준과학연구원
【김휘진, 이종화, 임영란, 황의진, 임용현, 허성우, 민형식, 임명철, 이경석】

위 연구진은 2018년도 제60회 춘계 학술대회에서 「동위원소희석 질량분석법을 이용한 굴 내 수은 측정을 위한 인증표준물질의 개발」 이라는 논문을 발표하여 우수 포스터로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2018년 11월 15일

사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

우수 포스터 상

강원대학교 **【서주희, 조지은, 이용휘, 김만구】**

위 연구진은 2018년도 제60회 춘계 학술대회에서 「현장 Olfactometer의 성능평가 - 국내 적용 가능성」 이라는 논문을 발표하여 우수 포스터로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2018년 11월 15일

사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

우수 포스터 상

서울여자대학교 **【이예린, 안소영, 배선영】**

위 연구진은 2018년도 제60회 춘계 학술대회에서 「Colorimetric determination of Zinc ion using Zinc Ion Imprinted Polymer」 라는 논문을 발표하여 우수 포스터로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2018년 11월 15일

사단법인 한국분석과학회 회장 이 승 호

2018년도 업무 보고

2018. 01. 01 ~ 2018. 11. 16

[추진 사항]

- 01.11 2018년도 제1차 이사회 개최 및 신년 하례식**
- 01.16 신 임원 명단 보고 및 승인 신청 (국립과천과학관)
- 01.23 창립 30주년 준비위원회 회의
- 01.25 부가가치세 2기 확정 신고
- 01.29 2018년도 1차 연회비 청구
- 01.31 2017년도 사업 실적 보고서 제출(과총)
- 02.25 분석과학회지 Vol. 31(1) 발간
- 02.28 비영리 법인 업무 현황(2017년 사업 실적 및 2018년 사업 계획) 제출 (국립과천과학관)
- 03.02 제60회 춘계 학술대회 홍보 포스터 발송
- 03.02 영인 분석과학자상, Leco 젊은 분석과학자상 추천 공고
- 03.14 창립 30주년 준비위원회 회의
- 03.20 공익법인 사업계획 및 예산보고서, 사업실적 및 결산 보고서 제출(국립과천과학관)
- 03.20 국내 학술지, 학술대회 지원금 신청(과총)
- 04.12 2018년도 제2차 이사회 개최, 영인 분석과학자상, Leco 젊은 분석과학자상 선정, 춘계 학술대회 보고 등**
- 04.16 창립 30주년 준비위원회 회의
- 04.25 부가가치세 1기 예정 신고
- 04.25 분석과학회지 Vol. 31(2) 발간
- 04.25 제60회 춘계 학술대회 일정 홈페이지 공지
- 05.17-18 제60회 춘계 학술대회 (경주 현대 호텔/ 창립 30주년 기념행사)**
- 06.25 분석과학회지 Vol. 31(3) 발간
- 07.04 2018년도 2차 연회비 청구
- 07.20 2019년 수석부회장 선거 일정 공고
- 07.25 부가가치세 1기 확정 신고
- 08.16 Leco 젊은 분석과학자상 추천 공고
- 08.16-31 2019년 수석부회장 투표
- 08.22 DI 분석과학자상 선정위원회 구성
- 08.25 분석과학회지 Vol. 31(4) 발간
- 08.30 2018년도 고문회의 개최
- 08.31 제61회 추계 학술대회 홍보 포스터 발송
- 09.04 DI 분석과학자상 추천위원회 회의
- 09.11 2019년 수석부회장 개표 진행
- 10.11 2018년도 제3차 이사회 개최. 차기 수석부회장 의결, DI 분석과학자상, Leco 젊은 분석과학자상, 우수 논문상 선정, 차기임원 선임, 추계 학술대회 보고 등**
- 10.25 부가가치세 2기 예정 신고
- 10.25 분석과학회지 Vol. 31(5) 발간
- 11.15-16 제61회 추계 학술대회 및 총회 (대명리조트 거제마리나)**

[예정 사항]

- 12.25 분석과학회지 Vol. 31(6) 발간

2018년도 수입 · 지출 현황

(2018.01.01. ~ 2018.10.31.)

수 입		지 출	
세 과 목	금 액(원)	세 과 목	금 액(원)
1. 회 비	10,723,777	1. 학회지	14,258,780
개인회비(일반)	5,809,584	학회지 발간비	7,441,500
(학생)	1,870,668	학회지 발송비	1,887,090
도서관회비	398,185	편집운영비	4,930,190
단체 회비	1,188,900	2. 이사회 운영비	6,575,000
종신회비	1,456,440	활동비	5,055,000
2. 학술대회	120,584,026	교통비	1,520,000
춘계 학술대회	83,670,262	3. 임원 활동비	6,136,590
추계 학술대회	36,913,764	활동비	5,161,490
3. 학회지	33,998,077	교통비	975,100
광고료	27,500,000	4. 사무관리비 및 기타	92,364,913
논문 게재료	4,307,693	우편 및 택배	895,860
저작권료	2,190,384	사무용품 & 잡비	1,895,180
4. 과총 지원금	10,730,000	급여 및 상여금	25,664,130
국내 학술대회	3,490,000	전화 및 팩스사용료	591,763
국내 학술지	7,240,000	이체 수수료	30,100
5. 전년도 적립금	50,000,000	사무실 관리비	1,749,600
6. 전년도 이월금	200,877,880	세무사 기장료	2,629,000
우리은행 입출금통장	191,764,120	과총 연회비	1,500,000
우체국 통장	9,113,760	카드기 임대료	110,000
7. 기타 수입	613,905	법인 등기비	357,240
이자수입	613,905	교통 및 출장비	1,402,040
		카드기 정보 변경비	30,000
		이니시스 연관관리비	220,000
		30년사 인쇄 및 집필료	18,000,000
		HPLC 수익 분배금	37,290,000
		5. 학술대회	69,579,113
		춘계 학술대회	67,046,145
		추계 학술대회	2,532,968
		6. 세 금	6,895,380
		재산세	396,240
		부가세	3,006,320
		법인세	1,219,800
		주민세(법인)	143,820
		4대 보험료(기관부담)	2,129,200
		7. 당해년도 적립금	100,000,000
		8. 잔 액	131,717,889
		우리은행 입출금 통장	72,580,922
		농협 입출금 통장	50,019,377
		우체국 통장	9,117,590
합 계	427,527,665	합 계	427,527,665

총 잔액 ₩ 231,717,889 (당해년도 적립금+잔액)

2019년도 임원(안)

직위	이 름	소속
회장	조남준	한국기술교육대학교 에너지신소재·화학공학부
감사	배선영	서울여자대학교 화학과
감사	한상범	중앙대학교 약대
수석부회장	김진석	한국표준과학연구원
총무부회장	정두수	서울대학교 화학과
사무총장	이정미	성균관대학교 약학대학
학술부회장	홍종기	경희대학교 약학과
홍보부회장	류재정	경북대학교 화학교육과
편집위원장(부회장)	이원용	연세대학교 화학과
부회장(화학)	명승운	경기대학교 화학과
부회장(화학)	김종혁	한국화학연구원 분석센터
부회장(화학)	선일식	한국화학융합시험연구원 화학환경본부
부회장(환경)	신호상	공주대학교 사범대학 환경교육과
부회장(환경)	김기현	한양대학교 건설환경공학과
부회장(약학)	이용문	충북대학교 약학대학
부회장(약학)	강중성	충남대학교 약학과
부회장(재료/섬유)	박신화	포항산업과학연구원 분석평가그룹
부회장(식품/농화학)	김동술	식품의약품안전처 식품의약품안전평가원
부회장(식품/농화학)	표희수	한국과학기술연구원 생체대사연구센터
부회장(표준/원자력/안전)	송규석	한국원자력연구원 원자력화학연구부
부회장(법과학)	김남이	서울과학수사연구소
부회장(여성분과)	신선경	국립환경과학원 환경자원연구부
부회장(산학연분과)	김혁년	LG display 파주분석팀
이사(식품/농화학)	안장혁	차의과학대학교 식품생명공학과
이사(약학)	권성원	서울대학교 약학대학
이사(환경)	김희갑	강원대학교 환경학과
이사(재료/섬유)	최은경	한국생산기술연구원 섬유소재본부
이사(총무간사)	김주훈	경희대학교 화학과
이사(총무간사)	최기환	한국표준과학연구원
이사(총무간사)	장혜원	한국식품연구원 분석센터
이사(학술간사)	김정권	충남대학교 화학과
이사(학술간사)	김광표	경희대학교 응용화학과
이사(재무)	김태욱	한경대학교 환경공학과
이사(재무)	송준명	서울대학교 약학대학
이사(학술)	공광훈	중앙대학교 화학과
이사(학술)	권오승	한국과학기술연구원 도핑컨트롤센터

이사(학술)	정영림	서울의약연구소
이사(학술)	강성호	경희대학교 응용화학과
이사(학술)	이진숙	한국산업기술시험원
이사(학술)	윤정기	국립환경과학원 토양지하수연구과
이사(학술)	안육성	한국세라믹기술원 기업지원본부 수도권시험분석, 기업지원센터
이사(학술)	한영지	강원대학교 환경융합학부
이사(학술)	이재형	한국화학융합시험연구원 환경보건팀
이사(학술)	정의창	한국원자력연구원
이사(학술)	김민석	대구경북과학기술원 뉴바이올로지전공
이사(학술)	박종호	한국원자력연구원
이사(학술)	김지혜	한국원자력연구원
이사(학술)	이성협	SK 이노베이션
이사(기획)	황승울	화학물질안전원 연구개발교육과
이사(기획)	김상철	한국건설생활환경연구원 보건환경연구소
이사(기획)	백만정	순천대학교 약학대학
이사(기획)	윤혜운	한국기초과학지원연구원 서울센터
이사(기획)	정세훈	포항산업과학연구원 분석평가그룹
이사(기획)	이정애	KIST 분자인식연구센터
이사(기획)	김원석	서도비엔아이㈜
이사(기획)	박준호	서울과학기술대학교 정밀화학과
이사(기획)	이후근	가천대학교 약학대학
이사(기획)	이학수	(주)지디에스
이사(조직)	최용욱	전주대학교 환경시스템학과
이사(조직)	임흥빈	충북대학교 특용식물학과
이사(조직)	김훈주	대구경북첨단의료산업진흥재단 임상시험신약생산센터
이사(조직)	김현주	한국교통대학교 교양학부
이사(조직)	박경수	한국과학기술원 특성분석센터
이사(조직)	조성찬	삼성 Display 분석기술팀
이사(조직)	표재성	경성대학교 약학과
이사(조직)	정재학	성문시스템 한국분석과학연구소
이사(홍보)	민지숙	국립과학수사연구원 대구과학수사연구소
이사(홍보)	남궁현	코오롱분석평가연구소
이사(홍보)	이창열	KCC중앙연구소 분석평가센터
이사(홍보)	이군택	서울대학교 농생명과학공동기기원
이사(홍보)	유혜현	한양대학교 약학대학
이사(홍보)	한정희	한국기초과학지원연구원 환경과학연구부
이사(홍보)	김병희	숙명여자대학교 식품영양학과
이사(홍보)	이수연	계명대학교 약학대학
이사(홍보)	서금희	한국기술교육대 산학협력단

이사(홍보)	조건	한국기초과학지원연구원
이사(홍보)	김윤석	K-water 수질분석 연구센터
이사(홍보)	길효식	SK이노베이션기술원분석Lab

발전 동력 위원회

직위	이름	소속
위원장(전임회장)	이승호	한남대학교 화학과
부위원장(부회장)	이덕희	영인프린티어
위원(부회장)	강창희	제주대학교 화학과
위원(부회장)	팽기정	연세대학교 원주캠퍼스 화학과
위원(부회장)	김인환	대구대학교 사범대학 화학교육과
위원(부회장)	이중주	APRO
위원(부회장)	김효진	동덕여자대학교 약학대학
위원(부회장)	박용남	한국교원대학교 화학교육과
위원(부회장)	윤근성	인성크로마텍
위원(부회장)	정민환	리코코리아
위원(부회장)	윤상화	써모사이언티픽 코리아(주)
위원(부회장)	이창선	퍼킨엘머 코리아
위원(부회장)	노경원	(주)신코 연구개발부
위원(부회장)	이성희	(주)지올코리아
위원(부회장)	김문해	(주)성문시스텍
위원(부회장)	차경훈	영인과학

2019년도 사업계획서(안)

- 01.10 2019년도 제1차 이사회 개최 및 신년 하례식**
- 01.14 신 임원 명단 보고 및 승인 신청(국립과천과학관)
- 01.25 부가가치세 2기 확정 신고
- 01.28 2018년도 1차 연회비 청구
- 01.31 2018년도 사업 실적 보고서 제출(과총)
- 02.25 분석과학회지 Vol. 32(1) 발간
- 02.28 비영리 법인 업무 현황(2018년 사업 실적 및 2019년 사업 계획) 제출(국립과천과학관)
- 03.04 제62회 춘계 학술대회 홍보 포스터 발송
- 03.04 영인 분석과학자상, Leco 젊은 분석과학자상 추천 공고
- 03.29 공익법인 사업계획 및 예산보고서, 사업실적 및 결산 보고서 제출(국립과천과학관)
- 03.29 국내 학술지, 국내 학술대회 지원금 신청(과총)
- 04.11 2019년도 제2차 이사회 개최, 영인 분석과학자상, Leco 젊은 분석과학자상 선정, 춘계 학술대회 보고 등**
- 04.24 제62회 춘계 학술대회 일정 홈페이지 공지
- 04.25 부가가치세 1기 예정 신고
- 04.25 분석과학회지 Vol. 32(2) 발간
- 05.16-17 제62회 춘계 학술대회 (강릉 세인트존스 호텔)**
- 06.25 분석과학회지 Vol. 32(3) 발간
- 07.15 2018년도 2차 연회비 청구
- 07.01 차기 수석부회장 선관위 구성
- 07.19 차기 수석부회장 선거 일정 공고
- 07.25 부가가치세 1기 확정 신고
- 08.12 DI 분석과학상 추천위원회 구성
- 08.19 Leco 젊은 분석과학자상 추천 공고
- 08.25 분석과학회지 Vol. 32(4) 발간
- 09.02 제63회 추계 학술대회 홍보 포스터 발송
- 10.10 2019년도 제3차 이사회 개최. 차기 수석부회장 의결, DI 분석과학자상, Leco 젊은 분석과학자상, 우수 논문상 선정, 차기임원 선임, 추계 학술대회 보고 등**
- 10.25 부가가치세 2기 예정 신고
- 10.25 분석과학회지 Vol. 32(5) 발간
- 11.14-15 제63회 추계 학술대회 및 총회(미정)**
- 12.25 분석과학회지 Vol. 32(6) 발간

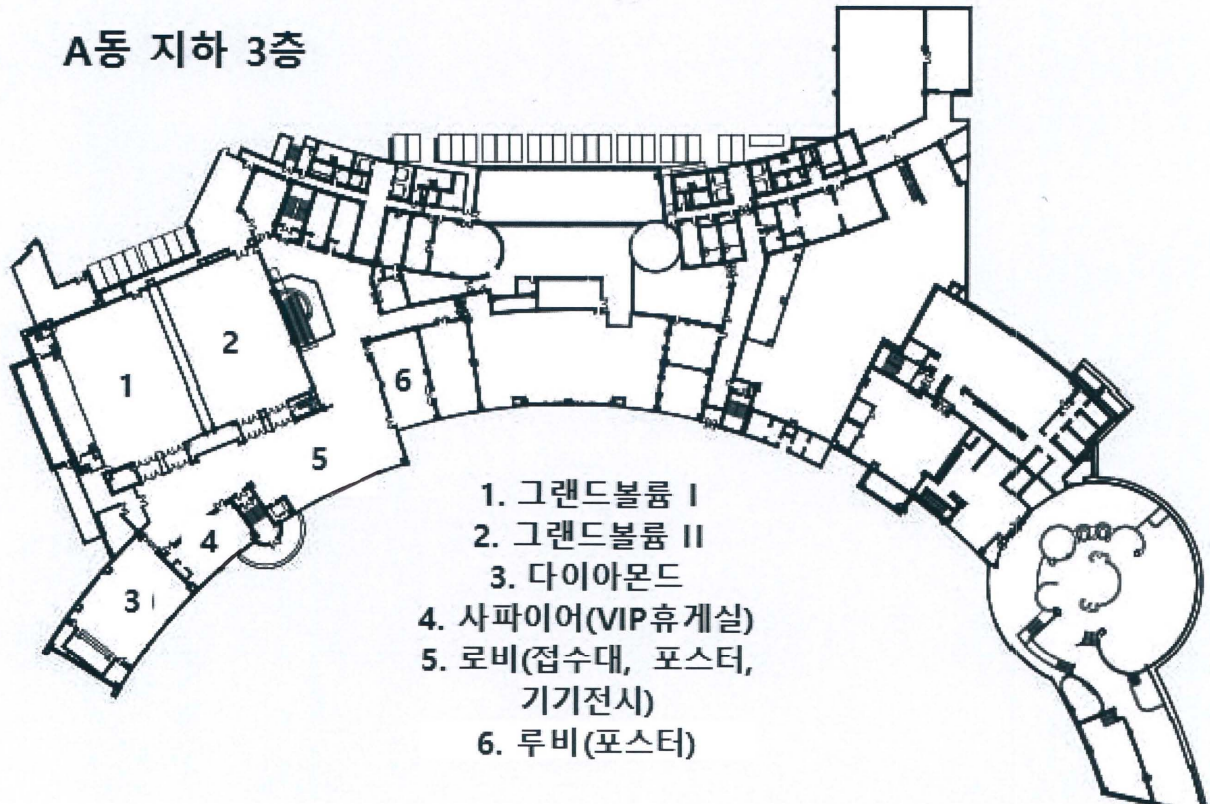
2019년도 예산(안)

(2019.01.01. ~ 2019.12.31.)

수 입		지 출	
세 과 목	금 액(원)	세 과 목	금 액(원)
1. 회 비	11,200,000	1. 학회지	41,500,000
개인 회비	8,000,000	학회지 발간비	18,000,000
도서관회비	500,000	학회지 발송비	3,500,000
단체 회비	1,200,000	편집운영비	20,000,000
종신 회비	1,500,000		
2. 학술대회	125,700,000	2. 이사회 및 임원 운영비	11,000,000
준계 학술대회	65,000,000	활동비	8,000,000
추계 학술대회	60,700,000	교통비	3,000,000
3. 학회지	50,000,000	3. 사무관리비	39,624,000
광고료	40,000,000	우편 및 택배	1,000,000
논문 게재료	8,000,000	사무용품 & 잡비	2,500,000
저작권료	2,000,000	급여 및 상여금	25,272,000
		전화 및 팩스 사용료	650,000
		이체 수수료	100,000
		사무실 관리비	2,300,000
		세무사 기장료	3,000,000
		과총 회비	1,500,000
		카드기 대여료	132,000
		법인 등기비	400,000
4. 과총 지원금	10,700,000	교통비 및 출장비	1,500,000
국내 학술지	7,200,000	카드기 정보 변경비	50,000
국내 학술대회	3,500,000	이니스스 연관관리비	220,000
		화환 및 근조기	500,000
		예비비	500,000
		4. 학술대회	90,000,000
5. 기타수입	700,000	준계학회	40,000,000
이자수입	700,000	추계학회	50,000,000
		5. 세 금	6,100,000
6. 전기년도 이월금	200,000,000	재산세	400,000
적립금	100,000,000	법인세	500,000
이월금	100,000,000	부가세	3,000,000
		지방소득&주민세	200,000
		4대 보험료(기관 부담)	2,000,000
		6. 차년도 이월금(2020)	210,076,000
		적립금	100,000,000
		이월금	110,076,000
합 계	398,300,000	합 계	398,300,000

학술 발표회장 도면

A동 지하 3층



(사)한국분석과학회 임원 명단

- 명예 회장: 박공식
- 고문: 김만구, 김연제, 김영만, 김영상, 김원호, 김일광, 김태승, 김택제, 문동철, 박만기, 박성우, 음철헌, 이 원, 이광우, 이광필, 이석근, 이종해, 최덕일, 하재호
- 회장: 이승호
- 감사: 정두수, 황승율
- 수석부회장: 조남준
- 부회장: 강종성(약학), 김남이(법과학), 김동술(식품/농화학), 김종혁(화학), 김진석(총무), 류재정(홍보), 명승운(화학), 박신화(재료/섬유), 선일식(화학), 송규석(표준/원자력/안전), 신선경(여성분과), 신호상(환경), 이용문(약학), 이원용(편집), 표희수(식품/농화학), 한상범(학술)
- 발전 동력 위원회: 강창희, 김문해, 김인환, 김태승(위원장), 김효진, 노경원, 박용남, 윤근성, 윤상화, 이덕희(부위원장), 이성희, 이종주, 이창선, 정민환, 차경훈, 팽기정
- 사무총장: 배선영
- 이사: 강성호(학술), 공광훈(학술), 권성원(약학), 권오승(학술), 길효식(홍보), 김기현(조직), 김병희(간사), 김상철(기획), 김원석(기획), 김윤석(홍보), 김정권(학술), 김태욱(재무), 김혁년(홍보), 김현주(조직), 김훈주(조직), 김희갑(환경), 남궁현(홍보), 민지숙(홍보), 박경수(조직), 박준호(기획), 백만정(기획), 서금희(간사), 송준명(재무), 안옥성(학술), 안장혁(식품/농화학), 유혜현(홍보), 윤정기(학술), 윤혜운(기획), 이군택(홍보), 이수연(간사), 이재형(학술), 이정미(기획), 이정애(기획), 이진숙(학술), 이창열(홍보), 이후근(기획), 임흥빈(조직), 정세훈(기획), 정영림(학술), 정의창(학술), 정재학(조직), 조건(간사), 조성찬(조직), 최기환(학술), 최용욱(조직), 최은경(재료/섬유), 표재성(조직), 한영지(학술), 한정희(홍보)
- 편집위원회
 위원장: 이원용
 부위원장: 박중호
 위원: 강성호, 강종성, 공광훈, 권오승, 김기현, 김병주, 김정권, 김주훈, 김희갑, 나동희, 류재정, 오한빈, 이군택, 이성광, 이수연, 이정미, 임흥빈, 장혜원, 표재성, Georg Hempel, Steve Williams, Bruce Gale, Lars Nilsson, Thomas J. Schmidt

2018년 한국분석과학회 제61회 초록집

2018년 11월 10일 인쇄 2018년 11월 15일 발행 발행인: 이승호 편집인: 한상범, 김정권	발 행 학 회 본 부 (04144) 인 쇄	사단법인 한국분석과학회 서울시 마포구 마포대로 127, 1603호 (공덕동, 풍림VIP텔) 전화: +82-(0)2-701-8661 팩스: +82-(0)2-701-8662 E-mail: koanal88@naver.com Home page: http://www.koanal.or.kr 한림원 서울시 중구 퇴계로 20, 51길 1303 (오장동, 넥서스 타워) 전화: +82-(0)2-2273-4201 팩스: +82(0)2-2266-9083 Home page: http://www.hanrimwon.co.kr
---	--	--