



# 제62회 한국분석과학회 춘계 학술대회

The 62<sup>th</sup> Biannual Conference of The Korean Society of Analytical Sciences

2019. 5. 16.(목) ~ 17.(금)

강릉 세인트존스 호텔

한국분석과학회 학회지 SCOPUS 등재 기념 학술대회

주 관 (사)한국분석과학회

후 원 **GWCVB** 강원국제회의센터 **KO-IST** 한국과학기술단체총연합회

## 협찬

영인과학(주), (유)워터스코리아, 동문이엔티(주), 리코코리아, 비케이사이언티픽(주), 서울대학교 공동기기센터 NICEM 분원, 센케이저러닝코리아(주), 써모피셔사이언티픽코리아(주), 에펜도르프코리아(주), 오디랩, 이지테크, 이크롬사이언스, 인성크로마텍(주), 자유아카데미, (주)시마즈사이언티픽코리아, (주)씨케이아이씨코리아, (주)애니랩, (주)엘림글로벌, (주)제이엘사이언스, 한국애질런트테크놀로지스(주), 한국퍼킨엘머



사단  
법인 한국분석과학회  
THE KOREAN SOCIETY OF ANALYTICAL SCIENCES

# 제62회 한국분석과학회 춘계 학술대회

The 62<sup>th</sup> Biannual Conference of The Korean Society of Analytical Sciences

2019. 5. 16.(목) ~ 17.(금)

강릉 세인트존스 호텔

한국분석과학회 학회지 SCOPUS 등재 기념 학술대회

주 관 (사)한국분석과학회

후 원 **GWCVB** 강원국제회의센터 **KO-IST** 한국과학기술단체총연합회

## 협찬

영인과학(주), (유)워터스코리아, 동문이엔티(주), 리코코리아, 비케이사이언티픽(주), 서울대학교 공동기기센터 NICEM 분원, 센케이저러닝코리아(주), 써모피셔사이언티픽코리아(주), 에펜도르프코리아(주), 오디랩, 이지테크, 이크롬사이언스, 인성크로마텍(주), 자유아카데미, (주)시마즈사이언티픽코리아, (주)씨케이아이씨코리아, (주)애니랩, (주)엘림글로벌, (주)제이엘사이언스, 한국애질런트테크놀로지스(주), 한국퍼킨엘머

## ■ 목 차 ■

초대의 글 .....	1
학술대회 운영 공지 사항 .....	2
2019년도 춘계 학술대회 프로그램 .....	3
포스터 발표 목록 .....	11
 [초 록]	
심포지엄 강연 .....	31
Special Session .....	67
Plenary Lecture .....	71
영인 분석과학자상 수상 강연 .....	75
Early Bird Seminar .....	79
PI급 구두 강연 .....	83
대학원생 구두 발표 .....	89
포스터 발표 I (2019.05.16)	
표준 .....	111
환경 .....	118
의약품/화장품 .....	144
식품/농학 .....	170
포스터 발표 II (2019.05.17)	
법과학 .....	193
원자력/방사선 .....	205
무기/재료 .....	210
일반 .....	218
대학원생 구두 .....	256
 인명 색인 .....	 273
 [총 회]	
총회 식순 .....	281
제62회 춘계 학술대회 상 .....	282
2018년도 결산서 .....	287
2018년도 재무 및 업무 감사 보고서 .....	288
2019년도 예산(안) .....	289
2019년도 수입·지출 현황 .....	290
2019년도 업무 보고 .....	291
 [기타 안내 사항]	
학술 발표회장 도면 .....	292
한국분석과학회 임원 명단 .....	293

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

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



## 초대의 글

한국분석과학회 회원 여러분 안녕하십니까? 제62회 한국분석과학회 총회 및 2019년 춘계 학술대회를 강릉 세인트존스 호텔에서 2019년 5월 16일(목) ~ 17일(금)에 개최하게 되었습니다. 분석과학 분야의 최근 연구 결과를 발표하고 토론할 수 있는 자리에 회원 여러분과 산학연관의 분석과학 분야에 관심 있는 여러분을 모시게 된 것을 큰 영광으로 생각합니다.

우리 한국분석과학회는 1988년에 설립되어 32년째 학술대회를 열어오고 있으며 특히 2019년부터 우리 학회지인 “Analytical Science & Technology”가 Scopus에 등재되어 명실공히 분석과학 분야의 대표 학술단체로 자리매김하고 있습니다. 그간 우리 학술지의 Scopus 등재를 위해 애써 주신 전 편집위원장 홍종기 교수님과 부편집위원장 박종호 교수님을 비롯하여 김정권 교수님, 오한빈 교수님 등 모든 편집위원 여러분께 깊은 감사의 마음을 전합니다. 이에 만족하지 않고 우리 학술지가 SCI에 등재될 수 있도록 저를 비롯하여 모든 회원 여러분께서 좋은 논문을 많이 투고해 주시고 함께 분발하고 노력합시다. 이를 위해 우리 학회의 홈페이지와 투고시스템을 전면 개선하기 위해 류재정 교수님을 비롯해 많은 분들이 애써주시는데 대해 깊이 감사드립니다.

이번 춘계 학술대회에서는 우리 학술지의 Scopus 등재를 기념하여 화학분과에서 Scopus 등재기념 심포지엄을 열기로 하였으며, 요즘 핫이슈로 떠오르고 있는 미세플라스틱 및 대기오염 진단, 의약품 분야의 최신 분석법, 메타볼로믹스, 산학연 분야 등의 심포지엄과 특별 세션으로 “Leading Edge Bioanalysis” 등의 심포지엄을 다양하게 구성하였습니다. Plenary Lecture에서는 메타볼로믹스 분야의 대가이신 한국과학기술연구원 정봉철 박사님을 모셨으며, Special Session 연사로는 폴란드의 Medical University of Gdańsk의 부총장이신 Tomasz Bączek 교수를 초청하여 “Off-line clean-up and on-line preconcentration novel approaches prior to capillary electrophoresis (CE)-based techniques during the analysis of drug and endogenous substances” 라는 주제로 발표하기로 하였습니다.

관동 팔경의 하나인 경포대와 오죽헌, 그리고 해돋이로 유명한 정동진 등 수려한 자연경관과 울곡과 신사임당 같은 걸출한 인물들을 배출한 명승지 강릉에서 열리는 제62회 춘계학술대회가 국내외 분석과학자 간의 학술 교류와 함께 회원 여러분의 돈독한 친분을 다지고 학문적 도약의 기회가 되기를 기원합니다. 또한 학술대회 후원기관과 기기전시회 참여업체 관계자 분들께도 깊이 감사드립니다.

2019년 5월  
사단법인 한국분석과학회  
회장 조 남 준 올림

# 학술대회 운영 공지 사항

## 1) 참가비 안내

2019년도 연회비를 납부하지 않은 분은 연회비 ₩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 학술상 수상 강연 30분, 심포지엄 강연 20분, 대학원생 구두 발표 5분입니다.
- 발표자께서는 발표시간 시작 전에 발표장에 도착하셔서 발표 자료를 도우미 학생에게 전달하고 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	부착 시간	발표 일시	철수 시간
로비	2019. 05. 16.(목) 10:30-15:00	2019. 05. 16.(목) 15:20-16:20	2019. 05. 16.(목) 16:30-18:00
	2019. 05. 17.(금) 08:00-10:30	2019. 05. 17.(금) 11:00-12:00	2019. 05. 17.(금) 12:00-12:30

- 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 6편 내외, 대학원생 우수 구두 2편을 선정하여 2019년 춘계 학술대회에서 시상할 예정입니다.

## 4) Early Bird Seminar에서는 참석자에게 간단한 조식이 제공됩니다. (선착순 100명)

## 5) 기타 자세한 사항은 아래로 문의바랍니다

- 학회 사무실 담당 강미경: 02-701-8661

## 2019년도 춘계 학술대회 프로그램

05월 16일(목)	그랜드볼룸 I (ANTIGUA I)	그랜드볼룸 II (ANTIGUA II)	볼룸(BARBUDA)	로비
10:30 -	등록 및 포스터 게시			
13:00 - 14:20	<b>SYM I</b> (식품, 농화학) 미세플라스틱 <b>13:00-14:00</b>	<b>SYM II</b> (환경) 대기 오염 진단	<b>SYM III</b> (화학) Scopus 등재기념	기기전시
14:20 - 15:20	<b>SYM IV</b> (약학) 의약품분야 연구에 대한 최신분석법의 활용 <b>14:00-15:20</b>	<b>Special Session</b> (Leading Edge Bioanalysis) <b>14:20-15:00</b>		
15:20 - 16:20				<b>포스터 발표</b> (PT 001-079)
16:20 - 17:00	<b>Plenary Lecture (기조강연)</b>			기기전시
17:00 - 17:30	Coffee Break & 기기전시 참관			
17:30 - 18:00	<b>영인 분석과학자상 수상 강연</b>			
18:00 - 18:30	총회			
18:30 -	만찬			
05월 17일(금)	그랜드볼룸 I (ANTIGUA I)	그랜드볼룸 II (ANTIGUA II)	볼룸(BARBUDA)	로비
08:00 - 08:30	<b>Early Bird Seminar</b> (써모피셔)			포스터 게시
08:40 - 10:00	<b>SYM V</b> (산학연) 산학연 심포지엄	<b>SYM VI</b> (약학) 메타볼로믹스	<b>PI급 구두 강연</b>	
10:00 - 11:00	<b>대학원생 구두 I</b>	<b>대학원생 구두 II</b>		
11:00 - 12:00				<b>포스터 발표</b> (PF 001-080)
12:00 - 12:10	Coffee Break & 기기전시 참관			
12:10 - 12:30	경품권 추첨 및 폐회			

05월 16일(목), ANTIGUA I

10:30 -	등록 및 포스터 게시	로비
13:00 - 14:00	Symposium I. 미세플라스틱(식품, 농화학)	
	좌장: 홍영민(시마즈사이언티픽코리아)	
13:00-13:20	Current status of microplastics detection in plastics bottled water and Sea-salts, and International standardization for microplastics testing and analysis 정재학(한국분석과학연구소)	
13:20-13:40	환경 중 미세플라스틱 분석방법에 대한 고찰 최기인(한국세라믹기술원)	
13:40-14:00	정수 중 미세플라스틱 검출 방법 및 타당성 검증 오주성(서울시립대학교)	
14:00 - 15:20	Symposium IV. 의약품분야 연구에 대한 최신 분석법의 활용(약학)	
	좌장: 이정미(성균관대학교)	
14:00-14:20	Observation for volatolome by imaging mass spectrometry (IMS) 권성원(서울대학교)	
14:20-14:40	Effects of gut microbial metabolic activity on the pharmacokinetics of red ginseng 유혜현(한양대학교)	
14:40-15:00	Determination of residual chemicals in various food commodities using QuEChERS and LC-MRM 최용석(단국대학교)	
15:00-15:20	In vitro comparative metabolite profiling of MAM-2201 in human, rat, and mouse 김주현(영남대학교)	
15:20 - 16:20	포스터 발표	로비
16:20 - 17:00	Plenary Lecture	
	좌장: 홍종기(경희대학교)	
16:20-17:00	Hair metabolomics: a challenge for biomarker discovery 정봉철(한국과학기술연구원)	
17:00 - 17:30	Coffee Break & 기기전시 참관	
17:30 - 18:00	영인 분석과학자상 수상 강연	
	좌장: 김진석(한국표준과학연구원)	
17:30-18:00	Development of highly accurate and precise analytical techniques using thermal ionization mass spectrometry for isotopic analysis of nuclear materials with ultra-trace levels 박종호(전북대학교)	
18:00 - 18:30	총회	
18:30 -	만찬	



05월 16일(목), ANTIGUA II

10:30 -	등록 및 포스터 게시	로비
13:00 - 14:20	Symposium II. 대기 오염 진단(환경)	
	좌장: 김만구(강원대학교)	
13:00-13:20	열탈착기-GCxGC Time of flight MS/FID 시스템을 이용한 환경시료 중의 유해물질 분석법 주도원(ITC21)	
13:20-13:40	Chemical Characteristics of Atmospheric Fine Particulate Matters in Relation to Meteorological Phenomena at Gosan Site, Jeju Island 강창희(제주대학교)	
13:40-14:00	인공위성 관측 자료를 이용한 지역규모 대기 에어로솔과 미량기체의 변화 특성 이권호(강릉원주대학교)	
14:00-14:20	드론으로 냄새 발생원 추적이 가능한가? 현재의 드론 기술 수준은 어디까지 왔나? 허귀석(ReSEAT)	
14:20 - 15:00	Special Session(Leading Edge Bioanalysis)	
	좌장: 정두수(서울대학교)	
14:20-15:00	Off-line clean-up and on-line preconcentration novel approaches prior to capillary electrophoresis (CE)-based techniques during the analysis of drug and endogenous substances Tomasz Bączek(Medical University of Gdańsk, Poland)	
15:20 - 16:20	포스터 발표	로비
16:20 - 17:00	Plenary Lecture	
	좌장: 홍종기(경희대학교)	
16:20-17:00	Hair metabolomics: a challenge for biomarker discovery 정봉철(한국과학기술연구원)	
17:00 - 17:30	Coffee Break & 기기전시 참관	
17:30 - 18:00	영인 분석과학자상 수상 강연	
	좌장: 김진석(한국표준과학연구원)	
17:30-18:00	Development of highly accurate and precise analytical techniques using thermal ionization mass spectrometry for isotopic analysis of nuclear materials with ultra-trace levels 박종호(전북대학교)	
18:00 - 18:30	총회	
18:30 -	만찬	

05월 16일(목), BARBUDA

10:30 -	등록 및 포스터 게시	로비
13:00 - 14:20	Symposium III. SCOPUS 등재 기념	
좌장: 이원용(연세대학교)		
13:00-13:20	<b>Content differences in sugars, organic acids, and phenolics as the response of viroid disease in grapes (<i>Vitis</i> spp.) in Korea</b> 강종성(충남대학교)	
13:20-13:40	<b>What is the best novel materials for the removal of key pollutants in indoor air?</b> 김기현(한양대학교)	
13:40-14:00	<b>Analytical methods for the chiral separation of proton pump inhibitors</b> 김경호(강원대학교)	
14:00-14:20	<b>식·의약품 중 불법 혼입된 부정물질 분석 사례</b> 박성수(식품의약품안전처)	

05월 17일(금), ANTIGUA I

07:40 -	등록 및 포스터 게시	로비
08:00 - 08:30	Early Bird Seminar	
좌장: 남궁현(코오롱인더스트리)		
08:00-08:30	Targeted screening of multi class compounds in veterinary drugs and pesticides using thermo TSQ LC-MS/MS with tracefinderd 양승진(Thermo Fisher Scientific)	
08:40 - 10:00	Symposium V. 산학연	
좌장: 김혁년(LG Display)		
08:40-09:00	Quantitative Analysis with NMR Quantitative NMR —an old and new assay technique— Katsuo Asakura(JEOL Ltd.)	
09:00-09:20	Structural characteristics of mPEG-PDLLA and their effects on micelle stability 민범찬(삼양바이오팜 의약바이오연구소)	
09:20-09:40	Solid-State NMR Study on the Phosphorus-modified ZSM-5 Zeolite 김철(한남대학교)	
09:40-10:00	IR/Raman Micro-spectroscopy for Industrial Applications 오성준(LG 화학)	
10:00-10:45	대학원생 구두 발표 I (포스터 발표도 진행)	
좌장: 김정권(충남대학교)		
10:00-10:05	[PF-064] Electric properties prediction of polymer composites 신동렬(한남대학교)	
10:05-10:10	[PF-065] Density prediction of high energy materials using deep learning method (DNNs) 조형식(한남대학교)	
10:10-10:15	[PF-066] 가스상 폼알데하이드에 대한 UiO-66-NH <sub>2</sub> 의 흡착 특성과 흡착능 평가 임대환(한양대학교)	
10:15-10:20	[PF-067] 대용량 시료 주입 방식과 gas chromatography/barrier discharge ionization detector 기반의 가스상 폼알데하이드 분석기술 개발 유미지(한양대학교)	
10:20-10:25	[PF-068] 개질 흡착제를 이용한 대기 중 벤젠성분의 고유속 흡착 특성 연구 김원기(한양대학교)	

2019년도 제62회 한국분석과학회 춘계 학술대회

10:25-10:30	<b>[PF-069]</b> <b>Perfluorocarbon (PFC) medium as a means to improve accuracy for NIR spectroscopic quantitative analysis of powder samples</b> 이윤정(한양대학교)	
10:30-10:35	<b>[PF-070]</b> <b>Evaluation of Autoencoder for NIR Spectroscopic Identification of Geographical Origins of Agricultural Products</b> 송우석(한양대학교)	
10:35-10:40	<b>[PF-071]</b> <b>Improving identification accuracy of geographical origins of sapphires using Raman and Laser induced breakdown spectroscopy</b> 음창환(한양대학교)	
10:40-10:45	<b>[PF-072]</b> <b>Short chain fatty acids analysis with headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis mass spectrometry</b> 권준엽(서울대학교)	
<b>11:00 – 12:00</b>	<b>포스터 발표</b>	<b>로비</b>
<b>12:10 – 12:30</b>	<b>경품권 추첨 및 폐회</b>	

05월 17일(금), ANTIGUA II

07:40 -	등록 및 포스터 게시	로비
좌장: 팽기정(연세대학교)		
08:40 - 10:00	<b>Symposium VI. 메타볼로믹스(약학)</b>	
08:40-09:00	<b>Urinary metabolomic study on autism spectrum disorder in valproic acid-induced mouse model for biomarker discovery</b> 박현미(한국과학기술연구원)	
09:00-09:20	<b>Analytical Chemistry, Metabolomics, and Bioinformatics</b> 이도엽(국민대학교)	
09:20-09:40	<b>Development of LC-MS/MS methods for investigation of reproductive toxicity induced by MEHP in zebrafish</b> 조성희(한국화학연구원)	
09:40-10:00	<b>Functional metabolomics of soybean core-collections and its application for the development of functional foods</b> 최용수(한국과학기술연구원)	
좌장: 조건(한국기초과학지원연구원)		
10:00-10:40	<b>대학원생 구두 발표 II(포스터 발표도 진행)</b>	
10:00-10:05	<b>[PF-073]</b> <b>Pf 543 and its Analogs Differently Accumulates Ceramide Groups in HaCaT Cell</b> Maftuna Shamshiddinova(충북대학교)	
10:05-10:10	<b>[PF-074]</b> <b>Development of an HPLC Method using Less Hazardous Mobile Phase for the Determination of <math>\beta</math>-Lactams</b> Thuy-Vy Pham(강원대학교)	
10:10-10:15	<b>[PF-075]</b> <b>빛 노출 조건에 따른 nicotine의 분해손실 가능성 확인 연구</b> 안영지(건양대학교, 안전성평가연구소)	
10:15-10:20	<b>[PF-076]</b> <b>Ultrasensitive fluorescence-free detection of norovirus by 3D super-localization light sheet microscopy with gradient fitting algorithm</b> Yucheng Sun(경희대학교)	
10:20-10:25	<b>[PF-077]</b> <b>Comparison of sample pretreatment methods for rapid screening of 123 multi-class illegal adulterants in lipid type supplements</b> 김범희(경희대학교)	

2019년도 제62회 한국분석과학회 춘계 학술대회

10:25-10:30	[PF-078] Simultaneous profiling of bile acids, histidine, and histamine in gastric juice by LC-MS/MS combined with serial derivatization: diagnosis of gastric cancer 엄진희(경희대학교)	
10:30-10:35	[PF-079] Metabolomic study on bleomycin and polyhexamethylene guanidine phosphate-induced pulmonary fibrosis mice models 서찬(순천대학교)	
10:35-10:40	[PF-080] Mixtures of menthol-based hydrophobic deep eutectic solvents: application as green solvents to extract bioactive compounds from <i>Ginkgo biloba</i> leaves Yan Jin(성균관대학교)	
11:00 - 12:00	포스터 발표	로비

05월 17일(금), BARBUDA

07:40 -	등록 및 포스터 게시	로비
08:40 - 10:00	PI급 구두 강연	
		좌장: 안장혁(차의과학대학교)
08:40-09:00	Nanosensor using Magnetoplasmonic Nanoparticle 이재범(충남대학교)	
09:00-09:20	Visualization and Quantification of Non-coding Cellular RNA in a Single Cell Using Atomic Force Microscopy 박익범(포항산업과학연구원)	
09:20-09:40	열이온화 질량분석기(TIMS)와 MC-ICP-MS를 이용한 Ce 동위원소 분석결과의 비교 이승구(한국지질자원연구원)	
09:40-10:00	[LECO 젊은 분석과학자상 수상 강연] Studies on headspace analysis of volatile organic compounds in foods by different extraction techniques 장혜원(한국식품연구원)	
11:00 - 12:00	포스터 발표	로비

## 포스터 발표 목록

로비

\*: 교신저자, \_(밑줄): 발표자

### 05월 16일[목]

표준: PT-001 ~ PT-007

**PT-001 GC-TCD와 Gas/Mass Spectrometer를 이용한 Neon 원자량의 결정**

김정은<sup>1,2</sup>, 양인석<sup>2</sup>, 김진석<sup>3</sup>, 홍기룡<sup>3,\*</sup>

<sup>1</sup>과학기술연합대학원대학교 측정과학과, <sup>2</sup>한국표준과학연구원 열유체표준센터,

<sup>3</sup>\*한국표준과학연구원 가스분석표준센터

**PT-002 가스분석 Data Center: GC Chromatogram 및 분석 조건에 관한 정보**

안병수<sup>1,2</sup>, 이진홍<sup>2</sup>, 이진복<sup>1</sup>, 문동민<sup>1</sup>, 김광섭<sup>1</sup>, 김진석<sup>1</sup>, 홍기룡<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>한국표준과학연구원 가스분석표준센터, <sup>2</sup>충남대학교 환경공학과

**PT-003 FTIR 고정밀 정량 분석을 위한 레퍼런스 스펙트럼 구축 방법론 고찰**

김예라<sup>1,2</sup>, 이정순<sup>1,2</sup>, 김상우<sup>1</sup>, 임정식<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>한국표준과학연구원 가스분석표준센터, <sup>2</sup>과학기술연합대학원대학교(UST) 측정과학과

**PT-004 토양 중 중금속 성분분석 숙련도시험 결과의 이상치 결정 방법 비교**

주창균, 이군택, 신건환, 김태승\*

서울대학교 농업생명과학대학 농생명과학공동기기원

**PT-005 Total Bisphenol A 함량 시험방법 개발을 위한 국제표준화 활동현황**

류건영<sup>1,\*</sup>, 최승윤<sup>1</sup>, 이도아<sup>1</sup>, 정재학<sup>2</sup>, 이진숙<sup>3</sup>

<sup>1</sup>\*KOTITI시험연구원, <sup>2</sup>성문시스텍, <sup>3</sup>한국산업기술시험원

**PT-006 Development and quality verification of tabanone reference material**

Minyeong Kim<sup>1</sup>, Hye-Jin Park<sup>1</sup>, Hongjun Jang<sup>1</sup>, Hyoungsu Kim<sup>1</sup>, and Seung-Hoon Baek<sup>1,\*</sup>

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

**PT-007 연료전지에 사용되는 고순도 수소의 품질보증을 위한 수소 중 극미량(무기)불순물 분석법 개발**

김가해<sup>1,2</sup>, 문동민<sup>2</sup>, 이진복<sup>2</sup>, 김광섭<sup>2</sup>, 임정식<sup>2</sup>, 이정순<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>충남대학교 화학과, <sup>2</sup>\*한국표준과학연구원 가스분석표준센터

환경: PT-008 ~ PT-033

**PT-008 질소와 산소 안정동위원소를 활용한 상수원 오염원 추적 및 유입지천의 기여도 평가(3)**

김정인<sup>1</sup>, 김형석<sup>1</sup>, 최원석<sup>1</sup>, 이선홍<sup>1</sup>, 김윤석<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>\*K-water연구원 수질안전센터

- PT-009 전국 상수원수의 질소( $\delta^{15}\text{N}$ )와 산소( $\delta^{18}\text{O}$ ) 안정동위원소 모니터링**  
 김형석<sup>1</sup>, 김정인<sup>1</sup>, 최원석<sup>1</sup>, 이선홍<sup>1</sup>, 김윤석<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>\*K-water연구원 수질안전센터
- PT-010 수질 참조표준 데이터를 활용한 냄새물질 발생 예측모델 개발**  
 이선홍, 이은정, 최원석, 최재원, 김윤석\*  
 한국수자원공사 수질연구센터
- PT-011 수질 중 벤조(a)피렌의 국제비교속련도 평가**  
 최원석, 이선홍, 최재원, 김윤석\*  
 한국수자원공사 수질안전센터
- PT-012 수산 환경과 양식생물 중 폴리염화나프탈렌(Polychlorinated naphthalenes) 분석법 정립**  
 이인석<sup>1,\*</sup>, 최민규<sup>2</sup>, 권정노<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>국립수산과학원 남동해수산연구소, <sup>2</sup>국립수산과학원 어장환경과
- PT-013 제주 연안 양식장 수산용수 및 배출수의 테트라사이클린계(TCs) 항생물질 잔류수준과 분포특성 연구**  
 이미경<sup>1</sup>, 김민섭<sup>1</sup>, 최민규<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>국립수산과학원 어장환경과
- PT-014 군산 연안의 퇴적물과 수산생물 내 다환방향족탄화수소와 폴리염화비페닐의 농도분포**  
 이봉민<sup>1</sup>, 성재현<sup>2</sup>, 박시현<sup>3</sup>, 최민규<sup>4,\*</sup>  
 국립수산과학원 어장환경과 유해물질실
- PT-015 국내 양식어장 퇴적물과 생물 중 DL-PCBs 와 PCDD/Fs의 잔류농도 및 분포특성**  
 성재현<sup>1</sup>, 김예지<sup>1</sup>, 박시현<sup>1</sup>, 이미경<sup>1</sup>, 김민섭<sup>1</sup>, 최민규<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>국립수산과학원 어장환경과
- PT-016 전국 연안의 양식장 밀집지역의 퇴적물 내 다환방향족탄화수소류(PAHs)의 잔류수준 및 분포패턴**  
 김예지<sup>1</sup>, 성재현<sup>1</sup>, 김민섭<sup>1</sup>, 최민규<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>국립수산과학원 어장환경과
- PT-017 Calibration and validation of WD-XRF for composition analysis and trace elemental analysis in particulate matter**  
 Kishore Babu Dasari\*, Gwang Min Sun, Yong-Hyeon Nam  
 Neutron Utilization Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute, Daejeon, Rep. of Korea
- PT-018 하수오니 중 중금속 동시 분석을 위한 시료 분해법과 ICP-OES 및 ICP-MS 분석법 최적화 연구**  
 최원명, 음철현\*  
 한국지질자원연구원 지질자원분석센터
- PT-019 탄소튜브를 이용한 인공 미세먼지 생성 및 생성온도에 따른 인공 미세먼지 구성성분 변화: 유기탄소, 무기탄소, 다환방향족탄화수소 중심으로**  
 조성원<sup>1</sup>, 최성진<sup>1</sup>, 김용현<sup>1,2,\*</sup>, 이규홍<sup>2,3,\*</sup>  
<sup>1</sup>안전성평가연구소 흡입독성연구그룹, <sup>2</sup>과학기술연합대학원대학교 인체 및 환경 독성학과, <sup>3</sup>안전성평가연구소 호흡기질환 제품 유효성평가연구단



- PT-020 Chemical signature of road dust as a potential discriminant factor for environmental pollution sources**  
김은아<sup>1\*</sup>, 임유영<sup>1</sup>, 김주미<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>한국화학연구원 화학안전연구센터
- PT-021 한강수계에서의 차아염소산나트륨 적용성 평가**  
백영애, 이광제, 이희진, 정종순, 최영준\*  
서울특별시 서울물연구원
- PT-022 가축밀집지역 및 양돈액비 집중살포지역 지하수의 수질특성**  
송영철\*, 김수정, 서병원, 김병현, 양민영, 현영실  
제주특별자치도 보건환경연구원
- PT-023 Ionic Composition and Pollution Characteristics of Precipitation at Jeju Island in 2018**  
Hee-Ju Kang, Jun-Oh Bu, Sook-Young Park, Geon-Yoon Kim, Jung-Min Song, Chang-Hee Kang\*  
Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University
- PT-024 Chemical Compositions of Atmospheric PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> Particles during Asian Dust Days at Mt. Halla-1100 Site of Jeju Island in 2017**  
Sook-Young Park, Hee-Ju Kang, Geon-Yoon Kim, Jun-Oh Bu, Jung-Min Song, Chang-Hee Kang\*  
Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University
- PT-025 천일염 중 미세플라스틱분석을 위한 라만 및 적외선 현미경 분석연구**  
Analysis of Microplastics in Sea Salts by Raman and FT-IR Microscopy  
조수아<sup>2</sup>, 조원보<sup>2</sup>, 김수빈<sup>1</sup>, 정재학<sup>1</sup>, 김효진<sup>2\*</sup>  
<sup>1</sup>한국분석과학연구소, <sup>2\*</sup>동덕여자대학교 약학과
- PT-026 금속유기골격체를 활용한 황화합물질들의 탈착특성 비교연구**  
Comparison of Desorption Characteristics of Sulfur Compounds Using Metal-Organic Frameworks  
이영재, 김기현\*  
한양대학교 건설환경공학과
- PT-027 다양한 기능성 물질의 황화수소 흡착 성능평가**  
Adsorptive performance of various functional materials against hydrogen sulfide  
한솔, 김기현\*  
\*한양대학교 건설환경공학과
- PT-028 휘발성 유기화합물 방출시험 방법의 전처리 과정에 관한 고찰**  
김상욱<sup>1</sup>, 김만구<sup>2,\*</sup>  
<sup>1</sup>강원대학교 환경학과, <sup>2\*</sup>강원대학교 환경융합학부
- PT-029 테러-재난 현장용 유해가스 채취장치의 개발과 성능평가**  
정명훈<sup>1</sup>, 박민희<sup>1</sup>, 김만구<sup>2,\*</sup>  
<sup>1</sup>강원대학교 환경학과, <sup>2\*</sup>강원대학교 환경융합학부
- PT-030 QSAR analysis for predicting acute inhalation toxicity**  
Se Young Park<sup>1</sup>, Dong Ryeol Shin<sup>1</sup>, Hyung Sik Jo<sup>1</sup>, Sung Kwang Lee<sup>1\*</sup>  
<sup>1\*</sup>Department of Chemistry, Hannam University

- PT-031 연속자동측정기기 데이터 신뢰성 향상 방안에 대한 연구 - 정도관리 시료 적용에 따른 총유기 탄소 측정기 운영 사례**  
신태섭, 조남준\*  
한국기술교육대학교 에너지신소재화학공학과
- PT-032 Determination of Bromate in Artificial Seawater applying Post-column Reaction and UV/VIS Detection**  
설혜원, 이경민, 김정례<sup>1\*</sup>  
<sup>1\*</sup>제이엘사이언스 분석기술연구소
- PT-033 폐수 내 Sb Total 농도 및 산화 상태에 따른 분리 분석**  
최제남, 성정문  
SK Innovation Global Technology Analysis Lab

**의약품/화장품: PT-034 ~ PT-059**

- PT-034 A sensitive and rapid LC-MS method for determination of berberine in human plasma**  
Jae Hee Kim<sup>1</sup>, Xuan-Lan Mai<sup>1</sup>, Kyu Yeon Kim<sup>2</sup>, Min-Seok Sim<sup>1</sup>, So-Yeon Lee<sup>1</sup>, Hee-Won Seo<sup>1</sup>, Gunhee Lee<sup>1</sup>, Dae-Jung Kim<sup>1</sup> and Kyeong Ho Kim<sup>1\*</sup>  
<sup>1</sup>College of Pharmacy, Kangwon National University, <sup>2</sup>Bioanalysis Team, Caleb Multilab Inc,
- PT-035 Determination of marker compounds for the quality control of DA001 using HPLC-DAD-ESI-MS**  
Hyun June KIM, Chong Woon CHO, Seo Young YANG, Young Ho KIM, Jong Seong KANG\*  
충남대학교 약학과
- PT-036 Differences in anthocyanins composition between healthy and viroid-infected grapes (*Vitis* spp.) in Korea**  
Thi Phuong Duyen VU<sup>1</sup>, In Sook CHO<sup>2</sup>, Sang-Hun Jung<sup>1</sup>, Young Ho KIM<sup>1</sup> and Jong Seong KANG<sup>1\*</sup>  
<sup>1</sup>충남대학교 약학과, <sup>2</sup>농촌진흥청 원예특작과학원 원예작물환경과
- PT-037 Standardization of extract mixture of Japanese Staunton vine and Cornus fruit to improve prostate health by HPLC-UV**  
GAO Dan<sup>1</sup>, Chong Woon CHO<sup>1</sup>, Seo Young YANG<sup>1</sup>, Kyoung Won CHO<sup>2</sup>, Young Ho KIM<sup>1</sup> and Jong Seong KANG<sup>1\*</sup>  
<sup>1</sup>충남대학교 약학과, <sup>2</sup>종근당건강(주)
- PT-038 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-039 Determination of abnormal 1-deoxysphinganine by fumonisin B1 in LLC-PK1 cells**  
Kyeong-Ran Min, Maftuna Shamshiddinova, Khilola Nazrullayeva, Min-Kyeong Kim, Shokhid Gulyamov, Yong-Moon Lee\*  
College of Pharmacy, Chungbuk National University

- PT-040 High-performance Liquid Chromatography - Photodiode Array Detector를 이용한 의약품 중 타르 색소 분석법 유효성 검증**  
김민경<sup>1</sup>, 김범희<sup>2</sup>, 민경란<sup>1</sup>, Shokhid Gulyamov<sup>1</sup>, Khilola Nazrullayeva<sup>1</sup>, Maftuna Shamshiddinova<sup>1</sup>, 홍종기<sup>2</sup>, 이용문<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>충북대학교 약학대학, <sup>2</sup>경희대학교 약학대학
- PT-041 The Quantification of Total Ceramide in LLC-PK1 Cells by HPLC-FLD method**  
Khilola Nazrullayeva, Maftuna Shamshiddinova, Kyeong-Ran Min and Yong-Moon Lee\*  
\*College of Pharmacy, Chungbuk National University
- PT-042 Competitive enzyme-linked immunosorbent assay를 이용한 CWPS (Cell Wall polysaccharide) 정량분석**  
엄정규  
\*충북대학교 약학대학 제약산업전공
- PT-043 NIR을 활용한 치약 중의 불소 확인**  
이혜린  
충북대학교 약학대학원 제약산업전공
- PT-044 Measuring metabolic disturbance of polystyrene particles on Caenorhabditis elegans by gas chromatography-mass spectrometry**  
김형민, 이동규, 응웬푸옥롱, 권성원\*  
\*서울대학교 약학대학 약학과
- PT-045 Rapid screening and confirmation of 60 PDE-5 inhibitors in supplements based on extracted common ion chromatograms by gas chromatography-mass spectrometry combined with trimethylsilylation**  
Hyun Ji Kim<sup>1</sup>, Beom Hee Kim, Jisu Hur, Jongki Hong\*  
College of Pharmacy, Kyung Hee University
- PT-046 Simultaneous quantitative determination of ephedrine & pseudoephedrine using LC-MS/MS in human plasma: its application to a PK study**  
Hee Jo Yoo<sup>1,2,3</sup>, Bo Kyung Kang<sup>3</sup>, Eun Kyoung Chung<sup>4</sup>, and Kyung-Tae Lee<sup>1,2,3\*</sup>  
<sup>1</sup>Department of Pharmaceutical Biochemistry and <sup>2</sup>Department of Life and Nanopharmaceutical Science, College of Pharmacy, Kyung Hee University, <sup>3</sup>Kyung Hee Drug Analysis Center, Kyung Hee University, <sup>4</sup>Department of Pharmacy, College of Pharmacy, Kyung Hee University
- PT-047 대한민국약전 화학의약품표준품 후보물질의 품질검증 연구**  
양지영, 전정륜, 권은진, 박장미, 정영은, 김연희, 이효민\*  
식품의약품안전처 의약품연구과
- PT-048 Development of Analytical Method for Allethrin in Household Pesticides using GC-FID**  
Kyoung-Moon Han, Sangseop Kim, Jihyun Shin, Soae Ji, Rheeda Lee, Soojeong Son, Kyunghun Son\*  
Cosmetics Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, Cheongju, Chungbuk, Republic of Korea
- PT-049 Study on the Determination of Dichlorobenzyl Alcohol Analysis Method Among Cosmetics Using Liquid Chromatography**  
Hyojin Kim, Sangil Lee, Hyeji Jeong, Yong Kyu Choi, Chungsik Min, Kyunghun Son\*  
Cosmetic Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation

- PT-050 A Study on the Determination of the chlorhexidine Analysis Method Among Cosmetics Using Liquid Chromatography**  
Hyo Jin Kim, Yun Geom Choi, Sangil Lee, Yong Kyu Choi, Chung Sik Min, and Kyung Hun Son\*  
Cosmetic Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation
- PT-051 Validation study of *in vitro* potency test method using reporter gene for the therapeutic monoclonal antibodies**  
Jounghee Baek<sup>1</sup>, Young Ki Hong<sup>1</sup>, Aera Son<sup>1</sup>, Min-Jung Kim<sup>1</sup>, Ho Kim<sup>1</sup>, Soyeong Kang<sup>1</sup>, Joon Ho Eom<sup>1</sup>, Ae Lee Jeong<sup>2</sup>, Su Jin Kim<sup>2</sup>, and Chiyoung Ahn<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>Advanced Therapy Products Research Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, <sup>2</sup>New Drug Development Center, Osong Medical Innovation Foundation, KBIO Health
- PT-052 Study on analysis of methotrexate (MTX) in biological sample using high-performance liquid chromatography with tandem mass spectrometry**  
Yeongsuk Yoo<sup>1</sup>, Sang Kwang Lee<sup>2</sup>, Kun Cho<sup>1,\*</sup>  
<sup>1,\*</sup>Biomedical Omic, Korea basic science institute, Cheong-ju, <sup>2</sup>Eulji Medi-Bio Research institute, Eulji University, Daejeon
- PT-053 Development of a gas chromatography mass spectrometry for simultaneous analysis of fragrance 24 allergens in cosmetics**  
Yeon-kyo Sung<sup>1</sup>, Ho-chul Shin<sup>1</sup>, Yong-min So<sup>1</sup>, Sun-il Kim<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Korea Testing & Research Institute, Beauty Wellness, Korea
- PT-054 LC-MS/MS와 HPLC를 이용한 Pyrethrum 분석방법 개발**  
이민진\*, 이지은, 이채홍, 허지선, 송희진, 해주단, 이정현  
KOTITI 시험연구원 생활환경사업본부
- PT-055 알레르기 유발 향료 중 리모넨의 광학 이성질체 분리 분석방법 연구**  
이민진\*, 허지선, 이채홍, 이지은, 송희진, 해주단, 이정현  
KOTITI 시험연구원 생활환경사업본부
- PT-056 Study of skin cell physiological activity of Red Ginseng low molecular weight polysaccharide**  
Ji Hoon Song, Jeung Hi Han, Young Eun Kim, Seok Chu, Chan Joo Park, Ji Ean Lee, John Hwan Lee<sup>2,\*</sup>  
Morechem Co. Ltd.
- PT-057 Development of new analytical method for distinction between Cocamidopropyl betaine(CAPB) and Polyhexamethylene Guanidine(PHMG)**  
Hye-In Kang<sup>1,\*</sup>, Byeong-Jo Kim<sup>2</sup>, Ki-Ho Park<sup>1</sup>, Hyon-Pil Yu<sup>1</sup>, Song-Yi Kim<sup>3</sup>, Ji-Hye Bae<sup>1</sup>, Seok-Hyeon Kim<sup>1</sup>  
<sup>1,\*</sup>AK Chem Tech R&D Div. Surfactant R&D Team, <sup>2</sup>AK Chem Tech R&D Div., <sup>3</sup>AK Chem Tech 1st Business Div. Strategy&Marketing Team
- PT-058 Method validation of a GC-MS for analysis of 1,2,4-trihydroxybenzene in hair dye**  
Eun Song Kim, Ji Yeon Choi, Hae Sung Kim, Jung Hyun Lee\*  
Cosmetic Business Team, Consumer Product & Environment Business Division, KOTITI Testing & Research Institute

**PT-059 Monitoring of 39 glucocorticoid compounds in cosmetics by LC-MS/MS**

Ji Yeon Choi, Seo Yeon Lee, Hae Sung Kim, Jung Hyun Lee\*

Cosmetic Business Team, Consumer Product & Environment Business Division, KOTIT Testing & Research Institute

**식품/농학: PT-060 ~ PT-079**

**PT-060 LC-TOF를 이용한 토마토, 오이, 딸기, 파프리카에서 Fenpyrazamine 분석법 확립**

정지완, 이민경, 조지미\*, 이재근, 이성우, 김재호

국립농산물품질관리원 전남지원

**PT-061 LC-MS/MS를 이용한 토마토, 오이, 딸기, 파프리카에서 Fenpyrazamine 분석법 확립**

이동필, 이현선, 조지미\*, 정진선, 이성우, 김재호

국립농산물품질관리원 전남지원

**PT-062 FT-NIRS를 이용한 콩의 형태별 원산지 판별 정확도 연구**

이지혜, 강동진, 장은희, 신병근, 한국탁\*

국립농산물품질관리원 시험연구소 원산지검정과

**PT-063 The Optimum conditions for analysis of Dicamba residue in agricultural products using QuEChERS and HPLC-MS/MS**

Hyunjeong Cho\*, Chai Uk Lim, Hyo Young Kim, Min Ju Kim, Jae Gon Kim

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

**PT-064 Development and Validation of Analytical Method for Prohydrojasmon in Major Agri-exports using GC-MS/MS**

Minju Kim, Hyo Young Kim, Chae Uk Lim, Heejeong Park, Hyunjeong Cho\*

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

**PT-065 Determination of Pymetrozine in Agri-products by Modified QuEChERS**

Chai Uk Lim, Hyo Young Kim, Heejeong Park, Minju Kim, Hyunjeong Cho\*

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

**PT-066 Development and Validation of TFNA and TFNG using LC-MS/MS in Major Agri-exports**

Hyo Young Kim, Chai Uk Lim, Heejeong Park, Minju Kim, Hyunjeong Cho\*

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

**PT-067 Development of Strontium Analytical Method in Chaga Mushroom**

Jeong-Yun Hwang, Hye-Eun Lee, Yeseul Park, Taehyun Ahn, Jang Duck Choi, Gil-Jin Kang\*

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

**PT-068 Simultaneous analysis of BPF related compounds migrating from food metal cans into food simulants**

Joung Boon Hwang\*, Subi Lee, Jinhwa Yeum, Jae Chun Choi, Yunsook Kang\*

Food Additives and Packaging Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation

- PT-069 Determination of residual detergent after dishwashing by liquid chromatography-mass spectrometry**  
Sun-young Park<sup>1</sup>, Yoon Hwan Kim<sup>1</sup>, Heesoo Pyo<sup>1</sup>, Bong Chul Chung<sup>1</sup>, Jeongae Lee<sup>1\*</sup>  
<sup>1</sup>Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology
- PT-070 포도 품종별 다량 및 미량 무기성분 함량 분석**  
서동원<sup>1\*</sup>, 김소영<sup>1</sup>, 박지수<sup>1</sup>, 이준영<sup>1</sup>, 구민선<sup>1</sup>, 최용민<sup>2</sup>  
<sup>1\*</sup>한국식품연구원 식품분석센터, <sup>2</sup>농촌진흥청 국립농업과학원 식생활영양과
- PT-071 새싹 밀 주정 농도별 추출물의 항산화 성분 및 생리활성 비교**  
서혜영, 김현영, 서우덕, 이미자, 장기창, 함현미\*  
농촌진흥청 국립식량과학원 작물기초기반과
- PT-072 Compositional changes of cacao beans during roasting process by NMR spectroscopy**  
이선호<sup>1,2</sup>, 이윤희<sup>1</sup>, 나윤철<sup>1</sup>, 이진규<sup>2\*</sup>, 방은정<sup>1\*</sup>  
<sup>1</sup>한국기초과학지원연구원 서울서부센터, <sup>2</sup>이화여자대학교 식품공학과
- PT-073 The development of simultaneous analytical method for vitamin A and E in foods and health functional foods**  
Do-Yeon Lee<sup>1</sup>, Eun Mi Seo<sup>1</sup>, Min Hee Kim<sup>1</sup>, So Ra Min<sup>1</sup>, Jeong Hye Kim<sup>1</sup>, Jang-Hyuk Ahn<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>Department of Research & Development, Fore Front TEST, Republic of Korea  
<sup>2</sup>Food Science & Technology, CHA University, Republic of Korea
- PT-074 Stability of food additive antioxidants in stock solution while preservation for expiration test**  
Min-Hee Kim<sup>1</sup>, Do-Yeon Lee<sup>1</sup>, Eun-Mi Seo<sup>1</sup>, So Ra Min<sup>1</sup>, Jeong Hye Kim<sup>1</sup>, Hye-Won Lee<sup>1</sup>, Jang-Hyuk Ahn<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>Department of Research & Development, Fore Front TEST, Republic of Korea, <sup>2</sup>Food Science & Technology, CHA University, Republic of Korea
- PT-075 Separation and characterization of nanoparticles in food-related material using field-flow fractionation (FFF)**  
Dongsup Song<sup>2</sup>, Meiyu Zhang<sup>2</sup>, Sang-Yong jung<sup>3</sup>, Woonjung Kim<sup>2</sup>, Jae-Min OH<sup>4</sup>, Seungho Lee<sup>1\*</sup>  
<sup>1</sup>Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea,  
<sup>2</sup>Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea,  
<sup>3</sup>Department of Chemistry and medical chemistry, Yonsei University, Wonju 26493, Korea,  
<sup>4</sup>Department of Energy and Materials Engineering, Dongguk University, Seoul 04620, Korea,  
<sup>4</sup>Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea
- PT-076 Characterization of low-molecular weight honey protein expression by MALDI-FTICR-MS for determination of geographical and floral origin**  
원유광, 이다빈, 최혜민, 주민희, 백민석, 양주현, 장혜지, 김정권\*  
충남대학교 화학과
- PT-077 사료 중 QuEChERS를 이용한 곰팡이독소 추출 효율 탐색**  
조형욱<sup>1\*</sup>, 선정훈<sup>2</sup>, 황규원<sup>2</sup>, 문준관<sup>2</sup>  
<sup>1\*</sup>한경대학교 산학협력단, <sup>2</sup>한경대학교 식물생명환경과학과

**PT-078 A UPLC-ESI-Q-TOF method for rapid and accurate identification and quantification of tropane alkaloids in *Datura stramonium***

Wontae Jeong<sup>1</sup>, Hyunki Cho<sup>1</sup>, Hyeongryeol Lee<sup>1</sup>, Kihoon Song<sup>1</sup> and Heongbin Lim<sup>\*</sup>

<sup>1</sup>\*Department of Industrial Plant Science & Technology, Chungbuk National University, Cheongju, Chungbuk 28644, Republic of Korea

**PT-079 Suppression of lipid accumulation in adipose cells using phytochemical extracted from flavonoid enhanced barley sprouts**

Jaesil Kim<sup>2</sup>, Lorrenne Caburatan<sup>1</sup>, Yen Le Thi<sup>1</sup>, Jiyeon Kim<sup>2</sup>, Joonho Park<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Fine Chemistry, Seoul National University of Science and Technology, Korea

<sup>2</sup>Department of Food Science and Technology, Seoul National University of Science and Technology, Korea

## 05월 17일[금]

**법과학: PF-001 ~ PF-012**

**PF-001 차량 역과여부 규명을 위해 타이어 성분의 trifluoroacetic anhydride를 이용한 유도체화 후 GC/MS 분석**

GC/MS analysis on the tire additive through derivatization by trifluoroacetic anhydride for revealing run-over by vehicle

곽성신<sup>1</sup>, 이준배<sup>1\*</sup>, 정용애<sup>1</sup>, 전수경<sup>1</sup>, 박우용<sup>2,3</sup>, 김영준<sup>3</sup>, 팽기정<sup>4</sup>

<sup>1</sup>국립과학수사연구원 대전과학수사연구소, <sup>2</sup>국립과학수사연구원 서울과학수사연구소,

<sup>3</sup>충남대학교 화학과, <sup>4</sup>연세대학교 화학과

**PF-002 생체시료 중 GC/MS에 의한 methyl alcohol 분석 사례**

A case study of analyzing methyl alcohol in bio specimen by GC/MS

안대준<sup>1</sup>, 이준배<sup>2\*</sup>, 정용애<sup>2</sup>, 전수경<sup>2</sup>, 곽성신<sup>2</sup>, 박우용<sup>3,4</sup>, 김영준<sup>4</sup>, 팽기정<sup>5</sup>

<sup>1</sup>국립과학수사연구원 광주과학수사연구소, <sup>2</sup>국립과학수사연구원 대전과학수사연구소, |

<sup>3</sup>국립과학수사연구원 서울과학수사연구소, <sup>4</sup>충남대학교 화학과, <sup>5</sup>연세대학교 화학과

**PF-003 Analysis of Ethyl Glucuronide(EtG) in Hair for the Diagnosis of Chronic Alcohol Abuse of Korean**

Bokyoung Gong, Soyeong Ju, Young-Hoon Jo, Dasom Jung, Mia Kwon<sup>\*</sup>

Forensic Chemistry Division, National Forensic Service, Wonju 26460, Republic of Korea

**PF-004 An indicator for alcoholic ketoacidosis to forensic analysis in post-mortem cases**

조영훈, 공보경, 김지원, 정다솜, 민지숙, 권미아<sup>\*</sup>

국립과학수사연구원 법화학과

- PF-005 Forensic analysis for identification of counterfeit functional health water**  
김유나<sup>1,\*</sup>, 손민희<sup>1</sup>, 김지원<sup>1</sup>, 정석환<sup>1</sup>, 김명덕<sup>1</sup>  
<sup>1,\*</sup>국립과학수사연구원 법화학과
- PF-006 Application Study of PCR Additives to Improve The Split Peaks in Direct PCR**  
Joo-Young Kim<sup>\*</sup>, Da-Hye Kim, Hyun-Chul Park, Ju Yeon Jung, Gang-Nam Jin,  
In-Kwan Hwang and Pil-Won Kang  
Forensic DNA Division, National Forensic Service, Wonju, 26460, Korea
- PF-007 도비탄 식별을 위한 법과학 시험법**  
박원석, 임봉환<sup>\*</sup>  
국방부조사본부 과학수사연구소 총기폭발물과
- PF-008 Oil spill environmental forensics of crude oils and marine fuel oils**  
Eun-Ji Jeon<sup>1</sup>, Song Kim<sup>1</sup>, Sun-Ju Hwang<sup>2</sup>, In-Chul Song<sup>2,\*</sup>  
<sup>1</sup>Western Regional Coast Guard, <sup>2</sup>Korea Coast Guard Research Center
- PF-009 Introduction of analysis cases for the unauthorized compounds adulterated in certain seized foods using LC-UV and LC-MS/MS**  
Nam Sook Kim, Hwan Seong Choi, Ji Hyun Lee, Seongsoo Park, and Hoil Kang<sup>\*</sup>  
Division of Advanced Analysis, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation,  
Republic of Korea
- PF-010 지문현출용 분말의 건강 위해성을 고려하여 챔버(chamber)를 이용한 분말 적용 방법에 관한 연구**  
김은지<sup>1</sup>, 이다은<sup>1</sup>, 박석원<sup>2</sup>, 최성운<sup>3,\*</sup>  
<sup>1</sup>충남대학교 평화안보대학원 과학수사학과, <sup>2</sup>대전지방경찰청 2부 형사과 과학수사계,  
<sup>3,\*</sup>충남대학교 신약전문대학원 신약개발학과
- PF-011 시료지문 제공자(donor)에 따른 현출정도의 차이에 관한 예비연구**  
이나연<sup>1</sup>, 최성운<sup>2,\*</sup>  
<sup>1</sup>충남대학교 평화안보대학원 과학수사학과, <sup>2,\*</sup>충남대학교 신약전문대학원 신약개발학과
- PF-012 감열지상 남겨진 노화지문의 아이오딘 증기(iodine fumig)에 의한 최적현출시간 변화에 관한 연구**  
이나연<sup>1</sup>, 최성운<sup>2,\*</sup>  
<sup>1</sup>충남대학교 평화안보대학원 과학수사학과, <sup>2,\*</sup>충남대학교 신약전문대학원 신약개발학과

**원자력/방사선: PF-013 ~ PF-017**

- PF-013 이차이온질량분석법을 이용한 핵물질 입자분석 분야 국제교차분석 수행**  
이나리, 박진규<sup>\*</sup>, 이치규  
한국원자력연구원 원자력화학연구부
- PF-014 MC-ICP-MS를 이용한 1 μm급 우라늄 입자 동위원소비 분석**  
박난희<sup>1</sup>, 한선호<sup>1</sup>, 최은주<sup>2</sup>, 임상호<sup>1</sup>, 박진규<sup>1</sup>, 이치규<sup>1</sup>, 송규석<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>한국원자력연구원, 원자력화학연구부, <sup>2</sup>한국화학연구원, 화학분석센터



- PF-015 열이온화질량분석에 사용되는 레늄 필라멘트 중의 Mo 불순물 측정**  
박양순\*, 조혜륜  
한국원자력연구원 원자력화학연구부
- PF-016 (Cancel) 냉각수 총수가 하나로 수조고온층에 미치는 영향**  
이성우\*, 이병헌, 김형욱, 안형진, 최호영  
\*한국원자력연구원
- PF-017 Evaluation of Target Materials Including 10B for the Neutron Flux Monitoring of NDP System at HANARO**  
Sang-Hwa LEE\* and Byung-Gun PARK  
Neutron Utilization Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute.

무기/재료: PF-018 ~ PF-025

- PF-018 Quantitative Analysis of Trace Metals in PCB Etching Waste solution by ICP-OES**  
SE Chul Hong<sup>1\*</sup>, Mi Young Son<sup>1</sup>, In kyeong Jung<sup>2</sup>, In Kim<sup>2</sup>, Hyoung Wook Choi<sup>2</sup>,  
Tae Gwon Seo<sup>2</sup>  
<sup>1\*</sup>Gumi Electronics & Information Technology Research Institute, <sup>2</sup>SUNG EUN CO., Ltd
- PF-019 기기중성자방사화분석에 의한 3종의 실리콘 주매질 표준물질 분석**  
문종화\*, 이한림, 김지석  
한국원자력연구원 중성자응용연구부
- PF-020 국내 사문석의 주성분 및 미량성분 정량분석**  
Quantitative Analysis of Major and Trace Elements in Korean Serpentine  
정은숙<sup>1</sup>, 김건한<sup>1</sup>, 이현아<sup>2</sup>, 김현구<sup>2</sup>, 최병인<sup>3</sup>, 안상호<sup>3</sup>  
<sup>1</sup>대덕분석기술연구소, <sup>2</sup>한국세라믹기술연구원 분석기술센터, <sup>3</sup>한국지질자원연구원 지질자원분석센터
- PF-021 알루미늄복합패널 연소특성 비교에 관한 실험적 연구**  
박정우, 심재웅, 김도현\*  
한국건설기술연구원
- PF-022 알루미늄 드로스의 소재화 기술 및 부산물에 대한 분석**  
김경문<sup>1</sup>, 최병일, 박재현, 김태성, 유석  
<sup>1</sup>한국화학융합시험연구원 고분자재료팀
- PF-023 표면처리용액 분석기술개발 및 현장 적용 연구**  
김성남\*, 김선혜, 양정환, 남종덕, 정성욱  
포항산업과학연구원 분석평가그룹 화학조성색선
- PF-024 도자기의 원료인 태토와 유약의 화학적 조성 및 유해물질 용출 특성**  
Characteristics of Chemical Composition and Extraction of Hazardous components for Body and Glaze used as the Raw Material of Pottery  
최용욱<sup>1</sup>, 박주희, 오다은, 오영택<sup>2</sup>, 임현아<sup>3</sup>  
<sup>1\*</sup>전주대학교 환경생명과학과, <sup>2</sup>전주대학교 물류무역학과, <sup>3</sup>한국전통문화전당

**PF-025 TRANSPARENT PLATINUM COUNTER ELECTRODES PREPARED BY POLYOL REDUCTION FOR BIFACIAL DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS**

Ghifari M. Alvien<sup>1</sup>, Jongin Hong<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Chung-Ang University

**일반: PF-026 ~ PF-063**

**PF-026 미세먼지(PM<sub>10</sub>, PM<sub>2.5</sub>) 샘플에 대한 WD-XRF와 LIBS 측정 분석**

한보영<sup>1,\*</sup>, 이한림<sup>1</sup>, 남용현<sup>1</sup>, 김지석<sup>1</sup>

<sup>1</sup>한국원자력연구원 방사선과학연구소 하나로이용연구단 중성자응용연구부

**PF-027 ICP-AES를 이용한 속련도 시험**

이재석, 김지혜, 최광순\*, 서경원, 김종윤, 박재일

한국원자력연구원 원자력화학연구부

**PF-028 이온교환수지 중 Ce, Co, Cs, Fe, Nb, Ni, Re, Sr 및 U 측정을 위한 전처리**

최광순\*, 오심온, 이재석, 박태홍

한국원자력연구원 원자력화학연구부

**PF-029 Characterization of in-vitro metabolites of bolasterone (7 $\alpha$ ,17 $\alpha$ -dimethyltestosterone) by ultra high-performance liquid chromatography / orbitrap mass spectrometer**

Anca Raluca Muresan<sup>1,2</sup>, Khandoker Asiqur Rahaman<sup>1,2</sup>, Farzana Binte Rafique<sup>1,2</sup>, Hophil Min<sup>1</sup>, and Oh-Seung Kwon<sup>1,2,\*</sup>

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

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

**PF-030 Colorimetric detection of arsenic and mercury ions based on the d-penicillamine induced aggregation of gold nanoparticles**

Sujin Yoon<sup>1,3</sup>, Yunsik Nam<sup>2</sup>, and Kangbong Lee<sup>1,3,\*</sup>

<sup>1</sup>National Agenda Research Division, Korea Institute of Science & Technology,

<sup>2</sup>Advanced Analysis Center and Green City Technonogy Institute, Korea Institute of Science & Technology

**PF-031 과불 폴리머의 측쇄 탄소 사슬 분석 방법 연구**

Side chain analyses of perfluoroalkylethyl acrylate polymers

박광서, 최은경\*

한국생산기술연구원 환경규제기술센터

**PF-032 유기물질의 성분 분석 시 GC-FID 및 GC-MS의 정량성 비교**

Comparison of area normalization and standard reagent method using TIC-MS and FID in GC analyses of organic components

박광서, 최은경\*

한국생산기술연구원 환경규제기술센터

- PF-033 화학물질 등록 시 미량 유해 무기물질 스크리닝 및 정량 절차도 연구**  
Study on scheme for screening and quantification of hazardous inorganic substances in trace amounts influencing hazard classification  
권현아, 박광서, 손승환, 최은경\*, 김상현<sup>1</sup>  
한국생산기술연구원 환경규제기술센터, <sup>1</sup>경성대학교 공과대학 제약공학과
- PF-034 1-Propanol의 90일간 흡입챔버내 농도 모니터링 및 B6C3F1 Mice의 생체영향 연구**  
이성배<sup>1,\*</sup>, 이용훈<sup>2</sup>, 한정희<sup>2</sup>, 박찬혁<sup>1</sup>, 조지민<sup>1</sup>, 임철홍<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>산업안전보건연구원 흡입독성연구센터 흡입시험연구부, <sup>2</sup>산업안전보건연구원 흡입독성연구센터 병리검사부
- PF-035 CO<sub>2</sub> Detection Test in Open Space through Advanced Open Path Infrared Sensor (TOR Sensor)**  
심재웅, 김양균\*, 조남욱, 이종천  
한국건설기술연구원 화재안전연구소
- PF-036 ICP-MS를 이용한 REE 함량 분석 시에 발생하는 Ba, Ce, Pr에 따른 분석오차에 관한 연구**  
김태현<sup>1,2,\*</sup>, 이승구<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>한국지질자원연구원, <sup>2</sup>강원대학교 지질지구물리학과
- PF-037 Cycle Corrosion Tester(CCT)를 이용한 염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>)과 염화나트륨(NaCl)의 부식 영향성에 대한 연구**  
김재희, 양정원, 최형욱\*  
\*KCC 중앙연구소 신뢰성특성평가연구팀
- PF-038 강관용 분체도료 경화도막의 내후 열화 메커니즘 분석연구**  
양정원<sup>1,\*</sup>, 최형욱<sup>1</sup>  
<sup>1,\*</sup>KCC 중앙연구소 신뢰성\_특성평가연구
- PF-039 Image Processing을 이용한 광물상 자동 정량분석 기술개발**  
박태창\*, 오한상, 김상헌, 김병훈  
현대제철 기술연구소 재료분석팀
- PF-040 AFM Phase Imaging 기법을 통한 Polyurethane 미세 발포체의 내부 구조변화 측정**  
한재철<sup>1,\*</sup>, 정주영<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>SKC R&D 센터
- PF-041 A study of cell viability measurement by using FTIR**  
Yoon Sook Na, Sangmo Shin\*  
IQBIO Co.,Ltd.
- PF-042 실란커플링제에 의해 표면이 개질된 패각 분말의 특성 분석**  
손유정, 신상모\*  
(주)아이큐바이오
- PF-043 Quantification and Qualification Analysis of Naphthenic Acids in Petroleum Heavy Oil by SPE Preparation, FT-IR, and FT-ICR MS**  
마경진, 이석진, 김은경, 이성협  
Analysis Unit, Platform Tech. R&D Center, Institute of Technology Innovation, SK Innovation

**PF-044 Development of metal-complexed antibacterial window-screen**

Young min Jeon<sup>2</sup>, Woonjung Kim<sup>2</sup> and Seunggho Lee<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea Republic

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Hannam University, Deajeon, 34054, Korea Republic

**PF-045 Easy to follow guidance to estimate measurement uncertainty using bottom-up approach of analytical method for VOCs determination in disposable feminine care products**

Gwangwon Lee<sup>1</sup>, Hye-Jin Park<sup>1</sup>, Minyeong Kim<sup>1</sup>, Taewoo An<sup>1</sup>, and Seung-Hoon Baek<sup>1,\*</sup>

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

**PF-046 Establishment of GC-MS method for phthalate plasticizers and bisphenol A in disposable feminine care products**

Jiwon Shin<sup>1</sup>, Minyeong Kim<sup>1</sup>, Gwangwon Lee<sup>1</sup>, and Seung-Hoon Baek<sup>1,\*</sup>

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

**PF-047 Profiling of steroid metabolic pathways in human plasma by GC-MS/MS combined with pipette tip SPE for diagnosis of gastric cancer**

Hyunjung Lee, Wonwoong Lee, Jongki Hong<sup>\*</sup>

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

**PF-048 Amperometric galactose biosensor based on ionic liquid and graphene-titania-Nafion modified composite electrode**

Sumin Lee, Won-Yong LEE<sup>\*</sup>

Department of Chemistry, Yonsei University

**PF-049 Simultaneous profiling analysis of endogenous normal and modified nucleosides by liquid chromatography-tandem mass spectrometry**

Moongi Ji<sup>1</sup>, Chan Seo<sup>1</sup>, Hyeon-Seong Lee<sup>1</sup>, Youngbae Kim<sup>1</sup>, Jeuk Min<sup>1,4</sup>, Subin Choi<sup>1</sup>, Songjin Oh<sup>1</sup>, Hyung-Jin Park<sup>2</sup>, In Duk Jung<sup>3</sup>, Jae-Hyun Park<sup>3</sup> and Man-Jeong Paik<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>순천대학교 약학과, <sup>2</sup>아주대학교 의생명공학과, <sup>3</sup>단디바이오 사이언스, <sup>4</sup>레드윈 서울

**PF-050 Analyte focusing by micelle collapse for liquid extraction surface analysis coupled with capillary electrophoresis of neutral pesticides on a solid surface**

Sun kyung Jeong and Doo Soo Chung<sup>\*</sup>

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

**PF-051 Three-phase single drop microextraction coupled to capillary electrophoresis for the analysis of non-steroidal anti-inflammatory drugs**

Nader Nciri, Wooyong Kwon and Doo Soo Chung<sup>\*</sup>

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

**PF-052 Single Bubble Microextraction for the analysis of chlorophenols**

Xamyo Noulorsaytour and Doo Soo Chung<sup>\*</sup>

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

**PF-053 금속이온이 굴패각 블록의 흡수율과 압축강도에 미치는 영향 분석**

김기현<sup>1</sup>, 이승호<sup>1</sup>, 김운중<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>한남대학교 화학과

- PF-054 Study on the POPC effect on the lipid flip-flop in DMPC vesicles**  
Mingi Kim, Jinju Jeong, and Chul Kim  
한남대학교
- PF-055 Synthesis of new Calix[4]arene derived (R)-Phenylglycinol Chiral Stationary Phases**  
허규성<sup>1</sup>, 김규리<sup>1</sup>, 류재정<sup>2\*</sup>  
<sup>1</sup>경북대학교 화학과, <sup>2\*</sup>경북대학교 화학교육과
- PF-056 Extraction of Isoflavones and Phenolic acids from Tofu by Deep Eutectic Solvent(DES)**  
Jin Sol Lee, Wonhoe Koo, Hyun-Woo Cho, Seung-Woon Myung\*  
Department of Chemistry, Kyonggi University
- PF-057 Determination of Polyphenols in Wine using Deep Eutectic Solvent-based Dispersive Liquid-Liquid Microextraction HPLC-UV**  
Jong Sung Noh, Wonhoe Koo, Hyun-Woo Cho and Seung-Woon Myung\*  
Department of Chemistry, Kyonggi University
- PF-058 Differentiation of disaccharide isomers using cleavage patterns of disaccharides produced by MALDI-TOF MS analysis**  
이다빈, 원유광, 최혜민, 백민석, 주민희, 양주현, 장혜지, 김정권\*  
충남대학교 화학과
- PF-059 Dialyzed nitrogen-doped carbon dots as matrix in matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry**  
양주현, 이다빈, 원유광, 최혜민, 백민석, 장혜지, 주민희, 김정권\*  
충남대학교 화학과
- PF-060 Optimization conditions to analysis volatile compounds of *Prunus mume* infusion**  
Sehyun Kim, Sunyoung Bae\*  
Department of Chemistry, Seoul Women's University
- PF-061 Simultaneous Detection of 5-hydroxymethyl-2-furaldehyde and Zn Ion Using Molecularly Imprinted Polymer**  
Hyeyoung Jung, Yelin Lee, Sunyoung Bae\*  
Department of Chemistry, Seoul Women's University
- PF-062 A Study on Analysis of Di-2-ethylhexyl Phthalate in Aqueous Phase by Molecularly Imprinted Fiber**  
Soyoung Ahn, Sunyoung Bae\*  
Department of Chemistry, Seoul Woman's University
- PF-063 SYNTHESIS OF METAL-FREE ORGANIC DYES FEATURING AZOBENZENE SPACER FOR DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS**  
Anggia Ismi Simpang<sup>1</sup>, Seung Wook Ham<sup>1</sup>, Jongin Hong<sup>1\*</sup>  
<sup>1</sup>Department of Chemistry, Chung-Ang University

대학원생 구두 & 포스터 발표: PF-064 ~ PF-080

**PF-064 Electric properties prediction of polymer composites**

Dong Ryeol Shin<sup>1</sup>, Woo Jin Choi<sup>2</sup>, Nam jung Cho<sup>2</sup>, Sung Kwang Lee<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Hannam University, <sup>2,\*</sup>Korea Research Institute of Chemical Technology

**PF-065 Density prediction of high energy materials using deep learning method (DNNs)**

Hyung Sik Jo, Soo Gyeong Cho<sup>1</sup>, Sung Kwang Lee<sup>\*</sup>

Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, Korea,

<sup>1</sup>Agency for Defense Development, Daejeon, Korea

**PF-066 가스상 폼알데하이드에 대한 UiO-66-NH<sub>2</sub>의 흡착 특성과 흡착능 평가**

The potential of UiO-66-NH<sub>2</sub> as novel sorbent for gaseous formaldehyde

임대환<sup>1</sup>, 김기현<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>한양대학교 건설환경공학과

**PF-067 대용량 시료 주입 방식과 gas chromatography/barrier discharge ionization detector 기반의 가스상 폼알데하이드 분석기술 개발**

Development of analytical techniques for gaseous formaldehyde based on the large-volume injection interfaced with gas chromatography/barrier discharge ionization detector

유미지, 김기현<sup>\*</sup>

한양대학교 건설환경공학과

**PF-068 개질 흡착제를 이용한 대기 중 벤젠성분의 고유속 흡착 특성 연구**

Test of adsorption performance of gaseous benzene under high flow conditions using modified adsorbent materials

김원기<sup>1</sup>, 김기현<sup>2,\*</sup>

<sup>1,2,\*</sup>한양대학교 건설환경공학과

**PF-069 Perfluorocarbon (PFC) medium as a means to improve accuracy for NIR spectroscopic quantitative analysis of powder samples**

Yoonjeong Lee<sup>1</sup>, Hoeil Chung<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>Department of Chemistry, Hanyang university

**PF-070 Evaluation of Autoencoder for NIR Spectroscopic Identification of Geographical Origins of Agricultural Products**

Woosuk Sohng<sup>1</sup>, Seeun Cho<sup>2</sup>, Hyeseon Lee<sup>2</sup>, Hoeil Chung<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Hanyang University, <sup>2,\*</sup>Department of Industrial & Management Engineering, POSTECH

**PF-071 Improving identification accuracy of geographical origins of sapphires using Raman and Laser induced breakdown spectroscopy**

Changhwan Eum, Hoeil Chung<sup>\*</sup>

Hanyang University Department of Chemistry

- PF-072 Short chain fatty acids analysis with headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis mass spectrometry**  
권준엽<sup>1</sup>, 정선경<sup>1</sup>, 정두수<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>서울대학교 자연과학대학 화학부
- PF-073 Pf 543 and its Analogs Differently Accumulates Ceramide Groups in HaCaT Cell**  
Maftuna Shamshiddinova<sup>1</sup>, Dong-Jae Baek<sup>2</sup>, Khilola Nazrullaeva<sup>1</sup>, Kyeong-Ran Min<sup>1</sup> and Yong-Moon Lee<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>College of Pharmacy, Chungbuk National University, <sup>2</sup>College of Pharmacy, Mokpo National University
- PF-074 Development of an HPLC Method using Less Hazardous Mobile Phase for the Determination of  $\beta$ -Lactams**  
Thuy-Vy Pham<sup>1</sup>, Xuan-Lan Mai<sup>1</sup>, Jae-Yong Lee<sup>1</sup>, Gunhee Lee<sup>1</sup>, Dae-Jung Kim<sup>1</sup>, Sang-Beom Han<sup>2</sup>, and Kyeong Ho Kim<sup>1,\*</sup>  
<sup>1,\*</sup>College of Pharmacy, Kangwon National University, <sup>2</sup>College of Pharmacy, Chungang University
- PF-075 빛 노출 조건에 따른 nicotine의 분해손실 가능성 확인 연구**  
안영지<sup>1,2</sup>, 서동호<sup>3</sup>, 최성진<sup>4</sup>, 이규홍<sup>2</sup>, 김용현<sup>4,5,\*</sup>  
<sup>1</sup>건양대학교 독성평가학과, <sup>2</sup>안전성평가연구소 호흡기질환제품 유효성평가연구단,  
<sup>3</sup>부산대학교 화학과, <sup>4</sup>안전성평가연구소 흡입독성연구그룹, <sup>5</sup>과학기술연합대학원대학교 인체 및 환경 독성학과
- PF-076 Ultrasensitive fluorescence-free detection of norovirus by 3D super-localization light sheet microscopy with gradient fitting algorithm**  
Yucheng Sun<sup>1</sup>, Seong Ho Kang<sup>1,2,\*</sup>  
<sup>1</sup>Department of Chemistry, Graduate School, Kyung Hee University, <sup>2,\*</sup>Department of Applied Chemistry and Institute of Natural Sciences, Kyung Hee University
- PF-077 Comparison of sample pretreatment methods for rapid screening of 123 multi-class illegal adulterants in lipid type supplements**  
Bum-Hee Kim, Jisu Hur, Hyun Ji Kim, Jongki Hong\*  
College of Pharmacy, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea
- PF-078 Simultaneous profiling of bile acids, histidine, and histamine in gastric juice by LC-MS/MS combined with serial derivatization: diagnosis of gastric cancer**  
Jinhee Um, Wonwoong Lee, Jongki Hong\*  
College of Pharmacy, Kyung Hee University
- PF-079 Metabolomic study on bleomycin and polyhexamethylene guanidine phosphate-induced pulmonary fibrosis mice models**  
Chan Seo<sup>1</sup>, Sung-Hwan Kim<sup>2</sup>, Hyeon-Seong Lee<sup>1</sup>, Moongi Ji<sup>1</sup>, Jeuk Min<sup>1</sup>, In-Hyeon Kim<sup>2</sup>, Kyuhong Lee<sup>2</sup>, Man-Jeong Paik<sup>1,\*</sup>  
<sup>1</sup>College of Pharmacy, Sunchon National University. <sup>2</sup>National Center for Efficacy Evaluation of Respiratory Disease Product, Korea Institute of Toxicology
- PF-080 Mixtures of menthol-based hydrophobic deep eutectic solvents: application as green solvents to extract bioactive compounds from *Ginkgo biloba* leaves**  
Yan Jin, Dasom Jung, Heesoo Lee, Seulgi Kang, Ke Li, Keunbae Park, Jeongmi Lee\*  
School of Pharmacy, Sungkyunkwan University, Suwon, 16419, Republic of Korea





# **Symposium I**

**- 미세플라스틱 -**



SYM I -01

**Current status of microplastics detection in plastics bottled water and Sea-salts,  
and International standardization for microplastics testing and analysis**

(플라스틱 병입생수 및 천일염 중 미세플라스틱 검출현황과 분석방법에 대한 국제 표준화 동향)

**Jaehak Jung\***

Korea Institute of Analytical Science and Technology, Seoul Korea

Recently, consumers are increasingly concerned about pollution of microplastics through successive newspapers & TV news media and about microplastics detected in food on the table. One of mankind's greatest creations, which have been exploding since the mid of 20th century, has been buried in land or spilled into the sea without being recycled or incinerated in homes and industries. In this process, plastics have been leaked into environmental matrices, and then microplastics were eventually included in the food ingredients on the dining table. Establishment of testing methods (especially including sampling) is required first criteria in order to accurately identify the phenomenon and reassure the public to these social issues. In this presentation, I would like to share the results of microplastics testing on plastics bottled water and Sea-salts sold in Korea, and also introduce the current status of international standardization for testing methods related to microplastics. ISO/TC 61(Plastic)/SC 14(Environmental Aspects)/WG 4(Microplastics) are being developing since 2017, so I'd like to introduce the major activities of ISO microplastics standardization.

1. ISO/DTR 21960:2018, Plastics—Environmental Aspects—State of knowledge and methodologies, ISO/TC 61/SC 14/WG 4 (Microplastics)
2. Erik Dümichen, Paul Eisentraut, Claus Gerhard Bannick, etc, 'Fast identification of microplastics in complex environmental samples by a thermal degradation method', *Chemosphere*, 174, 572~584 (2017)

SYM I -02

## 환경 중 미세플라스틱 분석방법에 대한 고찰

**최기인\***

한국세라믹기술원 분석기술센터

\*Corresponding author: kichoi@kicet.re.kr

환경에서의 미세 플라스틱 검출 문제는 최근 전 세계적으로 뜨겁게 주목받고 있는 환경문제 중 하나이다. 1960년대 소비재로 사용되기 시작한 플라스틱은 사용 편의성, 무해성, 내구성, 낮은 생산단가 등 다양한 장점으로 인해 다양한 분야에서 그 수요가 폭발적으로 증가하게 된다. 이러한 플라스틱 제품의 대량생산, 대량소비는 필연적으로 환경 중에서의 플라스틱 폐기물 처리 문제를 야기하였으며, 최근에는 해양, 하천, 토양, 침적물, 수산물, 생수 등 다양한 환경시료에서의 미세 플라스틱 검출 이슈로 이어지고 있다.

이에 많은 연구자들은 다양한 분석기술을 적용하여 환경시료 중에서 미세플라스틱 검출을 위해 여러 노력을 기울이고 있는 상황이다. 본 발표에서는 현재 미세플라스틱 분석에 적용되고 있는 다양한 분석기술의 장단점을 살펴보고, 이를 통해 향후 환경 중 미세플라스틱 분석 방법에 대한 표준화 추진 방향을 모색하고자 한다.

SYM I -03

## 정수 중 미세플라스틱 검출 방법 및 타당성 검증

계정진<sup>1</sup>, 오주성<sup>1</sup>, 김현욱<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>\*서울시립대학교 환경공학과

\*Corresponding author: h\_kim@uos.ac.kr

미세플라스틱(Microplastics)은 자체적인 독성뿐만 아니라 다른 물질들의 흡착 및 생물 농축 등의 영향으로, 근래에 이슈가 되고 있는 환경 문제 중 하나이다. 하지만 현재 미세플라스틱 측정방법은 연구를 진행하고 있는 팀의 개별적인 판단에 의해 이뤄지고 있다. 그러므로 미세플라스틱의 샘플링, 전처리 및 분석방법 등의 일련의 과정들에 대한 통일성이 부족하다. 그러므로 그동안 진행되어온 여러 가지 분석 결과들에 대한 비교가 현실적으로 어렵고, 신뢰성을 확보하기가 힘들다. 특히 정수 내의 미세플라스틱은 그 농도가 매우 낮기 때문에 측정방법의 신뢰성 검증이 반드시 필요한 상황이다.

본 연구에서는 정수처리장에서 배수지를 통하지 않고 직수로 공급되는 정수에 대한 분석을 진행하였다. 분석결과의 신뢰성을 검증하기 위해 최소 샘플량은 80L 이상을 실시했으며, 외부 요인을 최소화하기 위해 현장 샘플링 시 사용되는 필터 팩은 실험실 내에서 조립되어 밀봉된 채로 운반했다. 운반된 필터는 알루미늄 데시케이터에서 24시간 건조 후, microscope FT-IR(Fourier Transform Infrared spectroscopy)를 이용하여 최저 20 $\mu$ m 이상의 플라스틱에 대해 분석을 진행하였다. 정성분석은 FT-IR의 mapping 기능을 활용하여 필터 전체를 분석한 후 Library와 비교하여 미세플라스틱을 검출했다.

전체 샘플을 분석한 결과, 크기는 30  $\mu$ m~250  $\mu$ m로 다양한 분포를 보였으며 폴리에틸렌(PE), 폴리프로필렌(PP), 폴리에스터(PEST) 등 다양한 미세플라스틱이 검출되었다. 본연구 팀에서 검출한 미세플라스틱의 수 대비, 표준오차는 20% 이내로 신뢰할 수 있는 수준으로 나타났다. 또한 80L당 신뢰수준 95% 기준으로 최소 1개 이상의 미세플라스틱이 검출된다는 결과로써, 충분한 샘플량을 확보해야만 유의미한 결과를 얻을 수 있다는 것을 반증한다.



# **Symposium Ⅱ**

**- 대기 오염 진단 -**





SYM II-01

**열탈착기-GCxGC Time of flight MS/FID 시스템을 이용한  
환경시료 중의 유해물질 분석법**

**주도원\***

ITC21

\*Corresponding author: doweon@itc2000.co.kr

GCxGC 분석에서 시료의 모든 성분들은 모듈레이터로 연결된 두 개의 서로 다른 극성을 갖는 컬럼들에 의해 두 번의 분리가 이루어지게 된다. 첫 번째 컬럼에서 분리되어 나오는 일정부분을 모듈레이터에서 샘플링하여 두 번째 컬럼으로 주입하여 여러 성분으로 나누어지는 과정이 계속적으로 일어난다. 이렇게 얻어진 2차원적인 조각들(modulation slices)을 차례로 차곡차곡 쌓아 3차원 피크모양을 만들면, x축은 1차 RT, z축은 2차 RT, y축은 피크의 크기를 나타내는 입체적인 크로마토그램을 구현할 수 있다. 검출기로 MS를 사용했을 경우 mass spectrum 까지 얻을 수 있어 4차원 분석이 가능하게 된다. 기존에 사용하던 thermal 방식의 모듈레이터는 냉매를 반드시 사용해야 하고 C5 이하의 물질에 대해 적용이 어려워 응용범위에 한계가 있어 특정 분야에만 사용되어 왔다. 최근에 새롭게 개발된 flow 방식의 모듈레이터(RFF)는 냉매를 사용하지 않아 사용이 편리하고 온라인 분석에 적용이 가능하며, 분석 응용 범위가 넓으며 재현성이 우수하였다. 기존 모듈레이터의 단점을 보완하게 됨으로써 하드웨어의 발전을 이루었으며, 운영 프로그램까지도 새롭게 개발하여 커다란 진보를 이루었다. 이러한 하드웨어와 소프트웨어의 진보를 토대로, GCxGC 기술은 특정 분야에서만 사용하던 틈새적인 기술에서 일반적인 환경 분석에도 쉽게 적용이 가능한 일반적인 기술로 변화할 수 있는 토대를 마련하였다. 이러한 시스템에 시료 전처리 장비인 열탈착기를 연결하면 대기 중의 성분을 자동으로 온라인 분석할 수 있고, 검출기로 TOF MS/FID 혹은 TOF MS/ECD를 사용하게 되면 보다 일상적인 정성, 정량분석에도 GCxGC 기술을 응용할 수 있다.

SYM II-02

## Chemical Characteristics of Atmospheric Fine Particulate Matters in Relation to Meteorological Phenomena at Gosan Site, Jeju Island

Chang-Hee Kang<sup>\*</sup>, Jung-Min Song, Jun-Oh Bu

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

<sup>\*</sup>Corresponding author: changhee@jejunu.ac.kr

Collections of the atmospheric fine particulate matter samples, i.e. PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> were made at Gosan site of Jeju Island, which is one of the background sites of Korea, during 2000~2015. Their ionic and elemental species were analyzed in order to examine the variation of chemical characteristics in relation to the different meteorological phenomena. The mass concentrations of PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> were 30.5 and 16.8  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , respectively. Concentrations of the major secondary pollutants such as nss-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, and NH<sub>4</sub><sup>+</sup> were 5.29, 2.73, 1.98  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  for PM<sub>10</sub>, and 4.38, 1.26, 1.69  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  for PM<sub>2.5</sub>, respectively. Composition ratios of the major marine (Na, Mg), anthropogenic (S, Zn, Pb, Ni) and soil (Al, Fe, Ca) sources occupied 35.1%, 32.8% and 25.6% in PM<sub>10</sub> and 19.3%, 57.5%, 16.7% in PM<sub>2.5</sub>, respectively. From the study of chemical characteristics related to the particle sizes, the concentration ratios of PM<sub>2.5</sub>/PM<sub>10</sub> for nss-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> and NH<sub>4</sub><sup>+</sup> were 0.83, 0.85, respectively, indicating that those species were existed mainly in PM<sub>2.5</sub> fine mode particles. On the other hand, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> was evenly distributed in both fine and coarse mode particles, furthermore, the marine and soil species such as Na<sup>+</sup>, Cl<sup>-</sup> and nss-Ca<sup>2+</sup> were rich in coarse mode particles. The concentrations of anthropogenic and soil components increased noticeably through the prevailing northwesterly winds. Based on the clustered back trajectory analysis, the concentrations of anthropogenic components increased when the airflow moved from the China continent, on the other hand, they decreased when the airflow moved from the Northern Pacific into Jeju Island.

During the Asian Dust periods, the concentrations of nss-Ca<sup>2+</sup> and NO<sub>3</sub><sup>-</sup> increased highly as 12.7 and 3.7 times in PM<sub>10</sub>, and 7.7 and 2.8 times in PM<sub>2.5</sub>, respectively, compared to the normal days. Especially, the concentrations of the crustal species such as Al, Fe, Ca, K, Mn, Ba, and Sr showed a noticeable increase during the Asian Dust periods. For the haze event days, concentrations of the secondary air pollutants were increased 3.1~4.8 and 3.3~5.4 times in PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub>, respectively. Moreover the remarkable increase of NO<sub>3</sub><sup>-</sup> concentration was observed in PM<sub>2.5</sub> during haze events. The neutralization factors by ammonia were 0.69, 0.58, 0.78, respectively, for non-events, Asian Dust and haze days in PM<sub>10</sub>, besides they were 0.81, 0.69, 0.87, respectively, in PM<sub>2.5</sub>. Meanwhile, those by calcium carbonate were 0.09, 0.42, 0.09 in PM<sub>10</sub>, and 0.04, 0.18, 0.03 in PM<sub>2.5</sub>, respectively.

SYM II-03

## 인공위성 관측 자료를 이용한 지역규모 대기 에어로솔과 미량기체의 변화 특성

이권호<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>강릉원주대학교 대기환경학과

\*Corresponding author: kwonho.lee@gmail.com

현재까지 지구 환경을 관측하는 수많은 지구관측 위성이 운영되고 있으며, 이러한 지구관측 위성은 대기 및 지표 변화 관측에 널리 사용되어왔다. 특히, 동아시아 지역은 급속한 산업화와 인구의 증가로 인하여 환경변화가 급격하게 이루어져 왔으며, 인공위성을 이용한 환경변화 관측은 비 접근 지역에서의 관측 정보 생산을 가능케 함으로서 유용한 수단으로 자리 잡고 있다. 본 연구에서는 동아시아 지역(동경 110° ~ 150°, 북위 20° ~ 56°)의 환경 변화를 분석하기 위하여 지난 2000년부터 2018년까지의 인공위성 관측 자료를 이용하여 지표(토지 피복, 식생 분포 등), 대기 에어로솔(aerosol), 오존(O<sub>3</sub>), 이산화황(SO<sub>2</sub>), 이산화질소(NO<sub>2</sub>) 및 포름알데히드(CH<sub>2</sub>O)에 관한 변화 추세를 분석하였다. 분석 결과에 따르면 동아시아 지역의 대기 에어로솔은 주로 중국에 집중적으로 분포되어 있으며, 2000년~2014년 사이의 연간 빈도는 증가하는 추세(약 ~0.179 AOD/년)로 나타났다. 그리고 2015년 이후 인위적인 배출량의 감소와 기상 조건의 변화로 인해 연간 빈도가 감소하며, 이러한 패턴은 NO<sub>2</sub>의 연간 빈도와 비슷하다. SO<sub>2</sub>의 경우는 연료 사용의 변화와 배출 감소로 연간 꾸준한 감소가 확인되었다. 그러나 대류권 O<sub>2</sub>농도가 크게 증가함으로 인하여, 지역 대기 중에서 2차 오염 물질이 증가하는 것과 관련이 있을 것으로 판단된다. 이러한 대기 오염물질의 변화 현황은 후속 정지궤도 위성인 GK-2A 및 GK-2B 위성의 활용을 통하여 보다 상세한 정보를 획득 할 수 있을 것이며, 더욱이 동아시아의 대기 순환 및 기후변화 관련연구에서 활용이 가능할 것이다.

사사

본 연구는 환경부의 환경정책기반공공기술개발사업(2017000160003)에서 지원받았습니다.

SYM II-04

**드론으로 냄새 발생원 추적이 가능한가?  
현재의 드론 기술 수준은 어디까지 왔나?**

**허귀석<sup>1,\*</sup>**

<sup>1\*</sup>ReSEAT

\*Corresponding author: gwiheo@gmail.com

**연구목적:**

악취로 인한 사회적 문제가 아직도 해결되지 못하고 있는 실정이다. 이는 배출원 관리가 기술적으로 어려워서 생기는 문제로서 현재의 측정기술로서는 배출원을 파악하기 어렵기 때문이다. 특히 공장이 밀집되어 있는 산업단지의 경우 어느 배출원에서 악취가 발생하고 있는지를 정확하게 파악할 수 없어 관리가 불가능하다. 이런 문제를 해결하기 위해서 본 연구에서는 드론을 이용하여 악취 배출원을 추적할 수 있는 기술에 대해서 알아보하고자 한다.

**실험방법:**

드론에 악취 센서를 장착하여 배출원으로 비행할 수 있으면 악취 배출원을 파악할 수 있다. 문제는 드론을 어떻게 비행해서 배출원을 추적할 수 있는가이다. 수동 조정으로 드론을 조정해서 비행이 가능하나, 공업단지의 경우 각종 시설물과 전자파 장애가 있어서 안전한 비행이 어렵고, 이 문제로 인한 추락사고의 위험이 있다. 그러므로 드론이 자율비행 기능을 갖고 있어야 하고, 물리적 장애물을 피할 수 있고, 전자파에 의한 장애를 극복할 수 있어야 한다. 우선 본 연구에서는 드론에 PID 센서를 장착하여 악취 배출원 주변을 수동 비행하고, 비행과정에서 채취한 유해물질을 GC-MS로 분석하여 유해물질 및 악취물질을 분석하였다. 이 실험을 통해서 VOC 물질의 공간 분포를 드론 비행으로 파악함으로써 드론에 의한 악취 배출원 추적 가능성을 실험하였다.

**연구결과 및 고찰**

수동에 의한 드론은 조종 시야의 불안정성과 전기 출과 같은 장애요인으로 인하여 배출원에 근접 비행을 어렵다. 악취물질은 대기 중 확산이 빠르므로 이를 추적하기 위해서는 배출원 주변을 근접 비행하여 측정이 이루어져야 하므로 장애물을 자동으로 회피할 수 있는 자율 비행 성능이 요구된다. 최근 인공지능(AI) 기술의 발전으로 이러한 장애물 인식기술이 크게 발전하고, 이미지를 실시간으로 인식할 수 있는 고성능 HW의 발전으로 이러한 성능 구현이 가능해졌다. 자율자동차의 인식 기술이 드론에 적용 가능할 수 있도록 소형화될 수 있어, 이제는 드론을 이용한 악취 배출원 측정기술 개발이 한층 현실화가 가능해졌다. 여기에는 카메라를 이용한 SLAM 기술과 AI Deep Learning 알고리즘에 의한 이미지 인식 기술, 고성능 계산이 가능한 소형 컴퓨터(NVIDIA Tx1)가 핵심기술이다.

본 세미나에서는 현재까지 진행된 드론 개발 기술의 한계점과 이를 극복할 수 있는 최근 기술의 동향을 살펴보고, 이러한 기술을 악취 배출원 추적 기술 개발에 활용할 수 있는 가능성을 알아보하고자 한다.

# **Symposium Ⅲ**

**- SCOPUS 등재기념 -**



SYM III-01

**Content differences in sugars, organic acids, and phenolics as the response of viroid disease in grapes (*Vitis* spp.) in Korea**

**Jong Seong KANG<sup>1,\*</sup>, Thi Phuong Duyen VU<sup>1</sup>, In Sook CHO<sup>2</sup>, Young Ho KIM<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>충남대학교 약학과, <sup>2</sup>농촌진흥청 원예특작과학원 원예작물환경과

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

As one of the most consumed fruits, grapes (*Vitis* spp.) have been grown in Korea for more than 1000 years. In recent years, widespread viroid infection in grapes had been reported, which caused malformed berries and reduction in both fruit quality and yield. In this study, the effects of viroid disease on the content of sugars, organic acids, and phenolics in 'Campbell Early' and 'Kyoho' cultivars were studied using high-performance liquid chromatography-photodiode array-tandem mass spectrometry (HPLC-PDA-MS/MS) and HPLC-evaporate light scattering detector (ELSD). A phenomenex Luna NH<sub>2</sub> column, a Hi-Plex H cation-exchange column, and a Hector C18 column were used for analysis sugars (fructose, glucose), organic acids (tartaric acid, malic acid), and phenolics (anthocyanins, phenolic acid, flavonols), respectively. In response to viroid infection, considerable decreases in the content of sugars (fructose and glucose), malic acid, and anthocyanins were observed ( $p < 0.05$ ). The content of flavonols and tartaric acid in viroid samples, otherwise, increased dramatically ( $p < 0.05$ ) while there are no significant difference in phenolic acid content. The results showed that, due to viroid infection, grapes seem to increase synthesis of flavonols, which acts like the 'antibody' of grapes. However, decrease in sugars, anthocyanins content will lead to low quality of the berries as well as products derived from viroid-infected grapes. Moreover, increasing in tartaric acid, one of the most important organic acid in grapes, in viroid berries also affected the grape taste and other grape products.

SYM III-02

**What is the best novel materials for the removal of key pollutants in indoor air?**

**Ki-Hyun Kim\***

Department of Civil and Environmental Engineering, Hanyang University,  
222 Wangsimni-Ro, Seoul 04763, Republic of Korea.

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

To date, numerous materials have been developed and introduced as air quality treatment media for various gaseous pollutants including key volatile organic compounds (VOCs) like benzene and formaldehyde (FA). Although the use of activated carbon (AC) based on sorptive treatment has been one of the most preferable options for the treatment of benzene, such application is not feasible for the treatment of FA. In an effort to develop novel materials to treat various target species in indoor environment, we have investigated the potential of new or advanced materials like metal organic frameworks (MOFs) for diverse applications in indoor air quality remediation. Nonetheless, the basic information is yet limited with respect to the practical option for the advanced functional materials. This research was organized to update all the sorptive technology for hard targets based on Figure of Merits (FOM) such as the selection of the best performing sorbent in terms of adsorption capacity and economic feasibility.

**Keywords:** benzene, activated carbon, adsorption, treatment, conventional adsorbents



SYM III-03

## Analytical methods for the chiral separation of proton pump inhibitors

**Kyeong Ho Kim**<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Kangwon National University,

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

Proton pump inhibitors (PPIs) are first-line treatment for peptic acid disorders and are commonly marketed in the racemic form. Due to their different pharmacodynamic and pharmacokinetic properties, our laboratory has applied various analytical methods to separate enantiomers of four PPIs (lansoprazole, omeprazole, pantoprazole, and rabeprazole). A capillary electrophoresis (CE) method using cyclodextrins (CDs) as chiral selectors was developed to separate enantiomers of the PPIs. Chiral separation was carried out with a 56-cm long, 50- $\mu$ m wide bare fused-silica capillary. The effects of CD concentration, pH, buffer concentration, voltage, and capillary temperature on the enantioseparation were also investigated. CE was successfully applied to determine enantiomeric purity of dexlansoprazole tablets. Rabeprazole enantiomers, which is the most challenging candidate of the four PPIs, were resolved by CE for the first time. Additionally, rabeprazole enantiomers were also separated on new generation of chiral stationary phase, cellulose tris (3,5-dichlorophenyl carbamate) immobilized to silica gel, by high performance liquid chromatography and tandem mass spectrometry, following by determination of each enantiomer in commercial tablets. The developed methods were fully validated, thus, can be valuable tools for the routine analysis of PPIs enantiomers.

SYM III-04

## 식·의약품 중 불법 혼입된 부정물질 분석 사례

박성수, 김남숙, 이지현, 강호일\*

식품의약품안전처, 식품의약품안전평가원, 첨단분석팀

\*Corresponding author: kanghoil@korea.kr

식·의약품 등의 발달과 함께 건강에 대한 관심이 늘어남에 따라 건강기능식품 시장의 규모 역시 전 세계적으로 꾸준히 증가하고 있다. 질병의 예방 및 치료를 목적으로 오인하여 건강식품을 소비하거나, 특정 효능을 극대화하기 위해 식품에 사용될 수 없는 의약품 성분 등 부정물질을 의도적으로 첨가하여 불법 제조·판매한 제품에 의해 국민건강이 위협받고 있다. 또한 해외직구를 통해 건강식품의 국내 유입이 증가하면서 국내에서 허용되지 않은 부정물질의 선제적 차단을 위한 안전관리 강화가 요구되고 있다. 이에 식품의약품안전처 첨단 분석팀에서는 온·오프라인을 통해 유통되는 식·의약품 중 국민건강을 위협하는 불법 혼입 부정물질에 대한 신속·정확한 분석법을 개발할 뿐만 아니라, 범죄 단속망을 피하기 위해 이미 알려진 화학구조를 의도적으로 변경한 신종 부정물질을 검출·규명함으로써 시험분석을 통한 식·의약품 안전관리에 기여하고 있다. 보다 선제적인 안전관리를 위해서 다양한 분석기기(LC-UV, LC-Q-TOF/MS, LC-MS/MS 등)를 이용하여 노인성질환(골다공증, 통풍 등) 치료제(dexamethasone 등 20성분)나 발기부전치료제 및 유사성분(sildenafil 등 82성분) 동시분석법 등 다수의 다성분 동시분석법을 개발 및 유효성 검증한 후 위해사범중앙조사단이나 인천세관, 검찰청 등으로부터 의뢰되는 다양한 유형의 검체의 신속·정확한 시험분석에 활용하고 있으며 그 사례를 소개하고자 한다. 지난 4월, 위해사범중앙조사단에서 의뢰된 검체 중 통풍치료 특효약으로 불법 제조·판매한 한약 제품에서 dexamethasone이 검출·적발한 사례를 보도하였다. 또한, 성기능 강화를 표방하는 불법 제품에서 실데나필 이나 타다라필 뿐만 아니라 화학구조가 유사한 dimethylsildenafil 등과 같은 신종 부정물질을 검출·구조 규명 등 다양한 검출사례를 보도한 바 있다. 한편, 국제우편 등 다양한 방법에 의한 마약류의 국내 유입 및 불법 유통에 대한 신속한 대응을 위해 유관기관(인천세관 등)과 긴밀하게 협업하고 있다. 그 결과, 우려 마시는 차잎이나 성분 미상의 백색분말 등에서 APINAC, DMBA-CHMINACA 등을 검출·규명함으로써 신종 마약류의 국내 유입을 선제적으로 차단하기도 하였다. 앞으로도 건강기능 표방식품 등에 혼입될 우려가 있는 부정물질에 대한 분석체계 강화로 국민건강증진을 위해 지속적으로 노력할 것이다.

# **Symposium IV**

**- 의약품분야 연구에 대한 최신  
분석법의 활용 -**



SYM IV-01

## Observation for volatolome by imaging mass spectrometry (IMS)

권성원\*

\*서울대학교 약학대학 약학과

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

Many diseases are believed to have unique metabolites that can be utilized as diagnostics, and relevant molecules such as proteins, peptides, metabolites, and lipids have been identified using current multi-omics platforms. Among the more robust omics-based technologies, inexpensive and non-invasive technologies should be applied to practical use for bed-side diagnosis. Thus, systemic detection of disease-related biomarkers that can be detected by non-invasive approaches has emerged as the first choice for this purpose, and profiling of volatile compounds with GC-MS (gas chromatography-mass spectrometry) and visualization with IMS (imaging mass spectrometry) have become key tools in this study. Several VOCs (volatile organic compounds) were identified *in vitro* by GC-MS and SIMS (secondary ion mass spectrometry) was performed to create an image for volatolome localization of a single cell. Further studies to validate volatolome biomarker candidates should be extended to facilitate volatolome network establishment *in vivo*. This work was supported by the Bio-Synergy Research Project of the Ministry of Science, ICT and Future Planning through the National Research Foundation (NRF-2012M3A9C4048796).

SYM IV-02

## Effects of gut microbial metabolic activity on the pharmacokinetics of Red ginseng

유혜현<sup>1\*</sup>, 최민선<sup>1</sup>, 김전경<sup>2</sup>, 김동현<sup>2</sup>

<sup>1</sup>\*한양대학교 약학과, <sup>2</sup>경희대학교 약학과

\*Corresponding author: yoohh@hanyang.ac.kr

Gut microbiota convert polar ginsenosides to non-polar bioactive ginsenosides to contribute to the biotransformation of ginsenosides in the intestinal tract. In this study, we investigated the pharmacokinetic profiles of the protopanaxadiol ginsenosides in humans after the intake of conventional Red ginseng (RG) and fermented Red ginseng (FRG). RG or FRG was orally administered to 34 healthy Korean volunteers, and the serum concentrations of the ginsenosides were determined using liquid chromatography-tandem mass spectrometry. Additionally, the fecal ginsenoside metabolic activities were measured. Then, the correlations between the pharmacokinetic profiles of the ginsenosides and the fecal ginsenoside metabolizing activities were investigated. For the RG group, the area under the serum concentration-time curve (AUC) of ginsenosides Rd, F2, Rg3, and CK were  $8.20 \pm 11.95$  ng·h/mL,  $4.54 \pm 3.70$  ng·h/mL,  $36.40 \pm 19.68$  ng·h/mL, and  $40.30 \pm 29.83$  ng·h/mL, respectively. For the FRG group, the AUC values of ginsenosides Rd, F2, Rg3, and CK were  $187.90 \pm 95.87$  ng·h/mL,  $30.24 \pm 41.87$  ng·h/mL,  $28.68 \pm 14.27$  ng·h/mL, and  $137.01 \pm 96.16$  ng·h/mL, respectively. The fecal CK-forming activities of the healthy volunteers were generally proportional to their ginsenoside Rd-forming activities. The AUC value of the CK exhibited an obvious positive correlation ( $r=0.566$ ,  $p<0.01$ ) with the fecal CK-forming activity. These results suggest that the gut microbiota may play an important role in the bioavailability of the non-polar RG ginsenosides by affecting the biotransformation of the ginsenosides.

SYM IV-03

**Determination of residual chemicals in various food commodities  
using QuEChERS and LC-MRM**

**Dong Yoon Kim<sup>1</sup>, Hyo Chun Lee<sup>1</sup>, Ha Ra Cho<sup>1</sup>, Jun Seo Park<sup>1</sup>,  
Han Sol Kim<sup>1</sup>, Sang Beom Han<sup>2</sup>, Ho-Chul Shin<sup>3</sup>, Yong Seok Choi<sup>1</sup>\***

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Dankook University,

<sup>2</sup>College of Pharmacy, Chung-Ang University, <sup>1</sup>College of Veterinary Medicine, Konkuk University

\*Corresponding author: analysc@dankook.ac.kr

Since 2014, our research team have worked on the development/improvement of methods to determine residual chemicals including veterinary drugs, veterinary quasi-drugs, and pesticides in various food commodities like milk, egg, meat, and aquatic products. For efficient extraction and purification of analytes in complex sample matrices, methods based on QuEChERS have been optimized in each project. In the case of instrumental analyses of the extracted and purified analytes, liquid chromatography and multiple reaction monitoring (LC-MRM) have been employed with serious method modification in individual projects for excellent performances. The methods developed/improved by our team have been contributed to the establishment of the better food safety system including the positive list system in South Korea. Here, among many successful method development cases, three examples targeting pesticides, veterinary drugs, and veterinary quasi-drugs, respectively will be presented.

SYM IV-04

**In vitro comparative metabolite profiling of MAM-2201  
in human, rat, and mouse**

**김주현**

영남대학교 약학대학  
jhkim@yu.ac.kr

MAM-2201 is a synthetic cannabinoid with potent psychoactive properties that has been detected as an active ingredient in herbal incense blends. To expand understanding of MAM-2201 metabolism and compare the metabolic fates in human with those in animals, the metabolism of MAM-2201 in human, rat, and mouse hepatocytes were investigated using liquid chromatography-high-resolution mass spectrometry (LC-HRMS). As a targeted approach, we searched for possible metabolites of MAM-2201 based on previously reported metabolic pathways. Additionally, HRMS data acquired from in vitro incubation across species were investigated by PLS-DA, and possible metabolites were carefully studied with their fragment ions. Nineteen phase I metabolites reported previously in human liver microsomes and 13 novel metabolites were identified in human, mouse, and rat hepatocytes: one phase I metabolite (M20) and 12 phase II metabolites including six glucuronides (G1-G6), one sulfate (S1), and five GSH conjugates (GS1-GS5) of MAM-2201 metabolites. G3 was human-specific, but M20, G1, G2, and 5 GSH conjugates were rat-specific, indicating species-related differences in MAM-2201 metabolism. The metabolic fates of MAM-2201 in rat hepatocytes were quite different from those in human and mouse hepatocytes with eight rat-specific metabolites. Although in vitro observations cannot directly translated into in vivo situations, the findings of the present study will be useful for the experimental design and assessment of metabolism-mediated toxic risk of MAM-2201.



# **Symposium V**

**- 산학연 -**



SYM V-01

**Quantitative Analysis with NMR**  
**Quantitative NMR —an old and new assay technique—**

**Katsuo Asakura**

Manager, SI Sales Promotion Dept., JEOL Ltd.

Quantitative NMR (qNMR) is getting much attention especially among pharmaceutical, agricultural, and chemical industries as an assay technique. qNMR can determine purities of various chemical products with few authentic reference substances. In this lecture, the basics of qNMR will be described.

SYM V-02

**Structural characteristics of mPEG-PDLLA and  
their effects on micelle stability**

**민범찬<sup>1,\*</sup>, 서민효<sup>1</sup>, 김봉오<sup>1</sup>, 고영주<sup>1</sup>, 이일웅<sup>1</sup>, 김혜림<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>삼양바이오팜 의약바이오연구소

\*Corresponding author: bumchan.min@samyang.com

The correlation between polymer microstructure of mPEG-PDLLA and secondary aggregation of its micelle was studied. Close examination of <sup>1</sup>H NMR spectra revealed that the methine moieties, -CH(CH<sub>3</sub>)-, of mPEG-PDLLA polymer well represented its microstructure. To elucidate the physicochemical characteristics of various microstructures, we have developed an index, called L-ratio, to indicate the relative content of heterotactic component within the polymer. Storage stability of micelles from six polymers with different L-ratios (L-ratio ranging from 28 to 33%) was studied at 30 °C and 50°C, and changes in average particle size were monitored to evaluate their secondary aggregation. We have found that polymers with high L-ratio takes longer time to secondary aggregation of polymeric micelles to occur. The findings should provide insightful guidance in the development of polymeric micelles.

SYM V-03

## Solid-State NMR Study on the Phosphorus-modified ZSM-5 Zeolite

You Seung Oh<sup>1</sup>, Na Young Kang<sup>2</sup>, Yong Ki Park<sup>2</sup>, and Chul Kim<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>Department of Chemistry, Hannam University, <sup>2</sup>KRICT

\*Corresponding author: chulkim@hnu.kr

Zeolites such as Zeolite-Y and ZSM-5 are generally very effective catalyst in the fluid catalytic cracking (FCC) process in a modern refinery specially to enhance the production of light olefins. Brønsted acid sites or Lewis acid sites of the ZSM-5 is related to Al replaced Si site in the silicates. The problem is that this Al can be easily dealuminated during the catalytic reaction, especially during hydrothermal process. For the protection of Al site many different modification methods have been applied to ZSM-5, one of which is the phosphorus modification by using H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>. The phosphorus-modified ZSM-5 enhances the hydrothermal stability and acidity control of the ZSM-5. P-modification can inhibit the framework dealumination during steaming process. Phosphorus treatment can modify hydroxyl groups in ZSM-5 and generate many different hydroxyl groups such as silanol groups in different chemical situations, AlOH, POH, and bridged hydroxyls.

Multinuclear and multipulsed solid-state NMR techniques have been proven to be able to provide both structural and dynamical information about solid materials such as zeolites. Among these, CPMAS technique provides valuable information on dipole-dipole interactions between relevant two nuclei and chemical environment around them. Rotational-echo double resonance (REDOR) NMR is a popular MAS technique that can be used to measure internuclear distances between heteronuclear spin pairs.

Chemical changes of phosphorus-modified ZSM-5 zeolite in calcining and steaming processes were studied using solid-state MAS NMR techniques. The identification of the chemical species of the steamed or washed zeolite could be done by analyzing the spectral changes on the solid-state multinuclear MAS NMR spectroscopy. Dehydration process led to a dramatic change of aluminum species by breaking the aluminum-oxygen bond in the zeolite framework and to a formation of polyphosphate attached to aluminum.

From the analysis of <sup>27</sup>Al and <sup>31</sup>P MAS spectra and of the <sup>1</sup>H→<sup>31</sup>P CPMAS kinetics, we found that polyphosphates not attached to Al were removed by the steaming process while polyphosphates attached to Al survived after steaming. From the analysis of <sup>31</sup>P-<sup>27</sup>Al REDOR data, we found that the chemical species having longer Al-P distance in aluminum-phosphorus species in the calcined sample was removed by the steaming process. Taken together, these results suggest that highly condensed phosphate group can protect the framework aluminum during the steaming process.

SYM V-04

## IR/Raman Micro-spectroscopy for Industrial Applications

오성준\*, 황진영

LG Chem Corporate R&D

\*Corresponding author: parang5@hanmail.net

IR 현미경은 광학 현미경에 적외선 분광 기술을 적용한 것으로서, 수십 마이크로 크기의 시료를 분석하는 방법이다. IR 현미경 기술은 소재 관련 산업 분야에서 큰 의미가 있는데, 이는 제품의 결함, 오염, 불량 문제를 해결하는데 필수적인 임무를 수행하기 때문이다. 최근 고분자 성형물, 고분자 필름, 전자재료 분석 등에 널리 활용되고 있고, 그 사용 빈도는 점차 증대되었다.

이러한 마이크로 분광학의 지향점은 보다 작은 시료의 측정이다. IR 현미경은 비교적 작은 크기의 유기물을 측정할 수 있는 장점에도 불구하고, 적외선 파장의 한계로 인해 측정 가능한 크기가 제한되었으나, 측정 악세사리의 활용으로 응용성이 확대되었다. 또한, IR 현미경의 보완적 기술로서 가시광 레이저를 이용한 Raman 현미경 기술이 발전되어, 1 마이크로 수준에 대한 분석이 가능하게 되었다.

마이크로 분광 기술을 이용해서 얻어지는 한 지점의 데이터는 0 차원에 해당하지만, 선, 면, 그리고 공간으로 확대된 다차원 분광 이미징으로 발전하고 있으며, 이를 위해 고성능의 하드웨어와 소프트웨어의 발전이 병행되고 있다.

다차원 분광 이미징을 순차적 점 측정 방식으로 구현하면, 오랜 측정시간으로 효율적이지 못하며, 이를 극복하기 위해 개발된 최신 측정 기술과 고감도 디텍터를 적용할 수 있다. 분광 이미징에서 요구되는 신호대 잡음비는 개별적으로 한 점을 측정할 때보다 낮은 편이며, 소프트웨어적으로 부분적 개선이 가능하다.

# **Symposium VI**

**- 메타볼로믹스 -**





SYM VI-01

**Urinary metabolomic study on autism spectrum disorder in valproic acid-induced mouse model for biomarker discovery**

**Yuri Cho<sup>1</sup>, Ri Jin Kang<sup>2</sup>, Chan Young Shin<sup>2</sup>, Jongki Hong<sup>3</sup>, Soo-Hyun Lee<sup>4</sup>, Hyun-Mee Park<sup>1</sup>\***

<sup>1</sup>Advanced Analysis Center, Korea Institute of Science and Technology.

<sup>2</sup>School of Medicine and Center for Neuroscience Research, SMART Institute of Advanced Biomedical Sciences, KU Open Innovation Center, Konkuk University.

<sup>3</sup>College of pharmacy, Kyung Hee University.

<sup>4</sup>Department of Medical Record and Health Information Management, Kongju National University.

\*Corresponding author: phm4556@kist.re.kr

Autism spectrum disorder (ASD) is a neurodevelopmental disorder that is defective in social interactions and has repetitive behaviors. Although the reported increase in ASD's prevalence, physiological causes are environmental or genetic factors on a speculative basis and the diagnostic biomarker is not founded yet. A maternal exposure from valproic acid (VPA) among environmental factors is expressed behavioral phenotype similar to ASD. The aim of this study is to investigate the alteration of glutamate, tryptophan and tyrosine metabolism and to discover candidate biomarkers based on targeted metabolomics approach using ultra performance liquid chromatography-triple quadrupole-ion trap mass spectrometry (UPLC-QTRAP-MS) in ASD mouse model. Urine samples (n=18 in the control group, n=25 in ASD group) were obtained from individuals of 4 weeks after birth, which was born from the pregnant female mouse by single intraperitoneal injection of VPA 300–400 mg/kg. The results were represented significant metabolic changes in ASD group that [KYN/Trp], [AA/KYN], [3-HAA/3-HK] and [3-HAA/AA] in the kynurenine pathway. In addition, IAA, which is associated with in intestinal microbial metabolism, significantly decreased in the ASD group. The validity of the established analytical method (recovery, accuracy, precision, linearity, LOD, LOQ) was verified. In conclusion, this analytical method and outcome provide simultaneous determination of metabolites and important insights into the predicting and understanding ASD diseases.

SYM VI-02

## **Analytical Chemistry, Metabolomics, and Bioinformatics**

**Do Yup Lee<sup>\*</sup>, Eun Mi Lee, Bo Mi Lee**

Department of Bio and Fermentation Covergence Technology,

BK21 PLUS Program, Kookmin University

<sup>\*</sup>Corresponding author: rome73@gmail.com

Metabolomics is a powerful technology for comprehensively profile a range of metabolites in diverse biological systems. The technology provides unique gate to biochemical entity that is not accessed by other types of molecular species. Moreover, metabolites change most dynamically in response to internal and external stimuli among molecular class, thus have been applied to diagnostic and prognostic markers.

Mass-spectrometer in combination with gas or liquid chromatography is the representative analytical platform. The high-throughput capability of the analysis in turn has led to the demands for advanced statistics and big data management .

In this presentation, basic statistics to advanced bioinformatics coupled to metabolite profiling is introduced with different types of researches mainly focusing on clinical application. Further, the presentation shows how the metabolomics readouts are integrated with other omics data and physiological results.

SYM VI-03

## Development of LC-MS/MS methods for investigation of reproductive toxicity induced by MEHP in zebrafish

Sung-Hee Cho<sup>1\*</sup>, Chang-Beom Park<sup>2</sup>

<sup>1\*</sup>Chemical Analysis Center, Korea Research Institute of Chemical Technology (KRICT), <sup>2</sup>Gyeongnam Department of Environmental Toxicology and Chemistry, Korea Institute of Toxicology (KIT)

\*Corresponding author: shc0429@kRICT.re.kr

Zebrafish (*Danio rerio*) has been used as a model for behavioral research, genetics, physiology, disease modeling, drug discovery, and toxicology due to similarity of tissue-specific physiological processes between zebrafish and humans. Metabolic study using zebrafish provide important information regarding molecular-level effects and toxicity of xenobiotic chemicals. Phthalates are widely used as plasticizers in a variety of daily-life products, resulting in widespread distribution in aquatic environments. In this study, to investigate whether chronic exposure to mono-(2-ethylhexyl) phthalate (MEHP) disrupts thyroid endocrine system and causes reproductive dysfunction in zebrafish, the analytical methods were developed for determination of steroids and thyroid hormones in zebrafish using liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS). In this study, zebrafish was chronic exposed to different concentrations of MEHP (2, 10, and 50 µg/mL) for 21 days. To investigate the metabolic alteration induced by MEHP, thyroid hormones and steroids in the whole-body of zebrafish analyzed by LC-MS/MS after sample preparation steps. In zebrafish treated with MEHP, whole-body T3 levels were significantly increased (MEHP 10 µg/mL;  $P < 0.05$ , MEHP 20 µg/mL;  $P < 0.03$ ), indicating thyroid endocrine disruption and testosterone (MEHP 2 µg/mL;  $P < 0.04$ ), estradiol (MEHP 2 µg/mL;  $P < 0.03$ , 10 µg/mL;  $P < 0.02$ , MEHP 20 µg/mL;  $P < 0.02$ ), progesterone (MEHP 2 µg/mL;  $P < 0.03$ , 10 µg/mL;  $P < 0.03$ , MEHP 20 µg/mL;  $P < 0.03$ ), and cortisol (MEHP 2 µg/mL;  $P < 0.03$ , 10 µg/mL;  $P < 0.008$ , MEHP 20 µg/mL;  $P < 0.008$ ) were significantly increased. Also, treatment with MEHP inhibited spawning in zebrafish. These results demonstrate that chronic exposure to MEHP alters whole-body contents of thyroid hormones and steroidogenesis related to reproduction, thus exerting reproductive toxicity and the developed LC-MS/MS methods could be used to evaluate reproductive toxicity in zebrafish.

SYM VI-04

**Functional metabolomics of soybean core-collections and its application  
for the development of functional foods**

**문중경<sup>1</sup>, 김수남<sup>2</sup>, 김진철<sup>2</sup>, 최용수<sup>2,\*</sup>**

<sup>1</sup>농촌진흥청 농생명게놈활용연구사업단, <sup>2</sup>\*한국과학기술연구원 천연물연구소

\*Corresponding author: yongsoo.choi@kist.re.kr

Soybean is one of the major crops for economical and nutritional aspects, containing rich amounts of protein, starch, and essential minerals as well as secondary metabolites such as lipids and phenolic compounds. It is believed that cultivated soybean was domesticated from wild soybean in China approximately 5,000 years ago and became widespread in Korea and Japan before introduced to North, Central, and South America. Wild soybean is considered a potential resource for soybean domestication and improvement with genetic diversity and understanding the diverse spectrum of metabolic profile of cultivated and wild soybeans will be essential to design a soybean with enhanced nutritional traits. While various genomic and biochemical analyses have been performed to decipher specific traits of interest in wild soybeans, little is known with respect to their secondary metabolite composition, distribution, and association with genomic markers. In order to study metabolome and genome wide association study, 390 accessions of soybeans, which cover more than 99% genetic diversity of soybeans were collected, and non-targeted metabolic analysis was performed using liquid chromatography quadrupole time-of-flight mass spectrometry. 73 metabolite profiling was aligned and processed for genomic association with 180,000 SNP markers using GAPIT analysis following by multivariate data analysis. Additionally, bioactivity profiling obtained from antioxidant and liver cell protection assay for 390 soybean accessions was also associated with metabolome and genome profiling data. In this presentation, substantial variations in metabolic profiling and bioactivity between cultivated and wild soybean seeds will be presented along with early stage of multi-association results with 180,000 SNP genomic markers. Finally, one of promising soybean candidate found by the association study between metabolomics and functional activity will be presented for the development of functional foods with in vivo animal study for the further validation in bioactivity.

SNP: Single-nucleotide polymorphism

GAPIT: Statistic software used for a genome wide association study

# Special Session

-Leading Edge Bioanalysis-



SP-01

**Off-line clean-up and on-line preconcentration novel approaches prior to capillary electrophoresis (CE)-based techniques during the analysis of drug and endogenous substances**

**Tomasz Bączek**

Department of Pharmaceutical Chemistry, Medical University of Gdańsk,  
Hallera 107, 80-416 Gdańsk, Poland

Very often the efficient use of capillary zone electrophoresis (CZE), micellar electrokinetic chromatography (MEKC) [known also as micellar electrokinetic capillary chromatography (MECC)] or microemulsion electrokinetic chromatography (MEEKC)-based separation methods could not be sufficient without carrying out proper off-line sample preparation procedure and the choice of the most efficient on-line preconcentration technique for investigated compounds. To improve concentration detection limits, off-line sample preparation techniques, like liquid-liquid extraction (LLE), liquid-liquid microextraction (LLME), dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME), solid-phase extraction (SPE) or solid-phase microextraction (SPME) are some of commonly applied techniques. Among on-line preconcentration methods there are relevant approaches allowing the quantification of trace amounts of compounds in pharmaceutical and biomedical samples. In here, the field-amplified sample stacking (FASS) [known also as field-enhanced sample stacking (FESS)], field-amplified sample injection (FASI) [known also as field-enhanced sample injection (FESI)] are the best recognized ones. Sweeping, micelle to solvent stacking (MSS), p-ITP (pseudo-isotachopheresis) or FESI in conjunction with sweeping (sequential stacking featuring sweeping, SSFS) are another analyte enrichment techniques. In parallel, one should remember also about the possibilities to optimize CE methods playing with hydrodynamic injection (HDI), electrokinetic injection (EKI), simultaneous EKI and HDI (SEHI) or repetitive injection (RI). Several examples of novel approaches based on variable combinations of mentioned techniques and methods to be applied for the analysis of mixtures of selected drug and endogenous substances, like e.g., MEKC, SPE-MEKC, RI-FASS-CZE, DLLME-FASS-MEKC, DLLME-FASI-p-ITP, LLE-MSS-CZE, SPME-SEHI-SSFS-MEKC or ionic liquid-assisted SPME-MEKC and 3D-printed-assisted SPME-MEKC, are going to be thoroughly presented and discussed.

References

1. S. Dziomba, M. Biernacki, I. Olędzka, E. Skrzydlewska, T. Bączek, P. Kowalski, *Talanta*, 125(2014) 1-6.
2. S. Dziomba, P. Kowalski, A. Słomińska, T. Bączek, *Analytica Chimica Acta*, 811 (2014) 88-93.
3. M. Belka, S. Ulenberg, T. Bączek, *Analytical Chemistry*, 89 (2017) 4373-4376.
4. N. Miękus, I. Olędzka, N. Kossakowska, A. Plenis, P. Kowalski, A. Prahł, T. Bączek, *Talanta*, 186 (2018) 119-123.
5. I. Olędzka, P. Kowalski, A. Plenis, N. Miękus, N. Grabow, T. Eickner, T. Bączek, *Electrophoresis*, 39 (2018) 2590-2597.





# Plenary Lecture



PL-01

## Hair metabolomics: a challenge for biomarker discovery

**Bong Chul Chung**\*

Metabolomic Profiling Laboratory(MPL), Molecular Recognition Research Center,  
Korea Institute of Science and Technology(KIST), Seoul, 136-791, Korea

\*Corresponding author: [bcc0319@kist.re.kr](mailto:bcc0319@kist.re.kr)

Metabolomic profiling is emerging as a powerful tool which offers an opportunity to detect and characterize a large number of metabolites simultaneously. Recently, researchers have conducted these profiling works in clinical metabolomics research. These areas of study include the following: altered metabolic pathway for endocrinological defects, enzyme deficiency and cancer-related diseases, and trace characterization of bioactive e.g., steroids, polyamines, and thyroid hormones. Due to the existence of interfering substances and the resulting technical problems that they pose, it is hard to detect the metabolites in these biological specimens using mass spectrometry. Normally, the measurement of endogenous metabolites is usually achieved in urine or plasma. At present, analysis of endogenous metabolites in hair matrix is an area of increasing interests in the fields of medical and forensic sciences, because human scalp hair can be sampled easily and noninvasively from human subjects, and it contains a chronological records of medication use. In this talk, KIST-MPL platform with sample pretreatment of urine, hair matrix, and GC/MS and LC/MS working will be described. With this metabotyping platform, some results for cancer metabolomics, and hair metabolomics were obtained to the hormone-dependent diseases, such as thyroid cancer, prostate cancer, and skin appendage diseases like pattern hair-loss. And some interesting results from other research groups will be presented.



# 영인 분석과학자상 수상강연



영인 분석과학자상 수상강연

**Development of highly accurate and precise analytical techniques using thermal ionization mass spectrometry for isotopic analysis of nuclear materials with ultra-trace levels**

**Jong-Ho Park**

Department of Science Education, Chonbuk National University, Jeonju 54896, KOREA  
Nuclear Chemistry Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute, Daejeon 34057, KOREA  
\*Corresponding author: proton@jbnu.ac.kr

Monitoring undeclared nuclear activities for nuclear safeguards and tracking the sample origin for nuclear forensics require highly reliable nuclear element isotopic analysis. Thermal ionization mass spectrometry (TIMS) is one of the most accurate and precise techniques for isotopic analysis, with high instrumental sensitivity and negligible mass discrimination, matrix effect, and spectral interference. The aforementioned advantages enable most laboratories in the Network of Analytical Laboratories (NWAL) to adopt TIMS for environmental sample analysis. The amount of nuclear elements contained in environmental samples is mostly at ultra-trace levels. Unlike normal analysis of considerable amounts (micro- or milligram levels) of nuclear materials, such as in nuclear fuel or nuclear waste samples, TIMS measurement of such ultra-trace amounts of nuclear materials requires special techniques to maintain analytical reliability. TIMS-based techniques include filament pretreatment by carburization to enhance sensitivity, peak tail correction by statistical approach, simultaneous determination of the quantity and isotopic ratios of uranium in individual micro-particles using isotope dilution mass spectrometry (IDMS), and experimental evaluation of ion signal collection method had been developed to enhance the accuracy, precision, and sensitivity for isotopic analysis of nuclear materials with ultra-trace levels contained in environmental samples. The improved TIMS techniques were applied to particle analysis of uranium together with particle identification and manipulation techniques. The excellent agreements with the corresponding certified values showed the validity of the newly developed TIMS-based techniques. This study contributes to enhance the ability for nuclear monitoring, and, in turn, to reinforce the nuclear transparency of our society.





# **Early Bird Seminar**



Early Bird Seminar

## Targeted Screening of Multi Class Compounds in Veterinary Drugs and Pesticides Using Thermo TSQ LC-MS/MS with TraceFinder

**양승진**

Thermo Fisher Scientific

\*Corresponding author: seungjin.yang@thermofisher.com

식품 안전을 관리하기 위해 잔류동물용의약품과 잔류농약 등에 대한 분석은 중요한 분야이며, 최근 그 규제가 더욱 강화되고 있다. 이러한 잔류 성분들은 그 특성에 따라 각각의 그룹으로 분류되며, 각 그룹에 최적화된 분석법을 적용하는 것이 적합하다. 하지만, 현업에서는 많은 시료에서 짧은 시간 내에 잔류량을 확인하여 검출 여부와 정량 결과를 얻어야 하기 때문에, 동시 다성분 분석이 적용되고 있다. 국내 규제 대상 성분 외에 많은 성분들이 추가 검출되는 상황에서 멀티 그룹 스크리닝 분석이 중요시되고 있다.

Thermo 에서는 잔류동물용의약품과 잔류농약 등에 대하여 한 번의 시료 주입으로 다양한 그룹을 스크리닝 할 수 있는 최적화된 분석법을 개발하여 제공하고 있다.

최근 출시된 잔류동물용의약품 분석 키트는 170개 성분에 대한 Compound Database, Instrument Method, 전용 분석 컬럼, Standard Solution(170개 성분 Mixture), QC Solution(20개 성분 Mixture), 기타 약세사리 등과 함께 User Guide를 포함하고 있다. (잔류농약 분석 키트는 440개 성분에 대한 분석법을 제공한다.)

TraceFinder의 효율적인 Batch 운용은 Data acquisition부터 processing과 reporting 까지 모든 과정이 분석자를 위해 최적화 되어있다.



# PI급 구두 강연



PI-01

## Nanosensor using Magnetoplasmonic Nanoparticle

Jaebeom Lee<sup>\*</sup>, Tran Van Tan

Department of Chemistry, Chungnam National University

<sup>\*</sup>Corresponding author: nanoleelab@cnu.ac.kr

Most commonly, magnetoplasmonic nanoparticles (Mag-Plas NPs) are unique composites combining magnetic and plasmonic materials within a confined nanoscale area that simultaneously show magnetic and plasmonic characteristics. They generally use Fe, Co, or Ni-based magnetic materials and noble-metal (eg, Au, Ag, Cu, or Pt) plasmonic components, comprising a precious metal layer along a magnetic core or the inverse structure. MagPlas NPs are emerging multifunctional materials in the fields of nanoscale optoelectronics, anisotropic optics, electronics, optical sensing, and imaging. Their potential for sensing, targeting, and multimodal imaging is highly attractive for nanomedicine and nanobiotechnology. Because they possess suitable biocompatibility, 1 MagPlas NPs have also been used in biosensor systems, hyperthermia, 2 and magnetic resonance imaging (MRI) 3 applications.

PI-02

## Visualization and Quantification of Non-coding Cellular RNA in a Single Cell Using Atomic Force Microscopy

**Ikbun Park<sup>1,2,★</sup>, Hyun Jin Kim<sup>3</sup>, Joung-Hun Kim<sup>3,★</sup>, Joon Won Park<sup>2,4,★</sup>**

<sup>1</sup>Research Institute of Industrial Science & Technology (RIST),

<sup>2</sup>Division of Integrative Biosciences and Biotechnology, Pohang University of Science and Technology,

<sup>3</sup>Department of Life Sciences, Pohang University of Science and Technology,

<sup>4</sup>Department of Chemistry, Pohang University of Science and Technology

★Corresponding author: ristibpark@rist.re.kr

Over the past three decades, remarkable development and refinement in single molecule force spectroscopy has increased our ability to understand behavior of single molecules in chemistry and biology. Atomic force microscopy (AFM) is one of the representative examples of the kind. AFM allowed for sensing molecular interactions at the piconewton level, and it can be used in various conditions including vacuum and under physiological conditions. In particular, AFM would merit assessment of specific molecules at the area of interest at the nanometric spatial resolution.

MicroRNAs (miRNAs) play critical roles in controlling various cellular processes, and the expression levels of individual miRNAs can be considerably altered in pathological conditions such as cancer. Accurate quantification and visualization of miRNA at the single-cell level will lead to a better understanding of miRNA function.

Here, we present a direct and sensitive method for miRNA detection using atomic force microscopy (AFM). By scanning several sections of a micrometer-sized DNA spot, we were able to quantify the copy number of miRNA in a single neuron and demonstrate that the expression was increased upon cell activation. Moreover, we visualized individual miRNAs on fixed neurons after membrane removal and observed miRNAs of soma.

These findings indicate that miRNAs can be reliably quantified at the single cell level with AFM and that their distribution can be mapped at nanometric lateral resolution without modification or amplification. Furthermore, the analysis of miRNAs, mRNAs, and proteins in the same sample or region by scanning sequentially with different AFM tips would let us accurately understand the post-transcriptional regulation of biological processes.



PI-03

## 열이온화 질량분석기(TIMS)와 MC-ICP-MS를 이용한 Ce 동위원소 분석결과의 비교

Comparison of Ce isotope ratio by Thermal Ionization Mass Spectrometry (TIMS)  
and Multi Collector ICP-MS

**이승구<sup>1,\*</sup>, Yoshihiro Asahara<sup>2</sup>, Tsuyoshi Tanaka<sup>2</sup>, Hiroshi Hidaka<sup>2</sup>**

<sup>1,\*</sup>한국지질자원연구원 국토지질연부분부, <sup>2</sup>일본 나고야대학 지구행성과학과

\*Corresponding author: sgl@kigam.re.kr

원자번호 58번인 Ce은 희토류원소중의 한 원소로서, 자연계내에서 산환-환원 환경의 변화에 따른 산화수 변화(4가로도 존재가능)로 인해 다른 희토류원소와는 다른 거동을 할 수 있기 때문에 지구환경변화 특히 해수환경변화 연구의 중요한 도구이기도 한다. Ce은 자연계내에서 <sup>136</sup>Ce (0.19%), <sup>138</sup>Ce (0.254%), <sup>140</sup>Ce (88.48%), <sup>142</sup>Ce(11.08%)로 존재한다. 이중 <sup>138</sup>Ce은 <sup>138</sup>La의 β붕괴에 의해 생성되는 방사성기원 핵종 원소이고, 나머지 3개 원소는 우주생성 초기에 핵합성과정에서 의해 형성된 안정동위원소이다. 그리고 <sup>136</sup>Ce과 <sup>138</sup>Ce은 철(Fe)보다 무거운 핵종의 핵합성 과정 중 p-process에 의해 형성되는 동위원소로서, 이들 동위원소로부터 얻어내는 각각의 정보는 태양계와 지구의 형성과정을 이해할 수 있는 중요한 자료가 될 수 있다. 하지만, <sup>136</sup>Ce과 <sup>138</sup>Ce은 존재도가 매우 낮은 관계로 정확한 동위원소비를 획득하는 것이 매우 어려워, 과거에는 소수의 연구자만이 Ce 동위원소 연구를 시도하였었다. 하지만, 최근, 열이온화 질량분석기 (TIMS) 혹은 MC-ICP-MS와 같은 첨단 질량분석기의 발달과 더불어 Ce 동위원소를 정확히 측정하여 활용하고자 하는 연구가 세계적으로 활발하게 이루어지고 있다. 한국지질자원연구원 또한 이 두 장비가 모두 준비되면서 방사성 동위원소 및 안정동위원소 지구/우주화학 분야의 체계적인 연구가 가능하게 되었다. 이 발표에서는 이와 같은 연구의 진행과 관련하여, 일본 나고야대학과의 공동연구를 통해 TIMS와 MC-ICP-MS를 이용한 Ce의 동위원소 측정결과에 대해 토의하고자 한다. 특히 TIMS의 기종에 따른 <sup>138</sup>Ce/<sup>142</sup>Ce 비의 차이와 MC-ICP-MS를 이용하여 Ce동위원소를 측정하고자 할 때의 실험상의 문제점에 대해 토의하고자 한다.

PI-04 [LECO 젊은 분석과학자상 수상]

**Studies on headspace analysis of volatile organic compounds  
in foods by different extraction techniques**

**Jun-Young Lee<sup>1</sup>, Yoon-Yeol Lee<sup>1</sup>, Guijae Yoo, Hee-Don Choi<sup>1</sup>  
and Hae Won Jang<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>Korea Food Research Institute

\*Corresponding author: hwjrfri@kfri.re.kr

Volatile organic compounds (VOCs) are one of the most important compounds in foods due to their impact on aroma increasing food enjoyment. To date, several existing extraction methods such as direct solvent extraction, steam distillation solvent extraction, solvent-assisted flavor evaporation, steam distillation under reduced pressure are available for the VOCs detected from various foods. On the other hand, headspace techniques such as stir bar sorptive extraction (HS-SBSE) and solid phase microextraction (SPME), dynamic headspace (DHS) are mainly used these days regarding a simple, rapid, and solvent free technique for the volatile extraction. HS-SBSE has shown to provide the higher recoveries than HS-SPME and has improved the analytical performance in terms of the elimination of interfering substances and low concentration capacity. In recent years, SPME Arrow technology has been developed as a new tool of the SPME system, combining advantages of SPME and HS-SBSE. This provides higher sample capacity by the larger sorbent phase volumes, longer diameter and length of the fiber. In addition, a thermal desorption unit is not required for the SPME Arrow unlike HS-SBSE. However, to the best of our knowledge, very little information on volatile analysis in various food samples using HS-SBSE and HS-SPME-Arrow is available today.

In this study, volatile compounds from various foods were analyzed by using HS-SBSE-TDU-GC-MS and HS-SPME-Arrow-GC-MS equipped with a 60 m × 0.25 mm i.d. (df = 0.25 μm) DB-WAX bonded-phase fused-silica capillary column. HS-SBSE and HS-SPME-Arrow methods were optimized for detecting volatile compounds by following extraction conditions; adsorbent phase, extraction temperature, extraction time, and NaCl concentration, sample preparation before extraction. These new techniques were compared for the utility with SPME method and showed the better sensitivity and reproducibility than HS-SPME. For VOCs analysis from foods, HS-SBSE and SPME Arrow could be used more efficiently than SPME.

# 대학원생 구두발표 I



GI-01

## Electric properties prediction of polymer composites

Dong Ryeol Shin<sup>1</sup>, Woo Jin Choi<sup>2</sup>, Nam jung Cho<sup>2</sup>, Sung Kwang Lee<sup>1,\*</sup>

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

<sup>2,\*</sup>Korea Research Institute of Chemical Technology

\*Corresponding author: leesk@hnu.kr

Polymer composite are composite materials made by mixing polymer materials, filler materials, and additives. It is time and cost-consuming to optimize the composition ratio for preparing polymer composites of suitable electric properties. In this study, we have developed predictive models that predict the volume resistivity, one of the electric properties of materials, using the composition ratio of polymer composites. Prediction model of the volume resistivity for the polymer composite material were developed using various machine learning methods. The data collected for model development were obtained from chemical material solution center in KRICT, which collected the physical properties of polymer composite from literature and patents. The total data were divided into 211 as training set and 141 as external set. Multiple linear regression, support vector machine, and deep neural network were used as machine learning method. As a single model, deep neural network method has the best predictability, and as the consensus model, the support vector machine method using feature engineering technique has excellent predictive power. We also verified the robustness and predictability of model using bootstrap validation and y-scrambling method. The developed model will be alternative to reduce time and cost of developing polymer composites with desired electric properties.

GI-02

## Density prediction of high energy materials using deep learning method (DNNs)

Hyung Sik Jo, Soo Gyeong Cho<sup>1</sup>, Sung Kwang Lee<sup>\*</sup>

Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, Korea, leesk@hnu.kr

<sup>1</sup>Agency for Defense Development, Daejeon, Korea

Explosion is chemically related to a high rate of reaction in a particular system, and physically diffuses into a uncontrolled state by the proliferation of energy or matter under certain circumstances. Synthesis and experimentation of high energy materials(HEMs) is time and cost consuming in new material development. In generally, the higher density of HEMs, the higher detonation velocity and pressure of HEMs. In this study, we tried to develop Quantitative Structure-Property Relationship(QSPR) models to predict the density, which is an important factor in HEMs performance from chemical structure.

The crystal density data used in the model were collected from the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) and the final 8624 data were obtained after removing replicates, inorganics and abnormal structure. All chemicals were divided into a training set(50%) and a test set(50%), and these molecular descriptors were calculated with the PreADMET Program. The multiple linear regression (MLR), support vector machine (SVM), and deep neural network (DNN) methods were used as QSPR models and we tried to optimize various hyper-parameters in SVM and DNN. Y-scrambling method and assignment of applicability domain(AD) were used to confirm the reliability of model prediction. All three models showed excellent predictive performance, and these models can predict the density of new HEMs.

GI-03

## 가스상 폼알데하이드에 대한 UiO-66-NH<sub>2</sub>의 흡착 특성과 흡착능 평가

The potential of UiO-66-NH<sub>2</sub> as novel sorbent for gaseous formaldehyde

임대환<sup>1</sup>, 김기현<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>★한양대학교 건설환경공학과

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

최근 실내공기질에 대한 관심이 높아지고 있는 가운데 이를 개선하고자 하는 많은 노력이 이루어지고 있다 (1). 특히 실내공기질 중 폼알데하이드는 일반주택 및 공공건물의 건축자재, 실내가구의 칠 등에서 주로 발생이 이루어지는 것으로 알려져 있다 (2). 이는 알리지 증상을 가져오는 자극제이며, 발암성 물질로 알려진 대표적인 물질로 제거를 위한 중요성이 더욱 크다고 여겨진다 (3). 최근 다양한 흡착제를 활용한 폼알데하이드의 제거 및 저감을 시도하고 있으나 보다 효과적인 흡착제 개발이 필요한 실정이다.

본 연구에서는 폼알데하이드 1 ppm 농도 수준에서 4가지 유형 (Metal Organic Frameworks (MOFs), 3개/Carbon nitride, 3개/modified activated carbon, 4개/commercial activated carbon, 2개)의 다양한 소재에 대한 흡착제 성능을 HPLC-UV (Thermo Scientific, USA) 시스템을 이용하여 평가하였다. 분석결과 MOFs 기반 물질 중 UiO-66-NH<sub>2</sub>의 흡착 capacity는 5.26 mg/g, Breakthrough volume (BTV)은 373 L/g으로 가장 우수한 효율을 보이는 것으로 나타났다. 본 연구를 통해 폼알데하이드 성분에 대한 흡착 제거를 위한 기초자료로서 활용하고자 한다.

- (1) Medinsky, M.A., Bond, J.A.J.T., 2001. Sites and mechanisms for uptake of gases and vapors in the respiratory tract. 160, 165-172.
- (2) Liang, W., Yang, S., Yang, X., 2015. Long-Term Formaldehyde Emissions from Medium-Density Fiberboard in a Full-Scale Experimental Room: Emission Characteristics and the Effects of Temperature and Humidity. Environmental Science & Technology 49, 10349-10356.
- (3) Golden, R.J.C.r.i.t., 2011. Identifying an indoor air exposure limit for formaldehyde considering both irritation and cancer hazards. 41, 672-721.

GI-04

**대용량 시료 주입 방식과 gas chromatography/barrier discharge ionization detector 기반의 가스상 폼알데하이드 분석기술 개발**

Development of analytical techniques for gaseous formaldehyde based on the large-volume injection interfaced with gas chromatography/barrier discharge ionization detector

**유미지, 김기현\***

한양대학교 건설환경공학과

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

폼알데하이드 (FA)는 인체에 유해한 대기오염 물질 중 하나로, 주로 실내의 건축자재에서 배출이 이루어지는 것으로 알려져 있다 (Yoo et al., 2019). 특히 실내 생활이 많은 현대인들에게 노출빈도가 높아 집에 따라 대기 중 FA의 양을 정확하게 측정하고 제어하는 것이 필수적이다 (Wu et al., 2017). FA성분의 경우 분자량이 낮고 반응성이 높아 DNPH 유도체화와 같은 전처리 과정을 거친 후에 HPLC/UV로 분석하는 방식이 대표적이다 (Yoo et al., 2019). 그러나 DNPH/HPLC/UV를 활용한 분석법은 전처리 과정이 다소 복잡하고 소요 시간이 길어 FA 농도의 정확하고 신속한 파악에 한계를 지닌다 (Yoo et al., 2019). 본 연구에서는 이에 대한 대안으로 FA의 근실시간 모니터링을 위한 large-volume injection (LVI) 주입 방식과 gas chromatography/barrier discharge ionization detector (GC/BID) 시스템을 연계하여 FA 분석법을 정립하고자 하였다. LVI/GC/BID는 일반적인 시료 주입 부피의 확장과 동시에 가스 시료의 자동적 주입이 가능한 LVI 주입 방식과 GC 분석시스템에 헬륨 플라즈마를 기반으로 한 BID를 접목한 분석시스템이다. 따라서 해당 시스템을 활용하여 FA 시료의 자동 샘플링 및 기기 분석이 가능하도록 하였다. 분석법의 검증에 위해 선형성, 재현성 및 감도 등에 관한 정도 보증 테스트를 진행하였다. 분석결과, LVI/GC/BID를 활용한 FA 분석법은 0.29-5300 ng의 넓은 농도 범위에서 양호한 선형성을 지닌 것으로 나타났다. 방법 검출 한계 (method detection limit, MDL)는 0.13 ng (0.21 ppm, 0.5 mL의 시료 주입)로 나타났으며, 표준 편차 (relative standard deviation, RSD)값은 1.19% 이내를 유지하였다.

Wu, L., Qin, Z., Zhang, L., Meng, T., Yu, F., Ma, J., 2017. CNT-enhanced amino-functionalized graphene aerogel adsorbent for highly efficient removal of formaldehyde. *New Journal of Chemistry* 41, 2527-2533.

Yoo, M.-J., Jo, S.-H., Kim, K.-H., 2019. An advanced technique for rapid and accurate monitoring of gaseous formaldehyde using large-volume injection interfaced with gas chromatograph/barrier discharge ionization detector (LVI/GC/BID). *Microchemical Journal* 147, 806-812.



GI-05

## 개질 흡착제를 이용한 대기 중 벤젠성분의 고유속 흡착 특성 연구

Test of adsorption performance of gaseous benzene under high flow conditions using modified adsorbent materials

김원기<sup>1</sup>, 김기현<sup>2,\*</sup>

<sup>1,2,\*</sup>한양대학교 건설환경공학과

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

다양한 산업에서 생산 및 방출이 이루어지는 휘발성 유기화합물 (VOCs)은 인체 건강에 악영향을 미치는 환경오염 물질 중 하나로 알려져 있다 (1). 특히 벤젠의 경우 지용성물질로서 경구흡입으로 인체에 노출이 이루어지며, 다중 발암 물질과 림프종/백혈병의 원인 물질이다 (2). 이러한 유해물질을 제거하기 위해 공정의 유연성, 낮은 에너지 소비 및 낮은 운영비용 등의 이점을 가지고 있는 흡착방법이 가장 효율적인 기술이라 할 수 있다 (3). 최근 MOF (Metal organic framework) 합성 혹은 활성탄 등을 개질하여 흡착제의 성능을 향상시키는 연구가 활발히 진행 중 이다 (4). 본 연구에서는 벤젠 흡착 효율이 좋은 MOF-199과 활성탄에 여러 물질들을 합성을 시도 하고, 흡착 성능 매트릭스(흡착용량, 제거효율, 분배계수)을 평가를 수행하였다. 이를 위해, MOF-199기반의 물질 11개와 AC 기반의 5개 흡착제를 선정하여 흡착능을 평가하였다. 각각의 흡착제는 212  $\mu\text{m}$  이하의 분말상의 형태로 5 mg씩 석영튜브에 넣어 10 ppm수준으로 조제한 벤젠가스를 흘려주는 방식으로 실험을 진행하였다. 이때, LVI (Large volume injection) system을 이용하여 330 mL/min 유속의 가스상 시료가 흡착튜브에 계속 주입하는 방식으로, 통과한 시료는 GC-FID을 통해 분석을 진행하였다. 분석결과 Capacity는 AC-T2 (합성 활성탄, 104 mg/g), AC-0 (상용 활성탄, 84 mg/g), AC-T1 (합성 활성탄, 79 mg/g)의 순으로 활성탄 기반의 흡착 효율이 높은 것으로 나타났다. 반면 MOF-199 기반 소재의 경우 AC기반의 흡착제들에 비해 효율이 떨어지는 것으로 나타났다. 추가적으로 이들 소재를 활용하여 고유속 조건에서 흡착특성을 조사하였다.

(1) Paciência, Inês, et al. 2016. A systematic review of evidence and implications of spatial and seasonal variations of volatile organic compounds (VOC) in indoor human environments. Environmental Health, P.B., 19, 47-64.

(2) Abadi, M.B.H., et al. 2018. Air pollution control: The evaluation of TerphApm@ MWCNTs as a novel heterogeneous sorbent for benzene removal from air by solid phase gas extraction. Arabian J. Chem.

(3) Yun, J.H. et al. 1999. Equilibria and dynamics for mixed vapors of BTX in an activated carbon bed. AIChE journal, 45, 751-760.

(4) iwari, D., et al. 2018. Development of chemically activated N-enriched carbon adsorbents from urea-formaldehyde resin for CO<sub>2</sub> adsorption: Kinetics, isotherm, and thermodynamics. J. Environ. Manage., 218, 579-592.

GI-06

## Perfluorocarbon (PFC) medium as a means to improve accuracy for NIR spectroscopic quantitative analysis of powder samples

Yoonjeong Lee<sup>1</sup>, Hoeil Chung<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>Department of Chemistry, Hanyang university

\*Corresponding author: hoeil@hanyang.ac.kr

In near-infrared (NIR) spectroscopy, diffuse reflectance measurement is widely utilized for analysis solid samples because it is non-destructive and simple. In diffuse reflectance measurement, NIR radiation propagates through a series of particle-air interfaces and a part of sample-interacted NIR photons are gathered. When a photon crosses the interface, several events such as reflection, refraction, and scattering simultaneously occur and make overall photon propagation broader and more variable. Therefore, acquisition of reproducible diffuse reflectance spectra of solid sample is always demanding.

One of potential approaches to improve reproducibility of diffuse reflectance measurement is the filling void air volume in powder packing with a liquid. By this way, difference in refractive indices between sample particle and unoccupied space becomes smaller. Here, PFC (perfluorohydrocarbon)-based diffuse reflectance measurement scheme has been uniquely demonstrated for reproducibility improvement. A PFC does not absorb NIR radiation and are strongly hydrophobic, so they would suspend particles without dissolving them.

Initially, 3 different PFCs were selected, and their physical properties and NIR absorption features were examined for selection of an optimal PFC. Then, lactose powder was added into the selected PFC and diffuse reflectance spectra were repeatedly collected for the lactose-suspended PFC samples as well as original lactose powder were collected. NIR spectral features such as band shape, band intensity, and baseline in both cases were examined and the subsequent reproducibilities of measurements were compared. Next, NIR spectra of binary mixtures composed of ambroxol and lactose with varying ambroxol concentration were again measured with the same experimental scheme. In all cases, Monte Carlo simulations were employed to tract the photon migration in the samples and to explain the experimental results.

GI-07

## Evaluation of Autoencoder for NIR Spectroscopic Identification of Geographical Origins of Agricultural Products

Woosuk Sohng<sup>1</sup>, Seeun Cho<sup>2</sup>, Hyeseon Lee<sup>2</sup>, Hoeil Chung<sup>1,\*</sup>

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

<sup>2,\*</sup>Department of Industrial & Management Engineering, POSTECH

\*Corresponding author: hoeil@hanyang.ac.kr

Autoencoder (AE) has been evaluated as a potential feature extraction method for NIR spectroscopic identification of geographical origins of agricultural samples. AE is one of artificial neural network used to learn efficient data coding in an unsupervised learning and a feedforward neural network that consists of two parts, encoder and decoder. Encoder is the part of the network that compresses the input into latent space representation and decoder reconstructs the input from the latent space representation. This network can be trained by minimizing the reconstruction error between input and output. In this study, compressed input called latent vector was used as new feature for improving NIR spectroscopic Identification.

NIR spectra of imported and domestic agricultural samples (8 different agricultural samples: adzuki, angelica root, bellflower root, bracken, carrot, green kernel black bean, kidney bean and perilla seed) were used. For evaluation, AE as well as conventional feature extraction methods such as principal component analysis (PCA) and locally-linear embedding (LLE) were employed for the discrimination of geographical origins of 8 different agricultural products using support vector machine (SVM). Finally, the resulting accuracies were compared the characteristics of each method in the discrimination were discussed.

GI-08

**Improving identification accuracy of geographical origins of sapphires using Raman and Laser induced breakdown spectroscopy**

**Changhwan Eum, Hoeil Chung\***

Hanyang University Department of Chemistry

\*Corresponding author: hoeil@hanyang.ac.kr

Raman and laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) have been utilized to discriminate the geographical origins of sapphires (mined in 5 different countries) in conjunction with chemometric methods. Improvement of accuracy would expect when both spectroscopic data providing complementary information (molecular structural and elemental information) were combined. Initially Raman and LIBS data were separately employed for the discrimination by using support vector machine (SVM) as a classifier. In the case of using Raman spectra, a whole spectral range was used; while, only selected atomic peaks in LIBS spectra were fed for SVM. The separate use of Raman and LIBS data resulted in the discrimination accuracy of 86.5 % and 81.8 % respectively. Next, when both spectroscopic data were combined for SVM, the accuracy improved to 89.9 %. For further accuracy improvement, hierarchical SVM (H-SVM) was adopted to deal with multi-class discrimination. The use of H-SVM improved the discrimination accuracy up to 90.2 %. The cooperative combination of information on organic and elemental composition of the samples was the root of improvement.

GI-09

**Short chain fatty acids analysis with headspace in-tube microextraction  
capillary electrophoresis mass spectrometry**

**권준엽<sup>1</sup>, 정선경<sup>1</sup>, 정두수<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>서울대학교 자연과학대학 화학부

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

Short chain fatty acids are target molecules for the analyses of microorganisms and metabolites. These volatile molecules are weak acids so that the molecules evaporated in the air can be captured by a strong basic solution. Headspace extractions coupled with gas or liquid chromatography have been commonly used for these short chain fatty acids. If headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis mass spectrometry (HS-ITME-CE/MS) is applied, simple and fast analysis is possible. This simplifies sample preparation steps, which leads to minimization of sample losses and highly efficient results with low detection limits. HS-ITME-CE/MS of short chain fatty acids which have 3~5 carbons is presented.



# 대학원생 구두발표 II





GII-01

## Pf 543 and its Analogs Differently Accumulates Ceramide Groups in HaCaT Cell

Maftuna Shamshiddinova<sup>1</sup>, Dong-Jae Baek<sup>2</sup>, Khilola Nazrullaeva<sup>1</sup>,  
Kyeung-Ran Min<sup>1</sup> and Yong-Moon Lee<sup>1,\*</sup>

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

<sup>2</sup>College of Pharmacy, Mokpo National University

\*Corresponding author: ymleefn@cbnu.ac.kr

Sphingosine kinases (SphKs) transfer a phosphate group from ATP to sphingosine on the bioactive sphingosine 1-phosphate (S1P) formation. S1P has been linked with a variety of diseases such as incurable solid tumors, Alzheimer's disease, sickle cell disease and fibrosis. To study the role of SphK1 on ceramides metabolic fate, synthetic PF543 derivatives of SphK1 inhibitor were evaluated based on their effects on the accumulation of ceramides in HaCaT cells. The ceramides formation profile by PF543 and its analogs (DPF543, RB0035, RB012, RB040, A013, RB017, A156, H5-11, H5-10) were measured by LC-MS/MS. Cells ( $3 \times 10^5$  cells) were placed in 6-well plate in Dulbecco's modified Eagle's medium supplemented with 10% fetal bovine serum in a humidified incubator at 37°C with 5% CO<sub>2</sub>. Cells were incubated for 24 hours with or without 1 μM of myriocin which inhibits serine palmitoyltransferase. After 24 hours, 10 μM of a specific SphK1 inhibitors were additionally spiked into cells media and then incubated for more 24 hours. The ceramides in 150 μg protein from cells lysate was extracted by chloroform: methanol (2:1) mixture. The chloroform fraction was dried under nitrogen blow and reconstituted in 100 μl MeOH. The samples containing ceramides were eluted from CAPCELL PAK MG III C18 column with gradient elution with mobile phase A (10 mM ammonium acetate in water with 0.1% formic acid) and mobile phase B (10 mM ammonium acetate in acetonitrile: propanol-2 (4:3; v/v) with 0.1% formic acid). The ceramides in MRM positive ionization mode were monitored the following transitions: m/z 324.2>264.3 for Cer2, 380.2>264.3 for Cer6, 464.4>264.3 for Cer12, 538.2>264.3 for Cer16, 552.2>264.3 for Cer17, 548.2>264.3 for Cer18, 546.2>264.2 for Cer18:1, 594.2>264.2 for Cer20, 650.4>264.3 for Cer24 and 648.4>264.3 for Cer24:1. The ceramides with short fatty acid chain such as Cer2, Cer6 and Cer12 were not founded in HaCaT cells. The long chain fatty acid ceramides, Cer16, Cer18, Cer20 and Cer24:1 were significantly accumulated by different PF543 derivatives. Specifically, the amount of Cer24 was less changes by PF543 derivatives. The content of ceramides (Cer16, Cer18, Cer18:1, Cer20, Cer24:1) was differently changed depending on specific characteristics of PF543 derivatives.

GII-02

## Development of an HPLC Method using Less Hazardous Mobile Phase for the Determination of $\beta$ -Lactams

Thuy-Vy Pham<sup>1</sup>, Xuan-Lan Mai<sup>1</sup>, Jae-Yong Lee<sup>1</sup>, Gunhee Lee<sup>1</sup>, Dae-Jung Kim<sup>1</sup>, Sang-Beom Han<sup>2</sup>, and Kyeong Ho Kim<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>College of Pharmacy, Kangwon National University,

<sup>2</sup>College of Pharmacy, Chungang University.

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

A simple, cost-effective and greener high-performance liquid chromatography (HPLC) method was investigated to determine fourteen  $\beta$ -lactams. In this study, some strategies were implemented to achieve a greening HPLC method such as the use of aqueous mobile phase, alternative organic solvent or ionic liquids. Firstly, the preliminary screening step was conducted using one-factor-at-a-time approach to identify the significant factors affecting the chromatographic performance. Then the experimental design (central composite design) was applied to examine in depth the effects of the most important factors on the selected chromatographic responses as well as to find out the optimal HPLC condition. Finally, the chromatographic analysis was achieved on a C8 column at 35°C, mobile phase including ethanol and 25 mmol/L ammonium acetate pH5.0 (6:94,v/v) with the flow rate of 1.5 mL/min, and the detector wavelength at 210 nm. This method was not only found to be less hazardous (the use of greener organic solvent, the reduction in organic solvent consumption) but also turned out to be superior in terms of retention time and peak shape in comparison with other official methods published in the pharmacopoeias. The optimized assay condition was validated according to the International Conference on Harmonization guidelines. The results showed good linearity ( $R^2 > 0.9991$ ) over the assayed concentration range, and demonstrated good precision as well as accuracy for all surveyed compounds. The proposed method was also effectively applied for the quantitation of ampicillin, sulbactam, cefroxadine, and amoxicillin in various formulations. These results indicated that the developed HPLC method could be employed for routine analysis of some  $\beta$ -lactams in pure drug and commercial formulations.

GII-03

## 빛 노출 조건에 따른 nicotine의 분해손실 가능성 확인 연구

안영지<sup>1,2</sup>, 서동호<sup>3</sup>, 최성진<sup>4</sup>, 이규홍<sup>2</sup>, 김용현<sup>4,5\*</sup>

<sup>1</sup>건양대학교 독성평가학과, <sup>2</sup>안전성평가연구소 호흡기질환제품 유효성평가연구단,

<sup>3</sup>부산대학교 화학과, <sup>4</sup>안전성평가연구소 흡입독성연구그룹,

<sup>5</sup>과학기술연합대학원대학교 인체 및 환경 독성학과

★Corresponding author: yonghyun.kim@kitox.re.kr

Nicotine은 담배연기 내 주성분으로 알려진 물질이며, 인체 유입 시 중추신경 마비 및 혈압 상승을 촉진시키는 등 건강상 악영향을 준다고 알려져 있다. 담배연기 내 nicotine을 정량평가하기 위해 일반적으로 Cambridge filter를 통해 채취 및 추출한 후 기기분석을 수행한다. Nicotine의 정확한 정량평가를 하기 위해서는 Cambridge filter에 의한 nicotine의 손실평가와 빛에 의해 쉽게 산화 된다고 알려져 있는 nicotine의 빛에 의한 손실평가가 동시에 이루어져야 한다. 본 연구에서는 담배연기 채취 방식으로 잘 알려진 Cambridge filter 방법을 이용하여 빛에 의한 nicotine 손실정도를 분석회수율을 통해 확인하였다. Nicotine을 Cambridge filter에 채취 후 암실, 가시광선, 자외선에 일정 시간 (6, 12, 24, 46 hours) 노출 시킨 후 기기분석을 통해 상대적인 분석 회수율을 평가하였다. 암실조건에서는 nicotine을 Cambridge filter에 주사한 후 6시간 동안 시료의 손실이 거의 발생하지 않았지만 (relative recovery =  $100 \pm 1.16\%$ ), 6시간 이후 nicotine의 손실이 발생하여 경과 시간 48시간에는 상대회수율  $83.4 \pm 4.72\%$ 를 기록하였다. 가시광선 노출 조건에서는 암실 조건과 유사한 nicotine 상대회수율을 기록하였다. 자외선 조건에서 nicotine의 상대회수율은 6시간 노출에서  $90.5 \pm 4.98\%$ , 48시간 노출에서  $70.5 \pm 11.7\%$ 로 암실과 가시광선 조건에 비해 추가적인 nicotine 손실이 발생한 것을 확인하였다. 본 연구에서는 담배연기 채취 조건에서 발생 가능한 nicotine의 손실을 확인하였다. 담배연기에 대한 정확한 정량 및 독성평가를 수행하기 위해서는, 본 연구와 같이 담배연기 내 화학물질들의 상대회수율 평가를 우선하여 수행하고 이를 정량 및 독성결과에 반영해야 한다.

본 연구는 안전성평가연구소 주요사업 [KK-1904] 지원으로 수행되었음.

GII-04

**Ultrasensitive fluorescence-free detection of norovirus by 3D super-localization light sheet microscopy with gradient fitting algorithm**

**Yucheng Sun<sup>1</sup>, Seong Ho Kang<sup>1,2,\*</sup>**

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Graduate School, Kyung Hee University,

<sup>2,\*</sup>Department of Applied Chemistry and Institute of Natural Sciences, Kyung Hee University

An ultrasensitive fluorescence-free modality was developed for the detection of norovirus by three-dimensional light sheet microscopy (3D-LSM) coupled with dual-view (DV) based on gradient fitting. Silver nanoparticle (AgNP) and gold nanospot (AuNS) on a nanoarray working as fluorescence-free probe were immunoreacted with norovirus and simultaneously imaged by using a DV facility. A cylindrical lens was located in light path way before the charge-coupled device (CCD) leading to elliptically distorted point spread function (PSF) on different axial location. After axial slicing of the sandwich-structured immunoarray with 10 nm interval for 1000 planes, differences in PSFs of AgNP and AuNS on various plane were clarified by gradient fitting-based super-localization. The obtained 3D super-resolution images implied the distance on axial direction between AgNP and AuNS was  $23 \pm 3$  nm and limit of detection (LOD) for norovirus was 7.8 zM which was 106 to 2,300,000 times lower than previous methods with a wide linear dynamic range from 7.8 zM to 240 aM. Subsequently, norovirus extracted from lettuce leaves was detected with 99.87% recovery which demonstrated the presented super-localization 3D-LSM with DV based on gradient fitting modality was applicable for ultrasensitive detection of norovirus in single-molecule level.

GII-05

**Comparison of sample pretreatment methods for rapid screening of 123 multi-class illegal adulterants in lipid type supplements**

**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 screening 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 (ECICs) and neutral loss scan (NLS). Both ECICs and NLS could readily cover a wide scope of adulterants and were proved more efficient screening method, compared to multiple ion reaction monitoring (MRM) mode. A reduced mass tolerance window of  $\pm 5$  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; supplement diets; rapid screening; extracted common ion chromatogram; neutral loss scan; UHPLC-Q/TOF-MS/MS

GII-06

**Simultaneous profiling of bile acids, histidine, and histamine in gastric juice by LC-MS/MS combined with serial derivatization: diagnosis of gastric cancer**

**Jinhee Um, Wonwoong Lee, Jongki Hong\***

College of Pharmacy, Kyung Hee University

\*Corresponding author: jhong@khu.ac.kr

Bile acids (BAs) are synthesized in human liver and can mediate various metabolism process and homeostasis in the body. Their levels in gastrointestinal tract could be closely related to various gastrointestinal diseases. In particular, imbalances of BAs can induce overexpression of histidine decarboxylase involved in tumorigenesis. Therefore, comprehensive profiling of histamine (HIST), histidine (His), and BAs in biological samples provides a wide knowledge to understand pathological mechanisms of gastrointestinal diseases. However, development of analytical platform to profile HIST, His, and BAs in biological samples should overcome several challenges such as highly different polarities between acidic and basic targets, low physiological concentration, and high matrix interferences of biological samples. In this study, a UHPLC-MS/MS method combined with serial derivatization to simultaneously determine HIST, His, and 5 BAs (cholic acid, deoxycholic acid, chenodeoxycholic acid, ursodeoxycholic acid, and lithocholic acid) in human gastric juice was developed. In serial derivatization, benzoyl chloride (BzCl) and N,N-dimethylethylenediamine (DMED) were used to selectively derivatize amine and carboxyl groups of analytes, respectively. After serial derivatization, all target derivatives were determined using reversed phase C18 LC column and positive multiple reaction monitoring (MRM) mode, with reasonable chromatographic separation and sensitive MS detection. To accurately quantify target metabolites, 7 isotopically labeled internal standards were used. The MS/MS spectra of DMED and Bz derivatives exhibited specific fragments via loss of neutral molecule (dimethylamine; 45 amu) and inductive cleavage (benzoyl; m/z 105) from protonated molecules, enabling selection of appropriate MRM transition ions for selective and sensitive detection. The developed method was validated with respect to limit of detection (LOD) and quantification (LOQ), linearity, precision, and accuracy. The LODs and LOQs of target metabolites were ranged from 0.76–2.05 ng/mL and 2.56–6.83 ng/mL, respectively. All squared correlation coefficients ( $R^2$ ) were above 0.99. Overall precision and accuracy were investigated within acceptable values. The established method was successfully applied to gastric juice of patients with chronic superficial gastritis, intestinal metaplasia, and gastric cancer. Statistical significances between groups were estimated based on metabolic pathways of BA and histamine. This method provides reliable quantification of HIST, His, and BAs in human gastric juice and would be helpful to find biomarkers for gastric cancer.

GII-07

**Metabolomic study on bleomycin and polyhexamethylene guanidine phosphate-induced pulmonary fibrosis mice models**

**Chan Seo<sup>1</sup>, Sung-Hwan Kim<sup>2</sup>, Hyeon-Seong Lee<sup>1</sup>, Moongi Ji<sup>1</sup>,  
Jeuk Min<sup>1</sup>, In-Hyeon Kim<sup>2</sup>, Kyuhong Lee<sup>2</sup>, Man-Jeong Paik<sup>1</sup>\***

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Suncheon National University

<sup>2</sup>National Center for Efficacy Evaluation of Respiratory Disease Product,  
Korea Institute of Toxicology

\*Corresponding author: paik815@suncheon.ac.kr

Polyhexamethylene guanidine phosphate (PHMG) has been used as a disinfectant and biocide, and was known to be harmless and non-toxic. However, in 2011, PHMG used as a humidifier disinfectant was reported to be associated with lung diseases, such as, fibrosis in the toxicant studies on pulmonary fibrosis by PHMG. However, no metabolomics study for toxicity of PHMG has been performed in pulmonary fibrosis model. Therefore, in the present study, alterations of metabolism for toxicity were monitored in bleomycin (BLM)- and PHMG-induced mouse models of pulmonary fibrosis by gas chromatography (GC)-mass spectrometry (MS), liquid chromatography (LC)-tandem MS, and GC-tandem MS. The levels of 59 metabolites, that is, 30 amino acids, 13 organic acids, 10 fatty acids, 5 polyamines, and oxidized glutathione were determined in the pulmonary tissues of mice with BLM- and PHMG-induced pulmonary fibrosis and in normal controls. Principal component analysis (PCA) and partial least squares discriminant analysis (PLS-DA) were used to compare level of these 59 metabolites in pulmonary tissues. Levels of metabolites were significantly different in the BLM and PHMG groups as compared with the control group. In particular, the BLM- and PHMG- induced pulmonary fibrosis models showed elevated collagen synthesis and oxidative stress and metabolic disturbance of TCA related organic acids including fumaric acid by NADPH oxidase (NOX). In addition, polyamine metabolism was more severely altered in the PHMG group than in the BLM group. Thus, this result suggests that toxicity by PHMG can induce pulmonary fibrosis by arginine metabolism and NOX signaling.

GII-08

**Mixtures of menthol-based hydrophobic deep eutectic solvents: application as green solvents to extract bioactive compounds from *Ginkgo biloba* leaves**

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

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

\*Corresponding author: jlee0610@skku.edu

In the present study, three different menthol based deep eutectic solvents (Men-DESs) were synthesized as a new class of green extraction solvents and applied as extraction media for *Ginkgo biloba* leaves (GBL). Three Men-DESs composed of menthol with levulinic acid (DES 1), 1,3-butanediol (DES 2), and tert-butanol (DES 3) were selected for relatively low, medium, and high polarity DESs, respectively. Particularly, the extraction capabilities of the Men-DESs and their mixtures were simultaneously monitored by simplex centroid mixture design. The extraction capabilities were evaluated by determination of condensed tannin content (CTC), total phenolic content (TPC), and total flavonoid content (TFC). The results show using DES 1 could achieve the highest TPC and TFC, and using the mixture of DES1 and DES 3 could bring the most abundant CTC. Untargeted metabolomics study of the GBL extracts by an ultra-performance liquid chromatography quadrupole-time-of-flight mass spectrometry (UPLC-Q-TOFMS) combined with multivariate statistical analysis was employed for further investigation of Men-DESs and their mixtures in comparison with traditional organic solvents including methanol, aqueous methanol, and ethyl acetate. The number of peaks (NP) and coefficient of variation (CV) were chosen to evaluate the extraction coverage and reproducibility of extraction solvents. Principle component analysis and hierarchical cluster analysis were performed for assessment of the overall interactions between Men-DESs and their mixtures with traditional organic solvents.



# 포스터 발표 I

2019. 05. 16



PT-001 [표준]

## GC-TCD와 Gas/Mass Spectrometer를 이용한 Neon 원자량의 결정

김정은<sup>1,2</sup>, 양인석<sup>2</sup>, 김진석<sup>3</sup>, 홍기룡<sup>3,\*</sup>

<sup>1</sup>과학기술연합대학원대학교 측정과학과, <sup>2</sup>한국표준과학연구원 열유체표준센터,

<sup>3,\*</sup>한국표준과학연구원 가스분석표준센터

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

분자량은 분자를 구성하고 있는 원소들의 동위원소 비율에 의존한다. 일반적으로 동위원소 측정에는 질량분석기 (Gas/Mass Spectrometer)를 사용하지만, 본 연구에서는 가스 분석 분야에서 일반적으로 가장 많이 사용되는 GC-TCD (Gas Chromatography-Thermal Conductivity Detector)를 활용하여 네온의 원자량을 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 원자량을 모르는 고순도 네온 가스 3병과 이전에 정확한 동위원소 비율과 절대 원자량(Absolute Isotope Ratio)이 보고된 3병의 네온 가스이다. 이것들을 기준 표준물질로 사용하였다.

네온 기준물질의 분석 결과, 원자량에 따른 직선성이 확인되었다. 시료로 사용된 3종의 네온 시료의 원자량은 네온 기준물질의 직선성에 대입하여 확인하였다. 계산된 각 시료들의 원자량은 각각 20.1793(2), 20.1830(2), 그리고 20.1796(2) g·mol<sup>-1</sup> 이었다. 계산된 원자량을 확인하기 위해 Gas/Mass Spectrometer를 사용해 알려진 방법으로 동위원소 비율을 측정하여 원자량을 구했다. 운반기체로 사용된 시료를 포함하여 7가지 시료의 원자량을 비교하였더니 불확도 이내에서 일치하였다. GC-TCD를 보유한 연구실에서 위의 7가지 시료 중 2가지 이상을 기준 시료로 한다면 미지의 네온 시료에 대한 원자량을 구할 수 있다.

PT-002 [표준]

## 가스분석 Data Center: GC Chromatogram 및 분석 조건에 관한 정보

안병수<sup>1,2</sup>, 이진홍<sup>2</sup>, 이진복<sup>1</sup>, 문동민<sup>1</sup>, 김광섭<sup>1</sup>, 김진석<sup>1</sup>, 홍기룡<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>한국표준과학연구원 가스분석표준센터, <sup>2</sup>충남대학교 환경공학과

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

가스 분석에 있어서 가스크로마토그래피(GC)는 화학종의 정성 및 정량분석에 널리 사용된다. GC에 주입하는 시료의 양 및 각 화학종의 농도, 분석 컬럼의 종류, 검출기의 특성, 바탕가스의 종류, 운반가스의 화학종 등이 지정된 조건에서 나타나는 GC 스펙트럼은 고유의 패턴을 나타낸다. 주어진 조건에서 나타난 스펙트럼 형태는 각 화학종의 피이크 위치 정보와 상대적인 농도 정보(감도)를 제공한다. 하지만 구체적인 가스분석 데이터들은 개별 실험실에서만 활용될 뿐 참조표준 데이터로 활용되지 않고 있는 실정이다. 이에 한국표준과학연구원에서는 KRISS Data Center를 설립하여 GC/TCD, GC/FID, GC/ECD, GC/AED, GC/PDD 등에서 얻어진 정보를 데이터화하여 국내외 가스분석 전문가들에게 제공하고자 한다.

이번 발표에서는 GC/TCD를 이용하여 분석 조건에 따른 다양한 정보를 보여주고자 한다. 특히 화학종의 농도변화, 오븐온도 변화, 운반가스의 화학종 변화에 따른 피이크 크기 및 위치 등의 변화를 확인하였다. 향후 Data Center를 통해 분석대상가스별 농도, 바탕가스의 종류 및 분석조건에 대한 다양한 정보를 제공함으로써, 국내외 가스분석자들이 활용할 수 있는 참조표준으로 기능할 것으로 기대된다.

PT-003 [표준]

## FTIR 고정밀 정량 분석을 위한 레퍼런스 스펙트럼 구축 방법론 고찰

김예라<sup>1,2</sup>, 이정순<sup>1,2</sup>, 김상우<sup>1</sup>, 임정식<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>한국표준과학연구원 가스분석표준센터, <sup>2</sup>과학기술연합대학원대학교(UST) 측정과학과

\*Corresponding author: lim.jeongsik@kriss.re.kr

분광학 방법을 이용한 가스 정량 분석 방법에서는 전통적으로 Beer-Lambert 법칙을 사용하여 농도를 산출한다. Beer-Lambert 법칙은 흡광 광도법에서 흔히 사용되는 법칙으로, 투사광의 강도는 초기 입사광의 강도에서 흡광계수와 가스의 농도, 그리고 가스분포 길이에 따라 선형적으로 변하는 법칙이다. 이는 기준값인 레퍼런스 스펙트럼을 샘플 스펙트럼과 비교를 통해 농도를 산출할 수 있으며, 이러한 비교 분석법은 레퍼런스의 정확성에 따라 분석의 정확도 또한 달라진다.

FTIR을 이용한 정량분석 시, 사용하는 레퍼런스 스펙트럼은 가스 스펙트럼과 장비 Instrument Line Shape(ILS)과의 컨벌루션이다. 가스 스펙트럼의 경우, 정량 규정을 위해 중량법으로 제조한 가스를 이용하며, ILS의 경우, FTIR 장비를 N<sub>2</sub>O 표준셀을 이용하여 측정하였을 때, 레퍼런스 스펙트럼의 정확도를 높일 수 있다.

중량법으로 제조한 표준가스를 레퍼런스로 활용하는 경우, 높은 정확도로 인해 레퍼런스로 이용에 유용하지만, 여러 가지 다양한 성분을 분석하는 경우, 제조에 따른 부담감이 따른다.

따라서, 이러한 한계를 극복하고자 기존의 가스 스펙트럼 커뮤니티를 이용하여, 정량 분석을 하고자 하였다. HITRAN(High-Resolution Transmission Molecular Absorption Database), NIST(National Institute of Standards and Technology), NDACC(Network for the Detection of Atmospheric Composition Change)과 같은 커뮤니티는 다양한 가스종(HITRAN의 경우, 49종 취급)들을 다루며, 다양한 가스 스펙트럼을 데이터 베이스화 하고 있다.

이에 대한 활용을 위해서는 각각의 FTIR 장비마다 가지는 특징인 ILS 고려가 필수이며, 이번 연구를 통해, ILS 추출과 데이터 베이스의 가스 스펙트럼과의 컨벌루션으로 레퍼런스 스펙트럼으로 활용하였다. 특히, 고정밀 분광학에서는 장비가 가지는 특정 함수인 ILS의 영향이 상대적으로 크기 때문에 ILS를 이용한 정밀 측정이 필수이다.

표준 N<sub>2</sub>O 셀을 이용한, ILS 추출은 resolution에 의한 sampling function 과 Field of View(FOV)로 인해 필수적으로 발생하는 ideal ILS를 고려함과 동시에 실제 측정한 스펙트럼에서 추가로 발생하는 인터페로그램 기록에 따른 에러의 영향인 phase error, Intensity error 그리고 aperture의 mis-align에 의해 발생하는 ILS의 영향을 포함한다.

추출한 ILS 는 기존의 중량법으로 제조한 가스 스펙트럼과 데이터 베이스의 가스 스펙트럼을 컨벌루션 한 결과를 비교를 위해, 고분해능 FTIR 장비를 이용하여, CO<sub>2</sub>샘플을 고분해능 resolution에서 측정하였다.

PT-004 [표준]

## 토양 중 중금속 성분분석 숙련도시험 결과의 이상치 결정 방법 비교

주창균, 이군택, 신건환, 김태승\*

서울대학교 농업생명과학대학 농생명과학공동기기원

\*Corresponding author: tskim99@snu.ac.kr

일반적으로 숙련도시험의 목적은 시험소 간의 시험능력을 객관적으로 비교·평가하여 수행도 및 분석값의 변동원인 등을 파악하여 시험·분석 능력을 개선 또는 향상시키는데 있다. 아울러 시험소 간의 숙련도시험을 통해 시험소의 보다 발전된 시험·분석 능력을 확보하기 위해서는 시험결과의 다양한 평가가 요구된다.

본 연구에서는 「시험소 간 비교 숙련도시험용 통계적 방법 (KS Q ISO 13528:2015)」에 따라 균질성 및 안정성이 확보된 숙련도시험아이템 (시료)을 이용하여 토양 중 중금속 (As, Cd, Cu, Ni, Pb, Zn) 성분 분석 숙련도시험을 15개 시험소를 대상으로 진행하였다. 숙련도시험 결과를 대상으로 이상치 결정을 위해 적용한 통계기법으로 Cochran's test, Grubb's test, Hampel's test, classical  $z$ -score, median and normalized interquartile range (NIQR), robust statistical analysis (algorithm A), NATA statistical analysis 기법을 활용하였다. 또한 일반적으로 시험소 수행도 평가에 사용하는  $z$ -score 기준으로  $|z| \leq 2$ 는 만족,  $2 < |z| < 3$ 은 의심,  $|z| \geq 3$ 은 불만족으로 판단하는데 이를 이상치 결정에 연계하여 논의하였다. 제시된 통계기법을 각각 적용한 결과, NATA statistical analysis ( $z_{wi}$ )에서 4개 시험소로 가장 많은 이상치 검출을 보였다. 항목별로는 Ni의 경우에 가장 높은 비율로 이상치 검출 시험소가 나타났고, 여기서 시험소 이상치가 확인된 통계기법은 Cochran's test, Hampel's test, robust statistical analysis (algorithm A), NATA statistical analysis ( $z_{wi}$ )로 확인되었다. 또한 시험소 내 분석 결과 (within laboratory results)가 반영되는 Cochran's test이나 NATA statistical analysis ( $z_{wi}$ )의 경우 유사한 이상치 검출 시험소를 보였으며, 시험소 간 분석 결과 (between laboratory results)의 평균값에 의해 통계처리되는 나머지 방법 중 Hampel's test와 robust statistical analysis (algorithm A)에서 유사한 이상치 검출 시험소를 보였다.

이상의 연구 결과를 토대로 각 시험소들의 숙련도시험 시료 분석결과를 이상치 관점에서 해석함에 있어 시험소 내 및 시험소 간 분석 결과를 다양한 통계기법을 적용할 경우 각 방법의 차이점과 유사점을 확인할 수 있었다. 그리고 이를 통해 숙련도시험 수행도 평가에서 각 통계기법을 새롭게 적용할 가능성 및 제한점을 제시하였다.

PT-005 [표준]

## Total Bisphenol A 함량 시험방법 개발을 위한 국제표준화 활동현황

류건영<sup>1\*</sup>, 최승윤<sup>1</sup>, 이도아<sup>1</sup>, 정재학<sup>2</sup>, 이진숙<sup>3</sup>

<sup>1</sup>\*KOTITI시험연구원, <sup>2</sup>성문시스텍, <sup>3</sup>한국산업기술시험원

\*Corresponding author: gy\_ryu@kr.kotiti-global.com

전기전자 및 관련 산업분야의 국제환경규제는 날로 강화되고 있으며, 그에 따른 전기전자 및 소비자 제품 관련된 유해물질 시험분석방법에 대한 연구가 지속적으로 이루어지고 있다. 전기전자제품에 대한 유해물질 표준화는 현재 2019년 초부터 신설된 ISO/IEC JWG14에서 주도적으로 진행되고 있으며 기존 RoHS I, RoHS II 물질 외에 REACH SVHCs 및 신규 물질에 대한 국제표준화가 지속적으로 연구 중에 있다. 2018년 독일 함부르크 WG3 회의에서는 우선 표준화 후보물질 소개인 Substance Selection Guide Task Group에서 Bisphenol A를 포함한 몇 가지 유해물질에 대해 소개 되었다. Bisphenol A는 폴리카보네이트 및 에폭시 수지 등 다양한 폴리머 재질을 제조하기 위한 원재료로 사용되고 있다. 유아용품 및 다양한 생활제품에서 Bisphenol A가 검출되고 있으며, 이미 EU 등 다양한 국가에서는 폴리카보네이트 및 에폭시 수지로 제조된 Coating 제품 및 음식 용기에서의 Bisphenol A 전이량에 대한 규제가 이루어지고 있다. 그러나 전기전자 제품 및 생활용품 중 총 Bisphenol A의 함량에 대한 국제 표준화된 시험 방법은 부재하여 여러 산업분야에서 어려움을 겪고 있다. 본 연구에서는 국내외 관련 표준들을 조사 후 시료 전처리 및 분석방법 등을 비교 검토하여 분석법을 개발 및 검증하였고, 이를 토대로 국제표준화 채택과 ISO/IEC Double Logo 표준화 작업을 위한 PWI 제안 과정에 대한 내용을 소개하고자 한다.

PT-006 [표준]

## Development and quality verification of tabanone reference material

**Minyeong Kim<sup>1</sup>, Hye-Jin Park<sup>1</sup>, Hongjun Jang<sup>1</sup>, Hyongsu Kim<sup>1</sup>, and Seung-Hoon Baek<sup>1</sup>\***

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

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

Tabanones are the natural fragrance materials used in many products such as cosmetics, foods, and quasi-drugs. Because commercial tabanone reference material (TRM) is small in number and low in purity, this limited accessibility of consumers and reliability of analytical measurement. The present study aimed to establish and verify quality of new TRM. Tabanone was prepared following the organic synthesis in our previous study. Purity was assessed using GC-FID and mass balance method. TRM was prepared by sealing up the small aliquots in vials and with plastic/aluminium bags in the glove-box substituted with argon. TRM was subjected to homogeneity test and stability test (ISO guide 35) under the various conditions for maximum 24 months. Content of tabanones was  $92.7 \pm 0.2\%$  assessed by mass balance method. TRM was shown to be sufficiently homogeneous within/between bottles assessed by ISO homogeneity test. Short-term stability test data indicated that TRM was stable for 12 weeks under the accelerated condition (4°C), but content was significantly decreased over time in stress conditions (25°C, 60% humidity). Long-term stability test data indicated that TRM are stable at -20°C and -70°C up to 24 months. These findings showed that TRM could be used as a reference material for quality control and analysis of various products containing tabanone. This research was supported by a grant (16172MFDS242) from Ministry of Food and Drug Safety in 2016.

Keywords

tabanone; reference material; GC-FID; homogeneity; stability



PT-007 [표준]

연료전지에 사용되는 고순도 수소의 품질보증을 위한 수소 중  
극미량(무기)불순물 분석법 개발

김가해<sup>1,2</sup>, 문동민<sup>2</sup>, 이진복<sup>2</sup>, 김광섭<sup>2</sup>, 임정식<sup>2</sup>, 이정순<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>충남대학교 화학과, <sup>2,\*</sup>한국표준과학연구원 가스분석표준센터

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

신재생 에너지로 주목받고 있는 수소는 수전해, 천연가스 수증기 개질, 탄화수소 부분산화, 석탄가스화, 바이오매스 등 다양한 방법으로 생산되고 있으며 불순물이 수반될 수 있으므로 품질관리가 뒤따른다. 더구나 연료전지 등에 쓰이는 수소는 전지의 수명에 밀접한 영향을 주기 때문에 수소의 순도 관리는 필수적이다. 따라서 수소차의 사용화 및 가속화를 위하여 수소스테이션의 수소 연료의 효과적인 관리를 위해 필수적인 수소품질관리를 위하여 수소중의 극미량 불순물의 정성 정량 분석법 및 표준물질을 필요로 한다. 미국, 유럽, 일본을 비롯한 우리나라는 수소순도를 관리하기 위하여 규격을 정하였으며, 이를 현시화하기 위한 노력을 기울이고 있지만, 이를 관리할 수 있는 표준물질이나, 분석법은 따로 정해진 바 없다. 따라서 본 연구를 통하여 수소중의 불순물 분석법과 표준물질, 그리고 현장 분석 장치를 개발하고자 한다. 그 일단계로서 수소중의 무기물질 불순물 즉, 산소, 질소, 아르곤, 탄화수소 항목의 불순물 분석법 및 표준물질을 소개하고자 한다.

**Key words** : gas chromatography, certified reference materials, Hydrogen, impurities, quantitative analysis

PT-008 [환경]

## 질소와 산소 안정동위원소를 활용한 상수원 오염원 추적 및 유입지천의 기여도 평가(3)

김정인<sup>1</sup>, 김형석<sup>1</sup>, 최원석<sup>1</sup>, 이선홍<sup>1</sup>, 김윤석<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>\*K-water연구원 수질안전센터

\*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

질산염에 의한 수질오염은 상수원 유역의 부영양화 등 수생태계 오염을 초래하게 되어 상수원 수질 관리 시 주요 관심사항이다. 본 연구에서는 국내 상수원 중 한 곳을 선정하여 질소 ( $\delta^{15}\text{N}$ )와 산소 ( $\delta^{18}\text{O}$ ) 안정동위원소 조성을 이용한 질산염 오염물질의 유입 경로 추적과 유입지천에 대한 기여도를 평가하고자 한다. 수질시료는 상수원 저수지를 기준으로 상류 하천 4개 지점 (A, B, C, D지점) 그리고 하류 지점 등 총 6 지점에서 3년간 총 15회 채취하였고, 앞서 수행한 2016 - 2017년의 동위원소 비와 2018년의 동위원소 비의 변화를 비교하였다. 전처리에 사용된 미생물은 *Pseudomonas chlororaphis*이며 Bacterial denitrification method를 이용하여 Isotope ratio mass spectrometer (Thermo Fisher Scientific DELTA V PLUS)를 통해 질소와 산소 동위원소 분석을 수행하였다. 6개 지점의  $\delta^{15}\text{N}$ 과  $\delta^{18}\text{O}$ 의 평균값은 2016년;  $6.7 \pm 3.2\text{‰}$  &  $5.2 \pm 5.8\text{‰}$ , 2017년;  $4.9 \pm 4.1\text{‰}$  &  $1.8 \pm 3.2\text{‰}$ , 2018년;  $4.6 \pm 2.4\text{‰}$  &  $3.0 \pm 2.6\text{‰}$ 로 나타났으며 2018년으로 접어들면서  $\delta^{15}\text{N}$ 과  $\delta^{18}\text{O}$ 의 변화량이 감소한 것은 상수원 유역이 점차 안정적으로 변화한 것으로 판단된다. 2018년 상수원 유역은 C, D지점을 제외하고 사전연구 (Kendall et al., 2007)의 표와 비교했을 때,  $\delta^{15}\text{N}$ ;  $4.6\text{‰} \sim 9.4\text{‰}$ ,  $\delta^{18}\text{O}$ ;  $-1.3\text{‰} \sim 7.7\text{‰}$ 의 범위로 나타나 토양 유기물의 영향으로 판단되며 C, D지점은  $\delta^{15}\text{N}$ ;  $-1.4\text{‰} \sim 3.9\text{‰}$ ,  $\delta^{18}\text{O}$ ;  $-0.9\text{‰} \sim 9.4\text{‰}$ 의 범위로 화학비료의 영향으로 판단된다. C, D 지점에 대한 화학비료의 기여도는 각각 67.4%, 81.3%로 나타났다. 하지만  $\delta^{15}\text{N}$ 과  $\delta^{18}\text{O}$ 의 데이터의 기여도 평가를 저수지와 하류지점은 A와 B지점의 영향을 받는 것으로 나타나 향후 상수원 보호구역 관리에 있어 A, B지점의 지속적인 모니터링이 필요할 것으로 보인다.

PT-009 [환경]

## 전국 상수원수의 질소( $\delta^{15}\text{N}$ )와 산소( $\delta^{18}\text{O}$ ) 안정동위원소 모니터링

김형석<sup>1</sup>, 김정인<sup>1</sup>, 최원석<sup>1</sup>, 이선홍<sup>1</sup>, 김윤석<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>K-water연구원 수질안전센터

\*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

국내 안정동위원소에 대한 관심이 높아지면서 환경 분야에서는 안정동위원소 데이터를 활용한 수질 오염원 추적 및 수계별 안정동위원소 특성 규명에 대해 필요하게 되었다. 본 연구에서는 전국 13개 상수원을 선정하여 상수원별 수질시료 중 질산이온의 질소와 산소 안정동위원소 비를 측정하여 오염원 추적 및 안정동위원소 모니터링을 실시하였다. 13개 상수원 수질시료는 2017년 3월부터 2019년 2월까지 총 9회 채수하였고, 수중 질산이온( $\text{NO}_3^-$ )을 아산화질소( $\text{N}_2\text{O}$ )로 환원 시켜 분석하는 탈질박테리아법을 이용하여 안정동위원소 질량분석기를 통해 질소 동위원소 비( $\delta^{15}\text{N}$ )와 산소 동위원소 비( $\delta^{18}\text{O}$ ) 분석을 수행하였다. 분석결과 13개 상수원수의  $\delta^{15}\text{N}$ 과  $\delta^{18}\text{O}$ 의 최빈값은 각각 5.5 ~ 9.5‰, 0.5 ~ 4.5‰의 범위로 측정되었다. 화학비료, 토양, 가축분뇨 및 생활하수 등 오염원의  $\delta^{15}\text{N}$ 과  $\delta^{18}\text{O}$ 의 범위와 비교한 결과 자연유래 토양 유기물의 안정동위원소비의 범위로 나타났으며 전국 13개 상수원의 수질시료에서 화학비료, 가축분뇨 및 생활하수의 영향이 나타나지 않는 것으로 판단된다. 특히 13개 상수원 중 7개의 상수원에서 다른 상수원들과 구분 가능한 특징적인  $\delta^{15}\text{N}$ 과  $\delta^{18}\text{O}$ 의 범위를 형성하고 있는 것으로 나타나 향후 지속적인 모니터링을 통해 각 상수원별  $\delta^{15}\text{N}$ 과  $\delta^{18}\text{O}$ 의 대표 범위를 한정하여 상수원별 안정동위원소 특성 규명에 대한 좋은 연구 자료를 제공할 수 있을 것으로 보인다.

PT-010 [환경]

## 수질 참조표준 데이터를 활용한 냄새물질 발생 예측모델 개발

이선홍, 이은정, 최원석, 최재원, 김윤석\*

한국수자원공사 수질연구센터

\*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

수질 참조표준은 측정 데이터 및 수질 정보의 정확도와 신뢰도를 과학적으로 분석·평가하여 공인한 데이터로 삶의 질 및 물복지 향상을 위해 널리 사용토록 한 데이터이다. 수질데이터는 전국 광역 13개 상수원수에서 조류와 방선균에 의해 냄새를 유발하는 Geosmin과 2-methylisoborneol(2-MIB) 데이터를 활용하였다. 분석방법은 SPME-GC-MS 분석법을 활용하였으며, 3년간 매월 측정된 데이터를 활용하여 시계열 분석을 통한 예측모형을 수립 후 최근 1년의 데이터를 검증에 활용하였다. 평활법(smoothing method)을 이용하여 시계열 자료가 내포하는 불규칙한 변동을 완화하였고, 시계열 요소 분해법(푸리에 변환)을 통해 데이터의 경향 및 반복 주기를 분석하였다. 13개 광역정수장의 원수에서의 geosmin과 2-MIB는 각각 지점별 0.1-4.7 ng/L와 0.1-6.5 ng/L의 범위로 조사되었다. 예측모형을 활용하여 전체 데이터의 예측력을 검토한 결과 약 65%의 데이터가 95% 신뢰구간 내에 포함되었다. 현재 개발된 모델에 의하면 60~70% 수준의 데이터가 부합되며, 단기간의 분석자료를 활용한 예측 모델은 그 정확도가 낮은 것으로 평가되었다. 참조표준 데이터를 활용한 예측 모델의 개발은 다년간의 추가 측정 또는 매년 냄새물질 발생 수준을 bootstrapping 기법을 사용하여 냄새물질 발생 모의 기법을 통한 예측모델 적용이 필요할 것으로 판단된다.

PT-011 [환경]

## 수질 중 벤조(a)피렌의 국제비교속련도 평가

최원석, 이선홍, 최재원, 김윤석\*

한국수자원공사 수질안전센터

\*Corresponding author: yunskim@kwater.or.kr

속련도 시험은 시험자 및 시험기관의 시험능력 평가 외에 시험결과의 품질관리 보증 수단 중 하나이다. 본 연구는 국내에서 먹는물 감시항목 중 벤조(a)피렌을 속련도 항목으로 선정하였고, 수질 중 벤조(a)피렌 속련도시료에 대한 상온, 냉장, 가혹조건에서 균질성과 안정성이 평가되었다. 속련도 시험결과의 평가는 KS Q ISO 13528 (시험소 간 비교 속련도 시험에 사용되는 통계적 방법)에 근거한 로버스트 통계법을 사용하여, 인증표준물질과 조제시료를 반복 시험하여 평균 차이값을 더한 값으로 시료의 설정값을 산출하고 수행도를 평가하였다. 참가기관은 총 12개국에서 18기관이 신청하였고 이 중 13개 기관이 벤조(a)피렌의 결과를 제출하였다. 대상항목의 분석 방법으로는 대부분의 참여기관들이 기체크로마토그래피-질량분석법에 의한 분석방법으로 수행하였다. 시료의 균질성과 안정성은 ISO 13528 부속서 B의 방법으로 통계처리 하여 검토하였고 속련도 표준편차( $\sigma_{pb}$ )의 결정은 미량물질분석에 적합한 TOMPSON 방식을 적용하였다. 설정값은 참가기관들의 일치값을 사용하였고 0.009 7 mg/L로 나타났다. 최종결과를 제출한 기관이 19기관 미만으로 KS Q ISO 13528에 따라서 z'-score 의한 속련도 평가를 실시하였다. z'-score 결과, 미제출 된 5개 기관을 제외하고 2 미만의 만족 기관이 11개 기관으로 약 85%의 만족률을 나타냈다. 또한 총 2개 기관이 불만족으로 평가되었다. 벤조(a)피렌에 참가한 시험기관들의 측정불확도의 크기가 일정범위 내에 존재하며, 시험장비 사용에 따른 수행도 평가결과를 비교하면, GC-MS를 사용한 참여기관들의 만족률은 약 80%이고 GC-MS/MS를 사용한 기관들은 100%를 나타냄으로써 두 분류의 기기에 의한 차이는 20%의 차이를 보였지만 후자의 기기를 사용한 경우 개체 모수 (3기관)가 적어 정확한 비교 결과를 제시하는 것은 실제로 현실성이 부족할 것으로 판단되었고, 본 속련도시험의 결과는 유기물 분석에 대해서 향후 기초 자료로 활용될 것으로 판단된다.

PT-012 [환경]

수산 환경과 양식생물 중 폴리염화나프탈렌  
(Polychlorinated naphthalenes) 분석법 정립

이인석<sup>1,\*</sup>, 최민규<sup>2</sup>, 권정노<sup>1</sup>

<sup>1</sup>국립수산과학원 남동해수산연구소, <sup>2</sup>국립수산과학원 어장환경과

\*Corresponding author: islee@korea.kr

2001년 잔류성유기오염물질(POPs) 규제에 관한 국제 협약(스톡홀름 협약)이 12종 물질 규제를 시작으로 채택된 이후 POPs 추가 채택이 이어져 오고 있으며, 2019년 현재 28종에 이르고 앞으로도 계속 추가 채택될 것으로 예상된다. POPs는 물질별로 환경과 생물에서 사용량, 거동 및 축적 정도가 다르기 때문에 잔류수준은 환경매체에 따라 다르게 나타난다. 이러한 요인들을 바탕으로 일본이나 미국 등 여러 나라에서는 물질별로 측정 주기와 매체를 별도로 지정하고 있으며, 우리나라 환경부에서도 이러한 운영계획을 마련하고 있다. 따라서 수산 환경(해수, 퇴적물)과 양식생물에 대해서도 물질별 측정주기를 마련해 규제가 늘어나는 POPs에 대해 주어진 시간과 비용으로 능동적이고 효율적으로 대응할 필요가 있다. 이를 위해서는 먼저 POPs의 수산 환경과 양식생물 잔류량 스크리닝이 필요하며, 이를 위해서는 분석법 정립이 선행되어야 한다. 분석법은 매체를 고려한 최적의 분석법이 요구되며 시간과 비용을 고려한다면 기존 POPs 분석법과 조화를 이룰 필요가 있다. 폴리염화나프탈렌류(Polychlorinated naphthalenes, PCNs)는 2015년 신규 POPs로 지정되었으며, 환경부, 식약처 등도 분석법을 마련 중에 있으나 수산환경과 양식생물에 대한 연구는 미비한 실정이다. 따라서 수산 환경과 양식생물에 대한 PCNs 분석법을 기존 POPs 물질 분석법과 연계해 최적화된 분석법을 마련하고자 하였다.

PCNs은 현재는 제조 및 사용이 금지되어 있으나 지난 세기에 매우 많은 양이 생산되었고 Halowax 같은 상업적인 혼합물로 판매되어 PCBs와 마찬가지로 엔진오일의 첨가제, 절연물질 등으로 사용되어 왔다. 신규 POPs인 PCNs은 이론적으로 75종의 이성질체가 가능하지만 스톡홀름협약 상에서는 규제할 이성질체를 제시하고 있지는 않다. 따라서 국외 연구결과와 보고서 등을 통해 75종의 PCNs 물질 중 생물 축적도가 높고 독성이 높은 12종을 우선 스크리닝 대상물질로 선정했으며, 물리화학적 특징이 기존 POPs 중 PCBs, PBDEs와 유사하기 때문에 이러한 물질들에 대한 분석법과 조화를 이루어 효율적인 분석법을 정립하고자 하였다. 매체별 PCNs 추출은 해수의 경우 GF/F, Envi-disk 여과/추출 후 필터지를 가속 용매추출장치(ASE)를 이용하여 용매로 재추출하였으며, 퇴적물은 건조시킨 후 균질화 하여 ASE 추출하였고, 균질화된 양식생물은 1 N 수산화칼륨 용액으로 녹인 후 액-액 추출 하였다. 추출된 시료는 방해물질 제거를 위해 다층실리카겔 컬럼으로 정제하였으며, 알루미늄 컬럼의 경우 시료에 따라 선택으로 추가적용 하였다. 기기분석은 가스크로마토그래퍼-고분해능질량분석기(HRGC/HRMS)를 이용하여 Electron Impact 모드로 분석하였다.

PT-013 [환경]

제주 연안 양식장 수산용수 및 배출수의  
테트라사이클린계(TCs) 항생물질 잔류수준과 분포특성 연구

이미경<sup>1</sup>, 김민섭<sup>1</sup>, 최민규<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>국립수산과학원 어장환경과

\*Corresponding author: mkchoi3@korea.kr

테트라사이클린계(Tetracyclines) 항생물질은 미생물 증균 억제효과가 있어 수산 양식장에서 질병 발생 예방 및 치료를 목적으로 활용되고 있으나, 오·남용으로 인한 부작용을 초래할 수 있어 안전한 수산물 공급을 위하여 환경 내 잔류수준 조사가 필요한 실정이다. 본 연구에서는 제주 연안 어류 양식장에서 사용되는 항생제의 잔류량을 파악하고자 양식장으로 유입되는 수산용수(15정점/연안 표층수 5정점, 담·염 지하수 10정점) 및 배출수(14정점) 내 테트라사이클린(TC) 계열의 항생제 4종(옥시테트라사이클린(Oxytetracycline), 테트라사이클린(Tetracycline), 클로로테트라사이클린(Chlortetracycline), 독시사이클린(Doxycycline)을 총 3회(6월 입식 후, 8월 고수온, 10월 절식 후)에 걸쳐 시료 채집 후 고성능액체크로마토그래프/텐덤질량분석기(UPLC/MS/MS)를 이용하여 분석하였다.

제주 연안 내 모든 연구 정점에서 테트라사이클린(TC) 계열의 항생제 3종 테트라사이클린(TC), 클로로테트라사이클린(CTC), 독시사이클린(DC)의 농도가 검출되지 않았으나, 옥시테트라사이클린(OTC) 성분은 일부 정점의 배출수 시료에서 1.5~380.8(평균 56.4) ng/L 수준으로 검출되었다. 계절별 변화를 살펴보면, 6월에는 5개 정점에서 1.5~14.9(평균 6.6) ng/L, 10월에는 4개 정점에서 6.2~63.6(평균 22.1) ng/L의 농도 범위를 보였으나 8월에는 5개 정점에서 19.6~380.8(평균 133.7) ng/L로 다른 기간에 비해 매우 높은 농도를 보였다. 이는 8월경에 연일 지속되는 기록적인 폭염과 함께 고수온 현상으로 인해 양식장의 폐사율이 증가함에 따라 양식 현장에서 항생제가 과도하게 주입된 결과라고 여겨지며, 해상 어류/패류양식장, 일반 해양환경에서 검출된 수준인 0.6~6.2(평균 2.7) ng/L 보다 상대적으로 높은 수준이었다 [1]. 또한 계절별 옥시테트라사이클린(OTC) 성분이 검출된 조사 정점이 6월과 8월에는 일치하였지만 10월과는 다른 경향을 보여 양식장 별 항생제 사용 시기와 사용량이 서로 다른 것으로 여겨진다.

본 연구를 통해 어류 양식장으로부터 제주 연안으로 배출되는 항생제의 잔류량이 지역별, 계절별로 차이를 확인하였으며, 향후 지속적인 조사를 통해 항생물질의 올바른 사용과 수산물 안정성 확보를 위한 기초자료로 활용하고자 한다.

[1] NIFS, 신규유해물질 분석기법 정립 및 양식장내 예비 스크리닝(2013) 50-51

PT-014 [환경]

## 군산 연안의 퇴적물과 수산생물 내 다환방향족탄화수소와 폴리염화비페닐의 농도분포

이봉민<sup>1</sup>, 성재현<sup>2</sup>, 박시현<sup>3</sup>, 최민규<sup>4,\*</sup>

국립수산과학원 어장환경과 유해물질실

\*Corresponding author: mkchoi3@korea.kr

군산 연안의 내항에는 1989년부터 시작된 산업단지와 자유무역 지대 및 국제 항구가 있으며, 급속한 산업화로 인해 환경오염이 발생할 수도 있다. 따라서 본 연구에서는 군산 연안의 산업화로 인한 환경오염 평가를 해저퇴적물과 생물 중 다환방향족탄화수소 (PAHs) 16종과 폴리염화비페닐 (PCBs) 17종[Non Dioxin-Like PCBs (NDL-PCBs) 6종, Dioxin-Like PCBs (DL-PCBs) 12종]의 분포를 나타내고자 한다. 본 연구에서 퇴적물 12정점과 생물 23종(어류 13종, 갑각류 2종, 연체류 4종, 패류 4종)을 채취하여 분석하였다. 퇴적물의  $\sum_{16}$ PAH는 0.09-108 ng/g dw이며, Pyrene, Fluoranthene, Benzo[g,h,i]perylene이 주요성분(기여율 55%)이었다. 퇴적물의 총 PAH의 농도는 내측에서 상대적으로 높게 나타났다. 퇴적물의 총 PAH의 기준은 미해양해기청(NOAA)에서 제시한 ERL (Effect range low, 4,022 ng/g dw)값 이하로 나타났다. 퇴적물 내 Phenanthrene/Anthracene 비율로 배출원 추정결과, 유류기원 보다는 연소기원(<10)으로 추정되었다. 생물의  $\sum_{16}$ PAH는 불검출-33.4 ng/g dw이며, Pyrene(62%)이 주요성분이었다. 퇴적물의  $\sum_{6}$ NDL-PCB의 범위는 불검출-0.22 ng/g dw이며, PCB 153, 28, 101이 주요성분(기여율 68%)이었다.  $\sum_{12}$ DL-PCB의 범위는 불검출-0.08 ng/g dw(불검출-0.006 ng TEQ<sub>WHO-2005</sub>/g dw)이며, PCB 118, 105, 77이 주요성분(기여율 75%)이었다. 퇴적물의  $\sum_{6}$ NDL-PCBs는 내측에서 상대적으로 높게 나타났다. 퇴적물의 PCBs의 기준은 NOAA에서 제시하는 ERL (22.7 ng/g dw)값 이하로 나타났다. 생물  $\sum_{6}$ NDL-PCB의 범위는 0.02-0.98 ng/g dw로 나타났으며, PCB 153, 138, 28이 주요성분(기여율 70%)이었다. 생물의  $\sum_{12}$ DL-PCB의 범위는 불검출-0.011 ng/g TEQ<sub>WHO-2005</sub>/g dw로 나타났으며, PCB 126이 주요성분(기여율 90%)이었다. 또한 생물 섭취를 통한 PCBs의 인체위해도평가결과 Hazard quotient나 Hazard index 수치가 1이하로, 이 해역의 어류를 지속해 섭취하여도 PCBs에 의한 독성위해도는 발생하지 않는 것으로 판단된다.



PT-015 [환경]

## 국내 양식어장 퇴적물과 생물 중 DL-PCBs 와 PCDD/Fs의 잔류농도 및 분포특성

성재현<sup>1</sup>, 김예지<sup>1</sup>, 박시현<sup>1</sup>, 이미경<sup>1</sup>, 김민섭<sup>1</sup>, 최민규<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>국립수산과학원 어장환경과

\*Corresponding author: mkchoi3@korea.kr

다이옥신류(PCDDs: Polychlorinated dibenzo-*p*-dioxins, PCDFs: Polychlorinated dibenzo furans 이하 PCDD/Fs로 표기, DLPCBs: Dioxin liked polychlorinated bephenyls)는 잔류성유기오염물질(POPs: Persistent organic pollutants)로서, 수계에서 부유 입자에 흡착하거나 퇴적물에 축적되어, 먹이연쇄를 통해 수산생물 및 인간에게까지 영향을 줄 수 있으므로, 생태 위해성 관리 차원에서 오염도에 대한 연구 및 평가가 필요한 실정이다. 그러므로 본 연구에서는 국내 양식어장 내 수산생물(진주담치, 굴, 새꼬막, 김, 미역, 다시마, 우렁챙이, 가리비, 바지락) 및 퇴적물에 잔류하는 다이옥신류(PCDD/Fs 17종, DLPCBs 12종)의 농도와 분포특성을 파악하기 위하여 53개 퇴적물 정점 및 31개 양식어장 정점을 대상으로 모니터링을 실시하였다.

모든 연구 정점에서 퇴적물의 총 다이옥신류( $\sum_{12}$ DLPCBs +  $\sum_{17}$ PCDD/Fs) 농도는 0.09~6.66 pg WHO<sub>2005</sub>-TEQ/g dw 수준으로 검출되어, 국내외 보고된 농도(캐나다 브리티시컬럼비아주의 해양 퇴적물 질 예비기준[Level 1(일반퇴적물 기준), 100 pg WHO<sub>2005</sub>-TEQ/g dw; Level 2(보완기준), 190 pg WHO<sub>2005</sub>-TEQ/g dw])보다는 상당히 낮은 경향을 보였으며, 양식생물의 총 다이옥신류의 농도는 0.00~0.43 pg WHO<sub>2005</sub>-TEQ/g ww 수준으로 나타나, 유럽연합에서 제시한 총 다이옥신류의 최대 농도(6.5 pg WHO<sub>2005</sub>-TEQ/g ww) 보다는 낮은 경향을 보였다. 해역별로 비교한 결과 퇴적물 내 총 다이옥신류의 농도가 남동해 (2.15 pg/g dw) 해역에서 가장 높게 나타났고, 동해 (1.19 pg/g dw), 남서해 (0.76 pg/g dw), 서해 해역 (0.06 pg/g dw) 순으로 낮은 경향을 보였다. 또한 수산생물의 총 다이옥신류 농도는 남동해 (0.19 pg/g ww) 해역에서 가장 높게 나타났고, 남서해(0.11 pg/g ww), 동해(0.04 pg/g dw), 서해(0.03 pg/g dw) 순으로 낮은 경향을 보였다. 퇴적물 내  $\sum_{17}$ PCDD/Fs의 농도가 상당히 높음에도 불구하고 수산생물 체내의 농도가 매우 낮은 것은 섭식을 통해 생물체로 이동되는 과정에서 선택적인 흡수 또는 배출 등의 생리적 기작의 영향인 것으로 여겨진다. 총 다이옥신류(Total dioxins)의 이성질체 분포특성으로, 수산생물은 PCB-126 90%, 2,3,7,8-T4CDF 7.28%의 함량을 보였으나 퇴적물에서는 1,2,3,7,8-P5CDD, 1,2,3,4,7,8-H6CDF 성분이 각각 19.6%, 13.0%로 다른 이성질체에 비해 높게 나타났다. 수산생물 종별 비교 결과  $\sum_6$ 해조류,  $\sum_3$ 피낭류,  $\sum_{19}$ 패류는 각각 0.00, 0.08, 0.16 pg/g ww의 농도를 보였으며, 지방질의 함량이 높은 피낭류 및 패류에서 함량이 낮은 해조류보다 높게 나타났다. 본 연구를 통해 국내 양식어장 퇴적물 및 수산생물 내 다이옥신 함량이 해역별로 차이를 확인하였으며, 향후 지속적인 조사를 통해 잔류성 유기오염물질 저감방안 대책 수립을 위한 기초자료로 활용하고자 한다.

PT-016 [환경]

## 전국 연안의 양식장 밀집지역의 퇴적물 내 다환방향족탄화수소류(PAHs)의 잔류수준 및 분포패턴

김예지<sup>1</sup>, 성재현<sup>1</sup>, 김민섭<sup>1</sup>, 최민규<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>국립수산과학원 어장환경과

\*Corresponding author: mkchoi3@korea.kr

다환방향족탄화수소 (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons; PAHs)는 돌연변이 및 발암성을 유발하는 유기화합물질로서 해양 퇴적물 입자에 흡착되어 해양에 장기간 잔류하는 특성 때문에 먹이연쇄를 통하여 수산생물을 거쳐 인간에게까지 영향을 줄 수 있으므로 생태 위해성 관리 차원에서 모니터링 연구가 필요한 실정이다. 그러므로 본 연구에서는 2년(2017~18)에 걸쳐 전국 연안에 위치한 양식장 53개 정점에서 표층 퇴적물을 채취하여 '우선대상 오염물질'로 선정된 16종 다환방향족탄화수소(Naphthalene, Acenaphthylene, Acenaphthene, Fluorene, Phenanthrene, Anthracene, Fluoranthene, Pyrene, Benzo[a]anthracene, Chrysene, Benzo[b]fluoranthene, Benzo[k]fluoranthene, Benzo[a]pyrene, Indeno[1,2,3-c,d]pyrene, Dibenzo[a,h]anthracene, Benzo[g,h,i]perylene)의 잔류수준 및 분포패턴을 확인하고 더 나아가 그 기원을 규명하고자 하였다.

2018년에 조사한 53개 정점의 퇴적물 내  $\Sigma_{16}$ PAHs 잔류수준은 0.983 ~ 444 ng/g dw로 17년(15.1 ~ 433 ng/g dw)과 유사한 경향을 보였다. 그러나 17년도 기장 및 부산 연안의 일부 정점에서 비교적 높은 농도가 검출되었고(1150 ng/g dw, 1110 ng/g dw), 미국 해양 대기청에서 제시한 ERL(Effect Range Low; 생물 영향이 발생한 퇴적물 PAHs 농도 중 하위 10% 값)기준보다 낮아 영향이 적다고 여겨진다. 해역별로  $\Sigma_{16}$ PAHs 잔류수준을 비교한 결과, 남동해(평균 235±217 ng/g dw)와 동해(평균 278±123 ng/g dw)의 퇴적물이 남서해(평균 60.1±24.6 ng/g dw)와 서해(평균 61.6±46.6 ng/g dw)에 비해 비교적 높은 농도로 검출되어 지역별로 잔류 수준이 차이를 확인하였다. 또한 고분자(4~6 rings) PAHs가 퇴적물 내 높은 비율을 차지하고 있어(17년 평균 88%, 18년 평균 92%), 저분자 PAHs의 대부분이 휘발 또는 자연 분해된 결과라고 여겨진다. PAHs 기원 평가를 위해 AnT/(AnT+PhA)와 FluA/(FluA+Pyr)의 비율과 InP/(InP+BghiP)와 FluA/(FluA+Pyr)의 비율을 검정한 결과, 대부분의 정점에서 AnT/(AnT+PhA) > 0.1, FluA/(FluA+Pyr) > 0.5 및 InP/(InP+BghiP) > 0.5의 범위를 나타내어 국내 연안의 양식장 퇴적물 내 PAHs는 석유 기원 보다는 목초/석탄 등의 연소 기원이 우세한 것으로 여겨진다.

전국 연안의 주요 양식어장 퇴적물의 PAHs 모니터링 결과 남동해 해역의 두 정점을 제외하고 2017년과 2018년이 유사한 평균농도를 보이는 것으로 나타났다. 환경에 오랫동안 잔존하는 PAHs의 특성을 고려하여 장기적인 관점에서 지속적인 모니터링이 요구되며, 본 연구 자료는 국내에 빈번하게 발생하는 유류사고 영향 평가에 활용될 수 있는 기초자료로 활용될 것으로 여겨진다.

PT-017 [환경]

**Calibration and validation of WD-XRF for composition analysis and trace elemental analysis in particulate matter**

**Kishore Babu Dasari<sup>\*</sup>, Gwang Min Sun, Yong-Hyeon Nam**

Neutron Utilization Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute,  
Daejeon, Rep. of Korea

<sup>\*</sup>Corresponding author: dasari@kaeri.re.kr

The transboundary particles is one of the emerging issue in northeastern countries and highly risk especially to South Korea. These transboundary particles contain toxic components including inorganic metals, organic and bacteria which are directly linked to health diseases such higher rates of cancer, life expectancy, heart disease, stroke, and respiratory diseases particularly in children and elders. The composition of particulate matters(PMs) are changes very often due to rapid industrialization, desertification and man made pollution. Thus It is an important to monitor the pollutant on daily base. Many analytical studies have been carried out on elemental composition of PMs as well as toxic elements. For PMs analysis, Dry chemical analytical methods are recommended than wet chemical methods. The characterization of PMs requires the rapid quantification analytical method along with highly accurate, precision required. Neutron Activation Analysis (NAA) is one of the primary methods for trace elemental analysis in solid samples. The complementary analytical methods other than the primary methods are necessary for cross-checking the results and new analyte analysis. The wave length dispersive X-ray fluorescence (WD-XRF) technique is one the highly suitable method for particulate matter on filter media and bulk sample analysis. Recently we installed a Bruker S8 Tiger sequential WD-XRF machine which has excellent properties similar NAA such high sensitivity, qualitative, quantitative, multi elemental analysis technique and non-destructive. We are collecting aerosol samples on filter media at KAERI. In the present work calibration and validation of WD-XRF methodology and applied to aerosol samples. Multi-elemental standard solutions were spiked on filter media using KRISS certified reference materials for calibration and NIST SRMs were used for validation of WD-XRF methodology developed at KAERI. This methodology will be used for trace elemental analysis of aerosol samples as well as development of in house standards and reference materials.

PT-018 [환경]

## 하수오니 중 중금속 동시 분석을 위한 시료 분해법과 ICP-OES 및 ICP-MS 분석법 최적화 연구

최원명, 음철현\*

한국지질자원연구원 지질자원분석센터

\*Corresponding author: cheum@kigam.re.kr

하수오니(sewage sludge) 중 중금속을 분석하는 방법으로 AAS, AFS, NAA, ICP-OES, ICP-MS에 의한 방법이 다수 보고 되어 있다. 왕수에 의한 추출법이나 혼합산에 의한 분해 방법이 가장 잘 알려져 있으며, 다양한 중금속을 ICP-OES 및 ICP-MS로 동시에 분석하는 방법 또한 활발히 연구되고 있다. 따라서 본 연구에서는 중금속(As, Co, Cr, Fe, Ni, Cu, Zn, Cd, Pb)을 ICP-MS와 ICP-OES로 동시에 정량하기 위한 최적의 시료 분해방법 및 기기분석법을 연구하고자 하였다. 실험을 위해 ERM(European Reference Material)의 하수오니 표준물질(ERM<sup>®</sup>-CC144)을 사용하였으며 시료 분해방법으로 혼합산에 의한 시료 분해법과 마이크로파 시료 분해법, 과산화나트륨 용융법, 건식회화 후 혼합산에 의한 시료 분해법 등 총 4 가지 방법이 사용되었다. 분해된 시료는 ICP-OES 및 ICP-MS 측정을 위해 적절히 희석되어 측정되었으며, 분석된 결과를 서로 비교하였다. 실험결과 혼합산 분해법과 마이크로파 시료 분해법은 하수오니에 포함된 다량의 유기물(TOC 질량분율 36%)을 분해하기에 어려움이 있었으나, 과산화나트륨 용융법과 건식회화 후 혼합산에 의한 시료 분해법은 다량의 유기물을 분해하는데 효과적이었으며 하수오니 시료 또한 완전히 분해할 수 있었다. 위 용액들에 대한 ICP-OES 및 ICP-MS에 의한 분석 결과 중금속과 As, Co 에 대하여 98 ~ 105%의 회수율을 얻을 수 있었으며, ICP-MS에 의한 As, Co 측정 시 일어나는 매질효과에 의한 방해는 CH<sub>4</sub>에 의한 DRC로 극복 가능하였다. As, Co, Cr, Fe, Ni, Cu, Zn, Cd, Pb 등의 중금속을 ICP-OES 및 ICP-MS로 정량할 수 있는 방법을 최적화하였으나, 추후 표준물질에 인증되어 있지 않은 성분들에 대해서도 추가적인 정량성 확보에 대한 연구가 필요함을 알 수 있었다.

PT-019 [환경]

**탄소튜브를 이용한 인공 미세먼지 생성 및 생성온도에 따른 인공 미세먼지  
구성성분 변화: 유기탄소, 무기탄소, 다환방향족탄화수소 중심으로**

**조성원<sup>1</sup>, 최성진<sup>1</sup>, 김용현<sup>1,2\*</sup>, 이규홍<sup>2,3\*</sup>**

<sup>1</sup>안전성평가연구소 흡입독성연구그룹, <sup>2</sup>과학기술연합대학원대학교 인체 및 환경 독성학과,

<sup>3</sup>안전성평가연구소 호흡기질환 제품 유효성평가연구단

\*Corresponding authors: yonghyun.kim@kitox.re.kr and khlee@kitox.re.kr

현재 미세먼지의 독성영향연구는 역학조사 자료의 통계적 해석에 의한 연구가 대부분이다. 미세먼지에 의한 인체독성을 확인하기 위해서는 동물 및 세포를 활용한 독성연구가 요구된다. 그러나 실제 미세먼지에 대한 구성성분의 종류 및 농도가 다양하고, 독성평가 수준의 고농도 미세먼지 시료를 확보하는데 어려움이 따르기 때문에 미세먼지를 활용한 in vitro 및 in vivo 수준의 독성평가가 어려운 실정이다. 본 연구에서는 미세먼지 독성평가연구를 수행하기 위한 실제 대기 내 미세먼지를 모사한 인공 미세먼지를 생성하였다. 탄소튜브에 전류 스파크를 일으켜서 탄소 기반의 인공 미세먼지를 생성하였다. 이때 인공 미세먼지 생성 챔버의 온도(25, 200, 400, 600, 800°C)를 다양하게 설정하여 인공 미세먼지 생성 조건에 따른 구성성분들의 변화 및 실제 미세먼지 구성성분과 비교분석 하였다. 인공 미세먼지 농도는 생성 온도가 25~ 600°C 까지 매우 일정한 수준을 기록하였다( $1,444 \pm 181 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). 생성 온도가 800°C 일 때 인공 미세먼지의 농도는 약 3배 이상 증가하였다( $6,181 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). 유기탄소(organic carbon, OC)는 인공 미세먼지 생성온도가 800°C일 때 농도가  $5,879 \pm 1,001 \mu\text{g}/\text{m}^3$  수준으로 인공 미세먼지의 대부분을 차지하였다. 이와 반대로 무기탄소(elemental carbon, EC)는 인공 미세먼지 생성온도가 상승함에 따라 농도가 줄어드는 경향을 확인하였다(EC concentration =  $572 \pm 113 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (25°C),  $302 \pm 16.0 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (800°C)). 총 인공 미세먼지의 농도수준은 세계보건기구(World Health Organization, WHO) 권고기준인 하루  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 의 100배 이상 높은 수준에 해당하며, OC/EC의 비율도 인공 미세먼지 생성온도 조건에 따라 약 1.5~20 범위로 제어할 수 있다. 인공 미세먼지 내 다환방향족탄화수소(poly aromatic hydrocarbon, PAH; 벤젠고리 3~6 범위의 13종 PAHs)는 생성 온도에 따라  $0.04 \sim 260 \mu\text{g}/\text{m}^3$  농도수준으로 생성되었다(실제 대기 내 PAH의 평균농도는 수  $\text{ng}/\text{m}^3$  수준). 벤젠고리 개수가 3개 이하일 때 인공 미세먼지 생성온도 증가에 따라 농도가 감소하는 경향을 보였으며, 벤젠고리 개수가 4개 이상으로 증가할수록 인공 미세먼지 생성온도 증가에 따른 농도증가 폭이 급격하게 상승하였다. 예를 들어 1급 발암물질로 알려진 benzo[a]pyrene의 경우, 인공 미세먼지 생성온도 400°C 이하에서 평균  $0.35 \mu\text{g}/\text{m}^3$  농도를 기록하였으나, 600°C에서  $11.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , 800°C에서  $112 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 으로 급격한 농도증가를 확인하였다. 본 연구에서 생성한 인공 미세먼지는 실제 미세먼지 내 탄소의 수백 배 이상의 독성평가가 용이한 농도수준으로 제어가 가능하다. 또한, 인공 미세먼지 내 OC/EC 및 PAHs 간 농도비를 인공 미세먼지 생성온도를 이용하여 조절함에 따라 다양한 종류의 실제 미세먼지를 모사한 맞춤형 인공 미세먼지의 생성이 가능한 것을 확인하였다.

본 연구는 안전성평가연구소 주요사업 [KK-1905-02]와 [KK-1904] 지원으로 수행되었음.

PT-020 [환경]

**Chemical signature of road dust as a potential discriminant factor for environmental pollution sources**

**김은아<sup>1\*</sup>, 임유영<sup>1</sup>, 김주미<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>한국화학연구원 화학안전연구센터

\*Corresponding author: ekim@kRICT.re.kr

This study suggests a new set of chemical profiles that act as footprints from the surrounding atmospheric environment. We examined the chemical compositions of fine particles contained in road dust in relation to surrounding environmental factors such as potential pollution sources. The top 3 emission sources for CO, NH<sub>3</sub>, NO<sub>x</sub>, PM<sub>2.5</sub>, SO<sub>x</sub>, and VOCs were extracted (13 different types of industries in total) based on air pollutant emission survey results in 2015. A total of 28 sites were selected to include the top 3 emission spots for each of 13 emission sources. Elemental compositions including metal contents and volatile or semi-volatile organic compounds were included to constitute comprehensive chemical profiles of solid road dust samples. A parallel factor analysis using excitation-emission matrices was applied to the water-extractable constituents in the re-suspended fine particulate matter (RPM). The fluorescence constituents of sub-micrometer RPM varied to greater extents between the different sites compared with those of relatively coarse RPMs. A principal component analysis (PCA) method was employed to capture various correlations between chemical features. The scores for three principal components were examined to find out if the air pollutant emissions from the vicinity had resulted in conspicuous differences in chemical compositions of fine road dust. Site classification based on the PCA results agreed fairly well with the group assignment of the sampling sites based on the main air pollutants from which the sampling sites may under constant influence.

PT-021 [환경]

## 한강수계에서의 차아염소산나트륨 적용성 평가

백영애, 이광제, 이희진, 정종순, 최영준\*

서울특별시 서울물연구원

\*Corresponding author : youngjune@seoul.go.kr

### 1) 연구목적

국내 정수처리에서 원수내 암모니아파과 및 정수 소독제로서 액화염소를 주로 사용하고 있으나, 최근 안전성 문제로 일부 정수장에서는 시판 또는 발생기 차아염소산나트륨으로 대체하고 있어, 서울시에 서도 한강수계에서 기존액화염소를 차아염소산나트륨으로 대체할 경우 수처리 영향 등 현장 적용성을 평가하고 최대투입가능농도 및 최적 저장조건을 제시하고자 했다.

### 2) 실험방법

(수처리효율평가) 2L 차에 한강원수를 채워 차아염소산나트륨을 각각 0, 1, 2, 3, 4, 5mg/L를 주입하고 도수 시 배관흐름을 감안하여 50rpm으로 교반한 후 취수장에서 정수장 착수정까지 도달시간 (약4.5시간)을 고려하여 빛을 차단한 상태에서 반응시킨 후 각 시료의 pH, THMs, Bromate, NH<sub>3</sub>-N 등을 분석하였다. (유지관리) 시판차염을 온도조건(10,20,30°C)에서 보관기간별 (0, 5, 10, 20, 30일)로 브롬산염, 클로레이트, 유효염소 변화를 분석하였다.

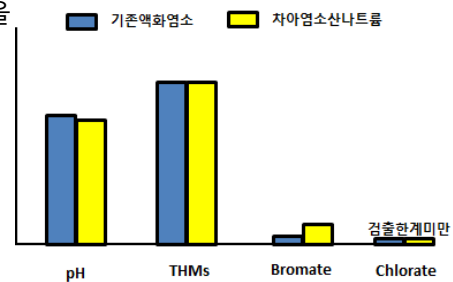


Fig. Lab test results

### 3) 연구결과

한강원수에 차아염소산나트륨 사용에 따른 수처리영향 평가결과, 투입농도를 0~5mg/L까지 사용하여 도 pH변화는 원수대비 0.1정도 증가하여 기존액화염소사용(0.4까지 감소)에 비해 큰 영향을 주지 않는 것으로 나타났다. 소독부산물의 경우 총트리할로메탄은 0.01~0.02mg/L로 기존염소와 유사한 수준으로 검출되었고, 브롬산염은 0.0005~0.003mg/L 정도 검출되었다. 이는 차염에 함유된 브롬산염(약85ppm, 12%기준)에 의한 것이며 먹는물 수질기준 (0.01mg/L)이하로 전·중·후염소 실제 투입률이 3~5mg/L이내 임을 감안하면 실제 발생농도는 더 낮을 것으로 판단된다. 클로레이트는 검출한계인 0.03mg/L이하 수준을 보였다. 또한 암모니아성 질소파과는 차아염소산나트륨 사용 시 기존액화염소와 동일효과를 나타내었다.

먹는물 수질기준항목인 브롬산염 기준 0.01mg/L를 초과하지 않는 차아염소산최대투입가능농도는 12% 기준으로 30mg/L이내가 적합한 것으로 나타났으며, 차아염소산나트륨 최적저장조건은 20°C이하에서 30일 이내로 설정하였다.

### 4) 고찰

한강원수에 전처리 및 소독제로서 차아염소산나트륨은 기존액화염소와 유사한 수처리 효율을 나타내며, 기존액화염소저장시설을 활용하여 적정보관조건(20°C이하, 30일 이내)에서 현장 적용 가능한 것으로 판단된다.

PT-022 [환경]

## 가축밀집지역 및 양돈액비 집중살포지역 지하수의 수질특성

송영철\*, 김수정, 서병원, 김병현, 양민영, 현영실

제주특별자치도 보건환경연구원

\*Corresponding author: syc6903@korea.kr

지하수의 질산성질소는 다양한 인위적 오염원으로부터 크게 증가하고 있으며, 특히 집중적인 농업 활동과 산업시설에서 배출되는 폐수, 정화조 및 축산 시설에서 나오는 폐기물과 관련되어 있다. 특히, 농경지에 뿌려지는 화학비료와 양돈액비는 식물에 이용되지 못 할 경우 지하수 오염으로 작용하고, 지표 수계에 유입되어 부영양화를 일으키고 있다. 최근 제주지역의 양돈사육은 과거에 비해 2배 이상 증가하고, 가축폐기물 해양투기 금지로 인한 지하수 오염이 가속화되면서 사회적 문제로 부각되고 있다. 따라서 본 연구는 제주도 8개 지역 120개소를 대상으로 2018.2.1. - 11.30까지 10개월간 질산성질소 등 13개 항목을 분석하였으며, 성분별 수질특성과 공간분포, 오염원별 상관관계를 분석하여 제주지하수에 대한 수질오염평가를 실시하고 지하수 수질보전관리를 위한 기초자료로 활용하고자 한다.

지역적 특징은 양돈장이 밀집되고 양돈액비 집중살포 지역인 한림, 한경, 애월, 양돈장 수는 적으나 양돈액비 살포량이 많은 구좌, 성산, 나머지 대정, 안덕, 조천지역은 상대적으로 양돈장 및 양돈액비 살포는 적으나 농경산업 발달로 인해 화학비료 사용량이 많다.

질산성질소 평균 농도는 농업활동이 활발한 대정 15.0 mg/L 및 한경 12.1 mg/L, 양돈장 밀집 및 양돈액비 집중살포 지역인 한림 9.9 mg/L, 양돈장은 상대적으로 적으나 양돈액비 집중살포지역인 구좌 4.4 mg/L로 측정되어 화학비료에 영향을 많이 받는 지역이 더 높았다.

질소 동위원소비 평균은 한림 10.2 ‰, 애월 7.1 ‰, 한경 6.5 ‰, 구좌 6.1 ‰, 조천 5.9 ‰, 안덕 4.2 ‰, 대정 4.1 ‰ 및 성산 1.8 ‰ 순으로 양돈장이 밀집되고 양돈액비 집단살포지역이 높았다. 화학비료 그룹과 동물성유기물 그룹에서 질산성질소와 수소이온 농도는 -0.6 이상의 부의 상관성을 보였고, 전기 전도도, 염소이온, 나트륨, 칼슘 및 마그네슘과는 0.6이상의 높은 정의 상관성을 가지고 있다. 그러나 중탄산이온, 칼륨과의 상관성은 전자인 화학비료 그룹에서 각각 0.63, 0.75로 높았지만 후자인 동물성유기물 그룹에서 각각 0.02, 0.24로 낮아 질산성질소와 동반 용탈이 미미한 것으로 보여진다. 질소와 산소 동위원소비의 상관관계는 화학비료 그룹에서 -0.14, 동물성유기물 그룹에서 0.77으로 큰 차이를 보여, 질산화과정에서 화학비료 그룹인 경우는 토양 공극에 있는 수분(산소)을, 동물성유기물 그룹은 동물성유기물질의 무거운 산소를 이용하기 때문인 것으로 여겨진다.

따라서 제주지하수는 가축폐기물 등 동물성유기물질의 영향을 많이 받는 지역보다 농사용 화학비료에 의한 영향을 많이 받는 지역에서 질산성질소 농도가 더 높게 나타났다. 그러나 질소 동위원소비는 동물성유기물질에 의한 영향을 받는 지역은 높은 값을, 화학비료에 의한 영향을 받는 지역은 낮은 값을 보여 오염원에 따른 수질특성이 뚜렷하게 나타났다.



PT-023 [환경]

**Ionic Composition and Pollution Characteristics of  
Precipitation at Jeju Island in 2018**

**Hee-Ju Kang, Jun-Oh Bu, Sook-Young Park, Geon-Yoon Kim,  
Jung-Min Song, Chang-Hee Kang<sup>★</sup>**

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

<sup>★</sup>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 in 2018. The total number of precipitation samples was 64, and their ionic components were analyzed by ion chromatography. From the comparison by ion balance, electric conductivity, and acid fraction, their correlations showed good linearity in the range of 0.982~1.000, indicating a good quality of the analytical data. During the study periods, the volume-weighted mean pH and electric conductivity were 4.9 and 28.9  $\mu\text{S}/\text{cm}$ , respectively, showing weak acidic precipitations below pH 5.0 with the frequency of 67.2%. The ionic strength of precipitation was  $0.33\pm 0.42$  mM, indicating 28.1% 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  $\text{Cl}^- > \text{Na}^+ > \text{Mg}^{2+} > \text{nss-SO}_4^{2-} > \text{NO}_3^- > \text{NH}_4^+ > \text{H}^+ > \text{nss-Ca}^{2+} > \text{K}^+ > \text{HCOO}^- > \text{CH}_3\text{COO}^- > \text{HCO}_3^- > \text{F}^- > \text{CH}_3\text{SO}_3^-$ . The major marine ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ), secondary pollutants ( $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{nss-SO}_4^{2-}$ ) and soil ( $\text{nss-Ca}^{2+}$ ) species have contributed to the total ionic components of precipitation in Jeju area by 79.2%, 13.5%, and 1.6%, respectively. The acidity contributions by sulfuric and nitric acid were 48.8% and 40.1%, respectively. Meanwhile the acidity contributions by formic and acetic acids were 6.2% and 4.9%, 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.

PT-024 [환경]

**Chemical Compositions of Atmospheric PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> Particles during Asian Dust Days at Mt. Halla-1100 Site of Jeju Island in 2017**

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

Department of Chemistry and Cosmetics, Jeju National University

\*Corresponding author: changhee@jejunu.ac.kr

Collection of the atmospheric fine particulate matter samples, i.e. PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> was made at the 1100 m site of Mt. Halla in Jeju Island, which is a background sites located at the planetary boundary layer (PBL), in 2017. Their ionic and elemental species were analyzed, in order to examine the composition and pollution characteristics related to the Asian-dust events. The mass concentrations of PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> were  $80.6 \pm 19.5 \mu\text{g}/\text{m}^3$  and  $16.1 \pm 5.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , during Asian dust periods, but  $20.3 \pm 14.7 \mu\text{g}/\text{m}^3$  and  $10.7 \pm 7.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , respectively, during the normal days. Concentrations of the major secondary pollutants such as  $\text{nss-SO}_4^{2-}$ ,  $\text{NO}_3^-$ , and  $\text{NH}_4^+$  were 2.4, 1.7, 0.8  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  for PM<sub>10</sub> and 2.1, 0.3, 0.6  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  for PM<sub>2.5</sub>, respectively. The compositions of major secondary pollutant ( $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{nss-SO}_4^{2-}$ ,  $\text{NO}_3^-$ ), marine ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ) and soil ( $\text{nss-Ca}^{2+}$ ) species were 51.9%, 7.2%, and 33.4% for PM<sub>10</sub>, and 83.6%, 3.8%, and 9.2% for PM<sub>2.5</sub>, respectively, during Asian-dust periods. Especially, the concentrations of oil-originated  $\text{nss-Ca}^{2+}$  increased noticeably up to 3.2  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  and 0.3  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  respectively in PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> particles during Asian-dust periods, showing each 11 and 10 times higher concentrations compared to the non-event days. Furthermore, the elemental compositions of major soil (Al, Fe, Ca), marine (Na, Mg) and anthropogenic (Zn, Pb) species were 71.5%, 13.4%, 0.2% respectively during Asian-dust periods, showing the remarkable increase for soil-originated components. The neutralization factors by  $\text{NH}_3$  in PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> particles were 0.59 and 0.64 during Asian dust periods, and 0.83 and 0.94, respectively, during non-event days. Meanwhile, those by  $\text{CaCO}_3$  were 2.03 and 0.34 during Asian dust periods, but 0.13 and 0.02, respectively, during non-event days. Due to the back trajectory analysis for the study period, it was shown that the concentrations of anthropogenic and soil-originated species of both PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> particles were high when the airflow moved from China continent to Jeju Island.

PT-025 [환경]

## 천일염 중 미세플라스틱분석을 위한 라만 및 적외선 현미경 분석연구

Analysis of Microplastics in Sea Salts by Raman and FT-IR Microscopy

조수아<sup>2</sup>, 조원보<sup>2</sup>, 김수빈<sup>1</sup>, 정재학<sup>1</sup>, 김효진<sup>2,\*</sup><sup>1</sup>한국분석과학연구소, <sup>2</sup>\*동덕여자대학교 약학과

\*Corresponding author: hyojkim@dongduk.ac.kr

미세플라스틱이 해양에서 대량으로 발견되어 생태계에 큰 위협이 되고 있다. 국내에서도 우리가 실생활에서 직접 섭취하거나 음식에 많이 사용되는 천일염에서 미세플라스틱이 검출되었다는 보고가 되어 많은 우려가 되고 있다. 미세플라스틱이란 주로 5 mm 이하의 작은 플라스틱 입자로 정의하고 있으며 마이크로 비즈와 같이 생산 당시부터 작게 만들어 치약이나 Rinse-off 화장품 중 각질 제거제 및 섬유유연제 등에 들어있었던 1차 미세플라스틱, 각종 전기전자 및 소비자 제품에서 사용되는 플라스틱 부품 또는 각종 포장 용기들이 사용 중 또는 사용 후에 인위적 또는 자연적으로 마모되어 크기가 5 mm 이하로 유출이 되는 2차 미세플라스틱으로 구분한다. 미세플라스틱을 분석하기 위하여는 성분, 크기, 모양, 조성 등에 대한 정보가 필요하며 이를 위하여 20 µm 크기까지는 FT-IR FPA (Focal plane array microscopy)이 가장 많이 사용되고 있다. 그러나 최근에는 20 µm 이하의 미세 및 이론적으로 300 nm 까지 측정이 가능한 Raman microscopy을 이용한 나노 플라스틱 분석법이 함께 많이 연구되고 있다. 본 연구에서는 시판 천일염 10g을 100 ml 삼차 증류수에 녹인 후 30% H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 30 ml 를 넣고 10시간 방치하여 유기물을 녹인 후 25.4 mm x 25.4 mm 크기의 45 µm mesh filter로 여과 한 후 건조한 동일 filter 시료를 각각 FT-IR microscopy 과 Raman microscopy을 사용하여 미세플라스틱을 분석하였다. FT-IR microscopy인 경우 70 µm에서 100 µm까지의 3개의 Polyethylene (PE) 와 170 µm의 Polypropylene (PP) 가 검출되었다. Raman microscopy에서는 45 µm filter를 사용하였음에도 불구하고 필터의 일부에 걸쳐 존재하는 10 µm, 30 µm의 PE와 50 µm에서 120 µm까지의 총 9개의 PE와 1개의 40 µm 크기의 Polystyrene (PS) 가 검출 되었다. 검출된 PE중에는 PE와 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>가 함께 결합한 70 µm 미세플라스틱과 원형이 아닌 200 µm x 30 µm, 150 µm x 20 µm의 비정형 PE도 함께 측정되었다. 본 연구에서 측정된 10.0 g의 시료에 측정된 미세플라스틱 숫자는 최근 <sup>1</sup>중국에서 판매되는 시판 천일염 소금 중에 FT-IR microscopy로 모두 550~681 particles/kg 가 측정 되었다는 연구 결과와 비교할 때, FT-IR microscopy인 경우 유사한 결과가 나왔으나, Raman microscopy으로는 거의 2개에 해당하는 미세플라스틱이 검출되었다. 이러한 이유로는 Raman microscopy로 50 µm 이하의 미세 플라스틱이 검출되었기 때문으로 생각된다. 또한 미세플라스틱 외에도 총 100 개 이상의 입자들이 측정되었으며 이들의 조성을 보면 5개의 셀룰로스, 16개의 glass류, 35개의 carbon, 28개의 mineral등과 확인이 되지못한 19개의 입자들이 측정되었다. 따라서 Raman microscopy는 50 µm 이하의 미세플라스틱을 측정할 수 있을 뿐 만 아니라 다양한 물질들을 확인 할 수 있는 분석법의 가능성을 보여주었다.

<sup>1</sup>Dongqi Yang *et. al*, *Environ. Sci. Technol.* 2015, **49**, 13622-13627

PT-026 [환경]

## 금속유기골격체를 활용한 황화합물질들의 탈착특성 비교연구

Comparison of Desorption Characteristics of Sulfur Compounds  
Using Metal-Organic Frameworks

**이영재, 김기현\***

한양대학교 건설환경광학과

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

사회가 발전함에 따라 산업단지와 인접한 주거지역 사이에 악취물질로 인한 관련 민원이 증가하고 있는 추세이다<sup>1</sup>. 악취물질의 경우 일반적인 대기오염 물질과는 달리 지역적이고 발생원에 따라 취기와 종류가 매우 다양하고 인간에게는 정신적·신체적 피해를 유발하는 것으로 알려져 있다<sup>2, 3</sup>. 특히 황화수소(Hydrogen sulfide, H<sub>2</sub>S)의 경우 석유정제 및 약품제조 등 다양한 곳에서 발생하고 있으며, 폭발성이 있는 무색의 자극적인 계란 썩은 냄새를 가지는 기체로서 대표적인 악취물질로 알려져 있다. 뿐만 아니라 강한 부식성으로 동·식물과 재산상에 피해를 주는 유독성 기체이다. 이러한 문제를 해결하기 위해 환경부에서는 복합악취를 위시한 지정악취물질 22종을 선정하여 법적으로 관리하고 있다<sup>2</sup>. 일반 대기환경 중 존재하는 극미량의 악취성분을 분석은 대기시료를 필드에서 흡착관에 흡착시킨 후 GC에 도입하여 분석하는 방법이 경제적 방법으로 알려져 있다<sup>4</sup>. 그러나 황화합물의 경우 흡착관법으로 포집 할 경우 흡착제에 대한 흡착효율 저하와 보관상의 안정도 문제가 발생할 수 있다. 따라서, 본 연구에서는 황화합물의 흡착관법분석을 위한 기초 연구로서 다양한 흡착제를 활용한 흡착능 평가를 진행하고자 하였다. 이를 위해 최근 활발하게 연구가 이루어지고 있는 다양한 금속유기골격체와 여러 가지 형태로 개질한 활성탄을 활용하여 황화합물(황화수소, 메틸머캅탄, 황화메틸, 이황화메틸)에 대한 흡착능을 평가하였다. 본 실험을 위해 각각의 흡착제에 2 ppm 수준의 농도로 조제한 4가지 혼합 황화합물을 주입하여 AS/TD/GC/MS기반을 활용하여 흡착능을 비교하고자 하였다. 본 연구를 통해보다 쉽고 정확한 황화합물의 시료채취 및 분석 기술 발전에 일조하고자 한다.

1. 환경부 (2007) '6년 악취 민원 실태분석 및 '7년 악취 관리방향, 환경부, pp. 1~6
2. 환경부 (2008) 2008 환경백서: <http://webbook.me.go.kr/DLi-File/091/023/002/186050.pdf>
3. Shusterman, D., 1992. Critical review: the health significance of environmental odor pollution. Archives of Environmental Health: An International Journal 47, 76-87.
4. EPA, U.S., 1999. Compendium Method TO-17: Determination of Volatile Organic Compounds in Ambient Air Using Active Sampling Onto Sorbent Tubes.

PT-027 [환경]

## 다양한 기능성 물질의 황화수소 흡착 성능평가

Adsorptive performance of various functional materials against hydrogen sulfide

한솔, 김기현\*

\*한양대학교 건설환경공학과

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

하 · 폐수처리장, 축사 및 석유 정제공장 등에서 주로 발생하는 황화수소성분의 경우 달걀 썩은 냄새, 하수구 냄새와 같은 불쾌감을 주는 대표 악취물질로 알려져 있다. 황화수소는 불쾌감을 주는 것뿐만 아니라 부식성이 강하며 발화점이 낮고 발화 범위가 넓어 폭발에 주의해야하는 물질로 알려져 있다<sup>1</sup>. 황화수소를 제거하기 위한 방법으로 습식 세정, 흡착제거, 직접 연소 및 촉매 산화법 등이 있다. 그 중 흡착법의 경우 폐수처리공정이 필요하지 않으며 설치비용이 저렴하고 유지하기 쉬우며 제거율이 높다는 장점이 있다<sup>2</sup>. 대표적인 상용 흡착제로 활성탄과 제올라이트가 있으며, 이를 활용한 효율을 높이기 위한 많은 연구가 진행 중에 있다. 그러나 활성탄을 사용할 경우 황화수소가 흡착제와 비가역적으로 반응하여 세공이 막히는 제한점이 있다. 또한, 제올라이트의 경우 높은 선택성을 가지고 있으나 상대적으로 흡착용량이 작다는 단점이 있다<sup>3</sup>. 이러한 단점을 극복하기 위해 최근 다양한 신소재(금속 유기골격체, Metal organic frameworks: MOFs)의 개발이 이루어지고 있으며, 이를 흡착제로서의 활용가능성에 대해 많은 연구가 활발히 진행 중에 있다<sup>4</sup>.

본 연구에서는 신소재 물질 중 다양하게 개질한 MOF-199 (16종)과 CUK (3종)를 활용하여 황화수소의 흡착능을 평가하고자 하였다. 이를 위해, 각각의 신소재 물질을 5 mg씩 각각의 석영관에 담아 황화수소가스를 흘려주는 방식으로 평가를 진행하였다. 이때 Large volume injection (LVI)과 GC/BID시스템을 연계하여 황화수소가스를 연속적 주입 및 분석이 이루어지도록 하였다.

### 참고문헌

1. G. D. Considine, 'Van Nostrand Reinhold encyclopedia of chemistry', Wiley-Interscience, 2005.
2. 이병관, 이상훈, 탁성제, and 이. J. 한국기후변화학회지, **8**(1), 51-56(2017).
3. A. Peluso, N. Gargiulo, P. Aprea, F. Pepe, and D. Caputo, *Separation & Purification Reviews*,**48**(1), 78-89(2019).
4. I. Ahmed and S. H. Jhung, *Materials today*,**17**(3), 136-146(2014).

PT-028 [환경]

## 휘발성 유기화합물 방출시험 방법의 전처리 과정에 관한 고찰

김상욱<sup>1</sup>, 김만구<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>강원대학교 환경학과, <sup>2,\*</sup>강원대학교 환경융합학부

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

제품의 휘발성 유기화합물의 방출시험 방법은 완제품 전체를 가지고 시험을 하는 것이 일반적이다. 그러나 제품의 크기나 시험장치에 따라서 일부분 자르거나 파쇄하여 휘발성 유기화합물의 방출시험 방법을 진행하고 있다. 이 연구에서는 마이크로 챔버와 같은 용적이 적은 시험 장치를 이용할 경우 자르는 과정이나 부위에 따라서 방출시험 결과는 큰 차이를 나타내고 있다. 제품에 따라서 부득이하게 자르거나 파쇄할 경우 휘발성 유기화합물의 손실을 줄이기 위하여 드라이아이스를 이용하여 휘발성 유기화합물의 손실을 방지해 볼 수도 있다.

이 연구에서는 휘발성 유기화합물의 손실을 줄이기 위하여 드라이아이스를 이용한 전처리 냉각 과정의 효과에 대하여 검토하였다.

본 연구에서는 휘발성 유기화합물의 손실을 막기 위해 상자 안에 드라이아이스를 넣은 뒤 스테인리스 용기를 올려두고 Thermal Couple(열전대)을 이용하여 높이에 따른 7개 지점(드라이아이스, 스테인리스 용기 표면, 용기 표면 위 2 cm, 5 cm, 10 cm, 표면에 접촉된 생리대 조각, 적층 된 생리대 조각)에서의 온도를 측정하였다. Thermal Couple(열전대)는 dry ice, 얼음물, 실험실 상온으로 보정하였으며, 데이터로 거로 변환하여 측정하였다.

Thermal Couple(열전대)를 이용한 온도는 드라이아이스  $-76.29\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 스테인리스 용기 표면  $-28.05\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 용기 표면 위 2 cm, 5 cm, 10 cm 각각  $9.64\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $20.92\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $22.60\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 표면에 접촉된 생리대 조각  $3.26\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 적층 된 생리대 조각은  $9.86\text{ }^{\circ}\text{C}$  로 나타났으며, 스테인리스 용기 표면과 드라이아이스가 접촉되지 않은 부분에서의 용기 표면 온도는  $4.05\text{ }^{\circ}\text{C}$ 까지 나타냈다.

인체의 독성을 나타내는 대표적인 휘발성 유기화합물로 벤젠과 스타이렌 등은 상온에서는 높은 증기압을 나타낸다. 따라서 드라이아이스로 냉각한 전처리 과정에서 휘발성 유기화합물질의 손실을 효과적으로 방지할 수 없을 것으로 판단된다.

PT-029 [환경]

## 테러·재난 현장용 유해가스 채취장치의 개발과 성능평가

정명훈<sup>1</sup>, 박민희<sup>1</sup>, 김만구<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>강원대학교 환경학과, <sup>2,\*</sup>강원대학교 환경융합학부

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

최근 테러집단의 도발 위협이 높아지면서 국내에서도 화학 테러 가능성이 높아지고, 화학물질 폭발과 같은 재난·사고가 증가하고 있다. 이러한 '위험사회'의 도래와 함께, 독성 가스, 현장 유류 채취 등을 채취, 분석할 수 있는 기술과 운용할 장치와 시스템의 개발 구축이 국내에도 필요하다.

화학물질 테러에 선제적으로 대응하기 위한 탐지장비의 개발, 현장의 신속한 대응을 통해 2차 피해를 예방하고 현장 증거를 확보할 기체분석센서, 기체채취기술, 휴대용/이동형 장치 기술개발 등 원천기술의 개발로 국민 안전을 확보하며 세계시장을 선도할 필요가 있다. 또한 이는 현장에서의 신속한 대응을 위해서 수요자의 요구에 따른 연구자의 핵심 요소 기술 개발과 현장 활용성을 위한 최적화를 요구한다.

본 연구에서는 사건 현장에서의 기체채취기술로서 시료채취장치 일차 시제품 제작 및 성능평가를 진행하고 있다. 장치는 블루투스 송수신을 통해 펌프 및 솔레노이드 밸브 등을 현장에서 원격제어 할 수 있도록 제작하였다. 시료채취장치는 구경이 다른 3개의 튜브와 솔레노이드 밸브 유로 변경을 통해 밸브의 조작 없이 유로들의 유량에 따라 에어커튼을 형성 하거나 제거하여 설정한 시간동안 시료채취를 가능하도록 제작하였다. 시료채취 장치는 30 cm(W) X 30 cm(D) X 10 cm(H)의 시판되는 방수용 컨트롤 박스에 구성하여 제작하였다.

제작된 시료채취장치의 원격통신을 통한 조작은 콘크리트 건물의 4층 까지, 같은 층에서 벽면이 4개 정도 겹친 50 m 정도 이격 거리에서 송수신이 가능하였다. 시료의 차단과 유입을 결정하는 장치의 에어커튼은 3ml/min 정도의 적은 유량으로도 훌륭히 작동이 되는 것을 확인하였다. 장치의 시료 채취 재현성은 퍼미에이터로 12.1 mg/m<sup>3</sup>의 톨루엔 표준가스를 연속 제조하여 반복 측정하였다. 다목적 원격 시료채취 장치를 이용하여 연속적으로 3회 채취한 톨루엔의 분석값은 536.2 ng, 546.2 ng, 531.3 ng으로 1.4 %의 상대 표준편차로 매우 재현성 있는 반복 채취 결과를 나타내고 있었다. 대조용 표준시료 채취장치를 이용한 톨루엔의 채취량과 다목적 원격 시료채취장치로 채취한 톨루엔 양간에는 3.7 %의 상대오차를 나타냈다. 이와 같이 개발된 다목적 원격 시료채취장치 정밀성과 정확성을 가진 원격시료채취임을 확인 하였다.

PT-030 [환경]

## QSAR analysis for predicting acute inhalation toxicity

Se Young Park<sup>1</sup>, Dong Ryeol Shin<sup>1</sup>, Hyung Sik Jo<sup>1</sup>, Sung Kwang Lee<sup>1</sup>\*

<sup>1</sup>\*Department of Chemistry, Hannam University

\*Corresponding author: leesk@hnu.kr

Acute inhalation toxicity is a toxicity that may be caused by short-term exposure of inhalable substances (gas, volatile or particulate matter). It is important to workers exposed directly to the industrial environment and to the general public using household chemicals. Inhalation toxicity assessment are based on toxicity assessment that are generally aimed at rodents, but with the opposition of recent animal rights groups, they have sought alternative assessment methods that can improve animal-human correlations. The objective of this study is to create a reliable model for predicting inhalation toxicity LC<sub>50</sub> values for organic chemicals using QSAR method.

The 99 LC<sub>50</sub> values from OECD TG403 for model development were collected from echempotal website. The data were divided into training set of 59 chemicals, test set of 40 chemicals. The molecular descriptors were calculated using the PreADMET program and The MLR, SVM, PLS and consensus models were optimized through the RapidMiner program. The best model was the MLR-SVM consensus model with cross-validation R<sup>2</sup> value of 0.857. In addition, internal validations were performed through bootstrap validation and y-scrambling, and the scope of the model was defined by setting applicability domain(AD).

### ※ Acknowledgement

This research was supported by a grant (18182MFDS466) from the Ministry of Food and Drug Safety in 2019.



PT-031 [환경]

**연속자동측정기기 데이터 신뢰성 향상 방안에 대한 연구  
- 정도관리 시료 적용에 따른 총유기탄소 측정기 운영 사례**

**신태섭, 조남준\***

한국기술교육대학교 에너지신소재화학공학과

\*Corresponding author: njuncho@koreatech.ac.kr

우리나라는 수질오염을 방지하고 관리하여 위하여 수계 통합관리를 시행하고 있으며, 이를 위해 전국 하천에 70개소의 수질자동측정시설과 하수처리장 등의 방류구 955개소에 수질 TMS를 설치하여 운영하고 있다. 각각의 측정소에서는 유기물, 질소, 인 등의 오염지표를 수질자동측정기기를 통해 지속적으로 모니터링 하고 있으며, 특히 TMS에서는 배출기준 초과 여부를 감시하고 있다.

한편 수질모니터링을 위해 사용되는 다양한 수질자동측정기기들은 기본적으로 '수질오염공정시험기준'의 시험방법을 자동화시킨 기기들이지만, 다양하게 변화하는 수질을 정확하게 측정하고 있는지에 대한 별도의 보증이 필요하다. 이를 위해 정도관리지침에 따른 정도보증사업계획을 수립하여 측정기기의 정도관리를 수행하고 있다. 그러나 여전히 측정데이터의 신뢰성 향상을 위한 여러 가지 방안이 필요한 실정이다.

따라서 본 연구에서는 연속으로 환경시료를 모니터링하고 있는 총유기탄소 측정기에 정도관리 시료를 일 1회 측정하도록 하였고, 환경시료 측정결과, 정도관리 시료 측정결과 및 측정기기 관리 내역을 비교 분석하였다.

PT-032 [환경]

**Determination of Bromate in Artificial Seawater  
applying Post-column Reaction and UV/VIS Detection**

**설혜원, 이경민, 김정례<sup>1,\*</sup>**

<sup>1,\*</sup>제이엘사이언스 분석기술연구소

\*Corresponding author: shw@jlsience.com

The ozonolysis of bromide-containing waters results in the formation of the potential carcinogen bromate. Ozone is also widely used to sterilize supply and effluent water for aquaculture systems to remove pathogens. One of the major challenges is the control the levels of the disinfection by-products such as bromate due to its carcinogenic and toxic characteristics.

In this study, the IC-PCR-UV/VIS method with high capacity column has been applied to the determination of bromate in artificial seawater samples. This configurations were evaluated for their efficacy to eliminate the interference caused by the high concentration of matrices present in seawater, such as chloride and sulfate. The Metrosep Carb 2 column was chosen because of its ability to work with several g/L NaCl as eluent. It is enabled to be closer to the samples type and created less interferences during the measure. Chromatographic determinations apply anion-exchange chromatography followed by tri-iodide reaction as post column chemistry according to EPA Method 326.0. This method is also useful for the measurement of sample include a high concentration matrices such as saline water, brackish water and so on.

PT-033 [환경]

## 폐수 내 Sb Total 농도 및 산화 상태에 따른 분리 분석

최제남, 성정문

SK Innovation Global Technology Analysis Lab

2019년부터 물 환경 보전법 특정수질유해물질로 Sb(Antimony)이 신규 추가됨에 따라 공장 폐수 내 Sb 농도(<0.2ppm)의 안정적 관리 및 Sb 저감 기술 개발을 위해 폐수 내 간섭원소를 제거하고 Sb 산화 상태에 따른 농도 분석법을 개발하였다.

폐수 내 Sb 농도는 ICP-OES(Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectrometry) 장비로 분석하였다. 폐수 내 Sb 농도에 비하여 Na이 과량(0.7~0.9 wt.%) 존재하여 ICP 장비에 염이 축적되어 장비 Maintenance 주기가 짧아지고 분석 결과의 정확도가 낮아지는 문제점이 있다. 이온 교환을 통해 폐수 내의 Na을 1 ppm 이하까지 제거가 가능하였으며, 장비 Damage를 줄임과 동시에 분석 결과의 % RSD(1.0 %)와 정량 한계를 (0.03 ppm)까지 낮출 수 있었다.

폐수 내 Sb 제거를 위한 흡착제 및 응집제 성능이 Sb 산화 상태에 영향을 받음에 따라 Sb 산화 상태(Ⅲ, V)에 따른 분리 분석법 개발이 필요하였다. APDC(Ammonium Pyrrolidine Dithiocarbamate)을 사용하여 Sb(Ⅲ)과 Complex를 형성한 후 SPE(Solid Phase Extraction)로 분리/분취하여 Sb(V)를 정량하였다. Sb(Ⅲ)와 Sb(V) 표준 시약을 사용하여 회수율 실험을 진행하였으며, Sb(Ⅲ)의 회수율은 0%, Sb(V)의 회수율은 94~102%이었다.

공장 폐수 내의 Sb은 대부분 Sb(V) 형태로 존재함을 확인하였으며, Sb 제거를 위한 20여종의 흡착제 및 응집제의 성능을 평가하고 최적의 제거 조건을 선정하였다.

PT-034 [의약품/화장품]

**A sensitive and rapid LC-MS method for determination  
of berberine in human plasma**

**Jae Hee Kim<sup>1</sup>, Xuan-Lan Mai<sup>1</sup>, Kyu Yeon Kim<sup>2</sup>, Min-Seok Sim<sup>1</sup>, So-Yeon Lee<sup>1</sup>,  
Hee-Won Seo<sup>1</sup>, Gunhee Lee<sup>1</sup>, Dae-Jung Kim<sup>1</sup> and Kyeong Ho Kim<sup>1</sup>\***

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Kangwon National University,

<sup>2</sup>Bioanalysis Team, Caleb Multilab Inc,

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

A *Coptidis Rhizoma* (CR) has been widely used in traditional medicine to treat some common diseases. This study was aimed to develop a high sensitive liquid chromatography-tandem mass (LC – MS) spectrometry method for evaluation pharmacokinetic effect of a new natural products in which contain CR extract with main bioactive compound (berberine) at trace concentration. Human plasma samples were pretreated with methanol by protein precipitation method. Berberine was analysed on a Kinetex column C18 (2.1 mm x 50 mm, 100Å, 1.7 µm) using mobile phase included 10 mM ammonium formate/0.1% formic acid in water (A) and acetonitrile (B) (50:50,v/v) at 0.25 mL/min flow rate. The analyte was detected using electrospray ionization in positive mode with multiple reaction monitoring (MRM). The method was sensitive with lower limit of quantification of 1 pg/mL, which has never been obtained so far. It was also validated (over the range of 1 ~ 50 pg/mL) and applied successfully in human plasma samples for the pharmacokinetic study.

PT-035 [의약품/화장품]

**Determination of marker compounds for the quality control  
of DA001 using HPLC-DAD-ESI-MS**

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

충남대학교 약학과

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

Recently, air pollution caused by harmful substances such as fine dusts, smogs and ozone has been increasing in all the world. In particular, the damage to respiratory and skin diseases causing in fine dusts such (PM10) or ultra fine particles (PM2.5) is becoming in serious problem in Korea. Therefore, most of people are interesting in skin care, healthy improvement with increasing income. In particular, functional cosmetic products with anti-oxidants and anti-aging activities using natural substances have been increased. DA001 used in this study is consisted of OJ, EP, ZI, PO, AP, EJ, SB and DM as herbal materials. To ensure the stability of the anti-aging effects using DA001, a effective quality control using the quantification of main components are needed. However, the effective simultaneous analysis method for DA001 has no report until now. The aim of this study is to analyze the patterns of marker compounds and determine the marker compounds in DA001 and its composition herbal material for qualitative and quantitative using HPLC-DAD-ESI-MS. The HPLC analysis was carried out on a Optimapak C18 column (250 x 4.6mm, 5 $\mu$ m) with mobile phase of 0.1% formic acid in water (A), 0.1% formic acid in methanol (B) under the following gradient elution: 10-40-43-73% B, 0-40-50-90 min, and monitored at UV 330 nm and 1.0 mL/min of flow rate. The eleven peaks among the twelve marker compound candidates were selected as marker compounds, and these peaks were successfully assigned by comparing UV and MS spectra using HPLC-DAD-ESI-MS. The assigned peaks were identified as neochlorogenic acid, chlorogenic acid, cryptochlorogenic acid, luteolin-6-C-glucoside, 3,5-dicaffeoylquinic acid, luteolin-7-C-glucoside, 4,5-dicaffeoylquinic acid, isoquercitrin, rutin, astragalgin, wedelolactone and tricin. In conclusion, the selected marker compounds will useful for the qualitative and quantitative analysis of DA001 and its composition herbal material.

PT-036 [의약품/화장품]

**Differences in anthocyanins composition between healthy and viroid-infected grapes (*Vitis* spp.) in Korea**

**Thi Phuong Duyen VU<sup>1</sup>, In Sook CHO<sup>2</sup>, Sang-Hun Jung<sup>1</sup>,  
Young Ho KIM<sup>1</sup> and Jong Seong KANG<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>충남대학교 약학과, <sup>2</sup>농촌진흥청 원예특작과학원 원예작물환경과

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

Grapes (*Vitis* spp.) are one of the most consumed fruits in Korea. However, widespread infection by viroid in grapes had been reported in recent years, which caused malformed berries reducing in both fruit quality and yield. In this study, the effects of viroid infection based on the content of anthocyanins in grape skin of three cultivars 'Campbell', 'Kyoho', and 'Shine muscat' were studied using HPLC-PDA-ESI-MS/MS. Sixteen anthocyanins were detected using HPLC-PDA-ESI-MS/MS in grape skin. For detection of anthocyanins in samples, the wavelength of 520 nm was chosen. The optimized conditions include a mobile phase of 10% formic acid in water (A) and 10% formic acid in acetonitrile (B). The elution program was 7-20% B at 0-20 min, 20-30% B at 20-45 min, and 30-60% B at 45-60 min with a flow rate of 0.7 mL/min. In response to viroid infection, considerable decreases in the content of anthocyanins were observed ( $p < 0.05$ ) in 'Campbell' and 'Kyoho'. In 'Shine muscat' grapes, no anthocyanins were detected. In conclusion, due to viroid infection, grapes seem to decrease synthesis of anthocyanins, which are important compounds that determine the color and flavor of grapes and products derived from grapes. Therefore, it indicates that viroid grapes and their products infected by viroid result in very low quality in comparison of the healthy ones.

PT-037 [의약품/화장품]

**Standardization of extract mixture of Japanese Staunton vine and  
Cornus fruit to improve prostate health by HPLC-UV**

**GAO Dan<sup>1</sup>, Chong Woon CHO<sup>1</sup>, Seo Young YANG<sup>1</sup>, Kyoung Won CHO<sup>2</sup>,  
Young Ho KIM<sup>1</sup> and Jong Seong KANG<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>충남대학교 약학과, <sup>2</sup>종근당건강(주)

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

The incidence of prostate disease has rapidly risen with the increasing trend of the global population aging. The mixture of Cornus fruit (CO) and Japanese Staunton vine (SH) is a newly developed functional food material to improve prostate health. However, the effective HPLC analytical method to control the quality of CO and SH mixture has no report until now. The aim of study is to develop the simultaneous analytical method for the quantification of CO and SH mixture using a HPLC. The analytical condition of HPLC was carried out on an Hecator C18 column with mobile phase of 0.1% formic acid in water (A) and 0.1% formic acid in acetonitrile (B) under the following gradient conditions: 0-50 min, 12-40% (B) at flow rate of 1.0 mL/min and monitored at UV 205 nm and 240 nm. Hederacoside D and morroniside were selected as marker compounds because of their biological activities and containing major compounds in each herb. The developed analytical method successfully validated by various parameters. And 55 samples were evaluated to the content of maker compounds by the developed method. In results, the content of hederacoside D and morroniside was  $30.40 \pm 2.42$  mg/g and  $1.61 \pm 0.24$  mg/g, respectively. In conclusion, the developed analytical method will be useful for the qualitative and quantitative analysis of CO and SH mixture.

PT-038 [의약품/화장품]

**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.



PT-039 [의약품/화장품]

### Determination of abnormal 1-deoxysphinganine by fumonisin B1 in LLC-PK1 cells

Kyeung-Ran Min, Maftuna Shamshiddinova, Khilola Nazrullayeva,  
Min-Kyeong Kim, Shokhid Gulyamov, Yong-Moon Lee\*

College of Pharmacy, Chungbuk National University

\*Corresponding author: ymleefn@gmail.com

The biosynthesis of normal sphingolipids is started on the initial step of serine palmitoyl transferase(SPT) activation, which uses pyridoxal phosphate as a cofactor. However, several cases of type 2 diabetes or the hereditary sensory and autonomic neuropathy type 1(HSAN1) were reported to produce unusual sphingolipid, 1-deoxysphingolipids by mutant SPT activity sensing alanine as a substrate. To investigate a sensitive quantitation and functional studies for 1-deoxysphinganine, fluorogenic analysis method after ortho-phthalaldehyde(OPA) derivatization was developed. Porcine kidney proximal tubule epithelial cells, LLC-PK1 cells( $1.2 \times 10^6$  cells/3mL) were extracted to analyze 1-deoxysphinganine by high-performance liquid chromatography(HPLC) linked to fluorescent detection(FLD)(Ex.340nm, Em.455nm). The isocratic elution of 90% acetonitrile successfully separate 1-deoxysphinganine from other impurities for quantitative analysis. The 48 hr incubation of cells with L-alanine increased the contents of 1-deoxysphinganine in a dose dependent manner. A ceramide synthase inhibitor, fumonisin B1 highly accumulated 1-deoxysphinganine and sphinganine indicating these sphingolipids were turned out to corresponding ceramide structures. An amino acid, L-alanine was increased in culture media during prolonged incubation in a media condition of 1% fetal bovine serum. furthermore, L-serine-deprived cells exhibited increased formation of cytosolic lipid bodies containing deoxysphingolipids and other sphingolipids. Therefore, the L-alanine increase in media and concomitant increase of 1-deoxysphinganine indicates the status of cells aging. Now, we are investigating the optimal protocol of the analytical method for 1-deoxysphinganine and related sphingolipids in HPLC-FLD system for further precise studies.

PT-040 [의약품/화장품]

## High-performance Liquid Chromatography - Photodiode Array Detector를 이용한 의약품 중 타르 색소 분석법 유효성 검증

김민경<sup>1</sup>, 김범희<sup>2</sup>, 민경란<sup>1</sup>, Shokhid Gulyamov<sup>1</sup>, Khilola Nazrullayeva<sup>1</sup>,  
Maftuna Shamshiddinova<sup>1</sup>, 홍종기<sup>2</sup>, 이용문<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>충북대학교 약학대학, <sup>2</sup>경희대학교 약학대학

\*Corresponding author: ymleefn@chungbuk.ac.kr

의약품에서 착색료는 제품의 성상을 더 좋아 보이게 하거나 비슷한 외형의 제품을 쉽게 구별하도록 해 주며, 빛에 약한 내용물의 분해를 막는 효과 등을 지니고 있다. 그러나 황색 4 호는 체중 감소, 알레르기, 천식, 설사, HLD증 유발, 황색 5 호는 두통, 두드러기, 천식, 경증 유발, 적색 40 호는 어린이 행동 및 주의 집중에 부정적 영향, 적색 102 호는 인체 발암성 물질과 동시에 천식 환자에게 부작용 초래, 적색 3 호는 인체 발암성 물질, 아토피성 피부염, 집중력 장애, 과잉 행동 유발, 적색 2 호는 간혈액, 신장 장애, 암 유발, 녹색 3 호는 위장 장애, 피부 발진, 내장 세포 파괴, 청색 1 호는 ADHD, 천식, 알러지 유발, 청색 2 호는 ADHD, 알레기를 유발하는 등 안전성에 관한 부분이 제기되고 있다. 국내에서 의약품 중 타르 색소의 기시법으로 UV-Vis나 TLC 등을 확인 및 정량 시험법으로 사용하고 있다. 따라서 미국 FDA의 규정처럼 색소 규격에 유연 물질을 추가할 경우 현행 방법으로는 수행하기 어려워 최신 연구 동향을 바탕으로 한 High-performance Liquid Chromatography - Photodiode Array Detector (HPLC-PDA) 법을 이용하여 타르 색소를 분석하였다. 대상 물질 선정은 현재 국내에서 시판되고 있는 의약품들에 적용된 색소들 중 다빈도로 사용되고 있는 색소인 약 42 종 중 자주 사용되는 3 종 (Allura red AC, New Coccine, Phloxine B)을 선정하였다. 최신판 식품 공전에 기재된 동종 타르 색소 HPLC 분석법을 참고하여, 표준품을 각각 물에 녹여 1000 mg/L가 되도록 한 후 10 mM Ammonium acetate 용액으로 1, 5, 10, 15, 25 ug/mL의 농도가 되도록 희석하여 HPLC로 분석하였다. DAD의 파장은 254, 520, 540 nm으로 설정하였다. 그 결과, 적색 타르 색소의 경우, 대부분 520 nm과 540 nm에서 높은 몰흡광계수를 나타내며, 일부 색소는 254 nm 에서 흡광도가 높은 것을 확인하였다. 직선성의 R<sup>2</sup> 값은 0.99 이상의 값을 보였으며, RSD는 대부분 1 % 미만의 값을 나타내었다. 추후에는 분석한 물질들의 검출 한계와 정량 한계를 알아보고, 적색 40 호 Allura red의 유연 물질인 6-hydroxy-2-naphthalenesulfonic acid Sodium salt, 4-Amino-5-methoxy-o-toluenesulfonic acid, Disodium salt of 6,6'-oxybis (2-naphthalene-sulfonic acid)와 적색 102 호의 유연 물질인 Naphthalene-1-sulfonic acid, 적색 104 호 (1)의 유연 물질인 tetrachlorophalic anhydride, 1-carboxy-5,7-dibromo-6-hydroxy-2,3,4-trichloroxanthone, 4,5,6,7-tetrachlorofluorescein 등을 QSAR tool을 사용하여 각각의 타르 색소의 불순물의 유전 독성을 확인하고, 실제 의약품 제조에 사용되는 원료를 표준품과 동등한 수준의 기시법으로 분석하여 불순물의 존재 여부를 확인할 예정이다.

본 연구는 2019년도 식품의약품안전처 연구개발과제(19172약안전126)의 연구개발비로 수행되었다.

PT-041 [의약품/화장품]

## The Quantification of Total Ceramide in LLC-PK1 Cells by HPLC-FLD method

Khilola Nazrullayeva, Maftuna Shamshiddinova, Kyeong-Ran Min and Yong-Moon Lee\*

\*College of Pharmacy, Chungbuk National University

\*Corresponding author: ymleefn@cbnu.ac.kr

Ceramides are lipid molecules found in high concentrations within cell membranes in the upper layer of the skin. We developed a method for the analysis of the total ceramide by using serial purification and digestion by TLC and microwave oven to liberate sphingoid bases from ceramides. The liberated sphingosine and sphinganine were derivatized by fluorogenic OPA reaction and then were quantitatively analyzed by high performance liquid chromatography (HPLC) with fluorescent detection. LLC PK-1 cells ( $2.2 \times 10^6$  cells) were cultured in 10 cm dish in Dulbecco's modified Eagle's medium supplemented with 10% fetal bovine serum in a humidified incubator at 37°C with 5% CO<sub>2</sub>. The protein assay were determined by using BCA assay and 100 µg protein of cell lysate was used for ceramide extraction by using chloroform: methanol (2:1) mixture. The chloroform phase was collected and applied on TLC plate. The TLC plate was immersed into chamber with chloroform:methanol (10:1) solution. After development, the spots were visualized using vanillin-sulphuric acid reagent (5% ethanolic sulphuric acid and ethanolic vanillin) followed by heating at 180°C for 2min. The spots' areas of ceramides were corrected for by the spot areas of ceramide standard. The bands corresponding to ceramide on the TLC plate were scrapped and lipid fraction was extracted in methanol solution. The chloroform phase was dried in vacuum evaporator. The ceramide fraction was reconstituted with 0,1N NaOH in methanol at 40°C for 10min. Then transferred into borosilicate glass tubes with polytetrafluoroethylene-lined screw caps and microwaved during 1minx3 times to elaborate fatty acid groups and get sphingosine and sphinganine. After digesting the samples were cooled. We transferred 100 µL of the deacylated lipid mixture into vials and derivatized the lipids for 30 min with the addition of 15 µL OPA reagent (OPA and 2-mercaptoethanol). The total ceramide content was analyzed by using CAPCELL PAK C18 size 4.6 mmI.D×250mm column in isocratic elution with 90% of acetonitrile. The linearity of Ceramide was formed by using the area ratios of Ceramide 8 and IS (phytoceramide) with concentrations of: 62,5; 125; 250; 500; 1000 pmol. The correlation coefficient was  $R^2=0,9979$ . HPLC analysis of LLC-PK1cells revealed that total ceramide amount was 91.12 and 100.31 pmol/mg protein and total dihydroceramide amount was 11.0 and 26.3 pmol/mg protein.

PT-042 [의약품/화장품]

**Competitive enzyme-linked immunosorbent assay를 이용한 CWPS  
(Cell Wall polysaccharide) 정량분석**

**엄정규**

\*충북대학교 약학대학 제약산업전공

\*Corresponding author: *tigerjkl@naver.com*

폐렴구균 백신은 크게 CRM197, Tetanus toxoid (TT) 등과 같이 캐리어 역할을 하는 단백질에 폐렴균의 표면 피막을 형성하는 다당류를 접합한 형태와 캐리어 없이 피막다당류만을 항원으로 사용하는 두 가지 방식으로 나눌 수 있다. 두 가지 방식 모두 폐렴균의 표면 피막을 형성하는 당 분자의 긴 사슬을 항원으로 사용한다. 사용될 항원을 얻기 위해 여러 단계의 정제 공정을 거치게 되는데 이 과정에서 다양한 부산물들이 발생하게 된다. 폐렴구균 백신은 체내에 항원을 직접 주입하여 T세포와 B세포에 의해 항체를 생성하는데 특정 항원 이외의 부산물들은 항체를 생성하는데 방해하거나 간섭을 일으킬 수 있다. 그로 인해 항원 이외의 물질들을 검출하거나 확인하는 분석법들이 요구되었다. 본 포스터에서 소개하고자 하는 분석법은 Competitive enzyme-linked immunosorbent assay를 이용하여 CWPS (Cell Wall Polysaccharide)를 정량하는 분석법이다. CWPS는 백신의 항원으로 사용되는 Capsule 형태의 다당과 동일한 구조적 특징을 가지고 있어 CWPS만을 정량하는 분석법 개발이 필요하였다. 시험 방법으로는 CWPS antiserum을 이용하여 정제된 Serotype 5 Polysaccharide 1mg/ml 용액에 반응하여 CWPS 존재 유무를 확인한다. 검출되지 않음이 확인되면 이 용액에 1mg/ml로 희석한 CWPS Standard를 농도 별로 Spiking하고 이와 대조할 표준액은 pH 6.1 Phosphate buffer에 CWPS Standard를 검체에 Spiking한 것과 같은 농도로 준비하여 사용하였다. 검체에 처리할 항체의 농도, CWPS 농도, 반응 조건과 시간에 대한 조건 테스트를 실시하였다. 조건 테스트를 통해 가장 적합한 조건을 찾은 후 3회 반복시험 하였고 재연성을 확인 할 수 있었다.

PT-043 [의약품/화장품]

## NIR을 활용한 치약 중의 불소 확인

이혜린

충북대학교 약학대학원 제약산업전공

\*Corresponding author :if\_green@naver.com

본 내용은 의약외품으로 구분되는 치약 내 불소의 확인시험을 위해 근적외선분광기(FT-Near InfraRed)를 활용하는 방법을 소개하고자 한다. 치약의 유효성분 중 하나인 '불소'는 충치예방 효능을 나타내는 주성분으로 제품 내 불소의 함량이 효능효과에 영향을 미친다. 현재 치약 중의 불소는 이온상태인 '용해성불소' 또는 이온상태와 침전물의 형태 모두를 포함하는 '총불소'로서 함량시험을 실시하게 되어있다. 단, 치약과 같은 화합물은 전처리에 있어 약 3-5시간의 시간이 소요되므로 해당 실험이 산업현장에서 중간 벌크제품의 품질관리에 활용되기는 어렵다. 산업 현장에서 더 빠르고 손쉽게 불소의 투입 유무를 확인할 수 있도록 하기 위해 NIR(Near-InfraRed ;근적외선분광기)을 활용하고자 본 실험을 진행하였다. 실험은 1. NIR을 통한 정성시험과 2. NIR을 통한 정량시험, 두 가지를 실시하였으며 어떤 방법이 불소의 확인시험에 더욱 적합한지 알아보하고자 하였다. 그 결과 훨씬 많은 데이터를 토대로 검량해야 하는 2.정량시험이 신뢰성이 높다는 것을 확인하였다. 해당 방법을 산업현장에 적용할 경우, 제조가 완료된 완제품의 품질관리 이전에 벌크제조분에 대해 손쉽게 주성분인 불소가 제대로 투입되었고 조제되었는지를 확인가능 할 것으로 보인다. 실험을 통해 근적외선 분광기를 원료단계가 아닌 혼합물상태의 제품 단계에서 확인시험의 목적으로 활용이 가능하다는 것을 확인했으며, 산업현장에서 미지의 시료 확인이 아닌 제품에도 IR 분석기기를 활용하는 방안을 마련하여 진보된 품질관리를 수행할 수 있다고 사료된다.

PT-044 [의약품/화장품]

**Measuring metabolic disturbance of polystyrene particles on *Caenorhabditis elegans* by gas chromatography-mass spectrometry**

**김형민, 이동규, 응웬푸옥롱, 권성원\***

\*서울대학교 약학대학 약학과

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

Polystyrene is known to have a very slow biodegradation process that takes hundreds of years. Long-term presence on land and in the sea increases the risk of bioaccumulation. However, there have been limited studies that selectively focus on the toxicity and metabolism of nanopolystyrene to soil species. We investigated the metabolic and toxic effects of nanopolystyrene particles using a powerful in vivo model, *Caenorhabditis elegans* (*C. elegans*). Lethality assay, locomotion assay, reproduction assay, reactive oxygen species assay, and gas chromatography-mass spectrometry based untargeted metabolomics were applied interactively for intensive investigation. The results showed that 24 h exposure of nanopolystyrene significantly affected the various phenotypes of *C. elegans*. For example, the locomotion and reproduction decreased while oxidative stress levels increased. Furthermore, global metabolic alternation was observed, the most influential of which was the central metabolism of carbon metabolites and energy metabolism. In summary, we have confirmed the strong association between the phenome of *C. elegans* and the nanopolystyrene. Additional investigations are required to extend our findings on other polystyrene types to *C. elegans* and other mammals, including humans.

PT-045 [의약품/화장품]

**Rapid screening and confirmation of 60 PDE-5 inhibitors in supplements based on extracted common ion chromatograms by gas chromatography-mass spectrometry combined with trimethylsilylation**

**Hyun Ji Kim<sup>1</sup>, Beom Hee Kim, Jisu Hur, Jongki Hong<sup>\*</sup>**

College of Pharmacy, Kyung Hee University

<sup>\*</sup>Corresponding author : jhong@khu.ac.kr

Various phosphodiesterase 5 inhibitor (PDE-5i) drugs including approved drugs and their analogues have been increasingly adulterated in dietary supplement diets and widely distributed through online or offline markets. Novel screening method was developed using gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) for simultaneous analysis of 60 PDE-5i drugs in supplements. Microbore GC column (>0.2 mm, i.d.) could successfully separate and detected 60 PDE-5i within 21 min. Extraction of PDE-5i drugs from dietary supplements was performed by liquid-liquid extraction at pH 10 using ethyl acetate. To detect non-volatile PDE-5i drugs, trimethylsilyl (TMS) derivatization using MSTFA was applied. With aid to TMS derivatization, target drugs were enabled to obtain reasonable peak capacity and detection sensitivity, as results, sample volume could be down-scaled to 1 mg. Electron ionization (EI) mass spectra of PDE-5i-TMS derivatives exhibited the characteristic common fragments within similar structural moiety for sildenafil, tadalafil, and vardenafil analogues. These specific common fragments were observed to reflect their structural characteristic: m/z 384, 383, 311, 265 and 448 for sildenafil analogues, m/z 241 and 169 for tadalafil analogues, and m/z 476, 384 for vardenafil analogues. These characteristic common ions were formed through the losses of piperazinosulfonamide (or piperazine) and ethoxy (or propoxy) groups for sildenafil and vardenafil analogues, and the loss of benzodioxole and the ring fusion of diketopiperazine for tadalafil analogues. Extracted common ion chromatograms (ECICs) based on specific fragments of similar structural moieties could effectively apply for rapid screening of target analytes and new emerging counterfeit drugs. The established method was successfully applied for the monitoring of several types of dietary supplements to protect the public health and consumer safety.

**Keywords:** PDE-5i; supplement diets; rapid screening; pH control LLE; extracted common ion chromatogram; GC-MS/MS

PT-046 [의약품/화장품]

## Simultaneous quantitative determination of ephedrine & pseudoephedrine using LC-MS/MS in human plasma: its application to a PK study

Hee Jo Yoo<sup>1,2,3</sup>, Bo Kyung Kang<sup>3</sup>, Eun Kyoung Chung<sup>4</sup>, and Kyung-Tae Lee<sup>1,2,3</sup>\*

<sup>1</sup>Department of Pharmaceutical Biochemistry and

<sup>2</sup>Department of Life and Nanopharmaceutical Science, College of Pharmacy, Kyung Hee University,

<sup>3</sup>Kyung Hee Drug Analysis Center, Kyung Hee University,

<sup>4</sup>Department of Pharmacy, College of Pharmacy, Kyung Hee University

\*Corresponding author: ktleee@khu.ac.kr

A sensitive and reproducible high-performance liquid chromatography (HPLC)-electrospray ionization (ESI) tandem mass spectrometric method (LC-MS/MS) has been developed and fully validated for the simultaneous determination of ephedrine and pseudoephedrine in human plasma after the oral administration of Ojeok-san(OJS). OJS is the most common herbal prescription among 56 kinds of herbal prescriptions for treating cold or gastrointestinal disorders. We used 2-phenylethylamine as an internal standard (IS), and liquid-liquid extraction (LLE) method with methyl *tert*-butyl ether:methyl chloride=8:2 (v/v). Ephedrine and pseudoephedrine were detected in multiple reaction monitoring (MRM) mode at m/z transition 166.024 > 148.200. Chromatographic separation was performed on a Halo C18 Phenyl-Hexyl<sup>®</sup> column using 20 mM ammonium acetate (pH5.0 adjusted by acetic acid) and 100% methanol as mobile phase with a gradient method at a flow rate of 0.25mL/min. The retention times of ephedrine and pseudoephedrine were 11.3 min and 12.3 min, respectively. The calibration curve was linear [correlation coefficient ( $r$ )  $\geq$  0.9953] over the concentration range of 0.2–50 ng/mL. Intra- and inter-day precisions ranged from 4.9% to 12.6% and from 8.8% to 13.8%, and the accuracy ranged from 83.5% to 103.7% and from 89.9% to 93.0%, respectively. The developed method was fully validated with respect to selectivity, linearity, lower limit of quantitation (LLOQ), recovery, matrix effect, and stability. This validated method was successfully applied to the pharmacokinetic study of ephedrine and pseudoephedrine in 25 healthy Korean volunteers after the administration of Ojeok-san. This result may use for avoiding the drug-drug interaction with ephedrine and pseudoephedrine in OJS.



PT-047 [의약품/화장품]

**대한민국약전 화학의약품표준품 후보물질의 품질검증 연구**

**양지영, 전정륜, 권은진, 박장미, 정영은, 김연희, 이효민\***

식품의약품안전처 의약품연구과

\*Corresponding author: hmlee0983@korea.kr

표준품이란 의료제품의 품질관리를 위하여 시험-검사 시 대조용으로 사용하는 기준물질로 의약품의 품질관리와 안전성 확보에 직접적으로 영향을 미친다. 품질이 우수하고 안전한 의약품 생산 및 품질관리를 위해 식품의약품안전처는 연구사업을 통하여 「대한민국약전」(KP)에 수재된 국가 표준품을 공급하고 있다. 본 연구는 국가 표준품 공급 확대를 위하여, 먼저 업계 수요 등을 반영하여 KP에 수재된 화학의약품표준품 후보물질을 선정하고, 다기관 교차검증을 통한 품질검증을 하여 표준품을 확립하고 「식품의약품안전처 표준품」 종합안내서를 마련하는 것을 목적으로 한다. 이번 연구에서는 클로르페니라민 말레산염(chlorpheniramine maleate)등 8종에 대해 품질검증을 하였다. 연구방법으로는 국내외 공정서의 시험법을 기준으로 하여 액체크로마토그래프법, 강열잔분시험법, 건조감량 및 수분측정법 등을 통해 품목별로 유기불순물, 무기불순물 및 휘발성불순물에 대하여 5회씩 반복측정 하였고, 매스밸런스 방법으로 각 후보물질의 함량을 평가하였으며, 3개 기관의 공동연구를 결과에 대해 통계분석을 하여 불확도를 산출하였다. 이러한 연구결과는 식약처의 전문가 위원회의 자문을 거친 후, 최종적으로 식약처의 국가 표준품을 확립하는데 기초자료로 활용될 예정이다.

PT-048 [의약품/화장품]

**Development of Analytical Method for Allethrin in Household Pesticides using GC-FID**

**Kyoung-Moon Han, Sangseop Kim, Jihyun Shin, Soae Ji, Rheeda Lee, Soojeong Son, Kyunghun Son<sup>★</sup>**

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

<sup>★</sup>Corresponding author: juchan2@korea.kr

In Korea, standard and test methods of quasi-drugs are specified separately from medicines. The aim of this study is to develop the established assay of allethrin. Allethrin is a pesticide ingredient, which causes sneezing, rhinitis, headache, and asthma when inhaled high concentrations at indoor. For this reason, the Ministry of Food and Drug Safety (MFDS) has restricted the content of allethrin in household pesticide to less than 0.25% of the undiluted pesticide. In this study, the analytical method of allethrin in mosquito coil is developed by using a flame ionization detector. Currently, the assay of mosquito coil has a complicated sample preparation process with Soxhlet extraction system, and it is analyzed with packed gas chromatography (GC) columns. Therefore, the efficiency of the analytical method is needed to be improved by changing sample pretreatment process and column type. For the recovery test, four mosquito coil products containing allethrin were used.

The modified GC column was a capillary column coated with 5% phenyl-dimethylpolysiloxane (30 m × 0.32 mm × 0.25 μm). The carrier gas was nitrogen and its flow rate was 1.5 ml/min with split ratio of 10. The assay was validated with linearity, precision and recovery rate. For the linearity, the calibration curve was drawn three times, and the R<sup>2</sup> values were greater than 0.998. The limit of detection and limit of quantitation were 41.72 and 126.42 ppm, respectively. In addition, the precision was evaluated by relative standard deviation (RSD) of 6 repeated measurements at 150 ~400 ppm, which was less than 6%, and the recovery rate was in a range of 90 ~ 93%. The content of allethrin in products was ranged from 0.031 ~ 0.037%, which was less than 0.25%.

Keyword: Allethrin, Pesticide, GC-FID

PT-049 [의약품/화장품]

## Study on the Determination of Dichlorobenzyl Alcohol Analysis Method Among Cosmetics Using Liquid Chromatography

Hyojin Kim, Sangil Lee, Hyeji Jeong, Yong Kyu Choi,  
Chungsik Min, Kyunghun Son<sup>\*</sup>

Cosmetic Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation

<sup>\*</sup>Corresponding author: juchan2@korea.kr

Dichlorobenzyl alcohol is one of the restricted ingredients, which is used as a sterilizer or preservative. In Korea, the content of dichlorobenzyl alcohol in cosmetics is regulated up to 0.15%. In this study, the analytic method of dichlorobenzyl alcohol was established, which can be applied to various formulation types such as toner, lotion, cream, etc. by using HPLC. The established method was validated in accordance with "Korean pharmaceutical method validation guideline." The method showed great linearity and selectivity with a correlation coefficient ( $R^2$ ) of 0.999 or higher at the quantitative range of 1.0~20.0  $\mu\text{g/mL}$ . The limit of detection(LOD) and limit of quantitation(LOQ) were 0.160 and 0.485  $\mu\text{g/mL}$ , respectively. For the accuracy, the recovery rate of each type of products were evaluated, which was ranged of 86.8~100.6% for toners, 87.5~104.9% for lotions, 93.1~99.6% for creams, 94.0~99.6% for feminine washes, respectively. In addition, for the precision, the samples were analyzed 6 times and its relative standard deviation (%RSD) was 0.93%, 0.75%, 0.66% and 0.98% in toners, lotions, creams, and feminine washes, respectively. The stability of the standard solutions for 48 hours at room temperature and in refrigerator was also studied and it was confirmed that the solutions in both conditions were stable. To validate the established analytic method, 20 types of cosmetics were monitored. The content of dichlorobenzyl alcohol was found to be less than 0.15% in all products. The results of this study will contribute to safety of products for consumers.

Keywords: Dichlorobenzyl alcohol, Liquid chromatography, Cosmetic

PT-050 [의약품/화장품]

## A Study on the Determination of the chlorhexidine Analysis Method Among Cosmetics Using Liquid Chromatography

Hyo Jin Kim, Yun Geom Choi, Sangil Lee, Yong Kyu Choi,  
Chung Sik Min, and Kyung Hun Son\*

Cosmetic Research Team, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation

\*Corresponding author: juchan2@korea.kr

Chlorhexidine, or a preservative is used in cosmetics to prevent the corruption by losing the activity of foreign substances such as microorganisms that cause the deterioration of cosmetics. In Korea, chlorhexidine has been restricted in use by Ministry of Food and Drug Safety up to 0.1% in the rinse-off products which are not applied on the mucous membranes, and up to 0.05% in other products. However, the test method for chlorhexidine in cosmetics has not been set accordingly. Thus, the aim of this study is to establish the test method of chlorhexidine in cosmetic products. These methods were well-validated, followed by "Korean pharmaceutical method validation guideline". The quantitative method was established by HPLC. The coefficients of determination( $r^2$ ) were all greater than 0.999 with the standard curve range between 1.0 and 20  $\mu\text{g}/\text{mL}$  for HPLC. They showed an outstanding selectivity to the cosmetic matrices. For HPLC method, the LOD and LOQ were calculated as 0.020 and 0.060  $\mu\text{g}/\text{mL}$  respectively. In the accuracy and precision test for toner, lotion, cream, feminine wash cosmetics, the average recovery rate was 95.9~100.2%, 99.0~103.3%, 98.3~103.2%, 93.0~97.0% and the relative standard deviation (%RSD) was 0.50~1.00%. We expect that the results of this study can be usefully applied in QC of chlorhexidine and contributes to improve the consumer safety. To examine the stability of solution, each sample was stored at room temperature or in refrigerator after pre-treatment, which resulted in being stable. Also, 21 marketed cosmetic products were monitored by developed assay, which contained chlorhexidine. It was found that the content of chlorhexidine was below the regulation limit, which was 1.0% in all tested products of cosmetic. By publishing the analytical method established through this study, it is expected to be used to test the distributed cosmetics in the domestic market to improve the quality of cosmetics and safety of the public health. Also, it will contribute to the increase of exports by strengthening the international competitiveness of the domestic cosmetics industry.

Keyword: Chlorhexidine, Cosmetics, HPLC

PT-051 [의약품/화장품]

**Validation study of *in vitro* potency test method using reporter gene for the therapeutic monoclonal antibodies**

**Jounghee Baek<sup>1</sup>, Young Ki Hong<sup>1</sup>, Aera Son<sup>1</sup>, Min-Jung Kim<sup>1</sup>, Ho Kim<sup>1</sup>, Soyeong Kang<sup>1</sup>, Joon Ho Eom<sup>1</sup>, Ae Lee Jeong<sup>2</sup>, Su Jin Kim<sup>2</sup>, and Chiyoung Ahn<sup>1</sup>\***

<sup>1</sup>Advanced Therapy Products Research Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation, <sup>2</sup>New Drug Development Center, Osong Medical Innovation Foundation, KBIO Health

\*Corresponding author: cahn@korea.kr

We set up the test conditions using NF- $\kappa$ B-RE-*luc2P* HEK293 cells to evaluate the activity of the anti-TNF $\alpha$  antibody. The IC<sub>50</sub> was 68.5  $\pm$  7.2 ng/mL for infliximab and 56.1  $\pm$  6.3 ng/mL of adalimumab. The time required for the test was a only single day, it took less time than the conventional cell death/proliferative activity assay. When we compared the reporter gene assay with the cell proliferation assay using degraded mAb samples, the reporter gene assay are able to detect temperature stress-induced change of mAbs in case of infliximab. The results suggested that the reporter gene assay was more suitable for monitoring the quality. In addition to developing the reporter gene assay for target neutralization potency test, we also have developed the ADCC assay using reporter gene for an anti-cancer mAb(trastuzumab). We use a recombinant Jurkat T cell(BPS bioscience) expressing firefly luciferase gene under the control of NFAT response elements with constitutive expression of human Fc $\gamma$ RIIIa, high affinity(V158) variant and Fc $\gamma$  chain and performed validation study to investigate the specificity of the method against target cell line. Through this research project, we developed a improved potency test method for antibody drugs.

**Keywords**

Therapeutic monoclonal antibody, Potency test, Reporter gene assay

**References**

- (1) One-step assay for quantification of neutralizing antibodies to biopharmaceuticals. (Christophe Lallemand et al., Journal of Immunological Methods 356 (2010) 18–28)
- (2) A novel reporter gene assay for Recombinant Human Erythropoietin (rHuEPO) pharmaceutical products. (Yushuai Yang et al., Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis 100 (2014) 316–321)
- (3) Development of a robust reporter-based assay for the bioactivity determination of anti-VEGF therapeutic antibodies. (Lan Wang et al., Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis 125 (2016) 212–218)
- (4) Reporter gene assay for the quantification of the activity and neutralizing antibody response to TNF  $\alpha$  antagonists. (Christophe Lallemand et al., Journal of Immunological Methods 373 (2011) 229–239)

PT-052 [의약품/화장품]

**Study on analysis of methotrexate (MTX) in biological sample using high-performance liquid chromatography with tandem mass spectrometry**

**Yeongsuk Yoo<sup>1</sup>, Sang Kwang Lee<sup>2</sup>, Kun Cho<sup>1,\*</sup>**

<sup>1,\*</sup>Biomedical Omic, Korea basic science institute, Cheong-ju

<sup>2</sup>Eulji Medi-Bio Research institute, Eulji University, Daejeon

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

Methotrexate (MTX) was formerly known as amethopterin is an antimetabolite and antifolate drug used in treatment of cancer, autoimmune diseases and as an abortifacient in the induction of medical abortions. Methotrexate began to replace the more powerful and toxic antifolate aminopterin and the two should not be confused. Due to this reason, it is important to quantitatively analyze MTX. For this research, we applied to high performance liquid chromatography with tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) system. Preparation of sample was carried out through the following both preparation (Exosome kit, ultracentrifuge) and solid-phase extraction (SPE) method. Analysis was performed using a Agilent 1200 series HPLC system, Biphenyl columns and using gradient elution, with methanol and 15mM ammonium bicarbonate buffer as mobile phase. The mass spectrometric detection was carried out by using triple quadrupole mass spectrometer (A6460, Agilent) equipped with a electro-spray ionization interface operating in positive ionization mode using multiple reaction monitoring mode (MRM mode) acquisition for analysis of confirmation. From this research, we could optimize to analysis MTX 1~5 by LC-MS/MS and detect MTX1 from patient sample. When compared preparation method between exosome kit and ultracentrifuge, both methods was apply to LC-MS/MS method for detection of MTX.

PT-053 [의약품/화장품]

**Development of a gas chromatography mass spectrometry for simultaneous analysis of fragrance 24 allergens in cosmetics**

**Yeon-kyo Sung<sup>1</sup>, Ho-chul Shin<sup>1</sup>, Yong-min So<sup>1</sup>, Sun-il Kim<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Korea Testing & Research Institute, Beauty Wellness, Korea

Fragrance and flavor substances are organic compounds with characteristic, usually pleasant, odors. They are ubiquitously used in perfumes and other perfumed cosmetic products. Contact allergy to fragrance ingredients occurs when an individual has been exposed, on the skin, to a sufficient degree of fragrance contact allergens. As a consequence, symptoms, i.e. allergic contact dermatitis, may occur upon re-exposure to the fragrance allergen(s) in question. Fragrance contact allergy has long been recognised as a frequent and potentially disabling problem. Prevention is possible as it is an environmental disease and if the environment is modified (e.g. by reduced use concentrations of allergens), the disease frequency and severity will decrease. The purpose of this study was developed analytical method of fragrance 24 allergens in cosmetics using gas chromatography mass spectrometry. In this regard, a simple extraction procedure using methanol has been applied for the extraction of these allergens from spiked cream, toner and paste. The MS instrument was operated in the scan mode, and all allergens were monitored under SIM mode for certain reliable quantification result. The method was examined by items of specificity, linearity, limit of detection (LOD), limit of quantification (LOQ) and recovery using FDA, ICH and EP guidelines.

PT-054 [의약품/화장품]

## LC-MS/MS와 HPLC를 이용한 Pyrethrum 분석방법 개발

이민진\*, 이지은, 이채홍, 허지선, 송희진, 해주단, 이정현

KOTITI 시험연구원 생활환경사업본부

★Corresponding author: mj\_lee@kr.kotiti-global.com

Pyrethrum은 제충국(국화과 식물)에서 유래된 천연 유기 합성물질로 신경독성을 지니고 있어 곤충의 신경계에 작용하는 살충 효과가 있다. 또한 열과 산에 의해 분해가 쉽게 되어 천연 살충제로 많이 쓰여 왔다. 그러나 고함량으로 사용 시 피부에 노출될 경우 가려움증을 일으키고, 흡입 노출될 경우 호흡기 질환이나 구토 등을 유발할 수 있다. 이러한 위험성 때문에 국내에서는 환경부 고시 제2019-45호[안전 확인 대상 생활 화학제품 지정 및 안전표시기준]에 따라 방향제와 탈취제의 분사형 제품에 대하여 pyrethrum의 사용량을 규제하고 있다. 규제되고 있는 pyrethrum의 기준치는 0.7 % ~ 1 % 의 농도로 높은 기준치로 관리되고 있기 때문에 고성능액체크로마토그래피(HPLC) 분석법을 개발하고자 한다.

HPLC 분석법으로 분석하기에 앞서 pyrethrum의 경우 천연 유기 합성물질로 6가지 성분 (Pyrethrin I, Pyrethrin II, Cinerin I, Cinerin II, Jasmolin I, Jasmolin II)으로 구성되어 있고 개별 표준용액 구매가 용이하지 않아 각 성분에 대한 정확한 정보를 얻기 위해 LC-MS/MS 분석방법을 우선적으로 개발하였으며 이를 통해 개별 피크의 머무름 시간을 확인하였다.

LC-MS/MS 에서 확인한 개별 피크의 정보를 토대로 HPLC 분석법을 확립하였다. 또한 개발된 분석방법의 검증에 의해 pyrethrum이 검출되지 않는 방향제 시료에 pyrethrum 표준물질을 주입하여 분석을 진행하였다.

본 연구를 통해 pyrethrum의 분석방법을 확립하였으며 향후 시중에 판매되고 있는 방향제와 탈취제 제품에 대한 실태조사를 추가적으로 수행하여 pyrethrum의 무분별한 사용에 따른 위험성을 방지하고자 한다.



PT-055 [의약품/화장품]

## 알레르기 유발 향료 중 리모넨의 광학 이성질체 분리 분석방법 연구

이민진\*, 허지선, 이채홍, 이지은, 송희진, 해주단, 이정현

KOTITI 시험연구원 생활환경사업본부

\*Corresponding author: mj\_lee@kr.kotiti-global.com

유럽연합(EU)은 2012년 EU 소비자안전과학위원회(Scientific Committee on Consumer Safety) 보고서에서 화장품에 사용되는 향료 중 26종의 향 성분에 대하여 알레르기 유발 가능성이 있는 향료로 지정하여 관리를 권고하였다. 지정된 26종의 알레르기 유발 향료는 피부에 노출되었을 때 접촉성 알레르기를 유발하며, 면역계의 반응을 변화시키고 피부 질환 등의 문제를 일으킬 수 있다. 이에 EU에서는 성분에 따라 제품에 사용 시 표시를 의무화 하고 일부 성분에 대해서는 사용을 금지하고 있다.

26종의 알레르기 유발 향료 중 하나인 리모넨은 광학 이성질체로 D-리모넨과 L-리모넨의 두 가지 구조로 존재하는데, EU에서는 이 중 D-리모넨을 알레르기 유발 향료로 규제하고 있다. '안전 확인 대상 생활 화학제품 시험·검사 등의 기준 및 방법 등에 관한 규정 (국립환경과학원 고시 제 2018-71호)' 등 기존의 알레르기 유발 향료 26종의 동시 분석 방법은 고정상이 (50%-Phenyl)-methylpolysiloxane으로 구성된 Column을 사용한 GC-MS 분석이 보편적이지만, 이는 리모넨의 광학 이성질체 구조를 분리 할 수 없는 문제점을 가지고 있다. 따라서 기존의 분석 방법을 이용하여 알레르기 유발 향료 26종의 동시 분석 진행시 리모넨 성분이 검출되었을 경우에는, 추가적으로 해당 리모넨 성분에 대하여 광학 이성질체 구조를 분리하여 확인할 필요가 있다. 따라서 본 연구에서는 고정상이 dimethylpolysiloxane에 cyclodextrin이 직접 결합되어 광학 이성질체를 선택적으로 분리 가능한 Chiral Column을 사용한 GC-MS 분석 방법을 제안하고자 한다.

개발된 시험방법에 대한 유효성을 검증하였으며 추가적으로 시중에 판매되고 있는 화장품 중 리모넨이 검출된 제품에 대하여 기존의 (50%-Phenyl)-methylpolysiloxane 고정상 Column을 이용한 분석방법과 Chiral Column을 이용한 분석방법의 비교 분석을 진행하여 본 연구를 통해 개발된 분석 방법이 효과적으로 리모넨의 광학 이성질체를 분리시키는 것을 검증하고자 한다.

PT-056 [의약품/화장품]

**Study of skin cell physiological activity of Red Ginseng  
low molecular weight polysaccharide**

**Ji Hoon Song, Jeung Hi Han, Young Eun Kim, Seok Chu, Chan Joo Park,  
Ji Ean Lee, John Hwan Lee<sup>2,\*</sup>**

Morechem Co. Ltd.

\*Corresponding author: johnlee@morechem.net

Ginseng is herbal medicine that is widely known pharmacologically, and ginsenoside is known as an active compound. Polysaccharide components of ginseng have received with attention recently because of different biological activities. The polysaccharide content in red ginseng is about three times higher than that in ginseng. This is because it turns into easy-extracted state by steaming. The purpose of this study was to develop a cosmetic material enhanced skin absorption by lowering the molecular weight of polysaccharide which is excellent in skin physiological activity.

Red ginseng was extracted with hot water and ethanol was added to the extract to obtain a crude polysaccharide. As a result, red ginseng polysaccharide was obtained 13.3% thorough drying. This crude polysaccharide was dissolved in water and reacted with cellulase and protease. The enzyme was deactivated at 80°C and then filtered to remove the enzyme. Ethanol was added to this solution to obtain a low molecular weight red ginseng polysaccharide.

The molecular weight of polysaccharide was analyzed by gel permeation chromatography (GPC). Crude polysaccharide average molecular weight was ranged from 2 to 2,600 kDa. The rate of 2 kDa was distributed 24% and 2,600 kDa was 76%. On the other hand, the low molecular weight polysaccharide showed 80% rate of 4 kDa average molecular weight and 20% of 2,400 kDa. This means 56% of polymer polysaccharide were converted to low molecular weight.

Franz cell diffusion test was conducted to check dermal absorption of low molecular polysaccharide. Crude polysaccharide and low molecular polysaccharide were attached to phosphors and treated to franz cells and observed using fluorescence microscope. It was confirmed that almost no absorption was observed in the crude polysaccharide treated group, but in the low molecular polysaccharide treated group, it was absorbed to the dermal layer.

In order to confirm the efficacy on the skin, low molecular polysaccharide was treated with human-derived keratinocyte. Cell activation factors mitochondrially encoded ATP synthase membrane subunit 6(ATP-6) and NADH-ubiquinone oxidoreductase chain 5(ND-5) genes were increased more than 1.5 times compared to the control group. In addition, migration assay using human dermal fibroblast(HDF) showed that the group treated low molecular weight polysaccharide was more effective than the control group.

Through this study, it was confirmed that the low molecular weight of red ginseng polysaccharide increased the skin absorption and the activity on skin. In addition, the structure identification of polysaccharide and the search for activity substance have been continuously studied.

PT-057 [의약품/화장품]

**Development of new analytical method for distinction between Cocamidopropyl betaine(CAPB) and Polyhexamethylene Guanidine(PHMG)**

**Hye-In Kang<sup>1,\*</sup>, Byeong-Jo Kim<sup>2</sup>, Ki-Ho Park<sup>1</sup>, Hyon-Pil Yu<sup>1</sup>,  
Song-Yi Kim<sup>3</sup>, Ji-Hye Bae<sup>1</sup>, Seok-Hyeon Kim<sup>1</sup>**

<sup>1,\*</sup>AK Chem Tech R&D Div. Surfactant R&D Team, <sup>2</sup>AK Chem Tech R&D Div.,

<sup>3</sup>AK Chem Tech 1st Business Div. Strategy&Marketing Team

\*Corresponding author: kkanghi@aekeyung.kr

Cocamidopropyl betaine(CAPB), a representative of amphoteric surfactants, was assured of its safety in CIR(Cosmetic Ingredient Review) since 1991 and is reported as a safe raw material that is not stimulated or sensitized to humans. For this reason, CAPB is still included in various personal care products such as cleansing foam and shampoo.

On the other hand, Polyhexamethylene Guanidine(PHMG) has been extensively included in various biocidal and household chemical goods as disinfectant with activity in a broad spectrum until it is known as the causative agent of pulmonary disease related to humidifiers in 2011. However due to the toxicity of PHMG, it is prescribed as a restricted substance in all spray formulations and air freshener products since the 'humidifier disinfectants' case.

Despite the safety and wide distribution of CAPB, the PHMG analysis method using MALDI-TOF MS, a national standard method, results in the detection of PHMG when analyzing products containing CAPB. However, some experts have been suggested that the result could be an analytical error(March, 2018). Because there is no perfect analytical method suitable for various household chemical products, Whichever analytical method is used, there exist always a limit to the analysis in a specific matrix.

Therefore, this study aims to develop a high resolution method that can overcome the limit of the existing analytical method of misinterpreting the characteristic peak of CAPB as PHMG. We performed analysis using MALDI-TOF MS/MS, MALDI-FT-IR MS and LC-MS/MS(Q-TOF, QQQ) including MALDI-TOF MS. As a result, the LC-MS/MS method developed in this study can distinguish between CAPB and PHMG and can be used as a basic data for national level analysis method for safe regulation of PHMG.

PT-058 [의약품/화장품]

**Method validation of a GC-MS for analysis  
of 1,2,4-trihydroxybenzene in hair dye**

**Eun Song Kim, Ji Yeon Choi, Hae Sung Kim, Jung Hyun Lee\***

Cosmetic Business Team, Consumer Product & Environment Business  
Division, KOTITI Testing & Research Institute

Recently, hair dye has also been converted from quasi-drugs to functional cosmetics. 1,2,4-trihydroxybenzene is raw material widely used by hair dye. So, We conducted the validation of the test method to know the content of the raw material.

We developed a accurate method for the analysis of 1,2,4-trihydroxybenzene by GC-MS using a SIM mode. The separation was achieved on a DB-5MS column by using helium gas at a constant flow rate.

The developed method was validated in accordance with the guidelines established by the ICH. The performance of the method was evaluated by estimation of the specificity, LOD, LOQ, linearity, recovery, and precision and stability. The results demonstrated that the values were within the acceptable range.

Some studies reported toxicity of 1,2,4-trihydroxybenzene, like DNA damages. But the information is insufficient yet, need to further studies. Therefore, we need to continuous monitoring the presence of 1,2,4-trihydroxybenzene in hair dye should be pursued in the interest of human health, and the results of this study confirmed that the developed method has value in this application.

PT-059 [의약품/화장품]

## Monitoring of 39 glucocorticoid compounds in cosmetics by LC-MS/MS

Ji Yeon Choi, Seo Yeon Lee, Hae Sung Kim, Jung Hyun Lee<sup>★</sup>

Cosmetic Business Team, Consumer Product & Environment Business Division,  
KOTITI Testing & Research Institute

<sup>★</sup>Corresponding author: jhlee@kr.kotiti-global.com

Glucocorticoids are known to be highly effective drugs widely used for the treatment of inflammatory diseases. They reduce inflammation and can temporarily relieve the symptoms of inflammatory skin problems of severe plaque psoriasis. Prolonged therapy with glucocorticoid preparations may result in adverse effects like skin atrophy, cutaneous reactivity and some systematic side effect, hypertension, diabetes mellitus, osteoporosis, allergic contact dermatitis, Cushing's syndrome, and so forth. Therefore, there is a need for an continuous analytical screening of cosmetic products such as creams, ointments, and gels, which are banned in the presence of glucocorticoids and sold without health care.

A total of 39 glucocorticoid compounds, including Betamethasone, Dexamethasone, hydrocortisone and their analogues, found to be adulterated in cosmetics were simultaneously examined by LC-MS/MS.

The 694 samples were collected between 2017 and 2019 in South Korea, and method validation was performed to determine the adulterants to the glucocorticoid compounds. LODs, LOQs and linearity ranged from 0.78 to 683.01 ng g<sup>-1</sup>, from 2.36 to 2069.72 ng g<sup>-1</sup>, and from 0.9990 to 0.9999, respectively. The results showed that two glucocorticoid compounds, namely, betamethasone 17,21-dipropionate and clobetasol 17-propionate were detected in 5 of all samples and were found in order of frequency as follows: betamethasone 17,21-dipropionate in 3 samples; clobetasol 17-propionate in 2 samples. betamethasone 17,21-dipropionate, which was the most frequently found adulterant, ranged in levels from 38.80 to 391.40 mg g<sup>-1</sup>, (2017). Although the concentrations of both compounds ranged widely, 17-clobetasol propionate at high concentrations in samples.

PT-060 [식품/농학]

**LC-TOF를 이용한 토마토, 오이, 딸기, 파프리카에서  
Fenpyrazamine 분석법 확립**

**정지완, 이민경, 조지미\*, 이재근, 이성우, 김재호**

국립농산물품질관리원 전남지원

2019년 1월부터 우리나라에서 PLS(Positive List System) 제도가 본격적으로 시행됨에 따라 농산물의 잔류농약 허용기준이 강화되었다. 이미 PLS 제도가 정착되어 있는 나라에 대한 우리나라 농산물의 수출 과정에서 허용되지 않은 농약 검출로 수출 부적합이 종종 발생되고 있는 실정이다. 이에 따라 잔류농약 분석 또한 강화된 허용 기준에 맞춰 신속하고 정확한 분석법이 요구되고 있다. 본 연구에서는 LC-TOF를 이용하여 토마토, 오이, 딸기, 파프리카에 사용되는 fenpyrazamine 농약에 대한 분석법을 확립하여 국내 및 수출 농산물에 대한 안전 관리를 강화하고자 수행되었다.

시료의 추출 방법은 QuEChERS법을 사용하였고 LC-TOF로 기기분석 하였다. 분석을 위한 검출한계는 (0.2 - 1.5)  $\mu\text{g}/\text{kg}$  수준이었고 분석 정량한계는 (0.6 - 4.4)  $\mu\text{g}/\text{kg}$  범위로 나타났으며, 분석 대상 성분의 직선성은 (1 - 50)  $\mu\text{g}/\text{kg}$  범위에서  $R^2 > 0.99$  이었다. 분석 회수율은 저농도(10  $\mu\text{g}/\text{kg}$ )에서는 92.0 %에서 100.0 %, 고농도(50  $\mu\text{g}/\text{kg}$ )에서는 91.1 %에서 104.9 %의 수준이었으며, 상대표준편차는 5.4 % 이내로 나타나 20 % 이내의 기준을 만족하였다. 본 연구를 통해 QuEChERS 전처리와 LC-TOF를 이용한 fenpyrazamine 농약의 분석법이 토마토, 오이, 딸기, 파프리카의 농산물 분석에 효과적으로 적용될 것으로 기대된다.

PT-061 [식품/농학]

**LC-MS/MS를 이용한 토마토, 오이, 딸기, 파프리카에서  
Fenpyrazamine 분석법 확립**

**이동필, 이현선, 조지미\*, 정진선, 이성우, 김재호**

국립농산물품질관리원 전남지원

우리나라 농산물의 해외 수출은 매년 꾸준히 증가하고 있고 이에 따른 신규 농약 사용도 증가하고 있어 안전한 수출 농산물 관리를 위해서 신규 사용 농약에 대한 분석법 정립은 중요한 사항이다. 따라서 본 연구에서는 LC-MS/MS를 이용하여 우리나라 주요 수출 품목인 토마토, 오이, 딸기, 파프리카에 사용되는 fenpyrazamine 농약에 대한 분석법을 확립하여 수출 농산물에 대한 안전 관리를 강화하고자 수행되었다.

시료의 추출 방법은 QuEChERS법을 사용하였고 LC-MS/MS로 기기분석 하였다. 분석을 위한 검출한계는 (1.0 - 2.2)  $\mu\text{g}/\text{kg}$  수준이었고 분석 정량한계는 (3.1 - 6.4)  $\mu\text{g}/\text{kg}$  범위로 나타났으며, 분석 대상 성분의 직선성은 (1 - 100)  $\mu\text{g}/\text{kg}$  범위에서  $R^2 > 0.99$  이었다. 분석 회수율은 저농도(10  $\mu\text{g}/\text{kg}$ )에서는 94.9 %에서 100.3 %, 고농도(100  $\mu\text{g}/\text{kg}$ )에서는 93.9 %에서 101.9 %의 수준이었으며, 상대표준편차는 7.3 % 이내로 나타나 20 % 이내의 기준을 만족하였다. 본 연구를 통해 fenpyrazamine 농약의 분석법이 QuEChERS 전처리와 LC-MS/MS를 이용한 다성분 동시분석에도 적용 가능함을 확인하였고, 토마토, 오이, 딸기, 파프리카의 농산물 분석에 효과적으로 적용될 것으로 기대된다.

PT-062 [식품/농학]

FT-NIRS를 이용한 콩의 형태별 원산지 판별 정확도 연구

이지혜, 강동진, 장은희, 신병곤, 한국탁\*

국립농산물품질관리원 시험연구소 원산지검정과

콩(*Glycine max* L.)은 국민 다소비 잡곡류로서 국내 생산량은 대폭 감소 추세이며 국내산이 외국산에 비해 가격이 높아 원산지 표시위반이 지속적으로 발생하는 품목이다. 본 연구는 원형의 콩을 퓨리에변환 NIRS(FT-Near Infrared Spectroscopy)를 이용하여 원산지 판별 시 콩의 공극 차이로 인해 발생하는 빛의 산란현상 개선을 목적으로 수행하였다. 국내산 150점, 외국산 150점을 수집하여 시료의 수분함량이 14%이하가 되도록 건조 후 균분기로 축분하여 2분된 시료의 중량이 200g이 되도록 한다. 원형의 콩은 2분된 시료 중 임의로 그 하나를 선택하여 NIRS 기기 분석 소요량인 40g이 될 때까지 축분하여 추가적인 처리과정 없이 NIRS 분석에 사용하였다. 분쇄된 콩은 2분된 시료 중 나머지 200g을 -40°C에 8시간 예비동결 후 실험용밀(Rotor mill, pulverisette 14, FRITSCH, Germany)로 분쇄하여 0.5mm 필터를 통과한 분말을 시료로 사용하였다. 근적외선 분광분석기(FT-NIRS Tango, Bruker optics)를 사용하여 11,500  $\text{cm}^{-1}$  ~ 4,700  $\text{cm}^{-1}$  범위에서 16  $\text{cm}^{-1}$  간격으로 파장별 흡광도를 3반복 측정하여 raw data를 얻었다. 원산지판별 모델식 작성을 위해 PLS-DA 알고리즘이 내장되어 있는 Opus(Ver 7.0, Bruker optics) 프로그램을 사용하였다. 판별 모델식의 정확도를 분석한 결과 N=200 일 때 원형의 콩과 분말 콩 모두 원산지검정법 정확도 기준인 95%이상을 만족했다. 하지만 100의 샘플이 추가된 N=300은 분쇄된 콩에서는 정확도가 96.6%인 반면 원형의 콩에서는 정확도가 90.0%로 낮았다.



PT-063 [식품/농학]

**The Optimum conditions for analysis of Dicamba residue in agricultural products using QuEChERS and HPLC-MS/MS**

**Hyunjeong Cho<sup>\*</sup>, Chai Uk Lim, Hyo Young Kim, Min Ju Kim, Jae Gon Kim**

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

<sup>\*</sup>Corresponding author: hjcho201@korea.kr

Rapid residue method for Dicamba used a broad-spectrum herbicide to control weed of grain crops and legumes have been needed to ensure the safety of the domestic agricultural products for export. Dicamba is a methoxybenzoic acid that is O-methylsalicylic acid by chloro groups at positions 3 and 6, and one of the acidic and polar pesticides, the rapid determination of it has been difficult when it was analyzed with agricultural matrixes. Finally, the optimum condition of rapid analysis of Dicamba was set using QuEChERS and HPLC-MS/MS; furthermore, it meets for harmonization of Positive List System(PLS) or Zero Tolerance for agricultural chemical residues of the countries that we export agricultural products. 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 90.0 ~ 107.3% with relative standard deviations (RSD) of < 8.0%, and the limit of quantification (LOQ) of the method was below 7.0 µg/kg in all commodities. At this time, linear calibration functions with correlation coefficients were obtained  $r^2 > 0.999$ . The developed method is highly sensitive and accurate as well; also it is satisfied with the quantification level for PLS.

PT-064 [식품/농학]

**Development and Validation of Analytical Method for Prohydrojasmon  
in Major Agri-exports using GC-MS/MS**

**Minju Kim, Hyo Young Kim, Chae Uk Lim, Heejeong Park, Hyunjeong Cho\***

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

We developed the method for Prohydrojasmon 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 single method for Prohydrojasmon has been developed using the modified QuEChERS method with gas chromatography-tandem mass spectrometry (GC-MS/MS) in 5 agricultural commodities (Apple, Paprika, Pear, Strawberry, Tomato). Using matrix-matched calibration standards(MMCSs), it was demonstrated that a minimal concentration of 10-100 µg/kg of analyte in the matrix is required for the consistent identification of targeted pesticides with two MRM transition. The Method was validated by the precision and accuracy results. All commodities spiked with two concentration levels of 10 and 100 µg/kg. The recoveries were within 89.6 ~ 105.3 % with relative standard deviations (RSD) of ≤5.2%, and the limit of quantification (LOQ) of method was 10 µg/kg in all agricultural commodities. Linear calibration functions with correlation coefficients were obtained  $r^2 > 0.999$ .

For Prohydrojasmon residues analysis, this single method with GC-MS/MS was used to identify and quantitate pesticides residues with concentrations ranging from 10 to >100 µg/kg in a variety of agricultural samples, demonstrating fitness for screening applications.

PT-065 [식품/농학]

## Determination of Pymetrozine in Agri-products by Modified QuEChERS

Chai Uk Lim, Hyo Young Kim, Heejeong Park, Minju Kim, Hyunjeong Cho\*

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

\*Corresponding author: hjcho201@korea.kr

A liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) method was developed for the determination of Pymetrozine pesticide in 5 agricultural products. A simple and rapid sample preparation technique, based on modified 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 82 ~ 88% with relative standard deviation (RSD) of 2.2 ~ 5.3% and the limit of quantification (LOQ) of methods were below 1 µg/kg, and the correlation coefficient (r<sup>2</sup>) of matrix-matched standards were > 0.997

PT-066 [식품/농학]

**Development and Validation of TFNA and TFNG  
using LC-MS/MS in Major Agri-exports**

**Hyo Young Kim, Chai Uk Lim, Heejeong Park, Minju Kim, Hyunjeong Cho\***

Experiment & Research Institute, National Agricultural Products Quality Management Service

\*Corresponding author: hjcho201@korea.kr

TFNA and TFNG are metabolite of Flonicamid. Flonicamid is widely used to cotton aphid on fruits and vegetables. Each Country has a different residue definition of pesticide. Regulatory authorities need to choose which residue(s) will be used for dietary risk assessment and setting and enforcing MRLs. In Korea, residue definition of flonicamid is a flonicamid. But some countries, including U.S.A and Japan, have a residue definition of flonicamid include TFNA and TFNG. We developed the method for these metabolites 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 TFNA and TFNG 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.

PT-067 [식품/농학]

## Development of Strontium Analytical Method in Chaga Mushroom

Jeong-Yun Hwang, Hye-Eun Lee, Yeseul Park, Taehyun Ahn,  
Jang Duck Choi, Gil-Jin Kang\*

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

Among the radionuclides, the beta radionuclide refers to a radionuclide that releases beta rays. Most of the domestic and foreign institutions' beta nuclide analysis method is developed for environmental monitoring purposes and has a low detection limit, but it takes a long time to analyze. In this study, we developed a strontium analytical method for the emergency response of food safety in case of radiation accident. In order to analyze strontium in food, it was studied how to remove disturbing elements such as organic and inorganic substances from the sample and to separate and purify only the nuclear species to be analyzed. Chaga mushrooms (*Inonotus obliquus*), which had the lowest recoveries in the samples, were used as representative samples for the development of the analytical method. The analytical method was developed by adjusting the Sr-resin height and using the carbonate precipitation method. The detection nuclear species, strontium-90, was analyzed using a LSC. MDA's mean of the existing analytical method (Sr-resin, 4 cm), carbonate precipitation method and the developed analytical method (Sr-resin, 6 cm) were 1.20, 0.33 and 0.30 Bq/kg, respectively. The recovery rate of strontium was analyzed by gamma spectroscopy with strontium-85. The recovery rates of strontium-85 were 21.5, 70.8 and 70.6%, respectively. The MDA and recovery rates of the carbonate precipitation method and the developed analytical method are similar, but the carbonate precipitation method is complicated and requires a large amount of sample. Therefore the analytical method was established by adjusting the height of Sr-resin to 6 cm in consideration of simplification of analysis process, increase of recovery rate, and lower detection limit.

Key word: Strontium, LSC (Liquid scintillation counter), Gamma spectrometer, MDA (The mean of minimum detectable activity), recovery rate

PT-068 [식품/농학]

**Simultaneous analysis of BPF related compounds migrating  
from food metal cans into food simulants**

**Joung Boon Hwang\*, Subi Lee, Jinhwa Yeum, Jae Chun Choi, Yunsook Kang\***

Food Additives and Packaging Division, National Institute of Food and Drug Safety Evaluation

\*Corresponding author: yunsook@korea.kr

Most of metal food cans are coated by epoxy-based resin or PVC organosol to prevent metal corrosion. Bisphenol A diglycidyl ether (BADGE) and novolac glycidyl ether (NOGE, representatively BFDGE) are the most common materials used for synthesizing epoxy resins. And they are also added as additive for the elimination of surplus hydrochloric acid in PVC organosol. BADGE and NOGEs could migrate from the inner epoxy-coating of can into foodstuffs, and react with food ingredient. The reaction of BADGE and NOGEs with foodstuffs is the hydrolytic opening of the epoxy rings to form derivatives (BADGE·2H<sub>2</sub>O, BFDGE·2H<sub>2</sub>O) 3ring-, 4ring-, 5ring-, 6ring-NOGE). On the other hand, BADGE and NOGEs in organosol are used to remove react with hydrochloric acid and lead to formation of chlorinated derivatives such as BADGE·HCl, BADGE·HCl·H<sub>2</sub>O, BADGE·2HCl, BFDGE·HCl, BFDGE·2HCl and BFDGE·HCl·H<sub>2</sub>O. BADGE, BFDGE and NOGE are regulated by the European Commission. The Commission Regulation 1895/2005 has established specific migration limit (SML) of 9 mg/kg for the sum of BADGE and its hydrolysis (BADGE·H<sub>2</sub>O, BADGE·2H<sub>2</sub>O); and 1 mg/kg for the sum of chlorinated derivatives (BADGE·HCl, BADGE·HCl·H<sub>2</sub>O, BADGE·2HCl) in foodstuffs or food simulants. And the use or existence of BFDGE and NOGEs has been prohibited due to lack of toxicity assessment data after January 2005. However, Korea does not have a SML and studies on related the compounds are not sufficient.

In this study, we have established a analytical method for 12 compounds of BADGE and BFDGE related compounds migrating from food metal can into food simulants using liquid chromatography/mass spectrometry (HPLC/MS). Migration test was applied to water, 4% acetic acid, 50% ethanol and *n*-heptane as food simulants. The parameters for HPLC/MS were optimized and the method was validated in terms of linearity, precision, recovery, limit of detection and limit of quantification.

PT-069 [식품/농학]

**Determination of residual detergent after dishwashing  
by liquid chromatography-mass spectrometry**

**Sun-young Park<sup>1</sup>, Yoon Hwan Kim<sup>1</sup>, Heesoo Pyo<sup>1</sup>, Bong Chul Chung<sup>1</sup>, Jeongae Lee<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>Molecular Recognition Research Center, Korea Institute of Science and Technology

Most detergents consist of surfactants such as cationic, anionic or non-ionic surfactants. This study was conducted to determine the residual surfactant and its persistence after dishwashing. The aim of the study was to monitor the amount of migration of detergents sold on market. In order to confirm the loss of residual detergent, the experiment was conducted as follows. The detergent sample was diluted to 2.25 mL/L with deionized water at 25 °C and 60 °C. The solution was poured into 250 mL glass beaker and left for 10 min. Then, the solution in the beaker was discarded. The beaker was washed with 50 mL of deionized water (25 °C, 60 °C or 100 °C) and the washed water was transferred to another beaker. And 50 mL of deionized water was added to the original beaker and left for 30 min, and the washing process was repeated 5 times. The amount of migration was measured when surfactants were no longer detected. All samples were boiled dry and reconstituted with 10 mL of deionized water. Finally, 10 µL of the sample was injected into liquid chromatography-mass spectrometry. As the result, most of surfactants were washed out more at 60 °C than 25 °C. When The detergent on the wall of the dish rinsed well more than 5 times at 25 °C and 3 times at 60 °C, the detergent was not migrated and no detergent remained.

PT-070 [식품/농학]

## 포도 품종별 다량 및 미량 무기성분 함량 분석

서동원<sup>1,\*</sup>, 김소영<sup>1</sup>, 박지수<sup>1</sup>, 이준영<sup>1</sup>, 구민선<sup>1</sup>, 최용민<sup>2</sup>

<sup>1,\*</sup>한국식품연구원 식품분석센터, <sup>2</sup>농촌진흥청 국립농업과학원 식생활영양과

\*Corresponding author: dwseo@kfri.re.kr

식품성분 DB는 국민건강, 농업 및 국가간 무역 등 여러 분야에 정보를 제공한다. 공중보건연구, 교육 정책, 질병예방 및 건강증진에 관련된 분야에도 사용될 수 있다. 본 연구에서는 국가표준식품성분 DB 구축과 관련하여 포도 11품종의 다량 및 미량 무기성분 함량에 대해 분석하였다. 무기질 분석법 유효성 검증을 위해 NIST Standard Reference Material (SRM) 2387을 사용하였다. Microwave 전처리와 inductively coupled plasma (ICP) optical emission spectrometer (OES) 및 ICP-mass spectrometer (MS) 로 분석하였다. Correlation coefficient ( $r^2$ )는 0.999 이상으로 양호한 직선성을 나타내었다. 검출 및 정량 한계는 각각 0.45 mg/kg 및 1.51 mg/kg 이하였다. 포도의 대표품종인 캠벨얼리의 경우 다량 무기질 Ca, Fe, Mg, P, K, Na, Zn, Cu 및 Mn 함량은  $4.30 \pm 0.10$ ,  $0.11 \pm 0.00$ ,  $3.63 \pm 0.02$ ,  $19.77 \pm 0.13$ ,  $190.49 \pm 3.82$ ,  $0.47 \pm 0.01$ ,  $0.09 \pm 0.00$ ,  $0.10 \pm 0.00$  및  $0.18 \pm 0.00$  mg/100g로 나타났다. 미량 무기질 Se, Mo은  $0.31 \pm 0.03$ ,  $0.31 \pm 0.00$  ug/100g으로 나타났다. 본 연구는 농촌진흥청 협동연구사업 (PJ01339702)의 지원을 받아 수행된 연구 성과입니다.



PT-071 [식품/농학]

## 새싹 밀 주정 농도별 추출물의 항산화 성분 및 생리활성 비교

서혜영, 김현영, 서우덕, 이미자, 장기창, 함현미\*

농촌진흥청 국립식량과학원 작물기초기반과

\*Corresponding author: hamhm@korea.kr

새싹 밀은 아미노산, 미네랄, 비타민 등 영양성분이 풍부하고 플라보노이드 등 기능성분이 다량 함유되어 있는 것으로 보고되어 있다. 본 연구에서는 주정 농도별 새싹 밀 추출물을 이용하여 항산화 성분 및 활성, 효소 활성 등 생리활성을 비교·분석하고자 하였다. 새싹 밀은 농촌진흥청 국립식량과학원 시험 포장에서 재배한 새싹 밀을 이용하였다. 새싹 밀은 건조 및 분쇄 후 샘플의 약 20배에 해당하는 농도별 (0%, 30%, 50%, 80% 및 100%) 주정을 이용하여 교반기에 24시간 추출하였다. 2회 반복 추출 후 여과 및 농축하여 추출물을 제조하였다. 항산화 성분 및 활성으로 총 폴리페놀 함량 및 ABTS, DPPH 라디칼 소거능을 측정하였고, 항당뇨 활성의 대표적 효소 활성인  $\alpha$ -glucosidase 억제활성 및 미백활성의 대표적 효소활성인 tyrosinase 억제 활성을 측정하였다. 연구 결과 주정농도별 새싹 밀 추출물의 수율은 50% 및 80% 주정 추출물에서 33.9% 및 36.0%로 높게 나타났다. 총 폴리페놀 함량은 50% 주정 추출물이  $77.6 \pm 2.3$  mg GAE/g로 가장 높게 나타났으며, ABTS 및 DPPH 라디칼 소거능 역시 50% 주정 추출물에서  $78.7 \pm 1.9$  mg TEAC/g 및  $44.3 \pm 1.5$  mg TEAC/g으로 주정 농도별 추출물 중 가장 높은 활성을 보였다.  $\alpha$ -Glucosidase 억제 활성 및 tyrosinase 활성 측정 결과 두 효소 억제 활성 모두 50% 이상 주정 추출물에서 효소 억제 활성이 나타났으며, tyrosinase 억제 효과는 50% 주정 추출물이 14.4%로 가장 우수한 활성을 나타냈다. 따라서 새싹 밀은 항산화 성분 및 생리활성이 가장 우수하게 나타난 50% 주정이 추출용매로 가장 효과적일 것으로 판단되며, 본 연구 결과는 새싹 밀의 생리활성 연구에 있어 기초 자료로서 활용될 수 있을 것으로 기대한다.

PT-072 [식품/농학]

**Compositional changes of cacao beans during roasting  
process by NMR spectroscopy**

**이선호<sup>1,2</sup>, 이윤희<sup>1</sup>, 나윤철<sup>1</sup>, 이진규<sup>2,\*</sup>, 방은정<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>한국기초과학지원연구원 서울서부센터, <sup>2</sup>이화여자대학교 식품공학과

\*Corresponding author: jkrhee@ewha.ac.kr, bej@kbsi.re.kr

Nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, a powerful tool widely used in food science and industry, can be applied for quality assessment, screening, and processing of food stuff. In this study, the compositional changes of cacao beans during roasting process are characterized using NMR spectroscopy combined with multivariate analysis. We obtained <sup>1</sup>H NMR spectra of green and roasted cacao bean extracts containing small molecules such as amino acids, organic acids, sugars, methylxanthines, and phenols. To investigate the overall compositional changes during the roasting process, multivariate data analysis was performed on the <sup>1</sup>H NMR dataset and quantitative values of 20 components are analyzed statistically. During roasting process, components such as sugar, amino acids and (-)-epicatechin are decreased and organic acids tend to increase. In this study, we provide comprehensive information on changes in components of cacao beans during roasting process and show the NMR-based approach is useful to understand and control of food process such as roasting.

PT-073 [식품/농학]

**The development of simultaneous analytical method for vitamin  
A and E in foods and health functional foods**

**Do-Yeon Lee<sup>1</sup>, Eun Mi Seo<sup>1</sup>, Min Hee Kim<sup>1</sup>, So Ra Min<sup>1</sup>,  
Jeong Hye Kim<sup>1</sup>, Jang-Hyuk Ahn<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Department of Research & Development, Fore Front TEST, Republic of Korea

<sup>2</sup>Food Science & Technology, CHA University, Republic of Korea  
ahn5470@hanmail.net, +82-031-734-7155

The purpose of this study was to develop the simultaneous analytical method for vitamin A and E in foods and health functional foods and evaluate the applicability into commercial products in Korea market. The developed analytical method for vitamin A and E was standardized for a detail describing the conditions of saponification in preparation process based on the international certified test methods. The simultaneous analytical conditions of vitamin A and E were 325 nm and 298 nm, respectively, using liquid chromatograph UV detector. Validation of the method was satisfied in MFDS guideline including linearity, LOD, LOQ, accuracy, precision and interlaboratory cross-check. The method was applied in samples including cereals, infant formula and health functional foods, as results of analysis, these were suitable to the standard specification, respectively.

**Acknowledgement**

This research was supported by a grant (18162MFDS083) from Ministry of Food and Drug Safety in 2018.

PT-074 [식품/농학]

**Stability of food additive antioxidants in stock solution while  
preservation for expiration test**

**Min-Hee Kim<sup>1</sup>, Do-Yeon Lee<sup>1</sup>, Eun-Mi Seo<sup>1</sup>, So Ra Min<sup>1</sup>,  
Jeong Hye Kim<sup>1</sup>, Hye-Won Lee<sup>1</sup>, Jang-Hyuk Ahn<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Department of Research & Development, Fore Front TEST, Republic of Korea

<sup>2</sup>Food Science & Technology, CHA University, Republic of Korea

ahn5470@hanmail.net, +82-031-734-7155

Antioxidants have a variety of uses in the industry. They are most commonly used as food preservatives and supplements. The purpose of this study was to analyze the stability of antioxidant standards during storage. Four different antioxidant standard solutions, Propyl Gallate(PG), (Butylated Hydroxytoluene(BHT), Butylated hydroxyanisole(BHA) and tert-Butylhydroquinone(TBHQ), were dissolved in isopropyl alcohol and acetonitrile (1: 1) and analyzed by HPLC-PDA(High Performance Liquid Chromatography-Photodiode Array Detector) for 2 weeks. Analytical methods were as follows: Isopropyl alcohol solution was purchased from six companies and mixed with acetonitrile to analyze standard solutions. As a result of analyzing the standard solution, the area value of TBHQ was remarkably decreased to 80%. Antioxidants are exposed to oxygen and sunlight, leading to oxidation. For this reason, the stability of the standard solution of the antioxidant is considered to be decreased. In the case of standard solutions of antioxidants, it would be appropriate to carry out the same day of manufacture on that day.

**Acknowledgement**

This research was supported by a grant (16162MFDS013) from Ministry of Food and Drug Safety in 2019.

PT-075 [식품/농학]

**Separation and characterization of nanoparticles in food-related material using field-flow fractionation (FFF)**

**Dongsup Song<sup>2</sup>, Meiyu Zhang<sup>2</sup>, Sang-Yong jung<sup>3</sup>,  
Woonjung Kim<sup>2</sup>, Jae-Min OH<sup>4</sup>, Seungho Lee<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea,

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon 34054, Korea,

<sup>3</sup>Department of Chemistry and medical chemistry, Yonsei University, Wonju 26493, Korea,

<sup>4</sup>Department of Energy and Materials Engineering, Dongguk University, Seoul 04620, Korea,

<sup>4</sup>Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea

\*Corresponding author: slee@hnu.kr

Various types of nanoparticles are used in food or food packaging materials. Nonetheless, there has not yet been enough information on the toxicity of those nanoparticles. Some nanoparticles could be harmful to human cells by blocking membrane pores through adsorption and aggregation.

The adsorption, aggregation or even dissolution of the nanoparticles are known to be affected by their chemical and physical properties, which depend on the environments such as pH, ionic strength, and the type of the dispersant. It is thus necessary to analyze the adsorption and coagulation of nanoparticles in various biological environments.

Field-flow fractionation (FFF) provides separation of particles according to their sizes or masses, allowing determination of the particles size distribution. In this study, sedimentation FFF (SdFFF) and flow FFF (FIFFF) were tested for separation and characterization of nanoparticles (e.g., TiO<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub>) from food or food-related products. Then the results from FFF were compared with those from dynamic Light Scattering (DLS).

FIFFF provides separation of a mixture of TiO<sub>2</sub> and sucrose powder by flushing out the sucrose through the membrane by the cross flow, but suffers from some particle-membrane interaction. It seems that SdFFF performs better than FIFFF in separation and size characterization of high density inorganic nanoparticles such as TiO<sub>2</sub>, ZnO and SiO<sub>2</sub>.

PT-076 [식품/농학]

**Characterization of low-molecular weight honey protein expression by MALDI-FTICR-MS for determination of geographical and floral origin**

**원유광, 이다빈, 최혜민, 주민희, 백민석, 양주현, 장혜지, 김정권\***

충남대학교 화학과

\*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Honey, along with bee pollen, wax and royal jelly, is one of the most notable agricultural products produced by honey bees (*Apis* genus). Due to its importance and economical value, attempts of adulteration and mislabelling of honey origin remains a severe problem in food authenticity and market regulations. In this study, we introduced the analysis of low-molecular weight honey protein expression by Matrix-assisted Laser Desorption/Ionization with Fourier-transform Ion Cyclotron Resonance Mass Spectrometry (MALDI-FTICR-MS) as a identification method for geographical and floral origin of honey samples. Eight honey samples were collected from various geographical and floral origins from Southern Vietnam region, and its protein contents are extracted from the sugar-rich substrate by 2000-MWCO dialysis in 48h. The analysis of honey proteins were performed using MALDI-FTICR-MS in the range of  $m/z$  3,000~10,000 and the distribution of acquired data were visualized by multivariate statistical data analysis. The preliminary data using this approach suggest that the distinct characteristics of honey proteins could be a useful tool for differentiating honey by its geographical and floral origin.

PT-077 [식품/농학]

## 사료 중 QuEChERS를 이용한 곰팡이독소 추출 효율 탐색

조형욱<sup>1\*</sup>, 선정훈<sup>2</sup>, 황규원<sup>2</sup>, 문준관<sup>2</sup>

<sup>1</sup>\*한경대학교 산학협력단, <sup>2</sup>한경대학교 식물생명환경과학과

\*Corresponding author: hyeongwook.jo@hknu.ac.kr

사료 중 곰팡이독소를 분석하기 위하여 TLC, HPLC, ELISA, GC를 이용하고 HPLC 및 GC를 이용하여 분석할 경우 유도체화 및 IAC 등 단성분 및 동일 계열만 분석하는 방법으로 되어 있다. 하지만 현재 방법은 시간과 비용이 많이 발생하므로 시간과 비용을 최소화하고 신속정확하게 분석할 수 있도록 QuEChERS(Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged, Safe)를 이용한 곰팡이독소 추출 효율을 탐색하였다. 분석대상은 곰팡이독소 중 허용기준이 설정되어 있는 aflatoxin(B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>, G<sub>1</sub>, G<sub>2</sub>) 및 ochratoxin A와 관리기준이 설정되어 있는 zearalenone(이성질체 포함), fumonisin(B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>), T-2 toxin, HT-2 toxin 및 deoxynivalenol 총 6그룹 13성분이다. LC-MS/MS를 이용하여 분석하였으며, 추출방법은 포름산이 첨가된 증류수의 양에 따른 4가지 방법으로 효율을 탐색하였으며, 그에 따른 매트릭스효과(ME, Matrix effect)도 함께 검토하였다. 시료 5g에 증류수와 acetonitrile를 첨가하여 30분간 추출한 후, AOAC extraction kit를 첨가하여 1분간 혼합하였다. 추출한 시료를 4,000 rpm에서 5분간 원심분리하여 상등액을 분취하여 분석을 위한 시료로 사용하였다. 분석결과 매트릭스효과는 -90 ~ 153.4 %의 차이를 보였으며, 대체로 증류수의 함량이 커질수록 매트릭스효과가 커짐을 확인할 수 있었다. 또한 aflatoxin(B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>, G<sub>1</sub>, G<sub>2</sub>), zearalenone, Deoxynivalenol의 경우, 증류수의 함량이 커질수록 추출 효율이 감소하는 경향을 보였고, fumonisin(B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>) 및 ochratoxin A의 경우 증류수의 함량이 커질수록 추출효율이 증가하는 경향을 보였다.

PT-078 [식품/농학]

**A UPLC-ESI-Q-TOF method for rapid and accurate identification and quantification of tropane alkaloids in *Datura stramonium***

**Wontae Jeong<sup>1</sup>, Hyunki Cho<sup>1</sup>, Hyeongryeol Lee<sup>1</sup>, Kihoon Song<sup>1</sup> and Heongbin Lim<sup>★</sup>**

<sup>1</sup>★Department of Industrial Plant Science & Technology, Chungbuk National University, Cheongju, Chungbuk 28644, Republic of Korea

★Corresponding author: heongbin@chungbuk.ac.kr

Tropane alkaloids (TAs) are secondary metabolites that contain a tropane ring in their chemical structure. TAs occur naturally in many members of the plant family *Solanaceae*. Some TAs has pharmacological properties and can act as anticholinergics or stimulants. We developed a novel ultra-performance liquid chromatography-quadrupole time-of-flight (UPLC-Q-TOF) mass spectrometry method that allows sensitive, rapid, and reliable quantification and identification of eight representative TAs (tropine, anisodamine, homatropine, scopolamine, norscopolamine, atropine, apocopolamine and apoatropine) that exhibit physiological activity in *Datura stramonium* (*D. stramonium*). The analytes were separated on a C18 column with 20 mM Ammonium formate containing water and acetonitrile, The mass information obtained by the Q-TOF analyzer was established as a libraries. All analytes were ionized to quasi-molecular ions  $[M+H]^+$  that were positive in an electronic ion source and rich fragment ion patterns were observed at CID (collision induced dissociation) energy 30-40 eV. The proposed analytical method was verified and the results showed excellent linearity ( $R^2 > 0.9956$ ), limit of detection (1 ng/mL to 20 ng/mL) and limit of quantification (33 ng/mL to 66 ng/mL). The validated UPLC-Q-TOF method was applied to the analysis of extracts from the root and leaves of *Datura stramonium*, allowing the identification of seven alkaloids by comparison of retention times, molecular ions, and fragmentation patterns with those of reference compounds. The present results demonstrate that the proposed UPLC-Q-TOF method can be useful for rapid and accurate investigation of TAs of medicinal plants.



PT-079 [식품/농학]

**Suppression of lipid accumulation in adipose cells using phytochemical extracted from flavonoid enhanced barley sprouts**

**Jaesil Kim<sup>2</sup>, Lorrenne Caburatan<sup>1</sup>, Yen Le Thi<sup>1</sup>, Jiyeon Kim<sup>2</sup>, Joonho Park<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Department of Fine Chemistry, Seoul National University of Science and Technology, Korea

<sup>2</sup>Department of Food Science and Technology, Seoul National University of Science and Technology, Korea

*Hordeum vulgare* buds contain high concentrations of phytochemicals, including polyphenol, flavonoids, and tannins. These show the strong antioxidants, and anti-proliferative abilities. Therefore, these can prevent nutrition-related diseases as well as improve its efficacy. The aim of this study was to examine the conditions to increase secondary metabolites and fat-lowering effects of barley sprout extracts. First, we tested the effects of specially treated waters (STWs), micro nutrients, and LED lights on seed germination, growth and enhancing phytochemicals. The effects of STWs enhanced seed germination. Among various trace elements, Zn, Bo, and selenium showed the significant increasing of growth and flavonoid production in barley sprout. In addition, the exposure of *Hordeum vulgare* plants under the blue light emitting diode (LED) light strongly induced gene related to flavonoid biosynthesis than those in white and red LED light. Especially, the content of saponarin was the highest under the treatment of blue LED and boric acid. Using Oil-red O staining, lipid accumulation was determined in 3T3-L1 adipocytes. The result showed the suppression of lipid accumulation. In addition, In HepG2 hepatocytes, both pure saponarin and Barley sprout extract showed inhibitory effects on lipid accumulation.



# 포스터 발표 II

2019. 05. 17



PF-001 [법과학]

**차량 역과여부 규명을 위해 타이어 성분의 trifluoroacetic anhydride를  
이용한 유도체화 후 GC/MS 분석**

GC/MS analysis on the tire additive through derivatization by trifluoroacetic  
anhydride for revealing run-over by vehicle

**곽성신<sup>1</sup>, 이준배<sup>1,\*</sup>, 정용애<sup>1</sup>, 전수경<sup>1</sup>, 박우용<sup>2,3</sup>, 김영준<sup>3</sup>, 팽기정<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>국립과학수사연구원 대전과학수사연구소, <sup>2</sup>국립과학수사연구원 서울과학수사연구소,

<sup>3</sup>충남대학교 화학과, <sup>4</sup>연세대학교 화학과

\*Corresponding author: pajlee@korea.kr

차량증가에 따라 차량에 의한 사고 또한 증가하는 추세이다. 심각한 인명사고뿐만 아니라 차량 타이어에 단순 역과 되는 사례 또한 적지 않은 실정이다. 본 연구에서는 타이어 역과여부를 밝히기 위해 신발이나 의류의 접촉부위 등에 극미량 잔류하는 타이어 성분을 분석하고자 하였다. 통상적으로 충격이나 역과 부위에 잔류하는 고무 입자의 분석은 크기가 극히 미세할 뿐만 아니라 고무자체의 분석특성이 결여되어 있어 어려움이 수반된다. 이러한 어려움을 극복하기 위하여 타이어 제조 시 사용되는 향산화제 성분인 N-(1,3-dimethylbutyl)-N'-phenylbenzenediamine(6PPD)을 지표로 하여 역과여부를 규명하고자 하였다. 타이어 접촉이나 충격부위에서 타이어 성분을 검출하기 위해 용제추출 과정을 거친 다음 해당 성분을 분리하고 GC/MS 분석을 통해 밝히는 것이 일반적이다. 이에 더하여 용제추출물을 열분해 (pyrolysis) 장치에서 농축하여 분석할 경우 개선된 결과를 얻을 수도 있으나 target component 뿐만 아니라 기타 다른 성분 또한 증가하기 때문에 이 방법 또한 검출이 어려운 경우가 있다. 이런 어려움에 대처하기 위해 용제추출물에 대해 silylation, acylation 및 alkylation을 시도하여 GC/MS 분석결과를 비교 분석하였다. 여러 가지 과정 중 acylation에 의해 양호한 결과를 얻었으며, trifluoroaceticanhydride(TFAA), pentafluoropropanoicanhydride(PFPA), methyl chloroformate(MCF) 등의 여러 가지 acylation reagents 중에서 가운데 TFAA를 사용하였을 때 가장 양호한 결과를 얻을 수 있었다.

PF-002 [법과학]

### 생체시료 중 GC/MS에 의한 methyl alcohol 분석 사례

A case study of analyzing methyl alcohol in bio specimen by GC/MS

안대준<sup>1</sup>, 이준배<sup>2\*</sup>, 정용애<sup>2</sup>, 전수경<sup>2</sup>, 곽성신<sup>2</sup>, 박우용<sup>3,4</sup>, 김영준<sup>4</sup>, 팽기정<sup>5</sup>

<sup>1</sup>국립과학수사연구원 광주과학수사연구소, <sup>2</sup>국립과학수사연구원 대전과학수사연구소,

<sup>3</sup>국립과학수사연구원 서울과학수사연구소, <sup>4</sup>충남대학교 화학과, <sup>5</sup>연세대학교 화학과

\*Corresponding author: pajlee@korea.kr

Methyl alcohol은 각종 용제, 의약품 등의 제조에 사용되는 것으로 알려져 있는 무색투명한 액체로서 음용 시 체내에서 대사되어 독성이 강한 formaldehyde 및 formic acid를 생성한다. 치사량에 대해서는 개인차에 따라 일정치 않으나 일반적으로 30 ~ 100 mL로 알려져 있고 혈중 농도가 0.033%(=330  $\mu$ g/mL)가 되면 실명, 0.114% (=1,140  $\mu$ g/mL) 이상에서는 사망하는 것으로 보고되어 있다. Methyl alcohol의 분석은 통상적으로 innowax 또는 carbopack column을 통하여 분리하고 GC-FID에 의해 이루어지는 것으로 알려져 있다. 이때 ethyl alcohol의 대사체나 기타 다른 성분들과 머무름 시간이 겹칠 수 있어 정성 및 정량에 어려움을 야기할 수 있다. 이에 대처하기 위해 GC/MS를 통해 분석할 수 있으나, 이의 분자량이 32.04 g/mol 로서 산소(O<sub>2</sub>)와 유사할 뿐만 아니라 낮은 끓는점 (65 °C) 때문에 분석 초기에 유출되어 다른 저비점 성분에 의한 간섭이 있을 수 있다. 따라서 본 연구에서는 pyran계 물질을 이용한 유도체화 후 GC/MS 분석을 통해 methyl alcohol을 뚜렷하게 확인할 수 있었으며, 이를 생체시료 중 methyl alcohol 분석에 적용하여 혈액 100  $\mu$ L에 대해 표준물 첨가법을 이용하여 1,210  $\mu$ g/mL 검출하였다. 검출한계는 5  $\mu$ g/mL 이었으며 선형성은  $r^2$ 가 0.995 이상이었다. 특히 Ion Chromatography에 의해 formic acid를 590  $\mu$ g/mL 확인함으로써 methyl alcohol에 의한 중독임을 추정할 수 있었다.

PF-003 [법과학]

**Analysis of Ethyl Glucuronide(EtG) in Hair for  
the Diagnosis of Chronic Alcohol Abuse of Korean**

**Bokyoung Gong, Soyeong Ju, Young-Hoon Jo, Dasom Jung, Mia Kwon<sup>★</sup>**

Forensic Chemistry Division, National Forensic Service, Wonju 26460, Republic of Korea

<sup>★</sup>Corresponding author: miakwon@korea.kr

Alcohol, which can easily be obtained in the same way as ordinary beverages, is harmful enough to cause death due to excessive drinking and chronic alcohol intake, so it is important to maintain a proper amount of drinking and healthy drinking habits. In addition, the incidence of behavioral disturbances and impaired judgements that can be caused by chronic alcohol drinking of more than adequate amounts of alcohol is also significant. Accordingly it is very useful for forensic science to check whether the person involved is drunken or is alcoholism state in various accidents. Currently, in Korea, alcohol consumption is determined by detecting the level of alcohol or alcohol metabolism 'ethyl glucuronide (EtG)' in blood or urine samples. However, analysis of alcohol or EtG in blood or urine can only provide information about the current state of alcohol consumption because the detectable time is short. Therefore, the purpose of this study was to analyze the alcohol consumption and the degree of alcohol inebriation for a long period of time by detecting EtG in hair that could be stable as an long-term direct alcohol metabolite bio-marker. In this study, we have established and validated a method to extract and detect EtG in hair consistently and efficiently using liquid chromatography tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) for the chronic alcohol abuse in Korean cases, and the EtG concentration in hair made a comparative study with alcohol consumption. The results of this study can be applied not only diagnosis and to monitoring the alcohol abuse of Korean in clinical cases, but also to the process of re-issuance and renewal of driver's licenses and legal procedures related to custody.

PF-004 [법과학]

## An indicator for alcoholic ketoacidosis to forensic analysis in post-mortem cases

조영훈, 공보경, 김지원, 정다솜, 민지숙, 권미아\*

국립과학수사연구원 법화학과

\*Corresponding author: miakwon@korea.kr

**Introduction:** 알코올 남용 (중독) 또는 알코올성 케토산증에 의한 사인을 판단하기 위해서는 사건 보고서 및 의료 기록에서의 증거를 조사하는 것은 매우 중요하지만, 확실성이 없을 수 있다. 이전의(history) 알코올 남용의 확실한 증거를 제공할 수 있는 지표와 만성 알코올 중독자들에게서 나타나는 케토산증에 대한 평가가 중요하다고 할 수 있겠다.

**Objects and methods:** 법화학 관점에서 알코올성 케토산증 사인에 대한 지표를 종합적으로 분석 할 필요가 있겠다. 알코올 남용 (수개월 동안의 음주 여부 판단)에 대한 판단은 모발에서 에틸렌글루코나이드 (ethyl glucorinide, EtG)로 분석되었다. 만성 알코올 중독자로 추정이 된다고 하더라도 사망 후의 혈중 알코올농도가 0.010% 미만 경우가 있기에, 혈액에서 EtG가 분석되었다. 케톤산증에 대한 지표로는 혈액에서 베타-하이드록시부티레이트 ( $\beta$ -hydroxybutyrate, BHB)가 분석되었다. EtG는 LC-MSMS, BHB는 GC-MS를 이용하여 분석되었다.

**Results:** Case 1는 만성 알코올 중독과 관련된 history가 있는 경우이다. 모발에서 EtG는 1,436 pg/mg으로 나타났으며, 혈액에서 EtG와 BHB는 0.512 mg/L, 312 mg/L였고, 안방수에서의 글루코오스농도는 400 mg/L으로 나타났다. Case 2는 history가 없는 경우이다. 모발에서 EtG는 256 pg/mg으로 나타났으며, 혈액에서 EtG와 BHB는 0.521 mg/L, 300 mg/L였고, 안방수에서의 글루코오스농도는 600 mg/L으로 나타났다. 요약하자면, Society of Hair Testing(SoHT)의 consensus에서 제시한 만성 알코올 남용 농도 기준인 30 pg/mg보다 매우 높게 나타나는 결과를 보였다. 글루코오스 농도는 1,250 mg/L 미만으로 당뇨병 보다는 알코올성 케토산증에 의한 BHB농도 (>260 mg/L)가 높게 나타난 것으로 판단하였다. 게다가, 혈액에서 에틸알코올농도는 검출되지 않았지만, EtG농도는 cut-off 이상 (> 0.09 mg/L)으로 나타났다. 이는, 사망에 이르기 전에도 알코올을 섭취하였음을 암시하였다. **Conclusions:** 본 연구에서는 알코올성 케토산증에 의한 사인으로 판단하기 위한 법화학 지표로, 생체시료 (모발 및 혈액)에서 EtG와 BHB를 분석하여 종합한다면, 사인에 보다 명확한 법과학적 정보를 제공할 수 있을 것으로 판단된다.

**Keywords :** 알코올 남용, 알코올성 케토산증, 생체시료 (모발 및 혈액), EtG, BHB



PF-005 [법과학]

## Forensic analysis for identification of counterfeit functional health water

김유나<sup>1\*</sup>, 손민희<sup>1</sup>, 김지원<sup>1</sup>, 정석환<sup>1</sup>, 김명덕<sup>1</sup>

<sup>1</sup>\*국립과학수사연구원 법화학과

\*Corresponding author: siyusang@korea.kr

A counterfeit product is one which is intentionally and fraudulently mislabelled with respect to identity and/or source. Functional water has gained attention recently in response to its physiological functions, health-promoting effects and disease prevention, especially on diseases such as diabetes and cancer, although the price is expensive. This is mostly due to the extension of the Internet and the appearance of numerous fraudulent websites where anyone can easily. Counterfeiting can apply to both branded and generic products and counterfeit products may include products with the correct ingredients or with the wrong ingredients, without active ingredients, with insufficient active ingredient or with fake packaging.

The evidence called 'premium silica water' or 'functional natural mineral alkali water' that advertise as a life-saving water was received. Chemical composition analysis of mixtures of substances, or unknown substances requires the application of a combination of analytical methods in order to achieve a full picture of the chemical structures and concentrations of the components in a sample. The concentration of specific components, such as an active ingredient which impart a unique function to the product, and impurity profiles were determined by semi-quantitative liquid-XRF, ICP/MS and IC in order to identify the product's performance or quality. Additionally, the combination of SEM/EDX and powder-XRD enabled the identification and characterization of the composition of the evaporation residues. The evidence was a strong alkaline (pH 13.2) water and the mixture of 0.5 % phosphate (as  $P_2O_5$ ), 0.6 % (as  $SiO_2$ ) and 1.0 % sodium ion. Mineral (Na, K, Mg, Ca, Fe, Mn, Zn) contents were also different from the indicated ingredient contents. The main use of the alkaline mixture of phosphate and silicate are water treatment agent as a corrosion inhibitor or an iron flocculation aid, and water soluble fertilizers.

PF-006 [법과학]

**Application Study of PCR Additives to Improve  
The Split Peaks in Direct PCR**

**Joo-Young Kim<sup>★</sup>, Da-Hye Kim, Hyun-Chul Park, Ju Yeon Jung,  
Gang-Nam Jin, In-Kwan Hwang and Pil-Won Kang**

Forensic DNA Division, National Forensic Service, Wonju, 26460, Korea

★ Corresponding author: jykim7112@korea.kr

Analysis techniques using DNA profiling are widely used in various fields including forensic science and new technologies such as the Direct PCR amplification method are being developed continuously in order to acquire the DNA profiles efficiently. However, it has a limits such as non-specific amplification according to the quality of crime scene evidence samples. Especially, split peaks caused by excessive DNA samples are one of the important factors that could cause the debate to allow researchers to interpret the DNA profile results. In this study, we confirmed the occurrence rate of split peaks in each STR (short tandem repeats) locus of the GlobalFiler™ kit and investigated the possibility of improving the split peaks using several PCR additives such as DMSO (dimethylsulfoxide), MgCl<sub>2</sub>, Betaine and Tween-20. As a result, we could make three groups according to the occurrence rate of split peaks in Direct PCR and it was confirmed that the ratio of split peaks could be reduced by DMSO (87.4%), MgCl<sub>2</sub> (84.5%) and Betaine (86.1%), respectively. These results indicate that PCR additives such as DMSO, MgCl<sub>2</sub> and Betaine can be improve the split peaks in Direct PCR and thereby facilitate subsequently a successful DNA profile results.

PF-007 [법과학]

## 도비탄 식별을 위한 법과학 시험법

박원석, 임봉환\*

국방부조사본부 과학수사연구소 총기폭발물과  
\*Corresponding author: zemiro98@hanmail.net

도비탄이란 총기에서 발사되어 비행중인 탄환이 어떠한 장애물과 충돌하여 최초의 탄도를 이탈한 탄환을 말한다. 이러한 도탄 현상은 탄환이 물체에 충돌 후 파편화 되는 경우가 아니라 탄환의 원형과 속도를 유지한 채로 탄도 비행각도 및 방향이 변경되어 발생한다. 총기 안전사고 발생 시 도비탄에 의한 사고인지 아니면 직접 조준사격 또는 유탄에 의한 사고인지는 매우 중요한 쟁점 사항이다. 본 연구에서는 수집된 도비탄을 시료로 하여 현미경적 외관 검사, 표면 부착물질 분석, 충돌 물체의 탄착지점 형태 분석을 실시하였고 실험 결과를 종합 분석하여 도비탄 여부 식별, 탄두의 진행방향 등 의미 있는 결과를 도출하였다. 향후 총기 안전사고 발생 시 도비탄 여부를 식별하기 위한 탄두 감정, 충돌 물체 확인, 탄두의 진행방향 및 총기 발사각도 추정 등 사고 재구성을 위한 객관적 근거자료로 활용될 것으로 사료된다.

PF-008 [법과학]

## Oil spill environmental forensics of crude oils and marine fuel oils

Eun-Ji Jeon<sup>1</sup>, Song Kim<sup>1</sup>, Sun-Ju Hwang<sup>2</sup>, In-Chul Song<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Western Regional Coast Guard,

<sup>2</sup>Korea Coast Guard Research Center

\*Corresponding author: giver1@korea.kr

The accidental spills and international discharges of crude oils and refined products are frequent occurrences in the sea. Determining the source of mystery spills relies largely on environmental forensics. The oil fingerprint has played an important role in the rapidly advancing field of environmental forensics of waterborne oil spills. Most sophisticated analytical oil spill identification techniques rely on gas chromatography(GC) methods. Gas chromatography provides several levels of the overall chemical composition such as hydrocarbon distributions in crude oils or fuel oils. The gas chromatograms can be classified as crude oil, residual fuel oil, diesel fuel, and lubricating oil. Further, individual hydrocarbon compounds in the oil can be identified, usually using a gas chromatography with mass spectrometry(GC/MS). The target compounds typically include n-alkanes, acyclic isoprenoids, homo- and heteroatomic 2- through 5-ring alkylated polycyclic aromatic hydrocarbons(PAHs) and numerous petroleum biomarkers including hopanes, steranes, and triaromatic steranes(TAS).

In this study, crude oils and marine fuel oils sampled refinery plants are used to investigate the chemical fingerprint. All samples were "fresh" in that they had not experienced any environmental weathering and analyzed by using the methodology of CEN/TR 15522 –2:2012 and SHIMADZU GC/FID and GC/MS. In GC/FID results, the gas chromatograms of all samples can be classified as crude oils, heavy fuels oil and light oils by indentifying peak pattern, Unresolved Complex Mixture(UCM) and n-alkane distributions. The variability in the carbon mass range composition(C8-C10, C11-C16, C17-C24, and C25-C40 by Canadian Council of Ministers of the Environment, CCME) among all samples indicated that heay fuel oils contain very high mass percentage of n-hydrocarbons. In GC/MS results, the identification of oil type in crude oils and fuel oils is more detailed by analysis target compounds of methylphenantrenes/anthracenes(m/z 192) and triaromatic steranes(m/z 231). The diagnostic ratios show that there are wide variation in PAHs containing sulfur. The chromatograms of petroleum biomarkers such as hopanes and steranes show the primary characteristic in all samples. This Data Base of crude oils and marine fuel oils is used to identify spill and source oil in Korea Coast Guard Reseach Center.

PF-009 [법과학]

**Introduction of analysis cases for the unauthorized compounds adulterated  
in certain seized foods using LC-UV and LC-MS/MS**

**Nam Sook Kim, Hwan Seong Choi, Ji Hyun Lee, Seongsoo Park, and Hoil Kang<sup>★</sup>**

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

★Corresponding author:kanghoil@korea.kr

According to growth of interest in healthy life, the global markets for healthy foods such as dietary supplements, have been growing steadily. People who misunderstand that all healthy foods prevent them from diseases tend to seek dietary supplements to alleviate diseases. Recently, some cases on illegal adulteration of pharmaceutical compounds in dietary supplements to maximize their pharmacological benefits and effects, have occasionally reported. Therefore, surveillance and investigation whether unauthorized compounds are illegally adulterated in commercial foods have been accomplished by Ministry of Food and Drug Safety (MFDS). In order to preemptively crack down the illegal food products which threat public health, the MFDS makes an effort not only to develop a rapid and accurate analysis method but also to identify a chemical structure of a new analogue adulterated in some illegal food products, using high performance liquid chromatography (HPLC), ultra high performance liquid chromatography (UPLC), liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS), and so on. We'd like to introduce herein two analysis cases of determining unauthorized compounds by developed and validated methods, and an identification case of a new pharmaceutical analogue. First, tetrodotoxin (0.035 mg in one pill 0.8g) was detected in an unapproved pill, which was manufactured from blowfish and sold via internet cafe using deceptive advertising its false efficacies. Second, N-Acetyl-L-Cysteine (121 mg in one capsule) unapproved for foods was detected in a dietary supplement intentionally falsely represented as 'L-Cystine'. Finally, a new sildenafil analogue was identified in a dietary supplement suspected to be adulterated with an erectile dysfunction drug and named as desmethylpiperazinyl propoxysildenafil. Our efforts for public health will be continued.

PF-010 [법과학]

지문현출용 분말의 건강 위해성을 고려하여  
챔버(chamber)를 이용한 분말 적용 방법에 관한 연구

김은지<sup>1</sup>, 이다은<sup>1</sup>, 박석원<sup>2</sup>, 최성운<sup>3,\*</sup>

<sup>1</sup>충남대학교 평화안보대학원 과학수사학과, <sup>2</sup>대전지방경찰청 2부 형사과 과학수사계,

<sup>3,\*</sup>충남대학교 신약전문대학원 신약개발학과

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

잠재지문의 현출에 흔히 사용되는 분말(powder)은 독특한 성분을 포함하고 있으며, 극히 미세한 분말입자가 호흡기 등으로 유입되어 사용자의 건강과 환경에 해로운 영향을 미칠 수 있다. 따라서 본 연구에서 분말법을 이용한 잠재지문 현출 시 과학수사요원의 안전성을 고려한 새로운 분말 적용 방법인 챔버법을 고안하였으며, 이를 기존의 브러시(brush)를 이용한 방법(이하 브러시법)과 비교하여 사용 가능성을 확인하고자 하였다. 두 가지의 표면(유리, PET)에 반지문과 전체지문을 각각 유류하여 3일, 14일 동안 보관하였으며, 흑색분말과 녹색 형광분말을 이용하여 현출한 결과를 농도계이미지 분석(densitometric image analysis)과 특징점 분석을 실시하여 비교하였다. 챔버법은 fan을 장착한 일정 용량의 챔버 내에 분말과 시료를 거치한 후 분말 바람을 일으켜 용선에 분말을 접착하는 방법으로 현출과정 이 폐쇄된 공간인 챔버 내에서 이루어지기 때문에 분말과 직접적인 접촉을 차단할 수 있었다. 또한 각각의 표면, 분말에 대하여 실험을 진행한 결과, 흑색분말을 사용할 경우 두 가지 표면 모두에서 브러시법과 유사한 선명도 및 특징점 결과를 보였다. 녹색 형광분말 사용 시 브러시법이 다소 우수한 결과를 보였으며, 특히 PET표면의 잠재지문을 챔버법을 이용하여 현출할 경우 용선이 확인되지 않는 바, 형광분말과 실리카겔을 혼합한 혼합분말을 사용한 결과 기존의 형광분말만을 사용한 결과보다 3배가량 높은 선명도와 브러시법과 비교적 유사하게 특징점이 발견되어 부분적인 보완 가능하였다. 새로운 분말 적용 방법으로서 챔버법의 사용 가능성 및 사용 시의 분말 접촉 차단을 확인할 수 있었으나, 더 우수한 현출력과 방법에 대한 검증, 기기의 휴대성 등 사건 현장에서의 활용을 위한 추가적인 후속 연구가 필요할 것으로 사료된다.

PF-011 [법과학]

## 시료지문 제공자(donor)에 따른 현출정도의 차이에 관한 예비연구

이나연<sup>1</sup>, 최성운<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>충남대학교 평화안보대학원 과학수사학과, <sup>2,\*</sup>충남대학교 신약전문대학원 신약개발학과

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

사건현장에 사건 관련자들의 지문이 유류되어있을 경우에는 이들 지문의 확인(fingerprint identification)을 통한 범죄자의 입증이 가능하여 지문은 범죄의 실체적 진실을 밝혀주는 중요한 증거물 중의 하나이다. 따라서 현장조사 관련 연구에서는 지문에 대한 다수의 실험들이 이루어지고 있으며, 특히 시료 잠재지문(latent fingerprint) 유류 시 지문의 품질에 영향을 줄 수 있는 변수들을 각기 다양한 방법으로 통제한다. 통상의 지문연구에서는 주로 이마, 코 등으로 부더의 분비물을 손가락의 끝부분에 전이시켜서 이용하는 이유로 현장발견지문과는 비교가 용이하지 않다.

이에 본 연구에서는 사건현장에 남겨지는 지문과 유사한 지문을 남기기 위하여 시료지문 통제방법 중의 하나로서, 시료지문 제공자(donor)를 heavy donor와 light donor로 구분하여 제공자의 차이에 의한 현출정도의 차이를 알아보기 위해 3가지 표면(A4, 감열지, 유리)에 유류하여 통상의 방법으로 현출하고 결과를 비교하는 예비실험을 실행하였다. 지문유류 시 1시간 전부터 손을 씻지 않고 일상의 활동을 행한 상태에서 0.3 kgf/ 3 sec의 조건에서 유류하였으며, 지문 잔류물 양의 감소를 확인하기 위하여 연속 감소지문형태(depletion series)로 유류하여 1일 경과시킨 뒤 현출하였다. 현출된 잠재지문의 이미지를 개별 용선들의 배경에 대한 선명정도의 평가를 위하여 농도계 이미지 분석(Densitometric Image Analysis, CP Atlas 2.0) 프로그램을 사용하여 용선 피크의 면적값을 도출하였다. 그 결과 전반적으로 heavy donor가 light donor에 비해 높은 면적값이 나왔지만 아미노산의 함량 차이를 보기 위한 A4 표면에서의 실험에서는 다른 표면에 비해 상대적으로 heavy donor와 light donor의 차이가 낮은 양상이 나타났다. 이는 지문성분 중 외분비 샘에서 분비되는 유기성분인 아미노산의 양이 다른 지문성분에 비해 상대적으로 적을 뿐만 아니라 Ninhidrin과 반응 시 아미노산의 종류 등에 영향을 받은 것으로 사료된다. 추후 추가적인 실험을 통하여 시료지문을 남겨서 실험할 경우 시료지문 제공자의 지방, 땀의 양 등의 차이를 고려하고 구분하여 실험해야 할 것으로 판단된다.

PF-012 [법과학]

## 감열지상 남겨진 노화지문의 아이오딘 증기(iodine fumig)에 의한 최적현출시간 변화에 관한 연구

이나연<sup>1</sup>, 최성운<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>충남대학교 평화안보대학원 과학수사학과, <sup>2</sup>\*충남대학교 신약전문대학원 신약개발학과

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

현장에 남겨진 잠재지문은 만인부동, 종생불변의 특성 때문에 개인 식별을 가능하게 해주는 중요한 증거물 중 하나이다. 이러한 지문이 발견될 수 있는 특수지류 중의 하나인 감열지는 특수성과 편리성의 장점을 가지고 있는 이유로 사용이 많아지면서 사건현장에서 발견되는 증거물로 다뤄지는 빈도수가 늘어나고 있다. 감열지는 열과 극성용매에 흑화현상이 일어나기 때문에 일반적인 다공성 표면에 적용되는 현출 방법으로는 현출이 어렵다고 알려져 있다. 따라서 감열지에 남겨진 잠재지문을 현출하기 위해서는 일반적으로 아이오딘 증기(iodine fumig), Thermanin®, 자성분말 등을 사용하는 방법이 권장된다. 그 중 아이오딘 증기법은 단 시간에 그리고 경제적인 비용으로 현출을 가능하게 한다. 하지만 감열지에 남겨진 잠재지문을 아이오딘 증기를 이용하여 현출할 시 최적의 현출조건에 대한 연구는 자세히 알려진 바 없다.

따라서 본 연구에서는 아이오딘 증기를 이용하여 감열지에 남겨진 잠재지문의 최적의 현출조건(아이오딘의 양, 증기노출 시간 등)을 알아보기 위한 실험으로서 유류 후 경과 일 수, 현출시간의 변화를 주어 현출하고자 하였다. 지문시료는 지문 제공자(heavy donor)가 지문유류 시 1시간 전부터 손을 씻지 않고 일상의 활동을 행한 상태에서 0.3 kg-f/ 3 sec.의 조건으로 유류하였으며 1, 3, 7, 14일 경과시킨 후 아이오딘 150 mg을 이용하여 현출시간(20분, 30분, 40분, 50분, 60분, 70분, 80분, 90분, 100분, 110분, 120분)에 변화를 주어 현출하였다. 현출된 잠재지문의 이미지는 농도계 이미지 분석(Densitometric Image Analysis, CP Atlas 2.0) 프로그램을 사용하여 면적값을 산출하였다. 그 결과 1, 3일 경과된 감열지는 90~120분에서 높은 면적값을 나타냈으며 7, 14일 경과된 감열지는 1, 3일 경과된 감열지에 비해 상대적으로 짧은 시간 안에 30~70분에서 높은 면적값이 산출되었다. 3일 경과된 감열지의 경우 120분의 면적값이 100분의 면적값과 유사하였으며 120분 이상 현출할 경우 면적값이 감소할 것으로 예상된다. 통상 현출시간이 늘어남에 따라 선명도가 증가하였고 현출시간에 따른 면적값의 변화는 곡선의 형태로 나타났다. 추후 감열지에 남겨진 잠재지문에 대해 현출할 시 아이오딘의 양, 현출하는 시간, 잠재지문의 나이 등에 변화를 주어 최적의 현출 조건을 찾는 추가적인 실험이 필요하다 사료된다.



PF-013 [원자력/방사선]

## 이차이온질량분석법을 이용한 핵물질 입자분석 분야 국제교차분석 수행

이나리, 박진규\*, 이치규

한국원자력연구원 원자력화학연구부

\*Corresponding author: jinku1004@kaeri.re.kr

불법적인 핵 활동을 감시하기 위한 핵 안전조치(Nuclear safeguards) 강화의 일환으로 국제원자력기구(IAEA, International Atomic Energy Agency)는 IAEA 환경시료분석법을 도입하였다. 환경시료분석법이란 원자력 관련 시설의 내부 혹은 외부에서 채취한 시료를 분석함으로써 시료 내 포함된 핵물질의 양, 동위원소비 등의 정보를 통해 불법적인 핵활동에 대한 판단 근거를 제공하는 기술이다. 환경시료분석법은 크게 총량분석법과 입자분석법으로 나뉘며, 입자분석은 다시 핵분열트랙-열이온화 질량분석법과 이차이온질량분석법(SIMS, Secondary Ion Mass Spectrometry)으로 나뉜다. SIMS는 일차이온빔을 시료에 조사하여 발생하는 이차이온을 검출함으로써 특정원소의 동위원소비를 측정하는 기술로 핵물질입자 동위원소비 측정 등에 널리 이용된다.

IAEA 환경시료 분석은 국제 환경시료 분석 실험실 네트워크(IAEA-NWAL, NetWork of Analytical Laboratories)에 가입된 실험실을 통해 이루어지며, IAEA는 IAEA-NWAL의 분석능력 향상을 위하여 정기적으로 국제교차분석을 실시한다. 입자분석 분야 국제교차분석은 모의 환경시료를 분석하여 시료에 포함된 핵물질 입자의 검출과 동위원소비 분석 능력을 평가하는 것을 목적으로 한다. 본 연구에서는 SIMS 입자분석 분야의 국제교차분석을 참가하여 우라늄 입자의 검출 및 동위원소비 측정 결과에 대해서 소개한다.

SIMS 입자 분석을 위하여 모의 환경시료에 포함된 입자들을 진공흡입 임팩터(Impactor)를 이용하여 카본 플란셋에 회수하였다. 회수된 입자 중의 우라늄 입자를 APM(Automated Particle Measurement) 분석을 통해 검출하고 검출된 개별 입자에 대한 Microbeam 분석을 통해서 우라늄 동위원소비를 측정하였다. 두 개의 모의시료에서 우라늄 입자가 측정되었고 나머지 한 개의 시료는 바탕시료(blank)로 판별되었다. 우라늄 입자가 측정된 시료 중 한 개의 시료에는 천연 우라늄(NU)만 측정되었고, 다른 한 개의 시료에는 농축도가 다른 두 종류의 저농축 우라늄(LEU)과 고농축 우라늄(HEU)이 측정되었다. 이 결과는 다른 실험실에서 분석한 결과 및 시료제조에 사용된 우라늄 동위원소비와 일치성을 나타냄으로써 본 실험실의 분석능력이 IAEA-NWAL와 동등함을 평가받았다.

PF-014 [원자력/방사선]

## MC-ICP-MS를 이용한 1 $\mu\text{m}$ 급 우라늄 입자 동위원소비 분석

박난희<sup>1</sup>, 한선호<sup>1</sup>, 최은주<sup>2</sup>, 임상호<sup>1</sup>, 박진규<sup>1</sup>, 이치규<sup>1</sup>, 송규석<sup>1</sup>

<sup>1</sup>한국원자력연구원, 원자력화학연구부

<sup>2</sup>한국화학연구원, 화학분석센터

원자력관련 시설의 활동 이력에 대한 정보를 얻기 위한 환경시료 분석은 핵활동의 투명성을 제고하기 위해 필수적으로 요구되며 이는 크게 총량분석과 입자분석으로 나뉜다. 총량분석을 통해서는 환경시료 내에 포함된 핵물질의 양과 이들의 평균적인 동위원소비를 구할 수 있는데, 이것은 해당 시설의 미신고 핵활동의 유무를 판단하는 근거를 제공할 수 있다. 반면, 입자분석은 환경시료 내에 포함된 핵물질 미세입자를 개별적으로 분석하여 동위원소비를 측정함으로써 핵활동 이력을 규명하는 구체적인 정보를 제공할 수 있다. 입자분석을 위한 방법으로는 핵분열트랙-열이온화질량분석법(Fission Track-Thermal Ionization Mass Spectrometry, FT-TIMS), 이차이온질량분석법(Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) 등이 있다. 하지만 FT-TIMS 기법은 핵물질 함유 입자 선별을 위하여 연구용 원자로를 이용한 중성자 조사가 필수적으로 요구될 뿐만 아니라 분석 과정이 복잡하고 오랜 분석 시간이 필요하다. SIMS 기법은 원소분포 측정을 통한 핵물질 함유 입자선별이 가능하여 복잡한 시료 선별과정이 필요하지 않아 분석 시간이 단축되고 원자로 이용에 대한 제한에서 자유로울 수 있는 반면 동중원소 간섭에 의해 부동위원소비 분석이 어렵다. 이를 해결할 수 있는 방법으로서 전자현미경(Scanning Electron Microscope, SEM)과 이에 장착된 X선 분광기(Energy Dispersive Spectrometer, EDS) 및 미세취급 장치를 이용하여 입자의 선별과 취급을 수행하고 입자를 용액화하여 MC-ICP-MS로 동위원소비를 분석하는 방법을 고찰하였고, 이를 검증하기 위하여 1  $\mu\text{m}$ 급 크기의 입자시료에 적용하여 측정 정밀도를 평가하였다. 단일 입자(~5 pg 수준)를 용액화하여 MC-ICP-MS로 분석한 결과 동위원소비의 정밀도가 주동위원소비는 1% 이내, 부동위원소비는 10% 이내로 평가되었다. 따라서 본 방법을 추후 실제 환경시료 내에 포함된 우라늄 입자 분석 시 FT-TIMS와 SIMS와 상호보완적으로 활용할 수 있을 것으로 기대된다.

PF-015 [원자력/방사선]

## 열이온화질량분석에 사용되는 레늄 필라멘트 중의 Mo 불순물 측정

박양순\*, 조혜륜

한국원자력연구원 원자력화학연구부

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

핵연료가 연소되면 다양한 핵분열 물질이 생성되는데 이중에서 Nd-148 동위원소는 핵연료의 연소도를 측정하는 대표적인 지표원소이다. 그러나 오염 등의 원인으로 오차를 일으킬 가능성을 배제할 수 없으므로 또 다른 핵분열 생성물인 Mo의 동위원소 비를 추가적으로 측정하여 연소도의 검증에 활용 가능한지 검토하고자 하였다. 본 실험은 실제 시료를 측정하기에 앞서 기초 자료를 얻기 위하여 수행되었다. 핵분열로 생성되는 Mo의 동위원소 비 측정 시, 자연 중에 존재하는 Mo와 Zr, Ru 등의 동중원소가 오차를 줄 수 있으므로 주의해야한다. 이러한 관점에서 레늄 필라멘트 내에 Mo, Zr, Ru이 불순물로 존재하는지 확인하고 포함되어있는 경우에 가열로 제거 가능한지 검토하였다. 불순물의 동위원소 측정에 사용된 열이온화질량분석기(Thermal Ionization Mass Spectrometer, TIMS)는 Thermo Fisher Scientific 사의 TRITON 모델로 9개의 Faraday cup과 1개의 SEM이 장착되어 있다. 실험을 위하여 시료가 로딩 되지 않은 레늄 필라멘트를 베이킹하지 않은 것과 1회, 2회 베이킹한 것의 3종류를 준비하고 이들 필라멘트를 TIMS에 각각 장착하여 온도를 올리면서 Mo, Zr, Ru 불순물에 대한 동위원소를 측정하였다. 측정결과, 베이킹하지 않은 필라멘트에서는 Mo 동위원소의 검출세기가 약 100 mV로 검출되었는데, 이는 시료 측정 시에 심각한 오차를 줄 것으로 예상된다. Zr 동위원소는 1.6 mV로 검출되었고 Ru 동위원소는 검출되지 않았다. 베이킹 과정을 1회 수행한 필라멘트에서는 Mo, Zr 모두 검출세기가 1/30로 현저히 감소하였다. 2회 수행한 필라멘트 역시 1회 수행한 것과 같은 결과를 나타낸 것으로 보아 여러 번 베이킹해도 더 이상 개선되지 않을 것으로 판단된다. 그러므로 시료에 대한 Mo 동위원소 측정 시 반드시 베이킹 과정을 수행한 필라멘트를 사용해야 오차를 최소화할 수 있으며 베이킹은 1회로 충분하다고 판단된다.

PF-016 [원자력/방사선]

## 냉각수 충수가 하나로 수조고온층에 미치는 영향

이성우\*, 이번헌, 김형욱, 안형진, 최호영

\*한국원자력연구원

\*swlee2881@kaeri.re.kr

하나로는 개방 수조형 원자로로 1995년부터 운영 중인 다목적 연구용 원자로이다. 하나로 노심 냉각 방식은 상향 강제 순환식으로 노심주변에서 생성된 방사성물질이 수조 상부로 상승 할 수 있다. 하나로 상부는 개방 되어 있어서 수조 상부로 상승된 방사성물질은 수조 상부 방사선준위를 증가시킨다. 이를 방지하기 위해 수조고온층계통을 설치하였고, 수조 상부에서 작업하는 작업자의 피폭과 각종 기기들의 손상을 최소화 하였다. 수조고온층계통은 수조 상부의 온도를 하부의 온도보다 높게 유지하여 방사화된 냉각수가 수조 상부로 순환되는 것을 방지한다. 그런데 수조고온층계통으로 증발된 냉각수를 주기적으로 보충 하는데 차가운 보충수가 44°C 이상인 수조고온층에 영향을 주어 수조고온층 유지가 어려워 질 수 있다. 그래서 본 논문은 하나로 냉각수 충수가 수조고온층에 미치는 영향을 분석하고, 그 영향으로 수조 상부의 방사선 준위가 어떻게 변하는지 분석 하였다.

PF-017 [원자력/방사선]

## Evaluation of Target Materials Including $^{10}\text{B}$ for the Neutron Flux Monitoring of NDP System at HANARO

Sang-Hwa LEE<sup>\*</sup> and Byung-Gun PARK

Neutron Utilization Research Division, Korea Atomic Energy Research Institute.

<sup>\*</sup>Corresponding author: sanghwalee@kaeri.re.kr

The NDP (Neutron Depth Profiling) is a nondestructive method to evaluate the atomic concentration, which is estimated from the neutron-induced reactions with the isotopes, depending on the depth within a few micrometers.[1] For the precise quantification of the atomic concentration, the neutron beam incident on the sample should be monitored during irradiation. The neutron beam can be monitored by using the neutron flux monitor containing nuclides that emit secondary particles after neutron capture. In the case of the neutron monitor with boron, the neutron flux can be estimated by measuring the emission rate of the  $\alpha$  particles, which is generated from the  $^{10}\text{B}(n,^4\text{He})^7\text{Li}$  reaction.[2]

The CONAS (COLD Neutron Activation Station), with the radioanalytical instruments, belongs to HANARO (High-flux Advanced Neutron Application ReactOr) of KAERI (Korea Atomic Energy Research Institute) was developed to analyze the elements of samples from the neutron capture reaction.[3] The KAERI-NDP chamber with the neutron flux monitoring system will be installed at the end of CG1 (Cold neutron Guide1). To choose the target material for the neutron flux monitoring, the thickness of the candidate materials (boron, boron nitride, borophosphosilicate, SRM93a) is determined by simulation using MCNP (Monte Carlo N-Particle) transport code. The goal of the minimum NPR (neutron penetration ratio) and count rate of the  $\alpha$  particles are 95 % and 1 cps, respectively. The results of the thickness dependence on the NPR and the count rate will be presented.

### Reference

- [1] "Neutron depth profiling: overview and description of NIST Facilities", R. G. Downing et al., J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol., 98(1), 109 (1993).
- [2] "Technique for determining concentration profiles of boron impurities in substrates", J. F. Ziegler et al., J. Appl. Phys., 43, 3809 (1972).
- [3] "Development of cold neutron activation station at HANARO cold neutron source", G.M. Sun et al., Trans. Kor. Nucl. Soc., 17 (2012).

PF-018 [무기/재료]

**Quantitative Analysis of Trace Metals in PCB Etching  
Waste solution by ICP-OES**

**SE Chul Hong<sup>1,\*</sup>, Mi Young Son<sup>1</sup>, In kyeong Jung<sup>2</sup>,  
In Kim<sup>2</sup>, Hyoung Wook Choi<sup>2</sup>, Tae Gwon Seo<sup>2</sup>**

<sup>1,\*</sup>Gumi Electronics & Information Technology Research Institute, <sup>2</sup>SUNG EUN CO., Ltd

\*Corresponding author: hsc0684@geri.re.kr

In the electrical and electronic industry, manufacturing of PCB (PRINTED CIRCUIT BOARD) is very important as the main field. This is an engine that forms a conductor circuit on the surface or inside of insulating substrate to connect parts based on P circuit design and made of 30% plastic, 40%, and 30% of metal. The build-up method is a technology which is applied to high-density equipment, can be enlarged the bounds to almost every PCBs in the future. And also this is a very important technology to lead the thin and light weight in accordance with SMD technology such as fine pitch BGA. Large amount of liquid waste are being generated during the process of producing and washing build-up PCB. Up to now, it has been a problem to secure landfill by treating sludge by chemical treatment. Therefore, in this study we analyzed the composition of the waste and the impurities using ICP-OES and IC to recover the copper ions ( $\text{Cu}^{2+}$ ) generated in the etching process during the PCB manufacture. The impurity element contained 60.6 mg/kg of nickel (Ni), 24.1 mg/kg of lead (Pb), and 12.4 mg/kg of aluminium (Al) 12.6 mg/kg of Chromium (Cr). In order to remove these impurities, the pH was adjusted to about 92.5% by using a solvent extraction method, D2EHPA and Cyanex 272.

PF-019 [무기/재료]

## 기기중성자방사화분석에 의한 3종의 실리콘 주매질 표준물질 분석

문종화\*, 이한림, 김지석

한국원자력연구원 중성자응용연구부

\*Corresponding author: jhmoon1@kaeri.re.kr

현재 고순도의 실리콘 반도체가 개발되어 현대 산업에 광범위하게 사용되고 있으며 더 우수한 기계적, 전기적 성능을 갖는 실리콘 기반의 차세대 반도체를 개발하기 위해 노력하고 있다. 기본적으로 반도체의 원재료에는 금속이나 이온 성분들과 같은 불순물을 포함할 수밖에 없으며 이를 최소화하기 위한 제조공정을 연구개발하고 있다. 불순물의 분석을 위해서는 다양한 화학적 분석 방법들을 적용할 수 있다. 즉 표면분석법으로는 SIMS, XPS, AES, EPMA, 무기분석은 ICP-MS, ICP-AES, GD-MS, XRF, 유기분석은 GC-MS, LC/MS, NMR, 구조분석은 XRD, FT-IR, Raman, ESR 등이 사용될 수 있다. 중성자 방사화 분석법은 주로 무기원소 정량분석법으로서 고체 시료의 비 용해 분석이 가능한 장점이 있으며 특히 실리콘 주매질의 경우에는 불순물의 수준에 따른 분석조건의 변화가 용이하여 정확한 분석이 가능한 강점이 있다. 본 연구에서는 실리콘이 주매질인 3종의 표준물질(미국의 NIST SRM 57b-Silicon Metal, 독일의 BAM CRM S008-Silicon Carbide Powder, BAM CRM S001-Silicon Nitride Powder)을 기기 중성자 방사화 분석법으로 불순물 원소를 정량하였다. NIST SRM 57b-Silicon Metal에서는 총 27종(Al, As, Au, Ce, Co, Cr, Dy, Eu, Fe, Hf, La, Lu, Mn, Na, Nd, Sb, Sc, Sm, Ta, Tb, Th, Ti, U, V, W, Yb, Zr), BAM CRM S008-SiC Powder에서는 총 20종(Al, Au, Ce, Cr, Dy, Fe, Hf, La, Lu, Mn, Mo, Na, Sc, Sm, Th, Ti, U, V, W, Zr), CRM S001-Silicon Nitride Powder에서는 17종(Al, As, Au, Ca, Co, Cr, Fe, In, La, Mn, Na, Sb, Sc, Sm, Ta, Th, W)의 원소를 검출, 정량하였다. 분석값의 정확도 평가를 위하여 표준물질의 보증값 또는 추천값을 갖는 원소들에 대한 상대오차를 평가한 결과, 몇 원소를 제외하고는 대부분 10% 이내 였으며 통계적인 U-score값도 2 이하를 보여 만족할 수준으로 평가할 수 있었다. 향후 GD-MS와 같은 타 무기원소 분석기술과의 협력을 통해 최적의 분석 프로토콜을 확립하고자 한다.

PF-020 [무기/재료]

### 국내 사문석의 주성분 및 미량성분 정량분석

Quantitative Analysis of Major and Trace Elements in Korean Serpentine

정은숙<sup>1</sup>, 김건한<sup>1</sup>, 이현아<sup>2</sup>, 김현구<sup>2</sup>, 최병인<sup>3</sup>, 안상호<sup>3</sup>

<sup>1</sup>대덕분석기술연구소, <sup>2</sup>한국세라믹기술연구원 분석기술센터,

<sup>3</sup>한국지질자원연구원 지질자원분석센터

사문석은 마그네슘이 많은 수화된 규산염광물의 한 군이다. 흔한 조암광물인 사문석의 화학조성은 대체로  $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ 이다. 사문석은 일반적으로 3가지 동질이상으로 산출되는데, 이들은 석면으로 사용되는 섬유상 변종인 온석면, 주름이 진 판상 또는 섬유상으로 산출되는 변종인 안티고라이트, 매우 세립질이며 판상의 변종인 리자다이트이다. 뱀의 껍질을 닮은 데서 이름이 붙여진 사문석은 보통 회색·백색·녹색이지만, 황색(온석면)·녹청색(안티고라이트)을 띠기도 한다. 녹색은 마그네슘을 치환한 철에 의해 나타난다.

사문석은 제철소의 소결로 용융제 원료, 용성인산비료, 건축재료, 장식용 석재 등으로 이용되고 있다. 이 중에서 제철소의 고로 및 소결로에 투입하는 원료로 가장 많이 사용한다. 일반적으로 철광석과 코커스 등의 원재료에는 알루미늄을 포함하는데 제선작업에서 광재의 알루미늄을 약 15%로 조정한다. 이때 알루미늄이 많게 되면 광재의 점성과 용융점이 변화되어 문제가 생기므로, 마그네시아(MgO)가 풍부하고 탈황효과가 있는 사문석을 투입하여 성분을 조정하도록 한다.

국내 부존광산은 경기도 가평, 양주, 양평, 경남 울주, 능소, 경북 안동 풍천, 울산 북구 달천, 전북 장수 번암, 충남 공주, 부여, 예산, 청양, 홍성, 충북 음성 등에 분포되어 있으나 현재 활발히 운영되고 있는 광산은 경북 안동 풍천면에 위치한 풍산자원(주) 뿐이다. 이 광산의 사문석 품위별 3종류의 시료를 채취하여 분석용 시료로 하였다.

본 연구에서는 사문석의 신속 정확한 정량분석을 하기 위하여 규석, 규사의 정량분석 규격과 석회석, 돌로마이트의 분석 규격을 활용하여 화학분석, XRF, ICP-AES, ICP/MS에 의한 주성분 및 미량성분을 하였다.



PF-021 [무기/재료]

## 알루미늄복합패널 연소특성 비교에 관한 실험적 연구

박정우, 심재웅, 김도현\*

한국건설기술연구원

\*Corresponding author: kimdh@kict.re.kr

최근 지구온난화에 대응하기 위하여 온실가스 감축에 관한 국내외 규범이 강화되고 있다. 이에 건축 분야에서는 건축물의 단열성능 기준을 향상하는 규제로 탄소에너지 배출 저감을 통하여 지구온난화 현안에 대응하고 있다.

상기 현안에 대하여 건축물의 외단열 공법은 경제성과 단열성능을 만족할 수 있는 효과적인 시공방법으로 중저층 건물에는 습식공법(EIFS; Exterior Insulation Finish System), 고층 건물에는 건식공법(알루미늄복합패널)이 주로 적용되고 있다. 특히 건식공법은 벽체에 단열재를 연이어 부착하고 금속 지지구조를 설치하여 최종적으로 건식마감재(알루미늄복합패널)를 시공한다. 이때 사용되는 최종마감재인 알루미늄복합패널은 양면이 0.5mm 두께의 알루미늄 사이에 약 2~5mm의 가연성 폴리에틸렌 소재의 심재를 고온 접합시킨 자재로서 유용한 시공성, 단열성, 경량성, 내식성 등이 우수한 건축자재이다. 해당 자재를 적용한 건축물에 화재 발생 시 알루미늄복합패널이 화염에 노출되면, 알루미늄 접합구조의 변형과 폴리에틸렌 소재의 용융으로 화재 확산이 촉진되며 건축물의 대형화재 사고피해를 유발한다.

관련 화재피해 사례로서, 2010년 부산우신골드스위트 화재와 2017년 런던그렌펠타워 화재가 있으며, 두 사례 모두 폴리에틸렌계 심재의 알루미늄복합패널이 연소확대를 촉진한 것으로 조사되었다.

이에 본 연구에서는 현재 건식공법 건축물의 전반에 사용되는 알루미늄복합패널 심재에 대하여 다양한 화재모델 시험으로 연소특성을 파악하고 발생하는 연소가스의 정량·정성 분석을 통해 화재위험성을 비교·분석하였다.

본 연구 결과는 가연성 폴리에틸렌계 알루미늄복합패널의 화재위험성이 극대화되고 이에 대응하기 위한 기술개발이 요구되는 현 시점에서 화재에 안전한 알루미늄복합패널 심재와 이를 적용한 외벽시스템 개발의 기초 자료로 활용 것으로 판단된다.

이 연구는 2019년도 '(19주요-대1-임무) 화재안전 및 단열성능 확보 건물 외벽시스템 개발 (1/3)' 연구비 지원에 의한 결과의 일부임. 과제고유번호:20190281

PF-022 [무기/재료]

## 알루미늄 드로스의 소재화 기술 및 부산물에 대한 분석

김경문<sup>1</sup>, 최병일, 박재현, 김태성, 유석

<sup>1</sup>한국화학융합시험연구원 고분자재료팀

국내 알루미늄 드로스(Dross)의 연간 발생량은 약 30만 톤이며, 이중 금속 알루미늄을 회수하고 발생된 페드로스는 약 4만 톤으로서 내화물 재료의 재활용 기술 개발이 시도되기도 했으나 대부분 매립 또는 야적에 의존하고 있는 상황이다. 일반 알루미늄 드로스의 재활용이 어려운 것은 알루미늄 합금과 사용하는 플럭스의 종류가 다양하기 때문에 드로스 리사이클에 따른 개재물(介在物, 산화물)과 플럭스(Flux)의 화학 조성이 일정하지 않고, 알루미늄 드로스 중의 알루미늄 및 마그네슘 금속 성분은 대기 중의 수분과 반응에 의해 발화 위험성이 크며, 드로스로부터 알루미늄 메탈을 회수하기 위해 재처리 작업 시 다량의 발열제 플럭스(초석,  $\text{NaNO}_3$ )를 사용하기 때문에 질화 알루미늄이 생성되어 수분 접촉 시 다량의 암모니아 gas와 암모니아수가 발생되어 드로스 재활용 기술 개발에 한계가 있었다.

본 연구에서는 알루미늄 재활용 공정이 용이하도록 새롭게 개발된 염화물 플럭스를 이용하여 알루미늄 드로스를 소재화 할 수 있는 공정을 개발하였고, 이 과정에서 발생된 자원화가 가능한 부산물(세라믹 소재, 가스 등)에 대한 분석을 실시하였다.

PF-023 [무기/재료]

## 표면처리용액 분석기술개발 및 현장 적용 연구

김성남\*, 김선혜, 양정환, 남종덕, 정성욱

포항산업과학연구원 분석평가그룹 화학조성색선

\*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, 가전제품과 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 품질 관리를 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 다음 용액 표준물질(CRM)을 이용해 검량선을 작성하여 정량분석을 실시하였다. 첨가된 유기물 구조 특성은 ATR 약세서리를 이용하여 FTIR 스펙트럼을 측정하고 다음, ASTM E2310 규격에서 기술하고 있는 HQI(Hit Quality Index)를 이용하여 기준 용액의 스펙트럼과 비교 결과를 수치로 나타내었다.

PF-024 [무기/재료]

**도자기의 원료인 태토와 유약의 화학적 조성 및 유해물질 용출 특성**  
Characteristics of Chemical Composition and Extraction of Hazardous components  
for Body and Glaze used as the Raw Material of Pottery

**최용욱<sup>1</sup>, 박주희, 오다은, 오영택<sup>2</sup>, 임현아<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>\*전주대학교 환경생명과학과, <sup>2</sup>전주대학교 물류무역학과, <sup>3</sup>한국전통문화전당

\*Corresponding author: cyw411@jj.ac.kr

도자기 전통공예의 우수성을 알아보기 위해 사용되는 원료물질의 태토와 유약의 화학적 주성분 및 극미량 성분분석과 유해물질 용출 특성을 밝히고자 하였다.

1. 도자기의 원료인 태토(국내산 18종 + 베트남산 2종)와 유약 6종을 구입하여 건조 후 분말로 만들어서 주성분은 x-선 형광분석법(XRF)으로 분석하였고, 극미량 성분을 토양공정시험법에 의거하여 총 16성분의 중금속 및 알칼리 성분을 ICP-AES로 분석하였다. 백자토, 청자토, 분청토 및 옹기토를 국내 유통 4~5개 업체로부터 구입하여 산화규소, 알루미늄, 산화철, 산화타이타늄 및 알칼리 금속 4종류(산화소듐, 산화포타슘, 산화탈슘 및 산화마그네슘)를 금속산화물의 형태로 화학적 조성을 XRF로 구하였다. 산화규소가 평균 63.3%, 알루미늄 27.2%, 산화철 3.7%, 알칼리 금속류 합계 5.2% 및 산화타이타늄 0.54% 순으로 화학적 조성을 이루고 있었다. 이를 바탕으로 제겔식(Seger equation)을 구성함으로써 전통 도자기를 구현하고자 하는 공예인들에게 장식, 석회석, 활석, 카올린 및 규석의 배합비를 계산하는 과정을 밝힘으로써 누구나 전통기술을 이용하여 도자기를 재현할 수 있도록 기본 정보를 제공하였다.
2. 태토와 유약에 포함되어 있는 유해 중금속과 알칼리 금속을 포함하여 총 16가지 성분을 분석한 결과 국내에서 유통되고 있는 태토 중 비소 토양허용기준을 초과한 태토로서 분청토 1종, 청자토 2종이 검출되었고 비소 기준의 96%에 해당되는 소지가 청자토에서 발견되었다. 유약성분들 중에서는 6가 크로뮴이 투명매트유에서 허용기준의 2배, 청자유에서 7배가 넘는 크로뮴이 검출되었다.
3. 유통 중인 우수도자기 제품 16종에 대한 용출성분을 평가한 결과 모두 안전한 I 등급 제품이었다. 또한 유약칠하여 자체 제작된 도자 시편 88개에 대한 중금속 16종의 용출농도를 분석하였고, 이것을 바탕으로 안전도를 평가한 결과 64종이 I 등급, 24종이 II등급으로 분류되었다.

PF-025 [무기/재료]

## TRANSPARENT PLATINUM COUNTER ELECTRODES PREPARED BY POLYOL REDUCTION FOR BIFACIAL DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS

Ghifari M. Alvien<sup>1</sup>, Jongin Hong<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Chung-Ang University

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

We developed transparent Pt counter electrodes prepared by polyol reduction of hexachloroplatinic acid. We investigated the effect of reduction temperature on their properties for dye-sensitized solar cells (DSSCs). The surface morphology and transparency of the Pt electrodes were characterized by using scanning electron microscopy (SEM) and UV-visible spectrometry, respectively. The catalytic activity of the counter electrodes was also assessed using a Tafel extrapolation method. The Pt electrodes based on polyol reduction below 200°C exhibited better transparency and catalytic activity than those prepared by thermal decomposition at elevated temperature (Figure 1). The photovoltaic parameters under one sun illumination are summarized in Table 1. The power conversion efficiencies of the DSSCs with polyol-reduced Pt were 6.55% of front illumination and 5.01% of back illumination, respectively. We think that the high ratio of the back-illumination efficiency to the front-illumination efficiency is beneficial for bifacial DSSC applications.

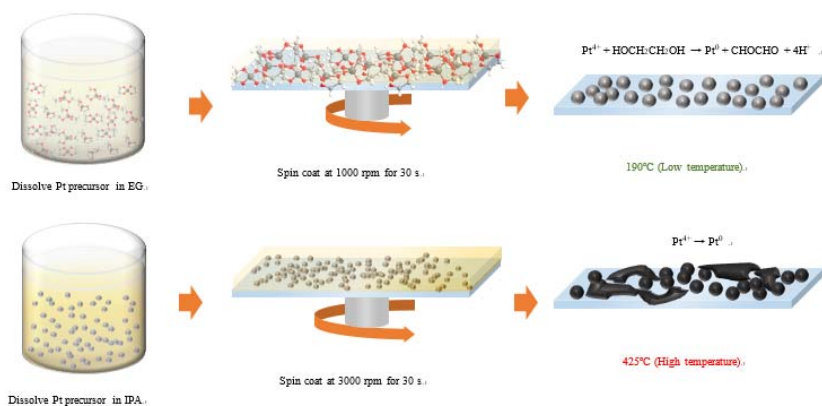


Figure 1. Schematic diagram of the preparation of Pt counter electrodes

Table 1. Photovoltaic parameters of the DSSCs

		$V_{oc}(V)$	$J_{sc}(mA/cm^2)$	$FF$ (%)	Eff. (%)
Polyol reduction	Front	$0.702 \pm 0.011$	$13.77 \pm 0.12$	$67.66 \pm 1.55$	$6.55 \pm 0.28$
	Back	$0.699 \pm 0.006$	$10.44 \pm 0.23$	$68.71 \pm 1.76$	$5.01 \pm 0.24$
Thermal decomposition	Front	$0.682 \pm 0.007$	$13.97 \pm 0.46$	$67.36 \pm 0.72$	$6.42 \pm 0.28$
	Back	$0.672 \pm 0.005$	$9.40 \pm 0.16$	$68.97 \pm 0.66$	$4.35 \pm 0.05$

PF-026 [일반]

## 미세먼지(PM<sub>10</sub>, PM<sub>2.5</sub>) 샘플에 대한 WD-XRF와 LIBS 측정 분석

한보영<sup>1\*</sup>, 이한림<sup>1</sup>, 남용현<sup>1</sup>, 김지석<sup>1</sup>

<sup>1</sup>한국원자력연구원 방사선과학연구소 하나로이용연구단 중성자응용연구부

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

본 연구의 목적은 미세먼지 오염원 규명을 위해 미세먼지 내 추적원소를 찾고자 빠른 분석 방법을 통해 하루 주기의 모니터링 데이터 구축과 정밀 분석방법을 통한 특이 원소 정량 데이터를 구축하고자 한다. 미세먼지 오염원 규명은 많은 변수들이 복합적으로 연관되어 있어 단기간의 측정을 통한 특징을 규정하기 어렵기 때문에 일일 단위로 장기간 시료채취가 요구된다. 이를 위해 고용량 공기채집기 (HiVol-3000 model)를 서울 성동구 한양대학교(2018년 11월부터 운영)와 대전 유성구 한국원자력연구원 빌딩 옥상(2019년 4월부터 운영)에 설치하고 하루단위로 필터교환 작업을 수행하고 있다. 채집된 시료는 먼저 채집 시간, 채집풍속, 온도, 습도, 필터 무게를 기록하고, 비파괴 측정이 선행된다. 비파괴 측정은 감마선, 베타선 검출과 X-ray Fluorescence(XRF), Laser-Induced Breakdown Spectroscopy(LIBS)를 이용하여 방출 분광선을 측정한다. 그리고 보다 정확한 정량 분석을 위해 미세먼지 농도 변화에 따른 선별된 시료들은 방사화분석(Neutron Activation Analysis), ICP-MS, 알파분광분석(Alpha Spectroscopy)등을 이용하여 분석이 진행된다. 본 연구발표에서는 시료 전처리 과정이 필요 없고 측정시간이 짧은 XRF와 LIBS 분석방법을 이용해 하루단위의 채취샘플을 측정한 결과를 보여준다. 먼저 Wavelength Dispersive XRF(WD-XRF) (Tiger S8, Bruker)를 이용해서 미세먼지 내 구성원소의 분광선을 측정하여 미세먼지 농도에 따른 상대적 신호를 모니터링 했다. 또한 동일 시료에 대해 LIBS 장비를 이용하여 원자 분광선을 측정하였고 XRF 결과와 비교 분석했다. 두 분석은 독립적인 분석방법으로 미세먼지 농도 변화 또는 오염원 인자에 따라 나타날 수 있는 새로운 특이 구성원소의 발견하거나 구성원소의 변화를 모니터링 하는 역할을 수행할 것이다.

PF-027 [일반]

## ICP-AES를 이용한 숙련도 시험

이재석, 김지혜, 최광순\*, 서경원, 김종윤, 박재일

한국원자력연구원 원자력화학연구부

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

프랑스 CETAMA가 주관하는 EQRAIN No 23에 참가하여 15개 원소를 ICP-AES로 측정하였다. 사용한 ICP-AES는 Thermo Fisher Scientific사의 모델 Thermo Icap 7400이었다. 15개 원소는 Al, B, Ca, Cr, Cu, Fe, Ga, K, Nd, Rh, Si, Sr, U, Zn 및 Zr이었다. ICP-AES로 측정할 때 15개 원소 최적의 파장을 사용하였으며, 측정 불확도를 산출하였다. 측정결과 상대편차의 최대값과 최소값은 알루미늄과 갈륨으로 각각 -5.8 %와 -0.2%이었다. 만족과 불만족의 기준값인  $(En)_i = \frac{X_i - X_{ref}}{\sqrt{U(X_i)^2 + U(X_{ref})^2}}$  를 사용하여  $(En)_i < 1$ 이면 만족이고,  $(En)_i > 1$ 이면 불만족이다.  $(En)_i$  식에서 알 수 있듯이 측정값이 만족하려면 정확도가 높거나 측정 불확도가 과소평가되지 않아야 한다. 측정 불확도 인자는 최소자승법으로 검정선을 작성할 때만 고려하였다. Al은 상대편차가 최대값인 -5.8 %로 정확도가 낮아서 불만족이었고, B은 상대편차가 -2.9 %로 Rh과 견주어 높지 않았으나 측정 불확도가 1.6 %로 과소평가하여 불만족이었다. 상대편차가 -4.1 %로 두 번째로 높은 Rh은 측정 불확도가 4.2 %로 과소평가되지 않아 만족이었다.

PF-028 [일반]

## 이온교환수지 중 Ce, Co, Cs, Fe, Nb, Ni, Re, Sr 및 U 측정을 위한 전처리

최광순\*, 오심온, 이재석, 박태홍

한국원자력연구원 원자력화학연구부

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

방사성폐수지에 흡착된  $^{99}\text{Ce}$ ,  $^{58,60}\text{Co}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{55}\text{Fe}$ ,  $^{94}\text{Nb}$ ,  $^{94}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{99}\text{Tc}$  및 전알파 핵종의 탈착방법을 확립하기 위하여 비방사성 혼합 이온교환수지 (양이온교환수지+음이온교환수지)에 Ce, Co, Cs, Fe, Nb, Ni, Re ( $^{99}\text{Tc}$  대응), Sr 및 U를 가하고 이온교환수지에 흡착된 9 개 원소의 탈착방법을 연구하였다. Cs은 ICP-MS로 그리고 나머지 원소는 ICP-AES로 측정하였다. 원소가 흡착된 이온교환수지에 혼합산 (진한 질산 10 mL-진한 염산 4 mL-진한 불산 0.25 mL)을 가하고 고성능 마이크로파 용해장치 (HP-MDS)로 전처리하였을 때 Co, Cs, Fe, Nb, Ni, Re, Sr 회수율은 양호하였다. 그러나 Ce과 U의 회수율이 낮았으므로 혼합산 (진한 질산 7 mL-진한 염산 7 mL-진한 불산 0.25 mL) 조성과 HP-MDS 작동 조건을 바꾸고 HP-MDS로 전처리하였으나, 두 원소의 회수율은 커다란 차이가 없었다. 특히 Ce의 회수율이 낮았으므로 탈착 후 이온교환수지에 Ce이 남아 있는지 확인하기 위하여 혼합산과 HP-MDS로 2 회 전처리에 사용한 이온교환수지를 450 °C까지 가열하였다. 생성된 재를 혼합산과 HP-MDS로 용해하고 ICP-AES로 측정한 결과 Ce이 검출되었다. 이 실험으로부터 Ce은 사용한 혼합산 (질산-염산-불산)에서 잘 탈착되지 않는 것을 알 수 있었다. 그러므로 혼합산 (질산-염산-불산) 외에 산화제로 과산화수소를 가하고 HP-MDS로 전처리할 경우에 Ce 회수율은 92.4 %로 크게 증가하였다. 또한 혼합산과 과산화수소를 가하고 전처리하였을 때 Co, Cs, Fe, Nb, Ni, Re, Sr 및 U 회수율도 모두 90 % 이상이었다.



PF-029 [일반]

## Characterization of in-vitro metabolites of bolasterone (7 $\alpha$ ,17 $\alpha$ -dimethyltestosterone) by ultra high-performance liquid chromatography / orbitrap mass spectrometer

**Anca Raluca Muresan<sup>1,2</sup>, Khandoker Asiqur Rahaman<sup>1,2</sup>, Farzana Binte Rafique<sup>1,2</sup>,  
Hophil Min<sup>1</sup>, and Oh-Seung Kwon<sup>1,2,\*</sup>**

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

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

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

Bolasterone (7 $\alpha$ ,17 $\alpha$ -dimethyltestosterone) is a typical steroid drug that is often illegally used in different kind of sports discipline, and it is included in the list of prohibited substances of World Anti-Doping Agency. The objective of this study was to investigate phase I and phase II metabolites of designer steroid bolasterone (MW 316), generated through *in-vitro* condition (rat liver microsomes), and identified by using an ultra high-performance liquid chromatography/Orbitrap mass spectrometer (Q-Exactive). A full scan and further various dd-MS/MS modes, all in positive ionization and an isocratic elution mode were used to obtain detailed structural information of the metabolites. We have characterized 6 hydroxylated (M1-M6) and 1 conjugated (G1) metabolites based on their retention times, characteristic ionization, and collision-induced dissociation behaviors based on the steroid structure, and their mass spectra were compared. M1, M4, and M6 expressed as m/z 333 of [M+H]<sup>+</sup> are proposed as A ring hydroxylated metabolites. Metabolites M4 and M6 have highly similar mass spectra, but with different ion intensities. The ions at m/z 257 [M+H-H<sub>2</sub>O-58Da]<sup>+</sup> indicates unaltered D ring fragmentation, m/z 315, 297, 279 suggest 3 consecutive losses of water. Whereas the metabolites M3 and M5 expressed as m/z 333 of [M+H]<sup>+</sup> have a highly similar mass spectra and are proposed as isomers, with one hydroxylation at D ring. The major ions are at m/z 97 which is reported to be from the A ring, and at m/z 123 from C ring fragmentation. The m/z 297 [M+H-2H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> and 279 [M+H-2H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> for both M3 and M5 indicate of 3 oxygen atoms in their structure. The missing ion at m/z 257 [M+H-H<sub>2</sub>O-58Da]<sup>+</sup> indicates changes in the D ring fragmentation. Metabolite M2 shows a similar fragmentation pattern. After the phase II reaction, the glucuronide-conjugated metabolite G1, expressed as m/z 493 of [MH]<sup>+</sup> was identified. By studying both the full scan mass spectra and the product ion spectra the significant ions are at m/z 317 [M+H-gluc]<sup>+</sup>, m/z 299 [M+H-gluc-H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> and m/z 281 [M+H-gluc-2H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup>, and by the missing ions at m/z 331, 141, and 123 we concluded that conjugation at the 3-keto moiety is the most feasible possibility. The location of the hydroxyl group position is hard to be specified based only on the mass spectra alone, and due to the lack of specific reference standard. This study shows that the detection of bolasterone administration could also be achieved by using one of these new potential biomarkers.

PF-030 [일반]

## Colorimetric detection of arsenic and mercury ions based on the d-penicillamine induced aggregation of gold nanoparticles

Sujin Yoon<sup>1,3</sup>, Yunsik Nam<sup>2</sup>, and Kangbong Lee<sup>1,3\*</sup>

<sup>1</sup>National Agenda Research Division, Korea Institute of Science & Technology

<sup>2</sup>Advanced Analysis Center and Green City Technonogy Institute,  
Korea Institute of Science & Technology

<sup>3</sup>\*University of Science & Technology

\*Corresponding author: leekb@kist.re.k

A simple and facile colorimetric method for the detection of arsenic ions ( $\text{As}^{3+}$ ) and mercury ions ( $\text{Hg}^{2+}$ ) using d-penicillamine coated silver nanoparticles (DPA-AuNPs) has been developed.  $\text{As}^{3+}$  and  $\text{Hg}^{2+}$  ions induced the aggregation of DPA-AuNPs in solution, resulting in a color change from red to blue, which was accompanied by the appearance of a new surface plasmon absorption band at 730 nm. The binding site and sensing mechanism for  $\text{As}^{3+}$  and  $\text{Hg}^{2+}$  ions in DPA-AuNPs were characterized by Fourier Transform infrared spectroscopy, ultraviolet-visible spectroscopy, and transmission electron microscopy. The aggregation of AuNPs in the presence of  $\text{As}^{3+}$  and  $\text{Hg}^{2+}$  ions was inhibited by d-penicillamine, which formed a shell on the surface of AuNPs. Furthermore,  $\text{As}^{3+}$  and  $\text{Hg}^{2+}$  ions coordinated with O- on AuNPs through a binding structure, causing the aggregation and colorimetric response of AuNPs. The sensor conditions were optimized with 5 mM of d-penicillamine (DPA) and 20 nm AuNPs at pH 4.5 and 7. The absorption ratios ( $A_{730}/A_{525}$ ) of the DPA-AuNPs solution exhibited a linear correlation with  $\text{As}^{3+}$  and  $\text{Hg}^{2+}$  ions concentration within the range of  $0.0 - 2.0 \times 10^{-3}$  mM.

This sensitive and selective colorimetric assay opens up a fresh insight of development facile and fast detection methods for metal ions and biomolecules using the special catalytic reactivity of AuNPs.

PF-031 [일반]

### 과불 폴리머의 측쇄 탄소 사슬 분석 방법 연구

Side chain analyses of perfluoroalkylethyl acrylate polymers

**박광서, 최은경\***

Kwang Seo Park and Eun Kyung Choe\*

한국생산기술연구원 환경규제기술센터

\*Corresponding author: ekchoe@kitech.re.kr

과불 폴리머의 원료물질인 C6~C12 플루오르텔로머(FTOH), 플루오르요오드(FTI), 과불 아크릴 모노머(FTAc) 등의 과불화합물 단일 물질들은 유기 용매에 용해하여 GC-MS로 분석 가능하며, 91.3~99.5 순도의 표준 시약도 판매되고 있어 정량 분석이 가능하다. 이와는 달리 과불 아크릴 혹은 과불 메타크릴 모노머가 중합이 되고 나면, 과불 측쇄 사슬은 분석의 사각지대에 놓이게 되어 긴사슬 과불알킬기의 사용 실태 조사를 해야 할 경우 용이하지 않다. 본 연구에서는 Py-GC-MS (300°C)를 이용하여 C6-perfluoroalkylethyl acrylate polymer와 C8-perfluoroalkylethyl acrylate polymer의 측쇄 탄소 사슬 정보를 얻을 수 있는 지 시도하였고, 그 결과 6:2 FTOH 및 8:2 FTOH의 [M-H]<sup>+</sup>이온(각 m/z 363 및 463)에서 추출되는 EIC 크로마토그램에서 주 사슬인 6:2 FTOH 혹은 8:2 FTOH를 중심으로 C6~C12의 분포를 갖는 과불 탄소사슬 관련 물질들을 확인할 수 있었다. 과불 고분자 액체시료를 전처리 없이 그대로 시료컵에 로딩하여 측쇄 사슬로부터 분해되는 FTOH를 신속 스크리닝 할 수 있었다. 본 분석법은 C6 혹은 C8 이상의 과불알킬 사슬을 측쇄로 갖는 고분자 액체제품의 모니터링 혹은 발수발유 코팅된 완제품 (섬유, 가죽, 카펫, 플라스틱 필름 등)에 C8 이상의 과불 사슬의 사용 여부를 스크리닝할 때 신속하고 효율적인 방법으로 활용될 수 있으리라 사료된다.

PF-032 [일반]

**유기물질의 성분 분석 시 GC-FID 및 GC-MS의 정량성 비교**  
Comparison of area normalization and standard reagent method using  
TIC-MS and FID in GC analyses of organic components

**박광서, 최은경\***

Kwang Seo Park and Eun Kyung Choe\*

한국생산기술연구원 환경규제기술센터

\*Corresponding author: ekchoe@kitech.re.kr

유럽 新화학물질관리제도(REACH)에서는 물질 등록을 할때 물질 확인(Substance Identification)을 수행하여 등록시스템에서 단일성분, 다성분, UVCB 성분이지를 입력하고, 순도, 각 성분의 함량 및 함량 범위도 입력하게 되어 있다. 유기물질의 경우, 물질에 따라 response 차이가 거의 없는 FID의 사용이 표준시험법에도 사용되고, 보편적으로 권장하고 있는 경향이 있으나, MS 라이브러리 기능을 이용한 GC-MS 분석은 주성분 외의 불순물 및 첨가제 등의 파악에 매우 유익하다. 따라서, FID 및 MS 검출기에 따른 정량 차이를 비교하여 GC-MS를 선호하여 분석 수를 최소화할 수 있는 지 알아보하고자 하였다. 표준 시약의 검량곡선을 이용한 GC-FID 분석, 표준시약 검량곡선을 이용한 GC-MS 분석, GC-MS 피크 면적비 방법으로 주 성분의 순도와 불순물의 함량을 분석하여 비교하였다. 물질로는 N,N-dimethyl-*p*-toluidine의 화학물질과 이에 불순물로 포함된 미량 수준의 N-methyl-*p*-toluidine, N,N-dimethyl-*m*-toluidine 등을 정량하여 비교하였다. 표준시약이 없는 물질들을 위해 다양한 시료를 사용하여 표준시약법 및 피크 면적비를 비교하여 후자로 대신할 수 있는 지 그 결과를 비교해 보았다.

PF-033 [일반]

## 화학물질 등록 시 미량 유해 무기물질 스크리닝 및 정량 절차도 연구

Study on scheme for screening and quantification of hazardous inorganic substances in trace amounts influencing hazard classification

권현아, 박광서, 손승환, 최은경\*, 김상헌<sup>1</sup>

Hyun Ah Kwon, Kwang Seo Park, Seung Hwan Son, Eun Kyung Choe\*, Sanghun Kim<sup>1</sup>

한국생산기술연구원 환경규제기술센터

<sup>1</sup>경성대학교 공과대학 제약공학과

\*Corresponding author: ekchoe@kitech.re.kr

유럽의 신(新)화학물질관리제도 (Registration, Evaluation, Authorization and Restriction of CHemicals; REACH)에 따라 유럽 내에서 유통되는 1톤 이상의 모든 화학물질은 등록 후 제조 또는 수입할 수 있고 2018년 5월로 기존화학물질의 등록이 완결되었다. 등록단계는 올바른 물질 확인 (Substance Identification)에서 시작하며 구조 분석에 더하여 특히 성분 분석이 주요하고, 미량 불순물이나 첨가물 확인도 분류, 표시 및 포장에 관한 규정 (Classification, Labelling and Packaging; CLP) 관점에서 필수적이다. 즉, 유해화학물질이 0.1% 이상 등록물질에 함유된 경우, 해당 물질 자체는 유해하지 않더라도 미량 함유된 유해화학물질의 유해성에 따라 분류되는 영향을 받는다. 따라서 본 연구에서는 화학물질 확인 시, 유해성 분류에 영향을 주는 미량 무기물질이 0.1% 이상 존재하는 지를 확인하기 위한 스크리닝 및 정량 시스템 절차도를 확립하고자 하였다. 일단계적으로 REACH SVHC 후보물질 197종 (2019.1.15. 기준) 중의 무기이온을 함유한 물질을 살펴보았다. 총 As, Cd, Cr, Pb, Sn, Sb, Co의 중금속을 1~3종 같이 함유하였다. 따라서, 유해 무기물질을 발체하여 유해 중금속 As, Cd, Cr, Pb, Sn, Sb, Co 별로 해당 중금속이 유해물질에서 차지하는 비율을 계산하여 서치할 수 있도록 하였다. 사례로 납(Pb)의 경우, 현재 32종의 납 함유 화합물 (25종은 무기화합물, 7종은 tetraethyllead, lead dipicrate, lead styphnate 등의 유·무기화합물)이 생식독성 (5종은 발암성 및 생식독성)이며, 납이 차지하는 비율은 0.31 ~ 1.00 으로 계산된다. 법규 이론 상, 주 물질에 납이 0.31 (현 리스트 상 최소 비율) x 0.1% (유해성 분류 기준)를 곱한 수치만큼 함유되지 않으면 분류에 영향을 주지 않는다. 산화아연(ZnO)의 REACH 등록 시 물질 확인을 사례로 살펴보면, 산화아연은 ICP-OES의 Zn 정량분석 결과, 순도 99.56%로 정량되었고, CLP에 따라 생식독성으로 분류되는 납 (Pb)이 XRF로 스크리닝되어, ICP-OES 정량분석한 결과 0.02 % (w/w)가 함유되어 있는 것을 확인하였다. 따라서, Mono-constituent로 등록되는 ZnO의 물질확인프로파일 (Substance Identification Profile; SIP)에 납은 분류에 영향을 주는 불순물 (impurity for classification)이 아니라, 불순물(impurity)이라는 정보를 제공하였다. 납을 분류에 영향을 주는 불순물 (impurity for classification)로 SIP를 작성해야 하는 기업은 공동 등록을 하기 위해서는 제조 과정에서 납을 감소하는 방안을 마련해야 한다. 본 시스템은 미량 유해무기물질이 분류에 영향을 끼칠 만큼 함유되어 있는지 평가하는데 용이하며, 등록 시 화학물질의 유해성을 올바르게 사전에 평가하는데 기여할 것으로 기대된다. 향후 C&L 인벤토리의 유해 무기물질에 대해서도 리스트화하거나 혹은 인벤토리를 서치하여 본 연구에서와 같이 접근하면 유익하리라 사료된다.

PF-034 [일반]

## 1-Propanol의 90일간 흡입챔버내 농도 모니터링 및 B6C3F1 Mice의 생체영향 연구

이성배<sup>1\*</sup>, 이용훈<sup>2</sup>, 한정희<sup>2</sup>, 박찬혁<sup>1</sup>, 조지민<sup>1</sup>, 임철홍<sup>1</sup>

<sup>1</sup>산업안전보건연구원 흡입독성연구센터 흡입시험연구부

<sup>2</sup>산업안전보건연구원 흡입독성연구센터 병리검사부

\*Corresponding author: sblee@kosha.or.kr

1-Propanol을 암·수 B6C3F1 마우스에 90일간 반복흡입 노출 시 나타나는 독성을 확인하여 유해성·위험성 평가 자료로 활용하고 발암성시험의 농도설정을 위하여 연구를 수행하였다. 시험의 군구성은 대조군과 노출군 T1, T2, T3군으로 구성하였으며 각 군당 실험동물은 동물실험윤리위원회의 심의 및 승인을 득하여, 암·수 각각 10마리씩 총 80마리를 사용하였다. 1-propanol을 증기화하여 각각 500, 1,600 및 5,200 ppm으로 OECD Guideline, 고용노동부, 환경부 국립환경과학원, 그리고 식약처 고시에 따라 1일 6시간, 주 5일, 90일간 반복 전신흡입 노출시켰다.

농도 균질성 결과 각 지점 오차가 0.02%로 챔버 내 노출물질의 농도가 균질함을 확인하였으며, 노출 물질이 목표농도에 95% 도달하는 T95는 44.8분이었다. 흡입챔버 내 1-propanol 물질은 T1군, T2군, T3군 각각 503.55±10.71 ppm, 1,605.42±52.64 ppm 및 5,209.11±151.48 ppm으로 노출되었다. 90일 반복 노출 기간 동안 노출군 암·수 마우스의 일반증상, 체중변화, 사료섭취량, 그리고 안과학적 검사에서 1-propanol 물질과 관련된 영향은 확인되지 않았으며, 대조군을 포함한 모든 노출군에서 사망동물은 관찰되지 않았다.

혈액학검사결과, 수컷 T2군에서 적혈구수(RBC)가 유의하게 감소하였으며, 암컷 T3군에서 단핵구수(MONA)가 유의하게 증가하였다. 혈액생화학적 검사 결과, 모든 항목에서 대조군과 비교하여 시험물질 노출군에서 통계적으로 유의성 있는 변화가 관찰되지 않았다. 육안적 관찰 결과, 암·수 대조군, T1군, T2군 및 T3군에서 피부의 탈모(Hair loss)가 관찰되었으며, 수컷 대조군의 비장 및 흉선에서 소형화(Small)가 관찰되었다. 장기중량 측정 결과, 암컷 T3군에서 뇌의 상대장기 중량의 유의한 감소가 관찰되었으나, 독성학적 의미는 없는 것으로 판단되었다. 병리조직학적 검사 결과, 육안소견에서 관찰된 피부의 탈모는 병리조직검사에서 소견이 관찰되지 않았다. 또한, 수컷 대조군의 비장 및 흉선에서 소형화(Small)는 위축(Atrophy)으로 확인되었으며, 이는 자연발생 또는 우발적 소견으로 독성학적 의미는 없는 것으로 판단되었다.

이상과 같이 본 연구에서 체중 및 사료, 임상결과, 그리고 병리검사 등의 결과를 종합했을 때, 1-Propanol의 무유해독성량인 NOAEL(No Observed Adverse Effect Level)은 5,200 ppm이상 수준으로 판단하였다.

PF-035 [일반]

## CO<sub>2</sub> Detection Test in Open Space through Advanced Open Path Infrared Sensor (TOR Sensor)

심재웅, 김양균\*, 조남욱, 이종천

한국건설기술연구원 화재안전연구소

\*Corresponding author: yangkyunkim@kict.re.kr

전 세계적으로 많은 화학제품이 사용됨에 따라 제품 생산에 필요한 유해 가스 사용량도 증가되고 있다. 이에 따라 화학 공장에서 유해 가스의 누출사고 또한 빈번히 발생 하고 있다. 이렇게 발생한 유해 가스는 매우 치명적이기 때문에 한 번의 사고로 인하여 대형 피해가 발생 한다. 따라서 현재 유해 가스의 누출을 확인하기 위해 여러 종류의 측정 방법을 이용하여 모니터링 하고 있다. 여러 측정 방법 중 경로개방형 가스 측정기의 경우 대공간에 분포된 기체를 샘플링 없이 측정하는 방식으로, 적외선 경로 내의 가스 평균 농도를 측정하는 방식이다. 특히 적외선에 노출된 가스의 경우 고유 파장범위에서 흡수되므로 표준가스의 농도에 따른 검량 작업을 통하여 정량분석이 가능한 방법이다. 하지만 현재 개방형 방식 중 많이 사용되고 있는 passive 방식의 경우 외부 광에 대한 간섭 등이 발생하기 때문에 본 연구에서는 검출기와 추가 적외선 램프를 사용하여 측정 조건을 보다 간편하게 변경하였다. 또한 소형·경량화 및 가스의 정확한 측정을 위하여 적외선 초전센서를 사용하였으며, 대기중 간섭을 최소화하기 위하여 chemometric 방법을 적용하였다. 개발된 센서의 유해가스 상관성을 확인하고자 10m 거리에서 가스를 농도별로 측정 및 선형성을 확인 하였고, 0.9 이상의 상관계수를 얻을 수 있었다. 이후 대공간에서 CO<sub>2</sub> 검출 시험을 진행 하였고 실시간 가스 농도 변화를 ppm 값으로 확인할 수 있었다. 이 결과를 이용하게 되면 위험지역과 비 위험지역에 대한 분류도 가능할 것이다. 앞으로 추가 연구를 통해 다양한 현장에서 실시간 유해가스 관리에 활용될 것으로 기대한다.

본 연구는 다부처사업으로 수행중인 재난치안용 멀티콥터 무인기 특화임무장비 기술 개발(과제번호 10080094) 연구결과 중 일부입니다.

PF-036 [일반]

## ICP-MS를 이용한 REE 함량 분석 시에 발생하는 Ba, Ce, Pr에 따른 분석오차에 관한 연구

김태현<sup>1,2,\*</sup>, 이승구<sup>1</sup>

<sup>1</sup>한국지질자원연구원, <sup>2</sup>강원대학교 지질지구물리학과

\*Corresponding author: kth0319@kigam.re.kr

유도 결합 플라즈마 질량 분석기(Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometer, ICP-MS)는 미량원소의 함량을 정량하는 질량분석기로서, 분석과학적인 측면에서만 아니라 여러 연구 분야에서 다양한 용도로 활용되고 있다. 하지만 ICP-MS는 분석 시 산화물 및 수산화물이 발생되는데, 이러한 요인으로 인해 지구화학적으로 중요한 의미를 가지는 희토류 원소 (Rare Earth Element, REE)의 함량측정 시에 Eu 이하 중희토류(Heavy Rare Earth Element, HREE)는 큰 영향을 받게 된다. 예를 들어, 원자 번호 56번의 Ba는  $^{130}\text{Ba}$ ,  $^{132}\text{Ba}$ ,  $^{134}\text{Ba}$ ,  $^{135}\text{Ba}$ ,  $^{136}\text{Ba}$ ,  $^{137}\text{Ba}$ ,  $^{138}\text{Ba}$ 과 같이 7개의 동위원소가 있는데, 이는 시료 분석 시 ICP-MS 내에서 BaO, BaOH<sup>+</sup>와 같은 화합물 및 다원자 이온을 형성하여 REE에 해당하는 Eu( $^{151}\text{Eu}$ ,  $^{153}\text{Eu}$ )과 Gd( $^{155}\text{Gd}$ ,  $^{157}\text{Gd}$ )의 분석치에 영향을 주게 된다. 또한 이와 같은 원리로 REE에 속하는 Ce( $^{136}\text{Ce}$ ,  $^{138}\text{Ce}$ ,  $^{140}\text{Ce}$ ,  $^{142}\text{Ce}$ )와 Pr( $^{141}\text{Pr}$ ) 또한 각각 CeO<sup>+</sup>, CeOH<sup>2+</sup>와 PrO<sup>+</sup>, PrOH<sup>2+</sup>와 같은 다원자 이온을 형성하여 다른 REE인 Gd( $^{155}\text{Gd}$ ,  $^{157}\text{Gd}$ )와 Tb( $^{159}\text{Tb}$ )의 분석치에 영향을 미치게 된다.

본 연구에서는 Ba 및 경희토류(Light Rare Earth Element, LREE)에 해당하는 Ce, Pr의 함량이 높은 지질시료에서 HREE의 함량 분석결과가 이러한 영향을 어느 정도의 받게 되는지 알아보기 위해 지구화학적 표준시료 중 하나인 JG1a를 3배 농축하여 만든 인공시료(JG1a-3x)에 Ba, Ce, Pr를 인위적으로 혼합하여 이를 ICP-MS를 통하여 분석하고 표준시료의 추천값과 분석 결과가 어느 정도의 차이를 보이는지 실험하였다. 이를 위해, 본 연구에 앞서 진행된 실험에서 Ba, Ce, Pr 표준용액을 각각 이용하여 ICP-MS로 측정시 발생하는 산화물 즉 앞서 언급한 Eu( $^{151}\text{Eu}$ ,  $^{153}\text{Eu}$ ), Gd( $^{155}\text{Gd}$ ,  $^{157}\text{Gd}$ ), Tb( $^{159}\text{Tb}$ )와 같은 원소들의 측정치가 사전에 측정된 바탕값에 비해 상대적으로 높게 나타나는 것을 확인하였으며 Ba, Ce, Pr에 의해 시료의 분석치가 영향을 받을 수 있음을 사전에 파악하였다.

실험결과, 당 실험실 자체 제조 암석용 표준용액인 JG1a-3x의 Eu, Gd, Tb의 분석결과가 일반적으로 시행되는 산화물 보정에도 불구하고 추천값과 큰 차이를 보였고 나머지 REE들의 분석치는 추천값과 0.02% 정도의 오차를 보이며 거의 일치하였음을 확인할 수 있었다. 본 연구에서 이루어진 실험은 인위적으로 Ba, Ce, Pr을 첨가하며 진행되었기 때문에 일반적으로 자연에 존재하는 모든 지질 시료에 해당되는 사례는 아니지만, Ba, Ce, Pr이 상대적으로 다량 함유된 화강암계열 암석표준시료인 G-2(Granite), GSP2(Granodiorite Sliver Plume) 등과 같은 특정 지질시료에서는 일반적인 지질시료들에 비해 이러한 영향을 많이 받을 수 있다는 것을 의미한다.



PF-037 [일반]

## Cycle Corrosion Tester(CCT)를 이용한 염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>)과 염화나트륨(NaCl)의 부식 영향성에 대한 연구

김재희, 양정원, 최형욱\*

\*KCC 중앙연구소 신뢰성특성평가연구팀

\*Corresponding author: hyungouk@kccworld.co.kr

염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>)은 물성의 특징 때문에 염화나트륨(NaCl)과 더불어 동절기 제설제 중 하나로 사용되고 있다. 최근 폭설 및 한파의 기간이 늘어남에 따라, 염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>) 및 염화나트륨(NaCl)의 사용량도 늘어나고 있는 추세이다. 이 두 물질은 눈이나 얼음과 직접 반응하여 효과적으로 결빙 방지한다는 순기능도 있지만 차량이나 도로의 부식을 야기하는 등의 역기능도 가지고 있다. 그렇기 때문에 두 물질과 부식의 상관관계를 파악하여 적절하게 사용하는 것이 무엇보다 중요하다. 그러나 염화나트륨(NaCl)의 철강재 부식 영향성과 관련해서 규격이나 연구가 충분히 시행된 데 비해, 염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>)에 대한 연구 및 규격이 상대적으로 미비한 상황이다. 따라서 염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>)과 부식의 상관관계를 명확하게 확인하기가 어려운 실정이다.

이에 본 연구는 염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>) 용액에 따른 강판의 부식을 확인하여 염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>)의 부식 영향성을 파악하고자 한다.

실험을 수행하기 위해 강판 및 도장된 강판을 시험군으로 준비하였으며, 실험은 염화칼슘(CaCl<sub>2</sub>)과 염화나트륨(NaCl) 용액에 각 시편을 부식시켜 표면 저항 값 변화, 무게 감량 등 시편의 변화를 관찰하는 방식으로 수행하였다. 그러나 일반 환경에서는 부식 속도가 느리기 때문에 시편의 변화를 관찰하기가 어려우므로, 보다 원활한 실험을 위하여 두 가지 환경 조건을 설정하였다.

먼저 시료에 같은 정도로 Scribe를 하여 부식 반응이 더 빨리 진행되도록 하였다.

둘째, CCT(Cycle Corrosion Tester) 분석기계를 이용하여 일정한 압력과 속도로 용액을 분사하도록 실험 환경을 설정하였다.

이 실험을 통해 염화계 물질에 의한 부식 반응과 변화 단계를 관찰하고, 용액별 부식도의 관계를 이해 할 수 있다.

PF-038 [일반]

## 강관용 분체도료 경화도막의 내후 열화 메커니즘 분석연구

양정원<sup>1,\*</sup>, 최형욱<sup>1</sup>

<sup>1</sup>\*KCC 중앙연구소 신뢰성\_특성평가연구

\*Corresponding author: jwyang@kccworld.co.kr

다양한 산업분야에 적용되는 분체도료 중 송유관, 가스관 등의 파이프에 적용되는 강관용 분체도료는 파이프의 부식방지, 내약품성 및 부착성능을 위해 에폭시 수지를 주로 사용한다. 다만, 에폭시 수지가 사용된 도료는 Methyl abstraction, Hydrogen abstraction, Norrish reaction 등 자외선에 의한 다양한 열화 현상이 발생할 수 있어 기후조건에 노출시 도막 물성이 취약해지는 문제가 발생한다. 그러므로, 해당 연구에서는 고내후 제품 개발 방향성 제시를 위해 BPA epoxy-amine 경화타입 도막의 분자적 열화 현상 분석을 통한 내후성 저하 원인의 이해를 돕고자 한다. BPA epoxy-amine 경화 도막 시편(STD)을 Weather-O-Meter(시험규격 : SAEJ1960/2527) 7일 시험후 도막(열화시편)과 비교 하였으며, FT-IR(ATR), DSC, GPC, NMR, MALDI-TOF 측정을 진행하여 STD 대비 열화시편간 분석데이터 차이로 내후 열화 메커니즘을 예상하였다. 결과적으로, BPA epoxy 내 phenyl-O 부근의 bond break 와 Norrish reaction에 의한 산화, 그리고 동시에 crosslink 재결합으로 결합 네트워크의 변형이 발생하는 것을 확인하였다.

PF-039 [일반]

## Image Processing을 이용한 광물상 자동 정량분석 기술개발

박태창\*, 오한상, 김상헌, 김병훈

현대제철 기술연구소 재료분석팀

\*Corresponding author: tae\_chang@hyundai-steel.com

현재 광물상을 정량분석하기 위해서, 광학현미경을 통해 얻은 이미지에 점산법(Manual point counting)을 적용하여 각 광물상의 분율(Phase fraction)을 정량화하고 있다. 하지만 이 점산법은 분석자의 경험과 판단에 의존하는 방법으로 객관적인 결과를 얻는데 어려움이 있을 뿐만 아니라 각각의 이미지를 포인트를 옮겨가면서 count해야 하므로 많은 시간이 소요된다는 단점이 있다. 본 연구에서는 이러한 점산법의 문제점을 해결하기 위하여, image processing 기법을 기반으로 자동으로 광물의 상분율을 측정할 수 있는 automatic program을 개발하였다. 개발한 image automatic program을 활용하면, 당사 제철공정에서 사용되는 철광석, 소결광 등 광물들에 존재하는 hematite, magnetite, calcium-ferrite 그리고 slag 등의 상들을 자동으로 구분을 할 수 있을 뿐만 아니라 구분된 광물상에 해당하는 이미지의 픽셀을 계산하여, 각 광물상을 정량적으로 계산할 수 있다. 향후 총 7가지 광물상 구분이 가능하도록 개선하는 추가적인 연구를 진행할 계획이다.

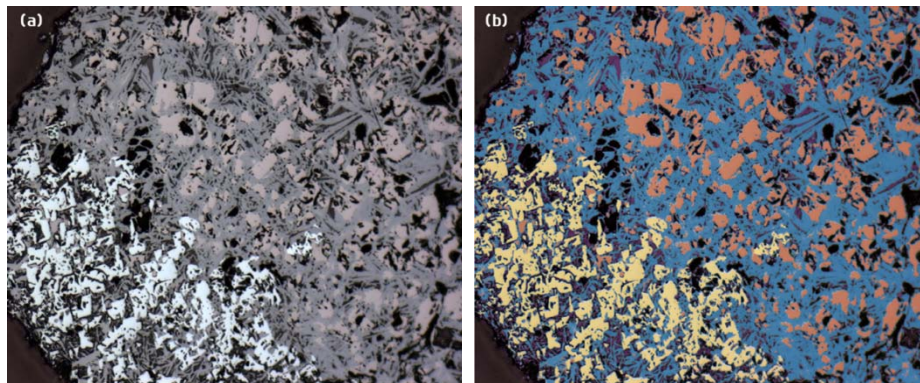


Fig. Image automation program을 이용한 광물상 분석 결과

PF-040 [일반]

## AFM Phase Imaging 기법을 통한 Polyurethane 미세 발포체의 내부 구조변화 측정

한재철<sup>1,\*</sup>, 정주영<sup>1</sup>

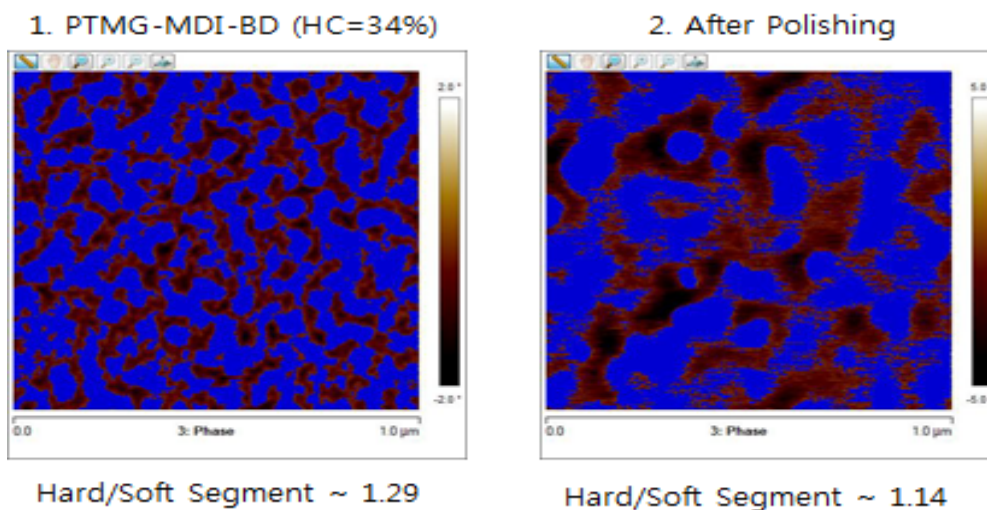
<sup>1</sup>SKC R&D 센터

\*jchan@sk.com

폴리우레탄 탄성체는 경질상 및 연질상의 뚜렷한 2개 상의 구조를 갖는데 AFM Phase Imaging 기법을 사용하여 영상화된 폴리우레탄 샘플을 나타낼 수 있다. 이들의 경도를 기초로 하여 상이한 영역에서의 차이를 증폭시켰으며 이것은 경질 및 연질 상을 영상화할 수 있다. 폴리우레탄 탄성체는 4,4 MDI-BD의 Hard segment와 Soft segment로는 분자량이 2000g/mol인 PTMG을 사용하였고 내부 구조변화 확인을 위해 반도체 기판에 연마한 후 경질상과 연질상의 배열 및 면적 변화를 측정하였다. Phase Image를 얻기 위해 낮은 스프링 상수를 가진 팁을 사용하였다.

가장 순수한 경질상 대 가장 순수한 연질상의 비율은 1.6 미만이고 가장 순수한 경질상에 대한 가장 밝은 부분과 가장 순수한 연질상에 대한 가장 어두운 부분에 의해 정의된 면적은 도 1 내지 2로부터 각각의 방향에서 가장 가까운 1/16" 인 것으로 측정 되었다.

(밝은 부분과 어두운 부분의 끝 사이에 있는 회색 음영에 의해 표시되는 혼합된 경질 및 연질 단면을 가진 영역을 측정 및 계산에서 제외하였다) 이어서, 전환인자 1/16" = 12.5 nm를 사용하여 측정을 나노미터로 전환하고 가장 순수한 경질상 및 가장 순수한 연질상의 면적을 구하였다.



PF-041 [일반]

## A study of cell viability measurement by using FTIR

Yoon Sook Na, Sangmo Shin\*

IQBIO Co.,Ltd.

\*Corresponding author: sms.iqbio@gmail.com

Cytotoxicity tests in drug screening is fundamental process. However, the current methods are time consuming and require high costs and may differ from batch, and involves the risk that the results will vary by the experimenter. Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy has been established as a fast spectroscopic method for biochemical analysis of cells and tissues. In this study we have used FTIR to determine whether cell viability can be estimated. MCF7 breast cancer cells were treated with anticancer drug docetaxel as well as with freezing-thawing, and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> necrosis inducers. When cancer cells are treated by apoptosis inducer, or necrosis inducer, the amide peaks were shown in specific regions from dead cells. By analyzing the characteristics of the amide I peak, the viability of the cells can be estimated and the cell viability can be measured in real time. As a result of this FTIR spectroscopy is expected unambiguous and easy analysis of cell viability and may be useful analysis method for biochemical and medical applications.

PF-042 [일반]

## 실란커플링제에 의해 표면이 개질된 패각 분말의 특성 분석

손유정, 신상모\*

(주)아이큐바이오

\*Corresponding author: sms.iqbio@gmail.com

실란 커플링제는 2개 이상의 다른 반응기를 가지면서, 결합하기 어려운 유기재료와 무기재료를 연결하는 바인더 역할을 하며, 이는 재료의 강도를 높이고 변형을 감소시킨다. 현재까지는 실리카에 실란처리를 한 연구는 활발히 진행되고 있지만 탄산칼슘에 대한 연구는 부족하다. 본 연구에서는 버려지는 패각에서의 탄산칼슘을 이용하여 고부가 제품으로의 전환을 활용하는 선행 연구로 버려지는 패각 분말 표면에 실란 커플링제로 표면을 개질하여 그 표면 특성에 관한 연구를 진행하였다. pH를 조절하여 패각 분말의 표면에 아민계 실란을 건식 합성하였으며, 이를 SEM, XRD, IR, TGA/DSC 등의 특성 분석을 통해 표면이 개질되었음을 확인하였다. 또한 이렇게 표면이 개질된 패각 분말을 이용하여 강도 측정을 통해 강도 값의 증가를 확인하였다. 강도를 개선하기 위한 유무기 하이브리드 바인더에 대한 연구를 추가적으로 실시하여 추후 폐 패각의 고강도 재료로서의 가능성을 기대한다.

PF-043 [일반]

## Quantification and Qualification Analysis of Naphthenic Acids in Petroleum Heavy Oil by SPE Preparation, FT-IR, and FT-ICR MS

마경진, 이석진, 김은경, 이성협

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

원유에 함유되어 있는 유기산을 일반적으로 납센산 (Naphthenic Acids) 이라고 총칭하며, 납센산은 정유공정의 반응기, 배관 재질 부식에 큰 영향을 미치기 때문에 납센산 함량과 화학 구조 분포에 대한 분석은 정유공정의 부식관리와 사고예방에 중요한 정보가 된다. 정유 공장에서 기존에는 납센산 총량을 KOH 적정법으로 구하여 관리하고 있으나, 해당 시험법의 경우 납센산 이외 머캡탄 등 Impurity 성분의 간섭현상으로 정확한 유기산 함량과 차이가 있어 유분의부식성 해석에 한계가 있다.

본 연구는 석유 Heavy Oil 중의 납센산을 특정 SPE (Solid Phase Extraction) Cartridge를 이용하여 분리 농축한 후, FT-IR (Fourier Transform-Infrared Spectroscopy)와 유기산 표준물질을 이용하여 정량하는 분석법에 대한 것과, 고분해능 질량분석기인 FT-ICR-MS (Fourier Transform-Ion Cyclotron Resonance-Mass Spectrometry)를 이용하여 분취된 유기산의 탄소수 분포와 Ring 수 분포 등의 시료별 유기산의 구조분포 차이 비교하는 기술에 대한 것이다.

납센산 함량은 FT-IR 스펙트럼의 Carboxyl 작용기를 이용하여 정량하며, 유기산의 분자구조 및 탄소수에 상관없이 시료에 함유된 Carboxyl 그룹 당량으로 분석할 수 있으며, 검출한계 5  $\mu\text{mol/g}$  수준으로 검출가능 하였다. 질량분석기를 이용하여 분석한 결과, 석유에 혼합된 유기산의 구조는 다양한 Naphthene Ring 분포를 갖거나 분자내 Carboxyl기가 1~3개 결합된 구조가 관찰되었다.

PF-044 [일반]

## Development of metal-complexed antibacterial window-screen

Young min Jeon<sup>2</sup>, Woonjung Kim<sup>2</sup> and Seungho Lee<sup>1,★</sup>

<sup>1</sup>Chemtree Co. Ltd. Research Center, Daejeon 34054, Korea Republic

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Hannam University, Deajeon, 34054, Korea Republic

★Corresponding author: slee@hnu.kr

Fine dust in the air causes diseases in humans by carrying various environmental pollutants such as viruses. Silver is known to have strong antibacterial property and is used as an antibacterial agent in many equipments and consumer goods. Goal of this study is to develop a method to treat window-screen with silver to add antibacterial property to commercially available window-screens.

First, a diazonium salt was synthesized and was used for surface-treatment of a window-screen. Then silver was loaded on the window-screen by complexation reaction ('Ag-screen'). The silver contents of the window-screens were measured using ICP-MS and SEM-EDS. As expected, the antimicrobial efficiency increased as the silver content increased. It is noted that loading of silica nano particles before loading silver ('Si-Ag-screen') resulted in higher silver content, and thus higher antibacterial efficiency of the window-screen. All bacteria exposed to a Si-Ag-screen were dead after 1 hour, while some of those exposed to a Ag-screen were alive even after 6 hours. The silver content of Si-Ag-screen reached up to about 58 ppm.

Silica nano particles are widely used in a variety of industries, including ceramics, chromatography, catalysis, and chemical mechanical polishing. Two of important factors in the synthesis of silica nano particles are: (a) the shape and broadness of the particle size distribution and (b) the reproducibility of the particle size. Dynamic light scattering (DLS) measurements showed the size distributions of the silica nano particles synthesized in this study were narrow and reproducible. Effects of the particle size and its distribution of silica nano particles on the silver content were examined.



PF-045 [일반]

**Easy to follow guidance to estimate measurement uncertainty using bottom-up approach of analytical method for VOCs determination in disposable feminine care products**

**Gwangwon Lee<sup>1</sup>, Hye-Jin Park<sup>1</sup>, Minyeong Kim<sup>1</sup>, Taewoo An<sup>1</sup>, and Seung-Hoon Baik<sup>1,\*</sup>**

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

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

Estimation of uncertainty has become one of the most important metrological concepts in analytical measurement. As the demand for uncertainty estimation increases in the journals related to analytical sciences, uncertainty is then widely recognized as an essential part to demonstrate quality of a result. Here, we aimed to provide uncertainty estimation processes for established analytical procedure to determine VOCs in disposable feminine care products. Uncertainty was estimated using in house validation data and bottom-up approach following the EURACHEM/CITAC Guide. Estimation procedure includes 1) specification of measurand, 2) identification of uncertainty sources, 3) quantification of uncertainty components, and 4) calculation of combined and expanded uncertainty. From the individual experimental steps consisting whole procedure, six uncertainty sources was identified including standard working mix preparation ( $U_1$ ), calibrators preparation ( $U_2$ ), linear least square fitting ( $U_3$ ), precision ( $U_4$ ), recovery ( $U_5$ ), and test sample weight ( $U_6$ ). Combined uncertainty was calculated separately at three concentration levels in the range. Expanded uncertainty was calculated by multiplying with a coverage factor of 2 within confidence interval 95%. We can conclude that our procedure will be the easy to follow guidance on how uncertainty estimates for analytical method. This research was supported by a grant (16172MFDS243) from Ministry of Food and Drug Safety in 2016.

Keywords :

VOCs: Uncertainty estimation; bottom-up approach; validation; EURACHEM/CITAC Guide

PF-046 [일반]

**Establishment of GC-MS method for phthalate plasticizers and bisphenol A in disposable feminine care products**

**Jiwon Shin<sup>1</sup>, Minyeong Kim<sup>1</sup>, Gwangwon Lee<sup>1</sup>, and Seung-Hoon Baek<sup>1,\*</sup>**

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

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

Despite the continuous efforts to ensure product safety, there has been growing concerns over human exposure to toxic chemicals from the use of disposable feminine care products. With a specific emphasis on the phthalate plasticizers and bisphenol A well-known endocrine disrupting chemicals, here, we aimed to establish reliable analytical method for risk assessment study to resolve the safety issues. Method development was carried out through optimization of individual procedures including extraction solvent, ultrasonic extraction<sup>1</sup>, and GC-MS separation. Developed method exhibited reliable method performance characteristics for all analytes including linearity ( $R^2 > 0.9983$ ), LOQ (0.05-9.60  $\mu\text{g/g}$ ), precision (RSD < 19.5%), and accuracy (recovery 79.7-105.9%), as assessed by ICH validation study. Established method was successfully applied to real samples such as sanitary pads and tampons. DEHP and DBP were the most frequently found in commercial products. These findings demonstrated that developed procedure is simple and reliable to monitor phthalates and bisphenol A in disposable feminine care products. Our method can be an useful tool for quality control testing or quantitative risk assessment of identified chemicals in disposable feminine care products. This research was supported by a grant (18172MFDS240) from Ministry of Food and Drug Safety in 2018.

Keywords :

Phthalate; bisphenol A; disposable feminine care products; GC-MS, validation

PF-047 [일반]

**Profiling of steroid metabolic pathways in human plasma by GC-MS/MS combined with pipette tip SPE for diagnosis of gastric cancer**

**Hyunjung Lee, Wonwoong Lee, Jongki Hong\***

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

\*Corresponding author: jhong@khu.ac.kr

Steroid hormones are generally biosynthesized from cholesterol in the adrenal glands, gonads, and peripheral tissues, and are circulated via bloodstream in the human body. They are associated in depth to cellular signaling, inflammatory immune responses, and reproductive functions. The alterations within their metabolic cascades may incur various physiological diseases including cancer. In particular, it was reported that both sex hormones and glucocorticoids and their relevant enzymes are correlated with the pathological mechanisms of gastric cancer. Quantitative profiling of steroid metabolic pathways in plasma of patients with gastric cancer can provide a vast information to understand development of gastric cancer. Here, we developed a gas chromatography-tandem mass spectrometry-dynamic multiple reaction monitoring (GC-MS/MS-dMRM) method combined with pipette tip (PT) SPE and microwave-assisted derivatization (MAD) to determine 27 endogenous steroids in human plasma. In this study, PT-SPE and MAD conditions were optimized with respect to elution solutions and volumes and irradiation power and time, respectively. The optimized PT-SPE enabled reduced sample requirement and effective cleanup for profiling of steroids in human plasma samples. The MAD could improve laborious and time-consuming derivatization procedure, since dielectric heating using microwave directly increase molecular energy of reactants by penetrating through medium. Furthermore, dMRM method provided more sensitive determination of 27 steroids than conventional MRM detection. The developed method was validated in terms of limit of detection and quantitation, linearity, precision, accuracy, recovery, stability and matrix effects according to an official guideline. The established analytical method was applied to profile steroids hormone in plasma of patients with chronic superficial gastritis, intestinal metaplasia, and gastric cancer. In conclusion, this method provided comprehensive profiling of 27 steroids in human plasma samples and will be helpful to discover potential biomarkers for the development of gastric cancer and to further understand metabolic syndrome.

PF-048 [일반]

## **Amperometric galactose biosensor based on ionic liquid and graphene-titania-Nafion modified composite electrode**

**Sumin Lee, Won-Yong LEE\***

Department of Chemistry, Yonsei University

\*Corresponding author: wylee@yonsei.ac.kr

Galactose is the digestion products of lactose, and its blood concentration affects human health. If the enzymes responsible for the digestion of galactose do not work properly, galactose will accumulate inside a body and cause galactosemia. In addition, people with galactosemia can be suffered from complications such as cataract and hepatomegaly, so measuring the concentration of galactose is very important in clinical chemistry and food industry. Electroanalytical method is used to determine concentration of galactose in this study. Electrochemical detection method is simple, inexpensive and sensitive compared with other quantitative detection methods. Also it has short response time.

The current study aims to develop first generation amperometric galactose biosensor based on galactose oxidase with graphene and ionic liquid sol-gel titania-Nafion composite film on platinized glassy carbon electrode. The side product of galactose oxidase reaction is hydrogen peroxide. It diffuses to the electrode surface through the pores of Nafion. The expanded pore volume of Nafion through the incorporation of titania sol-gel leads to increased diffusion rate of hydrogen peroxide. Platinum nanoparticles were formed on glassy carbon electrode using cyclic voltammetry. The platinized glassy carbon electrode has higher electrocatalytic activity for the oxidation of hydrogen peroxide and larger surface area than that of bare platinum electrode. In addition, the incorporation of graphene in the composite film leads to enhanced electrical conductivity as well as increased potential window. Graphene is used widely in a variety of different studies in order to improve the electrochemical performance of the biosensor. As a result, the current galactose biosensor with graphene-titania-Nafion composite film showed higher sensitivity and wider dynamic range than that of titania-Nafion composite film. To decrease interference effects from glucose, ascorbic acid or urea, ionic liquid is added in titania-Nafion composite at second layer.

PF-049 [일반]

**Simultaneous profiling analysis of endogenous normal and modified nucleosides by liquid chromatography-tandem mass spectrometry**

**Moongi Ji<sup>1</sup>, Chan Seo<sup>1</sup>, Hyeon-Seong Lee<sup>1</sup>, Youngbae Kim<sup>1</sup>, Jeuk Min<sup>1,4</sup>, Subin Choi<sup>1</sup>, Songjin Oh<sup>1</sup>, Hyung-Jin Park<sup>2</sup>, In Duk Jung<sup>3</sup>, Jae-Hyun Park<sup>3</sup> and Man-Jeong Paik<sup>1,\*</sup>**

<sup>1,\*</sup>순천대학교 약학과, <sup>2</sup>아주대학교 의생명공학과, <sup>3</sup>단디바이오 사이언스, <sup>4</sup>레드원 서울

\*Corresponding author: paik815@scnu.ac.kr

Endogenous normal and modified nucleosides have been studied as potential biomarker of various diseases including AIDS, cancer, rheumatoid arthritis and inflammatory diseases. In this study, simultaneous profiling method of seven normal and four modified nucleosides was developed by liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS). In the optimal conditions, this method showed good linearity ( $r \geq 0.998$ ) with limit of detection (LOD) of 0.0020-0.60 pg and limit of quantification (LOQ) of 0.0060-1.81 pg, respectively. The repeatability of intra and inter day as a percentage of relative standard deviation (% RSD) varied from 0.7 to 4.8 (% RSD). And accuracy as a percentage of relative error (% RE) was from -6.2 to 9.01 (% RE). When applied to profiling analysis of nucleosides in mouse urine samples, seven normal and three modified nucleosides were identified and determined. Therefore, the present nucleoside profiling method by LC-MS/MS will be useful for the biochemical monitoring and screening of various diseases.

PF-050 [일반]

**Analyte focusing by micelle collapse for liquid extraction surface analysis coupled with capillary electrophoresis of neutral pesticides on a solid surface**

**Sun kyung Jeong and Doo Soo Chung<sup>\*</sup>**

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

Liquid extraction surface analysis (LESA) has an advantage of directly sampling analytes on a surface, thus avoiding unnecessary dilution caused by homogenization of the bulk sample commonly practiced in solid sample analysis. By combining LESA with capillary electrophoresis (CE), the additional advantage of separating analytes before detection can be accomplished. For neutral molecules, micellar electrokinetic chromatography (MEKC) needs to be used. Since the detection sensitivity of CE in general suffers from the small capillary dimension, analyte focusing by micelle collapse (AFMC) using surfactant was employed for enhanced extraction in LESA and sample preconcentration for MEKC. In addition, by using a commercial CE instrument, the LESA process was performed much faster and more reliably compared to our first demonstration of LESA-CE using a homemade CE setup. Three neutral water-insoluble pesticides sprayed on an apple skin were directly extracted, preconcentrated, and analyzed by the automated LESA-AFMC-MEKC with high sensitivity in ten minutes. The relative standard deviations of the analyte migration times and peak heights were 0.8–2.1% and 1.2–3.0%, respectively when ametryn was used as an internal standard. The limits of detection were 1.8–6.4 ppb, which were 190–580 times lower than the tolerance limits set by the US Environmental Protection Agency for apples.

PF-051 [일반]

**Three-phase single drop microextraction coupled to capillary electrophoresis  
for the analysis of non-steroidal anti-inflammatory drugs**

**Nader Nciri, Wooyong Kwon and Doo Soo Chung\***

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

Three-phase single drop microextraction (SDME) coupled to capillary electrophoresis (CE) was employed for the analysis of three non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) such as ibuprofen, naproxen, and ketoprofen. These acidic analytes were extracted from an acidified donor phase to a basic acceptor drop covered with a thin octanol layer hanging to the capillary inlet tip. At the optimized conditions, high enrichment factors were obtained within 5min of extraction without stirring and at room temperature. As a simple, rapid, sensitive, and efficient technique, SDME-CE can be considered a promising approach for the analysis of NSAIDs in bio-fluid samples or drug-contaminated drinking water supplies.

PF-052 [일반]

## Single Bubble Microextraction for the analysis of chlorophenols

Xamy Noulorsaytour and Doo Soo Chung<sup>★</sup>

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

In conventional HS extraction, an analyte is evaporated from a donor phase to the headspace (HS) then extracted to an acceptor phase. The maximum enrichment factor (EF) obtainable when all the analyte is extracted into the acceptor phase is given by volume ratio between the donor and acceptor phases. Thus an acceptor phase of small volume is preferred and a single acceptor drop attached to the capillary inlet tip has been used in the HS extraction for capillary electrophoresis (CE). However, it is often difficult to keep the acceptor drop stably attached to the capillary tip. To overcome the drop instability, we recently developed HS in-tube microextraction (HS-ITME)-CE using a basic run buffer solution inside the capillary as an acceptor phase for acidic analytes. As a next step, we present a new technique single bubble microextraction (SBME) coupled with CE. By injecting an air plug into a capillary containing an acceptor plug and the run buffer for CE, immersing the capillary in a sample solution, and then ejecting the air plug out, a single bubble is formed at the capillary tip and the acceptor plug is placed at the capillary inlet. The single bubble is acting as a HS of extremely small volume about 100 nL. Then analytes evaporated in the single bubble are extracted into the acceptor by HS-ITME and analyzed by CE. This SBME-CE is a quite convenient HS extraction in-line coupled with CE in an automatic manner, providing very high EF values in a short extraction time without stirring the sample solution. It is also easy to elevate the extraction temperature since the acceptor phase is well secured inside the capillary. As a first demonstration, SBME-CE was employed for high sensitivity analysis of chlorophenols in an aqueous sample.



PF-053 [일반]

## 금속이온이 굴패각 블록의 흡수율과 압축강도에 미치는 영향 분석

김기현<sup>1</sup>, 이승호<sup>1</sup>, 김운중<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>한남대학교 화학과

\*Corresponding author: wjkim@hnu.kr

굴패각은 매년 28만 톤이 배출되고 있지만 해양수산부에서는 2016년부터 육상폐기물 해양배출 전면 금지를 시행함에 따라 처리 한계로 인해 환경 문제와 관광 사업에 점차 악영향을 미치고 있다. 굴패각 재활용분야는 비료, 의약, 산업자재 등에 약간 사용되고 있지만, 미비한 실정이다. 따라서 매년 16만 톤이 지속적으로 누적되어 환경 문제에 대한 부담은 점차 가중되고 있다. 최근 건설 및 토목분야에서 블록 제조에 필요한 천연골재인 모래, 쇄석, 석분 등의 고갈 및 원가 상승으로 인해, 대체 소재에 대한 요구가 증가하고 있다. 그러나, 굴패각은 탄산칼슘이 주성분으로 블록 제조에 재활용하기 위해서는 흡수율과 압축강도를 안정적으로 유지하는 것이 필요하다. 블록의 흡수율과 압축강도를 안정적으로 유지하기 위해서는 블록의 네트워크결합을 안정적으로 유지하는 것이 필요한데, 일반적으로 사용되는 폴리머 경화제는 EVA, Acryl, Latex 계열의 폴리머 경화제를 사용한다. 그러나, 블록 제조 시 재현성이 떨어져 굴패각 재활용에 큰 어려움이 있다.

본 연구에서는 폴리머 경화제에 포함된 금속이온의 영향으로 굴패각 블록내 네트워크결합력에 영향을 미쳐, 흡수율과 압축강도의 재현성에 영향을 미치는 것으로 판단되어, 연구를 진행하였다. 각 계열의 폴리머 경화제에 포함된 금속이온을 분석하기 위해, ICP-MS로 분석을 진행하였다. 대부분  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$  이온 성분들이 다량 검출되었다. 그중  $\text{Na}^+$  이온은 Latex 계열에서 가장 많은 양이 검출되었다.  $\text{Na}^+$  이 증가할수록 흡수율은 감소하였지만, 압축강도가 증가하는 경향을 보였다.  $\text{Ca}^{2+}$  이온은 Acryl 계열에서 가장 많이 양이 검출되었다.  $\text{Ca}^{2+}$  이온이 증가할수록  $\text{Na}^+$  이온과 같이 흡수율은 감소하였지만, 압축강도가 증가하는 경향을 보였다.  $\text{Zn}^{2+}$  이온은 EVA 계열에서 가장 많은 양이 검출이 되었다.  $\text{Zn}^{2+}$  이온이 증가할수록 흡수율은 증가하였지만, 압축강도가 감소하는 경향을 보였다.

본 연구에서는 굴패각 블록내 네트워크 구조를 형성하는 폴리머 경화제에 포함된 금속 이온중  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$  이온이 블록의 흡수율과 압축강도에 큰 영향을 미치고 있음을 확인할 수 있었다.

PF-054 [일반]

## Study on the POPC effect on the lipid flip-flop in DMPC vesicles

Mingi Kim, Jinju Jeong, and Chul Kim

한남대학교

세포막의 주요 구성요소인 인지질로 이루어진 비지클(vesicle)은 모델 생체막으로서 세포관련 실험에 널리 이용되고 있다. 특별히, 약물 전달 현상을 이해하는 데에도 폭넓게 사용되고 있다. 유동성이 있는 비지클은 용액 속에서 다양한 운동을 하고 있다. 그 중에서 인지질 분자의 flip-flop운동은 세포사멸과 밀접한 관련이 있으며 약물 전달에서는 약효의 지속성과 관련 있는 중요한 운동이다. 이번 실험에서는 비지클 내에서 인지질 분자의 소수성 상호작용의 크기가 인지질 분자의 flip-flop 운동에 얼마나 큰 영향을 주는 지 확인하고자 하였다. 탄화수소꼬리 길이가 14개인 DMPC와 탄화수소꼬리 길이가 16개와 18개로 이루어진, 그리고 불포화결합을 1개 포함한 POPC를 다양한 비율로 혼합하여 비지클을 만들었다. 인지질 분자의 flip-flop 운동을 형광을 이용하여 측정하고자, NBD-PE를 비지클 제조 시 첨가하였다. Sodium dithionite solution을 이용하여 NBD-PE의 형광이 소광되는 과정을 측정함으로써 인지질의 flip-flop운동의 속도를 온도별로 측정하였다. 이러한 과정을 통해 POPC의 첨가로 인한 인지질의 flip-flop 운동의 활성화 에너지를 측정할 수 있었다. 비지클의 인지질 중에 POPC의 양이 증가할수록 flip-flop 운동의 활성화 에너지가 감소하는 것을 확인하였다. 인지질의 flip-flop 운동은 비지클의 크기에 의해서도 변화한다. 따라서, 소광제의 투입과 형광의 측정 온도 변화에 의해 비지클의 크기 변화가 없다는 것을 DLS 측정을 통해 확인하였다

PF-055 [일반]

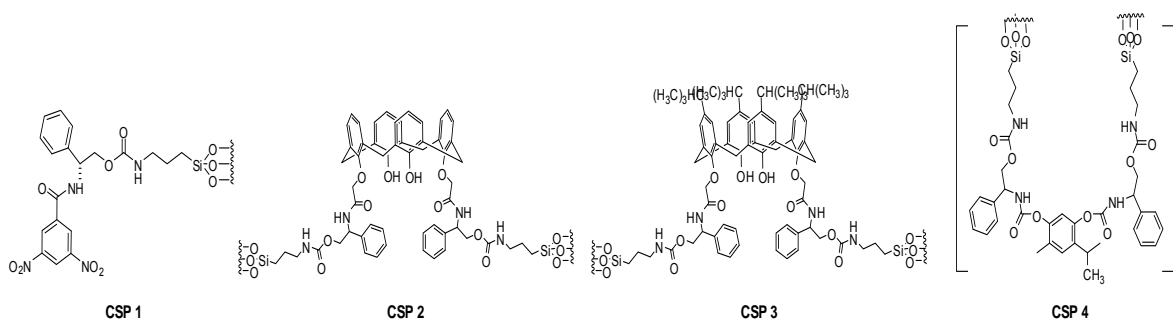
## Synthesis of new Calix[4]arene derived (R)-Phenylglycinol Chiral Stationary Phases

허규성<sup>1</sup>, 김규리<sup>1</sup>, 류재정<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>경북대학교 화학과, <sup>2,\*</sup>경북대학교 화학교육과

\*Corresponding author: jjryoo@knu.ac.kr

*N*-3,5-dinitrobenzoyl-(R)-phenylglycinol silylation product was used as an HPLC chiral stationary phase (CSP 1) for the resolution of various racemic samples<sup>1</sup> and some racemic samples successfully separated. In this study, we synthesized three new CSPs (CSP 2, 3, 4) that were synthesized from phenylglycinol into calix[4]arene instead of *N*-3,5-dinitrobenzoyl chloride. As a result, the new CSP 4 showed similar characteristics to CSP 1, and showed different characteristics in the specific samples.



1. Jae Jeong Ryoo. et al. Chirality 28, 186–191 (2016)

PF-056 [일반]

**Extraction of Isoflavones and Phenolic acids from Tofu  
by Deep Eutectic Solvent(DES)**

**Jin Sol Lee, Wonhoe Koo, Hyun-Woo Cho, Seung-Woon Myung<sup>★</sup>**

Department of Chemistry, Kyonggi University

<sup>★</sup>Corresponding author: swmyung@kyonggi.ac.kr

Deep eutectic solvent (DES) is simply a mixture of two salts, resulting from hydrogen bonds. DES is considered as a safe solvent in green chemistry because it has little toxicity, is cheap and has similar physical properties such as density and ion conductivity to ionic liquids. In this study, DESs were used as the extraction solvent for ultrasound assisted extraction(UAE) to simultaneously determine isoflavones(daidzin, glycitin, genistin, daidzein, glycitein and genistein) and phenolic acids(chlorogenic acid, caffeic acid and ferulic acid) from tofu.

The four types of DES were used, all with ChCl as HBA, and the HBD were synthesized with the following types: citric acid, ethylene glycol, glycerol and urea.

The parameters were optimized by the type of DESs, the extraction time, the ratio of samples to DES, and water content in DES. The extracted analytes were determined using high performance liquid chromatography(HPLC).

PF-057 [일반]

**Determination of Polyphenols in Wine using Deep Eutectic Solvent-based Dispersive Liquid-Liquid Microextraction HPLC-UV**

**Jong Sung Noh, Wonhoe Koo, Hyun-Woo Cho and Seung-Woon Myung\***

Department of Chemistry, Kyonggi University

\*Corresponding author: swmyung@kyonggi.ac.kr

Polyphenols are phytochemicals that exist in various plants and are beneficial to human health. These ingredients prevent aging, protect the skin from ultraviolet rays, improve brain health and prevent dementia. Resveratrol, oxyresveratrol and piceatannol in grapes are typical polyphenols, and grape wine also contains these ingredients. In this study, resveratrol, oxyresveratrol and piceatannol in wine were extracted by deep eutectic solvent based dispersive liquid-liquid microextraction (DES-DLLME) and a method for quantification these polyphenols using High Performance Liquid Chromatography - UV/vis spectroscopy was established. Parameters for sample clean up and concentration were optimized and verified. Experiments were carried out to obtain optimal parameters such as type and volume of basic solvent,  $\text{KHCO}_3$ , 1 mL; volume of acetic, anhydride, 400  $\mu\text{L}$ ; time of derivatization, 5 min; type of dispersive solvent, acetone; ratio of dispersive and extraction solvent, 1:4; and salt 1.0 g when use methyltriocylammonium chloride / decanoic acid (1:2 molar ratio) 100  $\mu\text{L}$  for extraction solvent. Chromatographic separation with HPLC/UV-vis was performed using Agilent HPLC 1100 series, ACME  $\text{C}_{18}$ (4.6 mm id  $\times$  150 mm length, 5  $\mu\text{m}$  particle size) column and gradient elution mode using water and methanol.

PF-058 [일반]

**Differentiation of disaccharide isomers using cleavage patterns  
of disaccharides produced by MALDI-TOF MS analysis**

**이다빈, 원유광, 최혜민, 백민석, 주민희, 양주현, 장혜지, 김정권\***

충남대학교 화학과

\*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

Isomers are ions or molecules of the same chemical structure but with distinct structures. The analysis of isomers using mass spectrometry is very difficult because they have the same molecular weight. Because disaccharides are isomers, it is also difficult to distinguish them by mass spectrometry. Recently, successful differentiation and relative quantitative analysis of disaccharide isomers have been reported by comparing the fragments generated through matrix-assisted laser desorption/ionization-time of flight/time of flight mass spectrometry (MALDI-TOF/TOF MS). In this study, the cleavage patterns of the disaccharide isomers (gentiobiose, isomaltose, meliobiose, lactose, maltose, cellobiose, and sucrose) are distinguished using MALDI MS and graphene oxide matrix. When graphene oxide was used as a matrix in MALDI-TOF MS, disaccharides were detected with fragment peaks produced by cleavage of the glycosidic bond and opening of the reducing ring. There was a specific cleavage pattern of fragment peaks for each isomer. The specific cleavage patterns of the isomers were used to differentiate the isomers. As a result, we observed the specific cleavage pattern of each disaccharide and succeeded in differentiating the disaccharide isomers. Using the relative intensities of the fragment peaks, we were also able to determine the relative ratio in the mixture of two specific disaccharides.

PF-059 [일반]

**Dialyzed nitrogen-doped carbon dots as matrix in matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry**

**양주현, 이다빈, 원유광, 최혜민, 백민석, 장혜지, 주민희, 김정권\***

충남대학교 화학과

\*Corresponding author: jkkim48105@cnu.ac.kr

In matrix-assisted laser desorption/ionization spectrometry (MALDI-MS), a matrix is used to transfer the laser energy to an analyte, resulting in desorption and ionization of the analyte. Aromatic organic acids such as 2,5-dihydroxybenzoic acid,  $\alpha$ -cyano-4-hydroxycinnamic acid and sinapic acid were commonly used as MALDI matrixes. Nitrogen-doped carbon dots (N-CDs) were recently introduced as a MALDI matrix to analyze small molecules.

In this study, we investigated the effect of dialysis of N-CDs on the performance of N-CDs as MALDI matrix. Dialysis allows only small molecules to pass through the holes in the membrane so that large molecules remain. N-CDs were synthesized by microwave-assisted pyrolysis of citric acid and urea. The synthesized brown N-CDs solid was dissolved in water and centrifuged at 15,000 rpm for 15 min. The resulting supernatant brown solution was purified using a 0.2- $\mu$ m membrane filter and dialyzed using a dialysis membrane (MWCO 2000) for 76 h. The dialyzed N-CDs were used as a matrix for the MALDI-MS analysis of sucrose. Slightly less noise was observed using the dialyzed N-CDs, compared to the N-CDs without dialysis. The limit of detection of sucrose using the dialyzed N-CDs was found to be 1nmol, which is the same as the N-CDs without dialysis.

PF-060 [일반]

**Optimization conditions to analysis volatile compounds  
of *Prunus mume* infusion**

**Sehyun Kim, Sunyoung Bae\***

Department of Chemistry, Seoul Women's University

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

*Prunus mume*, which has Korean common name "Mae" belongs to *Rosaceae* family. The Orient has long been used it for food and treatment of skin disorder, nausea, nervousness, stomachache, and hangover. The major volatile compounds of *Prunus mume* flower are quite different depending on their species. In this study, volatile compounds of *Prunus mume* infusion were analyzed by headspace-solid phase microextraction (HS-SPME) combined with gas chromatograph-mass spectrometer (GC-MS). Dried *Prunus mume* flower was infused in 75°C distilled water for 5 min. Saturation time, SPME adsorption time and SPME desorption time were optimized. Volatile organic compounds from *Prunus mume* infusion were quantified using ethyl n-decanoate as an internal standard. Benzaldehyde, benzyl alcohol, eugenol, and benzyl acetate were detected as major characteristic volatile compounds of *Prunus mume* infusion. Based on the major characteristic volatile compounds, statistical data analysis was performed for data validation and pattern recognition.

Keyword: *Prunus mume*, Volatile compounds, Headspace-solid phase microextraction



PF-061 [일반]

## Simultaneous Detection of 5-hydroxymethyl-2-furaldehyde and Zn Ion Using Molecularly Imprinted Polymer

Hyeyoung Jung, Yelin Lee, Sunyoung Bae\*

Department of Chemistry, Seoul Women's University

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

The most common separation method for 5-Hydroxymethyl-2-furaldehyde (5-HMF) and Zinc ion is Liquid-Liquid Extraction (LLE). LLE has been used widely for various samples. However, it has the disadvantages of low extraction efficiency and require a lot of labor and organic solvents. Some of solvents are harmful to health and make environmental problems. To overcome this drawback, Molecularly Imprinted Polymer (MIP) was synthesized using less materials and investigated. MIP was customized to adsorb target molecules. selectively with high recognition performance. In this study, 5-HMF and Zn ion being presented in aqueous phase were detected simultaneously using MIP. Extraction and detection using UV-visible spectrometer conditions were optimized. Sorption capacity and isotherm would be presented. FIP and ZIIP were mixed after polymerization at some various mixing ratios. The adsorption capacity of HIP to 5-HMF and Zn ion was confirmed. After adsorb 5-HMF and Zn ion using HIP, simultaneous detection was possible by UV-visible spectrometer.

**Keyword:** Liquid-liquid extraction, Molecularly imprinted polymer, 5-Hydroxymethyl-2-furaldehyde, Zn, Simultaneous detection

PF-062 [일반]

## A Study on Analysis of Di-2-ethylhexyl Phthalate in Aqueous Phase by Molecularly Imprinted Fiber

Soyoung Ahn, Sunyoung Bae\*

Department of Chemistry, Seoul Woman's University

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

Phthalic acid diesters (PAEs) is used to manufacture a wide range of consumer products such as toys and infant products, cosmetics, and personal care products. It has raised concerns about its safety and its potential effects on human health. To analyze the PAEs present in the aqueous phase, they need to be extracted and concentrated for further analysis. The various existed methods to concentrate PAEs prior to analysis are liquid-liquid extraction (LLE), solid-phase extraction (SPE), and solid-phase microextraction (SPME). In this study, we develop a novel Molecular Imprinted(MI) fiber using molecular imprinting method. Molecular imprinted polymer has specific recognition sites to extract the target compound selectively. Di-2-ethylhexyl phthalate (DEHP), one of the common PAEs found in consumer products, was used as a target template. DEHP was determined with direct immersion method followed by high performance liquid chromatography-ultraviolet-visible (HPLC-UV). The optimization of parameters such as template removal time, adsorbent amounts, and HPLC-UV program method were performed. Optimum conditions were determined and would be presented in this presentation.

Keywords: Molecular imprinted polymer, Di-2-ethylhexyl Phthalate, Molecular Imprinted fiber

PF-063 [일반]

## SYNTHESIS OF METAL-FREE ORGANIC DYES FEATURING AZOBENZENE SPACER FOR DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS

Anggia Ismi Simpang<sup>1</sup>, Seung Wook Ham<sup>1</sup>, Jongin Hong<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Chung-Ang University

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

Azobenzene and its derivatives containing an azo moiety (-N=N-) have the ability to alter their geometries via photochemical or thermal *trans-cis* isomerization. Recently, we computationally investigated the *trans-cis* isomerization of the azobenzene-based dyes and their optical and electronic properties [1]. Accordingly, we designed and synthesized metal-free organic dyes featuring azobenzene spacer for dye-sensitized solar cells (DSSCs). The azobenzene was used to connect a donor moiety (dimethylamine and diphenylamine) with an acceptor one (cyanoacrylic acid), and the two dyes (DMAC and DPAC) were successfully synthesized. We are currently exploring their optical and electrochemical properties and further application to the DSSCs.

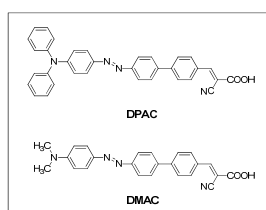
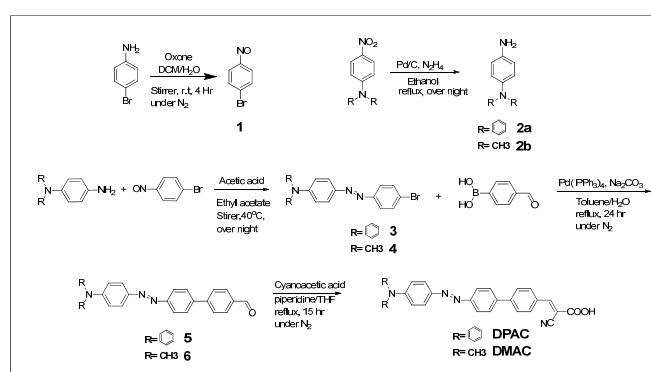


Figure 1. DPAC and DMAC dyes



Scheme 1. Synthetic route of the dyes

### Reference

- Rashid, M.A.M., et al., Computational investigation of tuning the electron-donating ability in metal-free organic dyes featuring an azobenzene spacer for dye-sensitized solar cells. *Nanomaterials* 2019. 9: p. 9(1-14).

PF-064 [대학원생 구두 발표]

## Electric properties prediction of polymer composites

Dong Ryeol Shin<sup>1</sup>, Woo Jin Choi<sup>2</sup>, Nam jung Cho<sup>2</sup>, Sung Kwang Lee<sup>1,\*</sup>

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

<sup>2,\*</sup>Korea Research Institute of Chemical Technology

\*Corresponding author: leesk@hnu.kr

Polymer composite are composite materials made by mixing polymer materials, filler materials, and additives. It is time and cost-consuming to optimize the composition ratio for preparing polymer composites of suitable electric properties. In this study, we have developed predictive models that predict the volume resistivity, one of the electric properties of materials, using the composition ratio of polymer composites. Prediction model of the volume resistivity for the polymer composite material were developed using various machine learning methods. The data collected for model development were obtained from chemical material solution center in KRICT, which collected the physical properties of polymer composite from literature and patents. The total data were divided into 211 as training set and 141 as external set. Multiple linear regression, support vector machine, and deep neural network were used as machine learning method. As a single model, deep neural network method has the best predictability, and as the consensus model, the support vector machine method using feature engineering technique has excellent predictive power. We also verified the robustness and predictability of model using bootstrap validation and y-scrambling method. The developed model will be alternative to reduce time and cost of developing polymer composites with desired electric properties.

PF-065 [대학원생 구두 발표]

## Density prediction of high energy materials using deep learning method (DNNs)

Hyung Sik Jo, Soo Gyeong Cho<sup>1</sup>, Sung Kwang Lee<sup>\*</sup>

Department of Chemistry, Hannam University, Daejeon, Korea, leesk@hnu.kr

<sup>1</sup>Agency for Defense Development, Daejeon, Korea

Explosion is chemically related to a high rate of reaction in a particular system, and physically diffuses into a uncontrolled state by the proliferation of energy or matter under certain circumstances. Synthesis and experimentation of high energy materials(HEMs) is time and cost consuming in new material development. In generally, the higher density of HEMs, the higher detonation velocity and pressure of HEMs. In this study, we tried to develop Quantitative Structure-Property Relationship(QSPR) models to predict the density, which is an important factor in HEMs performance from chemical structure.

The crystal density data used in the model were collected from the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) and the final 8624 data were obtained after removing replicates, inorganics and abnormal structure. All chemicals were divided into a training set(50%) and a test set(50%), and these molecular descriptors were calculated with the PreADMET Program. The multiple linear regression (MLR), support vector machine (SVM), and deep neural network (DNN) methods were used as QSPR models and we tried to optimize various hyper-parameters in SVM and DNN. Y-scrambling method and assignment of applicability domain(AD) were used to confirm the reliability of model prediction. All three models showed excellent predictive performance, and these models can predict the density of new HEMs.

PF-066 [대학원생 구두 발표]

## 가스상 폼알데하이드에 대한 UiO-66-NH<sub>2</sub>의 흡착 특성과 흡착능 평가

The potential of UiO-66-NH<sub>2</sub> as novel sorbent for gaseous formaldehyde

임대환<sup>1</sup>, 김기현<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>\*한양대학교 건설환경공학과

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

최근 실내공기질에 대한 관심이 높아지고 있는 가운데 이를 개선하고자 하는 많은 노력이 이루어지고 있다 (1). 특히 실내공기질 중 폼알데하이드는 일반주택 및 공공건물의 건축자재, 실내가구의 칠 등에서 주로 발생이 이루어지는 것으로 알려져 있다 (2). 이는 알러지 증상을 가져오는 자극제이며, 발암성 물질로 알려진 대표적인 물질로 제거를 위한 중요성이 더욱 크다고 여겨진다 (3). 최근 다양한 흡착제를 활용한 폼알데하이드의 제거 및 저감을 시도하고 있으나 보다 효과적인 흡착제 개발이 필요한 실정이다.

본 연구에서는 폼알데하이드 1 ppm 농도 수준에서 4가지 유형 (Metal Organic Frameworks (MOFs), 3개/Carbon nitride, 3개/modified activated carbon, 4개/commercial activated carbon, 2개)의 다양한 소재에 대한 흡착제 성능을 HPLC-UV (Thermo Scientific, USA)시스템을 이용하여 평가하였다. 분석결과 MOFs 기반 물질 중 UiO-66-NH<sub>2</sub>의 흡착 capacity는 5.26 mg/g, Breakthrough volume (BTV)은 373 L/g으로 가장 우수한 효율을 보이는 것으로 나타났다. 본 연구를 통해 폼알데하이드 성분에 대한 흡착 제거를 위한 기초자료로서 활용하고자 한다.

- (1) Medinsky, M.A., Bond, J.A.J.T., 2001. Sites and mechanisms for uptake of gases and vapors in the respiratory tract. 160, 165-172.
- (2) Liang, W., Yang, S., Yang, X., 2015. Long-Term Formaldehyde Emissions from Medium-Density Fiberboard in a Full-Scale Experimental Room: Emission Characteristics and the Effects of Temperature and Humidity. Environmental Science & Technology 49, 10349-10356.
- (3) Golden, R.J.C.r.i.t., 2011. Identifying an indoor air exposure limit for formaldehyde considering both irritation and cancer hazards. 41, 672-721.

PF-067 [대학원생 구두 발표]

**대용량 시료 주입 방식과 gas chromatography/barrier discharge ionization detector  
기반의 가스상 폼알데하이드 분석기술 개발**

Development of analytical techniques for gaseous formaldehyde based on the large-volume injection interfaced with gas chromatography/barrier discharge ionization detector

**유미지, 김기현\***

한양대학교 건설환경공학과

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

폼알데하이드 (FA)는 인체에 유해한 대기오염 물질 중 하나로, 주로 실내의 건축자재에서 배출이 이루어지는 것으로 알려져 있다 (Yoo et al., 2019). 특히 실내 생활이 많은 현대인들에게 노출빈도가 높아 집에 따라 대기 중 FA의 양을 정확하게 측정하고 제어하는 것이 필수적이다 (Wu et al., 2017). FA성분의 경우 분자량이 낮고 반응성이 높아 DNPH 유도체화와 같은 전처리 과정을 거친 후에 HPLC/UV로 분석하는 방식이 대표적이다 (Yoo et al., 2019). 그러나 DNPH/HPLC/UV을 활용한 분석법은 전처리 과정이 다소 복잡하고 소요 시간이 길어 FA 농도의 정확하고 신속한 파악에 한계를 지닌다 (Yoo et al., 2019). 본 연구에서는 이에 대한 대안으로 FA의 근실시간 모니터링을 위한 large-volume injection (LVI) 주입 방식과 gas chromatography/barrier discharge ionization detector (GC/BID) 시스템을 연계하여 FA 분석법을 정립하고자 하였다. LVI/GC/BID는 일반적인 시료 주입 부피의 확장과 동시에 가스 시료의 자동적 주입이 가능한 LVI 주입 방식과 GC 분석 시스템에 헬륨 플라즈마를 기반으로 한 BID를 접목한 분석시스템이다. 따라서 해당 시스템을 활용하여 FA 시료의 자동 샘플링 및 기기 분석이 가능하도록 하였다. 분석법의 검증에 위해 선형성, 재현성 및 감도 등에 관한 정도 보증 테스트를 진행하였다. 분석결과, LVI/GC/BID를 활용한 FA 분석법은 0.29-5300 ng의 넓은 농도 범위에서 양호한 선형성을 지닌 것으로 나타났다. 방법 검출 한계 (method detection limit, MDL)는 0.13 ng (0.21 ppm, 0.5 mL의 시료 주입)로 나타났으며, 표준 편차 (relative standard deviation, RSD)값은 1.19% 이내를 유지하였다.

Wu, L., Qin, Z., Zhang, L., Meng, T., Yu, F., Ma, J., 2017. CNT-enhanced amino-functionalized graphene aerogel adsorbent for highly efficient removal of formaldehyde. *New Journal of Chemistry* 41, 2527-2533.

Yoo, M.-J., Jo, S.-H., Kim, K.-H., 2019. An advanced technique for rapid and accurate monitoring of gaseous formaldehyde using large-volume injection interfaced with gas chromatography/barrier discharge ionization detector (LVI/GC/BID). *Microchemical Journal* 147, 806-812.

PF-068 [대학원생 구두 발표]

## 개질 흡착제를 이용한 대기 중 벤젠성분의 고유속 흡착 특성 연구

Test of adsorption performance of gaseous benzene under high flow conditions using modified adsorbent materials

김원기<sup>1</sup>, 김기현<sup>2,\*</sup>

<sup>1,2,\*</sup>한양대학교 건설환경공학과

\*Corresponding author: kkim61@hanyang.ac.kr

다양한 산업에서 생산 및 방출이 이루어지는 휘발성 유기화합물 (VOCs)은 인체 건강에 악영향을 미치는 환경오염 물질 중 하나로 알려져 있다 (1). 특히 벤젠의 경우 지용성물질로서 경구흡입으로 인체에 노출이 이루어지며, 다중 발암 물질과 림프종/백혈병의 원인 물질이다 (2). 이러한 유해물질을 제거하기 위해 공정의 유연성, 낮은 에너지 소비 및 낮은 운영비용 등의 이점을 가지고 있는 흡착방법이 가장 효율적인 기술이라 할 수 있다 (3). 최근 MOF (Metal organic framework) 합성 혹은 활성탄 등을 개질하여 흡착제의 성능을 향상시키는 연구가 활발히 진행 중 이다 (4). 본 연구에서는 벤젠 흡착 효율이 좋은 MOF-199과 활성탄에 여러 물질들을 합성을 시도 하고, 흡착 성능 매트릭스(흡착용량, 제거효율, 분배계수)을 평가를 수행하였다. 이를 위해, MOF-199기반의 물질11개와 AC 기반의 5개 흡착제를 선정하여 흡착능을 평가하였다. 각각의 흡착제는 212  $\mu\text{m}$  이하의 분말상의 형태로 5 mg씩 석영튜브에 넣어 10 ppm 수준으로 조제한 벤젠가스를 흘려주는 방식으로 실험을 진행하였다. 이때, LVI (Large volume injection) system을 이용하여 330 mL/min 유속의 가스상 시료가 흡착튜브에 계속 주입하는 방식으로, 통과한 시료는 GC-FID을 통해 분석을 진행하였다. 분석결과 Capacity는 AC-T2 (합성 활성탄, 104 mg/g), AC-0 (상용 활성탄, 84 mg/g), AC-T1 (합성 활성탄, 79 mg/g)의 순으로 활성탄 기반의 흡착 효율이 높은 것으로 나타났다. 반면 MOF-199 기반 소재의 경우 AC기반의 흡착제들에 비해 효율이 떨어지는 것으로 나타났다. 추가적으로 이들 소재를 활용하여 고유속 조건에서 흡착특성을 조사하였다.

(1) Paciência, Inês, et al. 2016. A systematic review of evidence and implications of spatial and seasonal variations of volatile organic compounds (VOC) in indoor human environments. Environmental Health, P.B., 19, 47-64.

(2) Abadi, M.B.H., et al. 2018. Air pollution control: The evaluation of TerphApm@ MWCNTs as a novel heterogeneous sorbent for benzene removal from air by solid phase gas extraction. Arabian J. Chem.

(3) Yun, J.H. et al. 1999. Equilibria and dynamics for mixed vapors of BTX in an activated carbon bed. AIChE journal, 45, 751-760.

(4) iwari, D., et al. 2018. Development of chemically activated N-enriched carbon adsorbents from urea-formaldehyde resin for CO<sub>2</sub> adsorption: Kinetics, isotherm, and thermodynamics. J. Environ. Manage., 218, 579-592.



PF-069 [대학원생 구두 발표]

**Perfluorocarbon (PFC) medium as a means to improve accuracy for NIR spectroscopic quantitative analysis of powder samples**

**Yoonjeong Lee<sup>1</sup>, Hoeil Chung<sup>1,\*</sup>**

<sup>1,\*</sup>Department of Chemistry, Hanyang university

\*Corresponding author: hoeil@hanyang.ac.kr

In near-infrared (NIR) spectroscopy, diffuse reflectance measurement is widely utilized for analysis solid samples because it is non-destructive and simple. In diffuse reflectance measurement, NIR radiation propagates through a series of particle-air interfaces and a part of sample-interacted NIR photons are gathered. When a photon crosses the interface, several events such as reflection, refraction, and scattering simultaneously occur and make overall photon propagation broader and more variable. Therefore, acquisition of reproducible diffuse reflectance spectra of solid sample is always demanding.

One of potential approaches to improve reproducibility of diffuse reflectance measurement is the filling void air volume in powder packing with a liquid. By this way, difference in refractive indices between sample particle and unoccupied space becomes smaller. Here, PFC (perfluorohydrocarbon)-based diffuse reflectance measurement scheme has been uniquely demonstrated for reproducibility improvement. A PFC does not absorb NIR radiation and are strongly hydrophobic, so they would suspend particles without dissolving them.

Initially, 3 different PFCs were selected, and their physical properties and NIR absorption features were examined for selection of an optimal PFC. Then, lactose powder was added into the selected PFC and diffuse reflectance spectra were repeatedly collected for the lactose-suspended PFC samples as well as original lactose powder were collected. NIR spectral features such as band shape, band intensity, and baseline in both cases were examined and the subsequent reproducibilities of measurements were compared. Next, NIR spectra of binary mixtures composed of ambroxol and lactose with varying ambroxol concentration were again measured with the same experimental scheme. In all cases, Monte Carlo simulations were employed to tract the photon migration in the samples and to explain the experimental results.

PF-070 [대학원생 구두 발표]

## Evaluation of Autoencoder for NIR Spectroscopic Identification of Geographical Origins of Agricultural Products

Woosuk Sohng<sup>1</sup>, Seeun Cho<sup>2</sup>, Hyeseon Lee<sup>2</sup>, Hoeil Chung<sup>1,\*</sup>

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

<sup>2,\*</sup>Department of Industrial & Management Engineering, POSTECH

\*Corresponding author: hoeil@hanyang.ac.kr

Autoencoder (AE) has been evaluated as a potential feature extraction method for NIR spectroscopic identification of geographical origins of agricultural samples. AE is one of artificial neural network used to learn efficient data coding in an unsupervised learning and a feedforward neural network that consists of two parts, encoder and decoder. Encoder is the part of the network that compresses the input into latent space representation and decoder reconstructs the input from the latent space representation. This network can be trained by minimizing the reconstruction error between input and output. In this study, compressed input called latent vector was used as new feature for improving NIR spectroscopic Identification.

NIR spectra of imported and domestic agricultural samples (8 different agricultural samples: adzuki, angelica root, bellflower root, bracken, carrot, green kernel black bean, kidney bean and perilla seed) were used. For evaluation, AE as well as conventional feature extraction methods such as principal component analysis (PCA) and locally-linear embedding (LLE) were employed for the discrimination of geographical origins of 8 different agricultural products using support vector machine (SVM). Finally, the resulting accuracies were compared the characteristics of each method in the discrimination were discussed.

PF-071 [대학원생 구두 발표]

**Improving identification accuracy of geographical origins of sapphires using Raman and Laser induced breakdown spectroscopy**

**Changhwan Eum, Hoeil Chung\***

Hanyang University Department of Chemistry

\*Corresponding author: hoeil@hanyang.ac.kr

Raman and laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) have been utilized to discriminate the geographical origins of sapphires (mined in 5 different countries) in conjunction with chemometric methods. Improvement of accuracy would expect when both spectroscopic data providing complementary information (molecular structural and elemental information) were combined. Initially Raman and LIBS data were separately employed for the discrimination by using support vector machine (SVM) as a classifier. In the case of using Raman spectra, a whole spectral range was used; while, only selected atomic peaks in LIBS spectra were fed for SVM. The separate use of Raman and LIBS data resulted in the discrimination accuracy of 86.5 % and 81.8 % respectively. Next, when both spectroscopic data were combined for SVM, the accuracy improved to 89.9 %. For further accuracy improvement, hierarchical SVM (H-SVM) was adopted to deal with multi-class discrimination. The use of H-SVM improved the discrimination accuracy up to 90.2 %. The cooperative combination of information on organic and elemental composition of the samples was the root of improvement.

PF-072 [대학원생 구두 발표]

**Short chain fatty acids analysis with headspace in-tube microextraction  
capillary electrophoresis mass spectrometry**

**권준엽<sup>1</sup>, 정선경<sup>1</sup>, 정두수<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>서울대학교 자연과학대학 화학부

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

Short chain fatty acids are target molecules for the analyses of microorganisms and metabolites. These volatile molecules are weak acids so that the molecules evaporated in the air can be captured by a strong basic solution. Headspace extractions coupled with gas or liquid chromatography have been commonly used for these short chain fatty acids. If headspace in-tube microextraction capillary electrophoresis mass spectrometry (HS-ITME-CE/MS) is applied, simple and fast analysis is possible. This simplifies sample preparation steps, which leads to minimization of sample losses and highly efficient results with low detection limits. HS-ITME-CE/MS of short chain fatty acids which have 3~5 carbons is presented.

PF-073 [대학원생 구두 발표]

## **Pf 543 and its Analogs Differently Accumulates Ceramide Groups in HaCaT Cell**

**Maftuna Shamshiddinova<sup>1</sup>, Dong-Jae Baek<sup>2</sup>, Khilola Nazrullaeva<sup>1</sup>,  
Kyeung-Ran Min<sup>1</sup> and Yong-Moon Lee<sup>1,\*</sup>**

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

<sup>2</sup>College of Pharmacy, Mokpo National University

\*Corresponding author: ymleefn@cbnu.ac.kr

Sphingosine kinases (SphKs) transfer a phosphate group from ATP to sphingosine on the bioactive sphingosine 1-phosphate (S1P) formation. S1P has been linked with a variety of diseases such as incurable solid tumors, Alzheimer's disease, sickle cell disease and fibrosis. To study the role of SphK1 on ceramides metabolic fate, synthetic PF543 derivatives of SphK1 inhibitor were evaluated based on their effects on the accumulation of ceramides in HaCaT cells. The ceramides formation profile by PF543 and its analogs (DPF543, RB0035, RB012, RB040, A013, RB017, A156, H5-11, H5-10) were measured by LC-MS/MS. Cells ( $3 \times 10^5$  cells) were placed in 6-well plate in Dulbecco's modified Eagle's medium supplemented with 10% fetal bovine serum in a humidified incubator at 37°C with 5% CO<sub>2</sub>. Cells were incubated for 24 hours with or without 1 μM of myriocin which inhibits serine palmitoyltransferase. After 24 hours, 10 μM of a specific SphK1 inhibitors were additionally spiked into cells media and then incubated for more 24 hours. The ceramides in 150 μg protein from cells lysate was extracted by chloroform: methanol (2:1) mixture. The chloroform fraction was dried under nitrogen blow and reconstituted in 100 μl MeOH. The samples containing ceramides were eluted from CAPCELL PAK MG III C18 column with gradient elution with mobile phase A (10 mM ammonium acetate in water with 0.1% formic acid) and mobile phase B (10 mM ammonium acetate in acetonitrile: propanol-2 (4:3; v/v) with 0.1% formic acid). The ceramides in MRM positive ionization mode were monitored the following transitions: m/z 324.2>264.3 for Cer2, 380.2>264.3 for Cer6, 464.4>264.3 for Cer12, 538.2>264.3 for Cer16, 552.2>264.3 for Cer17, 548.2>264.3 for Cer18, 546.2>264.2 for Cer18:1, 594.2>264.2 for Cer20, 650.4>264.3 for Cer24 and 648.4>264.3 for Cer24:1. The ceramides with short fatty acid chain such as Cer2, Cer6 and Cer12 were not founded in HaCaT cells. The long chain fatty acid ceramides, Cer16, Cer18, Cer20 and Cer24:1 were significantly accumulated by different PF543 derivatives. Specifically, the amount of Cer24 was less changes by PF543 derivatives. The content of ceramides (Cer16, Cer18, Cer18:1, Cer20, Cer24:1) was differently changed depending on specific characteristics of PF543 derivatives.

PF-074 [대학원생 구두 발표]

## Development of an HPLC Method using Less Hazardous Mobile Phase for the Determination of $\beta$ -Lactams

Thuy-Vy Pham<sup>1</sup>, Xuan-Lan Mai<sup>1</sup>, Jae-Yong Lee<sup>1</sup>, Gunhee Lee<sup>1</sup>, Dae-Jung Kim<sup>1</sup>, Sang-Beom Han<sup>2</sup>, and Kyeong Ho Kim<sup>1,\*</sup>

<sup>1,\*</sup>College of Pharmacy, Kangwon National University,

<sup>2</sup>College of Pharmacy, Chungang University.

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

A simple, cost-effective and greener high-performance liquid chromatography (HPLC) method was investigated to determine fourteen  $\beta$ -lactams. In this study, some strategies were implemented to achieve a greening HPLC method such as the use of aqueous mobile phase, alternative organic solvent or ionic liquids. Firstly, the preliminary screening step was conducted using one-factor-at-a-time approach to identify the significant factors affecting the chromatographic performance. Then the experimental design (central composite design) was applied to examine in depth the effects of the most important factors on the selected chromatographic responses as well as to find out the optimal HPLC condition. Finally, the chromatographic analysis was achieved on a C8 column at 35°C, mobile phase including ethanol and 25 mmol/L ammonium acetate pH5.0 (6:94,v/v) with the flow rate of 1.5 mL/min, and the detector wavelength at 210 nm. This method was not only found to be less hazardous (the use of greener organic solvent, the reduction in organic solvent consumption) but also turned out to be superior in terms of retention time and peak shape in comparison with other official methods published in the pharmacopoeias. The optimized assay condition was validated according to the International Conference on Harmonization guidelines. The results showed good linearity ( $R^2 > 0.9991$ ) over the assayed concentration range, and demonstrated good precision as well as accuracy for all surveyed compounds. The proposed method was also effectively applied for the quantitation of ampicillin, sulbactam, cefroxadine, and amoxicillin in various formulations. These results indicated that the developed HPLC method could be employed for routine analysis of some  $\beta$ -lactams in pure drug and commercial formulations.

PF-075 [대학원생 구두 발표]

## 빛 노출 조건에 따른 nicotine의 분해손실 가능성 확인 연구

안영지<sup>1,2</sup>, 서동호<sup>3</sup>, 최성진<sup>4</sup>, 이규홍<sup>2</sup>, 김용현<sup>4,5\*</sup>

<sup>1</sup>건양대학교 독성평가학과, <sup>2</sup>안전성평가연구소 호흡기질환제품 유효성평가연구단,

<sup>3</sup>부산대학교 화학과, <sup>4</sup>안전성평가연구소 흡입독성연구그룹,

<sup>5</sup>과학기술연합대학원대학교 인체 및 환경 독성학과

★Corresponding author: yonghyun.kim@kitox.re.kr

Nicotine은 담배연기 내 주성분으로 알려진 물질이며, 인체 유입 시 중추신경 마비 및 혈압 상승을 촉진시키는 등 건강상 악영향을 준다고 알려져 있다. 담배연기 내 nicotine을 정량평가하기 위해 일반적으로 Cambridge filter를 통해 채취 및 추출한 후 기기분석을 수행한다. Nicotine의 정확한 정량평가를 하기 위해서는 Cambridge filter에 의한 nicotine의 손실평가와 빛에 의해 쉽게 산화 된다고 알려져 있는 nicotine의 빛에 의한 손실평가가 동시에 이루어져야 한다. 본 연구에서는 담배연기 채취 방식으로 잘 알려진 Cambridge filter 방법을 이용하여 빛에 의한 nicotine 손실정도를 분석회수율을 통해 확인하였다. Nicotine을 Cambridge filter에 채취 후 암실, 가시광선, 자외선에 일정 시간 (6, 12, 24, 46 hours) 노출 시킨 후 기기분석을 통해 상대적인 분석 회수율을 평가하였다. 암실조건에서는 nicotine을 Cambridge filter에 주사한 후 6시간 동안 시료의 손실이 거의 발생하지 않았지만 (relative recovery = 100±1.16%), 6시간 이후 nicotine의 손실이 발생하여 경과 시간 48시간에는 상대회수율 83.4±4.72%를 기록하였다. 가시광선 노출 조건에서는 암실 조건과 유사한 nicotine 상대회수율을 기록하였다. 자외선 조건에서 nicotine의 상대회수율은 6시간 노출에서 90.5±4.98%, 48시간 노출에서 70.5±11.7%로 암실과 가시광선 조건에 비해 추가적인 nicotine 손실이 발생한 것을 확인하였다. 본 연구에서는 담배연기 채취조건에서 발생 가능한 nicotine의 손실을 확인하였다. 담배연기에 대한 정확한 정량 및 독성평가를 수행하기 위해서는, 본 연구와 같이 담배연기 내 화학물질들의 상대회수율 평가를 우선하여 수행하고 이를 정량 및 독성결과에 반영해야 한다.

본 연구는 안전성평가연구소 주요사업 [KK-1904] 지원으로 수행되었음.

PF-076 [대학원생 구두 발표]

## Ultrasensitive fluorescence-free detection of norovirus by 3D super-localization light sheet microscopy with gradient fitting algorithm

Yucheng Sun<sup>1</sup>, Seong Ho Kang<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Graduate School, Kyung Hee University,

<sup>2,\*</sup>Department of Applied Chemistry and Institute of Natural Sciences, Kyung Hee University

An ultrasensitive fluorescence-free modality was developed for the detection of norovirus by three-dimensional light sheet microscopy (3D-LSM) coupled with dual-view (DV) based on gradient fitting. Silver nanoparticle (AgNP) and gold nanospot (AuNS) on a nanoarray working as fluorescence-free probe were immunoreacted with norovirus and simultaneously imaged by using a DV facility. A cylindrical lens was located in light path way before the charge-coupled device (CCD) leading to elliptically distorted point spread function (PSF) on different axial location. After axial slicing of the sandwich-structured immunoarray with 10 nm interval for 1000 planes, differences in PSFs of AgNP and AuNS on various plane were clarified by gradient fitting-based super-localization. The obtained 3D super-resolution images implied the distance on axial direction between AgNP and AuNS was  $23 \pm 3$  nm and limit of detection (LOD) for norovirus was 7.8 zM which was 106 to 2,300,000 times lower than previous methods with a wide linear dynamic range from 7.8 zM to 240 aM. Subsequently, norovirus extracted from lettuce leaves was detected with 99.87% recovery which demonstrated the presented super-localization 3D-LSM with DV based on gradient fitting modality was applicable for ultrasensitive detection of norovirus in single-molecule level.



PF-077 [대학원생 구두 발표]

## Comparison of sample pretreatment methods for rapid screening of 123 multi-class illegal adulterants in lipid type supplements

**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 screening 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 (ECICs) and neutral loss scan (NLS). Both ECICs and NLS could readily cover a wide scope of adulterants and were proved more efficient screening method, compared to multiple ion reaction monitoring (MRM) mode. A reduced mass tolerance window of  $\pm 5$  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; supplement diets; rapid screening; extracted common ion chromatogram; neutral loss scan; UHPLC-Q/TOF-MS/MS

PF-078 [대학원생 구두 발표]

**Simultaneous profiling of bile acids, histidine, and histamine in gastric juice by LC-MS/MS combined with serial derivatization: diagnosis of gastric cancer**

**Jinhee Um, Wonwoong Lee, Jongki Hong\***

College of Pharmacy, Kyung Hee University

\*Corresponding author: jhong@khu.ac.kr

Bile acids (BAs) are synthesized in human liver and can mediate various metabolism process and homeostasis in the body. Their levels in gastrointestinal tract could be closely related to various gastrointestinal diseases. In particular, imbalances of BAs can induce overexpression of histidine decarboxylase involved in tumorigenesis. Therefore, comprehensive profiling of histamine (HIST), histidine (His), and BAs in biological samples provides a wide knowledge to understand pathological mechanisms of gastrointestinal diseases. However, development of analytical platform to profile HIST, His, and BAs in biological samples should overcome several challenges such as highly different polarities between acidic and basic targets, low physiological concentration, and high matrix interferences of biological samples. In this study, a UHPLC-MS/MS method combined with serial derivatization to simultaneously determine HIST, His, and 5 BAs (cholic acid, deoxycholic acid, chenodeoxycholic acid, ursodeoxycholic acid, and lithocholic acid) in human gastric juice was developed. In serial derivatization, benzoyl chloride (BzCl) and N,N-dimethylethylenediamine (DMED) were used to selectively derivatize amine and carboxyl groups of analytes, respectively. After serial derivatization, all target derivatives were determined using reversed phase C18 LC column and positive multiple reaction monitoring (MRM) mode, with reasonable chromatographic separation and sensitive MS detection. To accurately quantify target metabolites, 7 isotopically labeled internal standards were used. The MS/MS spectra of DMED and Bz derivatives exhibited specific fragments via loss of neutral molecule (dimethylamine; 45 amu) and inductive cleavage (benzoyl; m/z 105) from protonated molecules, enabling selection of appropriate MRM transition ions for selective and sensitive detection. The developed method was validated with respect to limit of detection (LOD) and quantification (LOQ), linearity, precision, and accuracy. The LODs and LOQs of target metabolites were ranged from 0.76–2.05 ng/mL and 2.56–6.83 ng/mL, respectively. All squared correlation coefficients ( $R^2$ ) were above 0.99. Overall precision and accuracy were investigated within acceptable values. The established method was successfully applied to gastric juice of patients with chronic superficial gastritis, intestinal metaplasia, and gastric cancer. Statistical significances between groups were estimated based on metabolic pathways of BA and histamine. This method provides reliable quantification of HIST, His, and BAs in human gastric juice and would be helpful to find biomarkers for gastric cancer.

PF-079 [대학원생 구두 발표]

**Metabolomic study on bleomycin and polyhexamethylene guanidine phosphate-induced pulmonary fibrosis mice models**

**Chan Seo<sup>1</sup>, Sung-Hwan Kim<sup>2</sup>, Hyeon-Seong Lee<sup>1</sup>, Moongi Ji<sup>1</sup>,  
Jeuk Min<sup>1</sup>, In-Hyeon Kim<sup>2</sup>, Kyuhong Lee<sup>2</sup>, Man-Jeong Paik<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Suncheon National University

<sup>2</sup>National Center for Efficacy Evaluation of Respiratory Disease Product,  
Korea Institute of Toxicology

\*Corresponding author: paik815@suncheon.ac.kr

Polyhexamethylene guanidine phosphate (PHMG) has been used as a disinfectant and biocide, and was known to be harmless and non-toxic. However, in 2011, PHMG used as a humidifier disinfectant was reported to be associated with lung diseases, such as, fibrosis in the toxicant studies on pulmonary fibrosis by PHMG. However, no metabolomics study for toxicity of PHMG has been performed in pulmonary fibrosis model. Therefore, in the present study, alterations of metabolism for toxicity were monitored in bleomycin (BLM)- and PHMG-induced mouse models of pulmonary fibrosis by gas chromatography (GC)-mass spectrometry (MS), liquid chromatography (LC)-tandem MS, and GC-tandem MS. The levels of 59 metabolites, that is, 30 amino acids, 13 organic acids, 10 fatty acids, 5 polyamines, and oxidized glutathione were determined in the pulmonary tissues of mice with BLM- and PHMG-induced pulmonary fibrosis and in normal controls. Principal component analysis (PCA) and partial least squares discriminant analysis (PLS-DA) were used to compare level of these 59 metabolites in pulmonary tissues. Levels of metabolites were significantly different in the BLM and PHMG groups as compared with the control group. In particular, the BLM- and PHMG- induced pulmonary fibrosis models showed elevated collagen synthesis and oxidative stress and metabolic disturbance of TCA related organic acids including fumaric acid by NADPH oxidase (NOX). In addition, polyamine metabolism was more severely altered in the PHMG group than in the BLM group. Thus, this result suggests that toxicity by PHMG can induce pulmonary fibrosis by arginine metabolism and NOX signaling.

PF-080 [대학원생 구두 발표]

**Mixtures of menthol-based hydrophobic deep eutectic solvents: application as green solvents to extract bioactive compounds from *Ginkgo biloba* leaves**

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

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

\*Corresponding author: jlee0610@skku.edu

In the present study, three different menthol based deep eutectic solvents (Men-DESs) were synthesized as a new class of green extraction solvents and applied as extraction media fo *Ginkgo biloba* leaves (GBL). Three Men-DESs composed of menthol with levulinic acid (DES 1), 1,3-butanediol (DES 2), and tert-butanol (DES 3) were selected for relatively low, medium, and high polarity DESs, respectively. Particularly, the extraction capabilities of the Men-DESs and their mixtures were simultaneously monitored by simplex centroid mixture design. The extraction capabilities were evaluated by determination of condensed tannin content (CTC), total phenolic content (TPC), and total flavonoid content (TFC). The results show using DES 1 could achieve the highest TPC and TFC, and using the mixture of DES1 and DES 3 could bring the most abundant CTC. Untargeted metabolomics study of the GBL extracts by an ultra-performance liquid chromatography quadrupole-time-of-flight mass spectrometry (UPLC-Q-TOFMS) combined with multivariate statistical analysis was employed for further investigation of Men-DESs and their mixtures in comparison with traditional organic solvents including methanol, aqueous methanol, and ethyl acetate. The number of peaks (NP) and coefficient of variation (CV) were chosen to evaluate the extraction coverage and reproducibility of extraction solvents. Principle component analysis and hierarchical cluster analysis were performed for assessment of the overall interactions between Men-DESs and their mixtures with traditional organic solvents.

## 인 명 색 인

<b>ㄱ</b>		김민섭	PT-015	김전경	SYM IV-02
강동진	PT-062	김민섭	PT-016	김정권	PT-076
강호일	SYM Ⅲ-04	김범희	PT-040	김정권	PF-058
계정진	SYM I -03	김병현	PT-022	김정권	PF-059
고영주	SYM V -02	김병훈	PF-039	김정례	PT-032
공보경	PF-004	김봉오	SYM V -02	김정은	PT-001
곽성신	PF-001	김상우	PT-003	김정인	PT-008
곽성신	PF-002	김상욱	PT-028	김정인	PT-009
구민선	PT-070	김상헌	PF-033	김종윤	PF-027
권미아	PF-004	김상헌	PF-039	김주미	PT-020
권성원	SYM IV-01	김선훈	PF-023	김주현	SYM IV-04
권성원	PT-044	김성남	PF-023	김지석	PF-019
권은진	PT-047	김소영	PT-070	김지석	PF-026
권정노	PT-012	김수남	SYM VI-04	김지원	PF-004
권준엽	GI-09	김수빈	PT-025	김지원	PF-005
권준엽	PF-072	김수정	PT-022	김지혜	PF-027
권현아	PF-033	김양균	PF-035	김진석	PT-001
김가해	PT-007	김연희	PT-047	김진석	PT-002
김건한	PF-020	김영준	PF-001	김진철	SYM VI-04
김경문	PF-022	김영준	PF-002	김태성	PF-022
김광섭	PT-002	김예라	PT-003	김태승	PT-004
김광섭	PT-007	김예지	PT-015	김태현	PF-036
김규리	PF-055	김예지	PT-016	김현구	PF-020
김기현	GI-03	김용현	GⅡ-03	김현영	PT-071
김기현	GI-04	김용현	PT-019	김현욱	SYM I -03
김기현	GI-05	김용현	PF-075	김형민	PT-044
김기현	PT-026	김운중	PF-053	김형석	PT-008
김기현	PT-027	김원기	GI-05	김형석	PT-009
김기현	PF-053	김원기	PF-068	김형욱	PF-016
김기현	PF-066	김유나	PF-005	김혜림	SYM V -02
김기현	PF-067	김윤석	PT-008	김효진	PT-025
김기현	PF-068	김윤석	PT-009		
김남숙	SYM Ⅲ-04	김윤석	PT-010	<b>L</b>	
김도현	PF-021	김윤석	PT-011	나윤철	PT-072
김동현	SYM IV-02	김은경	PF-043	남용현	PF-026
김만구	PT-028	김은아	PT-020	남종덕	PF-023
김만구	PT-029	김은지	PF-010		
김명덕	PF-005	김재호	PT-060	<b>ㄹ</b>	
김민경	PT-040	김재호	PT-061	류건영	PT-005
김민섭	PT-013	김재희	PF-037	류재정	PF-055



이민진	PT-055	이채홍	PT-055	정지완	PT-060
이번헌	PF-016	이치규	PF-013	정진선	PT-061
이봉민	PT-014	이치규	PF-014	조남욱	PF-035
이석진	PF-043	이한림	PF-019	조남준	PT-031
이선호	PT-072	이한림	PF-026	조성원	PT-019
이선홍	PT-008	이현선	PT-061	조수아	PT-025
이선홍	PT-009	이현아	PF-020	조영훈	PF-004
이선홍	PT-010	이혜린	PT-043	조원보	PT-025
이선홍	PT-011	이효민	PT-047	조지미	PT-060
이성배	PF-034	이희진	PT-021	조지미	PT-061
이성우	PT-060	임대환	GI-03	조지민	PF-034
이성우	PT-061	임대환	PF-066	조형욱	PT-077
이성우	PF-016	임봉환	PF-007	조혜륜	PF-015
이성협	PF-043	임상호	PF-014	주도원	SYM II-01
이승구	P I -03	임유영	PT-020	주민희	PT-076
이승구	PF-036	임정식	PT-003	주민희	PF-058
이승호	PF-053	임정식	PT-007	주민희	PF-059
이영재	PT-026	임철홍	PF-034	주창규	PT-004
이용문	PT-040				
이용훈	PF-034				
이윤희	PT-072	장기창	PT-071	최광순	PF-027
이은정	PT-010	장은희	PT-062	최광순	PF-028
이인석	PT-012	장혜지	PT-076	최기인	SYM I -02
이일웅	SYM V -02	장혜지	PF-058	최민규	PT-012
이재근	PT-060	장혜지	PF-059	최민규	PT-013
이재석	PF-027	전수경	PF-001	최민규	PT-014
이재석	PF-028	전수경	PF-002	최민규	PT-015
이정순	PT-003	전정륜	PT-047	최민규	PT-016
이정순	PT-007	정다솜	PF-004	최민선	SYM IV-02
이정현	PT-054	정두수	GI-09	최병인	PF-020
이정현	PT-055	정두수	PF-072	최병일	PF-022
이준배	PF-001	정명훈	PT-029	최성운	PF-010
이준배	PF-002	정석환	PF-005	최성운	PF-011
이준영	PT-070	정선경	GI-09	최성운	PF-012
이지은	PT-054	정선경	PF-072	최성진	GII-03
이지은	PT-055	정성욱	PF-023	최성진	PT-019
이지현	SYM III-04	정영은	PT-047	최성진	PF-075
이지혜	PT-062	정용애	PF-001	최승윤	PT-005
이진규	PT-072	정용애	PF-002	최영준	PT-021
이진복	PT-002	정은숙	PF-020	최용민	PT-070
이진복	PT-007	정재학	PT-005	최용수	SYM VI-04
이진숙	PT-005	정재학	PT-025	최용욱	PF-024
이진홍	PT-002	정종순	PT-021	최원명	PT-018
이채홍	PT-054	정주영	PF-040	최원석	PT-008





Hae Sung Kim	PT-059	Hyo Chun Lee	SYM IV-03	J	
Hae Won Jang	P I -04	Hyo Jin Kim	PT-050	Jae Chun Choi	PT-068
Han Sol Kim	SYM IV-03	Hyo Young Kim	PT-063	Jae Gon Kim	PT-063
Hee Jo Yoo	PT-046	Hyo Young Kim	PT-064	Jae Hee Kim	PT-034
Hee-Don Choi	P I -04	Hyo Young Kim	PT-065	Jaebom Lee	P I -01
Heejeong Park	PT-064	Hyo Young Kim	PT-066	Jaehak Jung	SYM I -01
Heejeong Park	PT-065	Hyojin Kim	PT-049	Jae-Hyun Park	PF-049
Heejeong Park	PT-066	Hyon-Pil Yu	PT-057	Jae-Min OH	PT-075
Hee-Ju Kang	PT-023	Hyoungsu Kim	PT-006	Jaesil Kim	PT-079
Hee-Ju Kang	PT-024	Hyoung Wook Choi	PF-018	Jae-Yong Lee	GII-02
Heesoo Lee	GII-08	Hyun Ji Kim	GII-05	Jae-Yong Lee	PF-074
Heesoo Lee	PT-038	Hyun Ji Kim	PT-045	Jang Duck Choi	PT-067
Heesoo Lee	PF-080	Hyun Ji Kim	PF-077	Jang-Hyuk Ahn	PT-073
Heesoo Pyo	PT-069	Hyun Jin Kim	P I -02	Jang-Hyuk Ahn	PT-074
Hee-Won Seo	PT-034	Hyun June KIM	PT-035	Jeong Hye Kim	PT-073
Heongbin Lim	PT-078	Hyun-Chul Park	PF-006	Jeong Hye Kim	PT-074
Hiroshi Hidaka	P I -03	Hyung Sik Jo	GI-02	Jeongae Lee	PT-069
Ho Kim	PT-051	Hyung Sik Jo	PT-030	Jeongmi Lee	GII-08
Ho-Chul Shin	SYM IV-03	Hyung Sik Jo	PF-065	Jeongmi Lee	PT-038
Ho-chul Shin	PT-053	Hyung-Jin Park	PF-049	Jeongmi Lee	PF-080
Hoeil Chung	GI-06	Hyunjeong Cho	PT-063	Jeong-Yun Hwang	PT-067
Hoeil Chung	GI-07	Hyunjeong Cho	PT-064	Jeuk Min	GII-07
Hoeil Chung	GI-08	Hyunjeong Cho	PT-065	Jeuk Min	PF-049
Hoeil Chung	PF-069	Hyunjeong Cho	PT-066	Jeuk Min	PF-079
Hoeil Chung	PF-070	Hyunjung Lee	PF-047	Jeung Hi Han	PT-056
Hoeil Chung	PF-071	Hyunki Cho	PT-078	Ji Ean Lee	PT-056
Hoil Kang	PF-009	Hyun-Mee Park	SYM VI-01	Ji Hoon Song	PT-056
Hongjun Jang	PT-006	Hyun-Woo Cho	PF-056	Ji Hyun Lee	PF-009
Hophil Min	PF-029	Hyun-Woo Cho	PF-057	Ji Yeon Choi	PT-058
Hwan Seong Choi	PF-009			Ji Yeon Choi	PT-059
Hye-Eun Lee	PT-067	I		Ji-Hye Bae	PT-057
Hye-In Kang	PT-057	Ikbum Park	P I -02	Jihyun Shin	PT-048
Hyeji Jeong	PT-049	In Duk Jung	PF-049	Jin Sol Lee	PF-056
Hye-Jin Park	PT-006	In Kim	PF-018	Jinhee Um	GII-06
Hye-Jin Park	PF-045	In kyeong Jung	PF-018	Jinhee Um	PF-078
Hye-Won Lee	PT-074	In Sook CHO	SYM III-01	Jinhwa Yeum	PT-068
Hyeongryeol Lee	PT-078	In Sook CHO	PT-036	Jinju Jeong	PF-054
Hyeon-Seong Lee	GII-07	In-Chul Song	PF-008	Jisu Hur	GII-05
Hyeon-Seong Lee	PF-049	In-Hyeon Kim	GII-07	Jisu Hur	PT-045
Hyeon-Seong Lee	PF-079	In-Hyeon Kim	PF-079	Jisu Hur	PF-077
Hyeseon Lee	GI-07	In-Kwan Hwang	PF-006	Jiwon Shin	PF-046
Hyeseon Lee	PF-070			Jiyeon Kim	PT-079
Hyeyoung Jung	PF-061			John Hwan Lee	PT-056

Jong Seong KANG	SYM III-01	Keunbae Park	PF-080	Meiyu Zhang	PT-075
Jong Seong KANG	PT-035	Khandoker Asiqur Rahaman	PF-029	Mi Young Son	PF-018
Jong Seong KANG	PT-036	Khilola Nazrullaeva	GII-01	Mia Kwon	PF-003
Jong Seong KANG	PT-037	Khilola Nazrullaeva	PF-073	Min Hee Kim	PT-073
Jong Sung Noh	PF-057	Khilola Nazrullayeva	PT-039	Min Ju Kim	PT-063
Jong-Ho Park	영인상	Khilola Nazrullayeva	PT-040	Mingi Kim	PF-054
Jongin Hong	PF-025	Khilola Nazrullayeva	PT-041	Min-Hee Kim	PT-074
Jongin Hong	PF-063	Ki-Ho Park	PT-057	Minju Kim	PT-064
Jongki Hong	SYM VI-01	Kihoon Song	PT-078	Minju Kim	PT-065
Jongki Hong	GII-05	Ki-Hyun Kim	SYM III-02	Minju Kim	PT-066
Jongki Hong	GII-06	Kishore Babu Dasari	PT-017	Min-Jung Kim	PT-051
Jongki Hong	PT-045	Kun Cho	PT-052	Min-Kyeong Kim	PT-039
Jongki Hong	PF-047	Kyeong Ho Kim	GII-02	Min-Seok Sim	PT-034
Jongki Hong	PF-077	Kyeong Ho Kim	SYM III-03	Minyeong Kim	PT-006
Jongki Hong	PF-078	Kyeong Ho Kim	PT-034	Minyeong Kim	PF-045
Joon Ho Eom	PT-051	Kyeong Ho Kim	PF-074	Minyeong Kim	PF-046
Joon Won Park	P I -02	Kyeong-Ran Min	GII-01	Moongi Ji	GII-07
Joonho Park	PT-079	Kyeong-Ran Min	PT-039	Moongi Ji	PF-049
Joo-Young Kim	PF-006	Kyeong-Ran Min	PT-041	Moongi Ji	PF-079
Joung Boon Hwang	PT-068	Kyeong-Ran Min	PF-073		
Jounghee Baek	PT-051	Kyoung Won CHO	PT-037	N	
Joung-Hun Kim	P I -02	Kyoung-Moon Han	PT-048	Na Young Kang	SYM V -03
Ju Yeon Jung	PF-006	Kyu Yeon Kim	PT-034	Nader Nciri	PF-051
Jun Seo Park	SYM IV-03	Kyuhong Lee	GII-07	Nam jung Cho	GI-01
Jung Hyun Lee	PT-058	Kyuhong Lee	PF-079	Nam jung Cho	PF-064
Jung Hyun Lee	PT-059	Kyung Hun Son	PT-050	Nam Sook Kim	PF-009
Jung-Min Song	SYM II-02	Kyunghun Son	PT-048		
Jung-Min Song	PT-023	Kyunghun Son	PT-049	O	
Jung-Min Song	PT-024	Kyung-Tae Lee	PT-046	Oh-Seung Kwon	PF-029
Jun-Oh Bu	SYM II-02				
Jun-Oh Bu	PT-023	L		P	
Jun-Oh Bu	PT-024	Lorrenne Caburatan	PT-079	Pil-Won Kang	PF-006
Jun-Young Lee	P I -04				
		M		R	
K		Maftuna Shamshiddinova	GII-01	Rheeda Lee	PT-048
Kangbong Lee	PF-030	Maftuna Shamshiddinova	PT-039	Ri Jin Kang	SYM VI-01
Katsuo Asakura	SYM V -01	Maftuna Shamshiddinova	PT-040		
Ke Li	GII-08	Maftuna Shamshiddinova	PT-041	S	
Ke Li	PT-038	Maftuna Shamshiddinova	PF-073	Sang Beom Han	SYM IV-03
Ke Li	PF-080	Man-Jeong Paik	GII-07	Sang Kwang Lee	PT-052
Keunbae Park	GII-08	Man-Jeong Paik	PF-049	Sang-Beom Han	GII-02
Keunbae Park	PT-038	Man-Jeong Paik	PF-079	Sang-Beom Han	PF-074

Sang-Hun Jung	PT-036	Sook-Young Park	PT-024	Wonwoong Lee	PF-078
Sang-Hwa LEE	PF-017	So-Yeon Lee	PT-034	Won-Yong LEE	PF-048
Sangil Lee	PT-049	Soyeong Ju	PF-003	Woo Jin Choi	GI-01
Sangil Lee	PT-050	Soyeong Kang	PT-051	Woo Jin Choi	PF-064
Sangmo Shin	PF-041	Soyoung Ahn	PF-062	Woonjung Kim	PT-075
Sangseop Kim	PT-048	Su Jin Kim	PT-051	Woonjung Kim	PF-044
Sang-Yong jung	PT-075	Subi Lee	PT-068	Woosuk Sohng	GI-07
SE Chul Hong	PF-018	Subin Choi	PF-049	Woosuk Sohng	PF-070
Se Young Park	PT-030	Sujin Yoon	PF-030	Wooyong Kwon	PF-051
Seeun Cho	GI-07	Sumin Lee	PF-048		
Seeun Cho	PF-070	Sun kyung Jeong	PF-050	X	
Sehyun Kim	PF-060	Sung Kwang Lee	GI-01	Xamyo Noulorsaytour	PF-052
Seo Yeon Lee	PT-059	Sung Kwang Lee	GI-02	Xuan-Lan Mai	GII-02
Seo Young YANG	PT-035	Sung Kwang Lee	PT-030	Xuan-Lan Mai	PT-034
Seo Young YANG	PT-037	Sung Kwang Lee	PF-064	Xuan-Lan Mai	PF-074
Seok Chu	PT-056	Sung Kwang Lee	PF-065		
Seok-Hyeon Kim	PT-057	Sung-Hee Cho	SYM VI-03	Y	
Seong Ho Kang	GII-04	Sung-Hwan Kim	GII-07	Yan Jin	GII-08
Seong Ho Kang	PF-076	Sung-Hwan Kim	PF-079	Yan Jin	PT-038
Seongsoo Park	PF-009	Sun-il Kim	PT-053	Yan Jin	PF-080
Seulgi Kang	GII-08	Sun-Ju Hwang	PF-008	Yelin Lee	PF-061
Seulgi Kang	PT-038	Sunyoung Bae	PF-060	Yen Le Thi	PT-079
Seulgi Kang	PF-080	Sunyoung Bae	PF-061	Yeongsuk Yoo	PT-052
Seung Wook Ham	PF-063	Sunyoung Bae	PF-062	Yeon-kyo Sung	PT-053
Seungho Lee	PT-075	Sun-young Park	PT-069	Yeseul Park	PT-067
Seungho Lee	PF-044			Yong Ki Park	SYM V-03
Seung-Hoon Baek	PT-006	T		Yong Kyu Choi	PT-049
Seung-Hoon Baek	PF-045	Tae Gwon Seo	PF-018	Yong Kyu Choi	PT-050
Seung-Hoon Baek	PF-046	Taehyun Ahn	PT-067	Yong Seok Choi	SYM IV-03
Seung-Woon Myung	PF-056	Taewoo An	PF-045	Yong-Hyeon Nam	PT-017
Seung-Woon Myung	PF-057	Thi Phuong Duyen VU	SYM III-01	Yong-min So	PT-053
Shokhid Gulyamov	PT-039	Thi Phuong Duyen VU	PT-036	Yong-Moon Lee	GII-01
Shokhid Gulyamov	PT-040	Thuy-Vy Pham	GII-02	Yong-Moon Lee	PT-039
So Ra Min	PT-073	Thuy-Vy Pham	PF-074	Yong-Moon Lee	PT-041
So Ra Min	PT-074	Tomasz Bączek	SP-01	Yong-Moon Lee	PF-073
Soae Ji	PT-048	Tran Van Tan	P I -01	Yoon Hwan Kim	PT-069
Song Kim	PF-008	Tsuyoshi Tanaka	P I -03	Yoon Sook Na	PF-041
Songjin Oh	PF-049			Yoonjeong Lee	GI-06
Song-Yi Kim	PT-057	W		Yoonjeong Lee	PF-069
Soo Gyeong Cho	GI-02	Wonhoe Koo	PF-056	Yoon-Yeol Lee	P I -04
Soo Gyeong Cho	PF-065	Wonhoe Koo	PF-057	Yoshihiro Asahara	P I -03
Soo-Hyun Lee	SYM VI-01	Wontae Jeong	PT-078	You Seung Oh	SYM V-03
Soojeong Son	PT-048	Wonwoong Lee	GII-06	Young Eun Kim	PT-056
Sook-Young Park	PT-023	Wonwoong Lee	PF-047	Young Ho KIM	SYM III-01

Young Ho KIM	PT-035
Young Ho KIM	PT-036
Young Ho KIM	PT-037
Young Ki Hong	PT-051
Young min Jeon	PF-044
Youngbae Kim	PF-049
Young-Hoon Jo	PF-003
Yucheng Sun	GII-04
Yucheng Sun	PF-076
Yun Geom Choi	PT-050
Yunsik Nam	PF-030
Yunsook Kang	PT-068
Yuri Cho	SYM VI-01

# 총회 식순

일 시: 2019. 05. 16.(목), 18:00

장 소: 강릉 세인트존스 호텔 4층 그랜드볼룸(ANTIGUA)

사 회: 이정미 사무총장

개회

국민의례

개회사 (한국분석과학회 조남준 회장)

시상

- 공로상
- 영인 분석과학자상
- Leco 젊은 분석과학자상
- 우수 구두 발표 상
- 우수 포스터 상

결산 및 업무 보고

- 2018년도 결산서
- 2018년도 재무 및 업무 감사 보고서
- 2019년도 예산(안)
- 2019년도 수입·지출 현황
- 2019년도 업무 보고

심의 안건 및 토의

- 기타 안건 및 토의

폐회 선언

## 제62회 춘계 학술대회 상

### 공 로 상

한남대학교 이 승 호 교수

귀하는 2018년도 제23대 사단법인 한국분석과학회 회장으로 재임하시면서  
본 학회의 발전에 기여한 공이 크므로 그 업적을 기리고자 합니다.

2019년 5월 16일  
사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

### 공 로 상

서울여자대학교 배 선 영 교수

귀하는 2018년도 사단법인 한국분석과학회 사무총장으로 재임하시면서 투철한 봉사 정신으로  
본 학회의 발전에 기여한 공이 크므로 그 업적을 기리고자 합니다.

2019년 5월 16일  
사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

### 공 로 상

경희대학교 홍 종 기 교수

귀하는 분석과학회 학술지 (Analytical Science & Technology) 국제화와 발전에  
크게 기여하여 그 공로에 이 상을 드립니다.

2019년 5월 16일  
사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 공 로 상

전북대학교 박 종 호 교수

---

귀하는 분석과학회 학술지 (Analytical Science & Technology) 국제화와 발전에 크게 기여하여 그 공로에 이 상을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 공 로 상

충남대학교 김 정 권 교수

---

귀하는 분석과학회 학술지 (Analytical Science & Technology) 국제화와 발전에 크게 기여하여 그 공로에 이 상을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 공 로 상

서강대학교 오 한 빈 교수

---

귀하는 분석과학회 학술지 (Analytical Science & Technology) 국제화와 발전에 크게 기여하여 그 공로에 이 상을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 영인 분석과학자상

전북대학교 박종호 교수

---

귀하는 한국분석과학회 회원으로서 본 학회에 기여한 공이 클 뿐 아니라, 분석과학 관련 우수한 논문을 다수 발표한 회원에게 수여하는 학술상 수상자로 선정되었기에 이 상패를 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## LECO 젊은 분석과학자상

한국식품연구원 장혜원 박사

---

귀하는 분석 과학 관련 분야의 연구 업적이 탁월하며 학문적 창의성과 잠재력이 많은 젊은 분석과학자에게 수여하는 학술상 수상자로 선정되었기에 이 상패를 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 우수 구두 발표 상

제주대학교 김 룬 경

---

귀하는 2018년도 제61회 추계 학술대회에서 「Chemical Compositions and Emission Characteristics of Atmospheric Aerosols in relation to Meteorological Conditions at Background Site of Korea during 2017」 이라는 논문을 발표하여 우수 구두 발표 상으로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준



## 우수 구두 발표 상

충남대학교 원 유 광

---

귀하는 2018년도 제61회 추계 학술대회에서 「Surface homogeneity enhancement of 2,5-Dihydroxybenzoic acid matrix using on-target recrystallization by acetonitrile droplet in MALDI-MS dried-droplet sample preparation」이라는 논문을 발표하여 우수 구두 발표 상으로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 우수 포스터 상

한국외국어대학교 【서은지, 박태민, 갈영주, 차상원】

---

위 연구진은 2018년 제61회 추계 학술대회에서 「유치(Deciduous teeth)대상 엑스포즘 연구를 위한 원소 분석법 개발」이라는 논문을 발표하여 우수 포스터로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 우수 포스터 상

식품의약품안전평가원, 강원대학교, 인천공항세관  
【이지현, 정애란, 박한나, 이창희, Suresh Mandava, 임성준,  
임병복, 박성관, 이종국, 강호일】

---

위 연구진은 2018년 제61회 추계 학술대회에서 「Identification and structural elucidation of a new synthetic cannabinoid in powder product found in an airmail package: DMBA-CHMINACA」라는 논문을 발표하여 우수 포스터로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 우수 포스터 상

**Lund University, Universidad Mayor de San Andres(UMSA), Hannam University  
【Catalina Fuentes, Hisfazilah Saari, Jaeyeong Choi, Seunggho Lee,  
Malin Sjöo, Marie Wahlgren and Lars Nilsson】**

---

위 연구진은 2018년 제61회 추계 학술대회에서 「Characterization of non-solvent precipitated starch using asymmetrical flow field-flow fractionation coupled with multiple detectors」 라는 논문을 발표하여 우수 포스터로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

## 우수 포스터 상

**한국표준과학연구원, 과학기술연합대학원대학교  
【김예라, 이정순, 박미연, 김상우, 김태완, 김가해, 임정식】**

---

위 연구진은 2018년 제61회 추계 학술대회에서 「Non-Voigt Line Shape 함수 프로그래밍 개발에 대한 유효성 평가 및 1.39  $\mu\text{m}$  영역 수증기의 분광학적 특성 평가」 라는 논문을 발표하여 우수 포스터로 선정되었기에 이 상장을 드립니다.

2019년 5월 16일

사단법인 한국분석과학회 회장 조 남 준

**2018년도 결산서**  
(2018. 01. 01 - 2018. 12. 31)

수 입		지 출	
세 과 목	금 액 (원)	세 과 목	금 액 (원)
<b>1. 회 비</b>	<b>12,359,224</b>	<b>1. 학회지</b>	<b>27,434,515</b>
개 인 회 비(일반)	6,761,961	학회지발간비	11,496,100
(학생)	2,203,738	학회지 발송비	3,012,770
도서권회비	448,185	권원운영비	12,925,645
단체회비	1,188,900		
송신회비	1,756,440		
<b>2. 학술대회</b>	<b>160,675,120</b>	<b>2. 이사회 운영비</b>	<b>6,775,000</b>
준계학회	83,670,262	발급비	5,255,000
추계학회	77,004,858	교통비	1,520,000
<b>3. 학회지</b>	<b>35,655,934</b>	<b>3. 임원활동비</b>	<b>7,916,890</b>
광고료	27,500,000	활동비	6,941,790
논문 기사료	5,965,550	교통비	975,100
저작권료	2,190,384		
<b>4. 과중 지원금</b>	<b>10,730,000</b>	<b>4. 사무관리비 및 기타</b>	<b>93,854,537</b>
국내 학술대회	3,490,000	우편 및 택배	899,300
국내 학술지	7,240,000	사무용품&살비	2,017,330
		급여 및 상여금	24,537,970
		전화 및 팩스사용료	735,777
		이서 수수료	39,100
		사무실관리비	2,147,180
		사무사기상료	2,849,000
		과중 연회비	1,500,000
		카드기 대여료	132,000
		법인 등기비	357,240
		교통 및 숙박비	2,824,640
		카드기 정보변경비	30,000
		근조기 설치 및 회수 비용	275,000
		에너지스 업관리비	220,000
		30년사 인쇄 및 집필료	18,000,000
		디학회 HPLC 수익 분배금	37,290,000
<b>5. 전년도 적립금</b>	<b>50,000,000</b>	<b>5. 학술대회</b>	<b>117,280,043</b>
		준계학회	57,046,145
		추계학회	50,233,898
<b>6. 전년도 이월금</b>	<b>200,877,880</b>	<b>6. 세 금</b>	<b>7,394,760</b>
(수거래)우리은행 입출금 통장	154,852,921	재산세	396,240
(HPLC 2017 수익금 포함)	(112,008,971)	부기세	3,006,320
우리은행 입출금 통장	34,362,713	법인세	1,219,800
우리은행 편직위원회 통장	2,548,586	수민세 및 소득세(법인)	143,820
우체국 퇴직금 통장	9,113,760	4대보험료(기관유보)	2,628,580
<b>7. 기타</b>	<b>641,411</b>	<b>7. 당해년도 적립금</b>	<b>100,000,000</b>
이자수입	641,411	징기예금	100,000,000
		<b>8. 잔 액</b>	<b>110,283,824</b>
		(주기래)우리은행 입출금 통장	43,101,360
		농협 입출금 통장	50,029,937
		우체국 퇴직금 통장	10,971,930
		우리은행 입출금(치무)	6,106,212
		우리은행 입출금(편직위)	74,385
<b>합 계</b>	<b>470,939,569</b>	<b>합 계</b>	<b>470,939,569</b>
2018 미수금	940,000	2018 미납금	741,350
		2018 미수금-미납금	198,650
<b>합 계</b>	<b>471,879,569</b>	<b>합 계</b>	<b>471,879,569</b>

2018년 당기순이익 (40,395,406) (당해년도 적립금+잔액+미수금-전년도 적립금-전년도 이월금-미납금)

**총 잔액 210,283,824** (당해년도 적립금+잔액)

감사 정 두 수

감사 황 승 율

  
 (인)  


# 한국분석과학회 2018년도 재무 및 업무 감사 보고서

## 한국분석과학회 2018년도 재무 및 업무 감사 보고서

정관 제16조에 의거하여 (사)한국분석과학회 2018 회계연도(2018년도 1월 1일 ~ 12월 31일)의 학회 운영 업무 및 재무와 재산상황에 관하여 2019년 01월 02일 학회 사무실에서 감사를 실시하여 그 결과를 아래와 같이 보고함.

1. 학회 운영과 업무에 대한 감사 결과 학회 업무가 정상적으로 운영되고 있었음.
2. 학회 재무와 재산상황에 대한 감사 결과 2018년도 사업계획에 근거하여 운영비 및 사업비 등이 지출 결의서 및 증빙서류를 갖추어 집행되고 있음을 감사한바 적법하게 처리되고 있었음.
3. 한국분석과학회 30주년 준비위원회를 2017년 춘계 총회부터 가동시켜 2018년 춘계 총회까지 학회 30주년 행사를 순조롭게 준비하고 진행되었음.

이상과 같이 감사 결과를 보고합니다.

2019년 1월 02일

감사 정 두 수



감사 황 승 울

# 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)
<b>1. 회 비</b>	<b>11,200,000</b>	<b>1. 이사회 및 임원 운영비</b>	<b>11,000,000</b>
개인 회비	8,000,000	활동비	8,000,000
도서관회비	500,000	교통비	3,000,000
단체 회비	1,200,000		
종신 회비	1,500,000		
<b>2. 학회지</b>	<b>50,000,000</b>	<b>2. 학회지</b>	<b>41,500,000</b>
광고료	40,000,000	학회지 발간비	18,000,000
논문 게재료	8,000,000	학회지 발송비	3,500,000
저작권료	2,000,000	편집운영비	20,000,000
<b>3. 학술대회</b>	<b>125,700,000</b>	<b>3. 학술대회</b>	<b>90,000,000</b>
춘계 학술대회	65,000,000	춘계학회	40,000,000
추계 학술대회	60,700,000	추계학회	50,000,000
<b>4. 과총 지원금</b>	<b>10,700,000</b>	<b>4. 사무관리비</b>	<b>39,624,000</b>
국내 학술지	7,200,000	우편 및 택배	1,000,000
국내 학술대회	3,500,000	사무용품 & 잡비	2,500,000
		급여 및 상여금	25,272,000
		전화 및 팩스 사용료	650,000
		이체 수수료	100,000
<b>5. 기타수입</b>	<b>700,000</b>	사무실 관리비	2,300,000
이자수입	700,000	세무사 기장료	3,000,000
		과총 회비	1,500,000
		카드기 대여료	132,000
<b>6. 전기년도 이월금</b>	<b>210,538,227</b>	법인 등기비	400,000
적립금	100,000,000	교통비 및 출장비	1,500,000
이월금	110,538,227	카드기 정보 변경비	50,000
		이니스스 연관리비	220,000
		화환 및 근조기	500,000
		예비비	500,000
		<b>5. 세 금</b>	<b>6,100,000</b>
		재산세	400,000
		법인세	500,000
		부가세	3,000,000
		지방소득&주민세	200,000
		4대 보험료(기관 부담)	2,000,000
		<b>6. 차년도 이월금(2020)</b>	<b>220,614,227</b>
		적립금	100,000,000
		이월금	120,614,227
합 계	408,838,227	합 계	408,838,227

# 2019년도 수입 · 지출 현황

2019.01.01. ~ 2019.04.30.

수입		지출	
세 과 목	금 액(원)	세 과 목	금 액(원)
<b>1. 회 비</b>	<b>2,903,332</b>	<b>1. 이사회 운영비</b>	<b>4,546,100</b>
개인회비(일반)	981,708	활동비	3,356,100
(학생)	676,244	교통비	1,190,000
도서관회비	50,000	<b>2. 임원 활동비</b>	<b>2,891,920</b>
단체회비	895,380	활동비	2,611,920
종신회비	300,000	교통비	280,000
<b>2. 학회지</b>	<b>10,831,332</b>	<b>3. 학회지</b>	<b>5,232,537</b>
광고료	9,900,000	학회지 발간비	1,708,300
논문 게재료	931,332	학회지 발송비	432,480
<b>3. 학술대회</b>	<b>39,825,932</b>	편집운영비	3,091,757
춘계 학술대회	30,775,932	<b>4. 학술대회</b>	<b>6,776,840</b>
2019 APIA	9,050,000	춘계학회	3,443,840
<b>4. 기타</b>	<b>1,982,925</b>	2019 APIA	3,333,000
이자수입	1,484,725	<b>5. 사무관리비 및 기타</b>	<b>21,071,078</b>
법입세 환급금	498,200	우편 및 택배	190,220
<b>5. 전년도 이월금</b>	<b>210,538,227</b>	사무용품 & 잡비	397,750
적립금	100,000,000	급여 및 상여금	8,459,230
(주거래)입출금 통장	43,355,763	전화 및 팩스사용료	186,681
(4계좌)입출금통장	67,182,464	이체 수수료	13,500
		사무실 관리비	582,330
		세무사 기장료	1,870,000
		과총 회비	1,500,000
		카드기 임대료	44,000
		법인 등기비	357,240
		교통비 및 출장비	140,580
		2020 APCE&CECE	5,000,000
		2018 과총 지원금 반환금	2,329,547
		<b>6. 세금</b>	<b>3,237,040</b>
		부가세	2,283,860
		법인세	180,660
		주민세 및 소득세(법인)	17,920
		4대 보험료(기관부담)	754,600
		<b>7. 잔액</b>	<b>222,326,233</b>
		적립금	100,000,000
		(주거래)입출금통장	42,996,155
		(4계좌)입출금통장	79,330,078
<b>합 계</b>	<b>266,081,748</b>	<b>합 계</b>	<b>266,081,748</b>

# 2019년도 업무 보고

2019. 01. 01 ~ 2019. 05. 17

## [추진 사항]

- 01.09 2018년도 사업 실적 및 결과보고서 제출(과총)
- 01.10 2019년도 제1차 이사회 개최 및 신년 하례식**
- 01.24 신 임원 명단 보고 및 승인 신청(국립과천과학관)
- 01.25 부가가치세 2기 확정 신고
- 02.13 2019년도 1차 연회비 청구
- 02.17-18 임원 워크샵(쓸비치 양양)
- 02.25 분석과학회지 Vol. 32(1) 발간
- 02.25 제62회 춘계 학술대회 홍보 포스터 발송
- 02.27 비영리 법인 업무 현황(2018년 사업 실적 및 2019년 사업 계획) 제출(국립과천과학관)
- 02.27 영인 분석과학자상, Leco 젊은 분석과학자상 추천 공고
- 03.20 국내 학술지, 국내 학술대회 지원금 신청(과총)
- 03.27 지정기부금단체 의무이행 여부 점검 결과 보고서 제출(국립과천과학관)
- 03.28 공익법인 사업계획 및 예산보고서, 사업실적 및 결산 보고서 제출(국립과천과학관)
- 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)**

## [예정 사항]

- 06.25 분석과학회지 Vol. 32(3) 발간
- 07.15 2019년도 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(제주 부영호텔)**
- 12.25 분석과학회지 Vol. 32(6) 발간

# 학술대회 발표회장 도면





# 사단법인 한국분석과학회 임원 명단

- **명예 회장:** 박금식
- **고문:** 김만구, 김연제, 김영만, 김영상, 김원호, 김일광, 김태승, 김택제, 문동철, 박만기, 박성우, 음철현, 이광우, 이광필, 이석근, 이승호, 이종해, 최덕일, 하재호
- **회장:** 조남준
- **감사:** 김태욱, 배선영
- **수석 부회장:** 김진석
- **부회장:** 강길진(식품/농화학), 강종성(약학), 권오승(약학), 김기현(환경), 김남이(법과학), 김종혁(화학), 김혁년(산학연분과), 류재정(홍보), 명승운(화학), 박신화(재료/섬유), 선일식(화학), 송규석(표준/원자력/안전), 신선경(여성분과), 신호상(환경), 이용문(약학), 이원용(편집), 정두수(총무), 홍종기(학술)
- **발전 동력위원회:** 강창희, 김문해, 김인환, 김효진, 박용남, 윤근성, 윤상화, 이덕희(부위원장), 이성희, 이승호(위원장), 이창선, 정민환, 팽기정
- **이사:** 강성호(학술), 공광훈(학술), 권성원(약학), 길효식(홍보), 김광표(학술 간사), 김민석(학술), 김상철(기획), 김원석(기획), 김윤석(홍보), 김정권(학술 간사), 김주훈(총무 간사), 김지혜(조직), 김현주(조직), 김훈주(조직), 김희갑(환경), 남궁현(홍보), 민지숙(홍보), 박경수(조직), 박종호(학술), 박준호(기획), 백만정(기획), 백승훈(학술), 서금희(홍보), 송준명(재무), 안장혁(식품/농화학), 유혜현(학술), 윤정기(조직), 유혜운(학술), 이군택(학술), 이성협(홍보), 이수연(홍보), 이재형(조직), 이정미(사무총장), 이정애(기획), 이진숙(학술), 이창열(홍보), 이학수(기획), 이후근(기획), 임흥빈(조직), 장혜원(총무 간사), 정세훈(기획), 정영림(재무), 정의창(조직), 정재학(조직), 조건(홍보), 조성찬(조직), 최기환(총무 간사), 최용욱(조직), 최은경(재료/섬유), 표재성(학술), 표희수(식품/농화학), 한영지(학술), 한정희(홍보), 황승울(기획)
- **편집위원회**  
 위원장: 이원용  
 부위원장: 박종호  
 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

## 제62회 한국분석과학회 춘계 학술대회 초록집

2019년 5월 10일 인쇄	발행	<b>사단법인 한국분석과학회</b>
2019년 5월 16일 발행	학회 본부 (04144)	서울시 마포구 마포대로 127, 1603호 (공덕동, 풍림VIP텔)
발행인: 조남준		전화: +82-(0)2-701-8661 팩스: +82-(0)2-701-8662 E-mail: koanal88@naver.com Home page: <a href="http://www.koanal.or.kr">http://www.koanal.or.kr</a>
편집인: 홍종기	인쇄	<b>한림원</b> 서울시 중구 퇴계로 20, 51길 1303 (오장동, 넥서스 타워) 전화: +82-(0)2-2273-4201 팩스: +82(0)2-2266-9083 Home page: <a href="http://www.hanrimwon.co.kr">http://www.hanrimwon.co.kr</a>