응용 자료

환경

# Agilent 7250 GC-QTOF를 이용한 잔류성유기오염물질 및 신종오염물질의 PCDL 구축


**저자**

김병호[1], 목소리[2], 문효방[2]*

[1]한국애질런트테크놀로지스㈜,

[2]한양대학교


## 개요

잔류성유기오염물질은 자연환경에서 잘 분해되지 않고 동식물에 축적되어 우리에게 해를 끼치는 물질로 POPs(persistent organic pollutants)라고도 합니다. 2001년 5월 22일에 POPs 제조와 사용을 규제하기 위한 스톡홀름협약이 채택되었고, 우리나라는 2001년 4월 10일 스톡홀름협약에 서명한 뒤 2002년 8월 26일 비준하여 '잔류성유기오염물질 관리법'을 제정, POPs 관리에 필요한 사항을 규정하고 있습니다. 또한 산업발달과 더불어 환경에 새로운 오염물질들이 증가하고 있으며, 이러한 신종오염물질(Emerging contaminants)의 확산을 제한하고 감소 및 제거하기 위해 EPA를 포함한 국제적 규제 기관들은 지침을 제공하고 있습니다.

이와 같이 POPs 및 신종오염물질들에 대해 환경오염 저감을 위한 규제와 관리 그리고 새로운 오염물질을 식별하기 위한 모니터링이 지속적으로 필요 합니다. 이에 본 응용 자료에서는 Agilent 7250 GC-QTOF를 이용하여 잔류성유기오염물질 및 신종오염물들의 PCDL(Personal Compound Database/Libraries)을 구축하고 환경시료 모니터링 방법에 대해 소개하고자 합니다.

## 서론

잔류성유기오염물질은 잔류성이 높아 환경에서 쉽게 분해되지 않으며 대기를 통해 장거리 이동도 가능 합니다. 독성이 강해 면역 및 생식 체계 교란 · 중추신경계 손상 · 암유발 · 선천성 기형 유발 · 지능 감소 등을 초래하는 유해 물질로 알려져 있습니다. 먹이사슬을 따라 동식물의 체내에 축적되어 생물농축 과정을 통해 인간과 같은 상위 포식자에게 높은 농도로 존재할 수 있습니다. 이와 같은 잔류성유기오염물질은 2001년 5월 스톡홀름협약을 통해 다이옥신(dioxin), 퓨란(Furans), 폴리염화비페닐류(polychlorinated biphenyls, PCB), 유기염소계 살충제(Organochlorinated pesticides, OCPs) 등 12종의 규제 물질을 지정하였으며, 이후 2009년 과불화합물(PFC), 브롬계 난연제(Polybrominated diphenyl ethers, PBDEs) 등 9종이 새로운 잔류성유기오염물질로 새롭게 지정되었습니다. 그리고 2011년에는 엔도설판(Endosulfan), 2013년에는 헥사브로모사이클로도데칸(HBCD), 2015년에는 염화나프탈렌, 헥사클로로부타디엔, 펜타클로로페놀 등 2년마다 1-3종의 새로운 유해물질이 POPs로 등재되어 2023년 기준 34종의 물질이 잔류성유기오염물질로 지정되어 있습니다. 이와 같이 산업의 발달과 함께 새로운 오염물질들이 증가되고 있으며, 이러한 신종오염물질 또한 규제와 관리를 위한 노력이 지속되고 있습니다.

환경오염물질 모니터링을 위한 Target/Suspect/Non-target screening 기법의 워크플로는 아래 그림 1.과 같습니다. 이와 같이 구축된 PCDL(라이브러리)을 이용하여 수질, 대기, 토양, 퇴적물 등의 환경시료 뿐만 아니라 동·식물·생체 시료 등을 분석함으로써 환경오염에 대한 모니터링에 활용할 수 있습니다. Non-target screening을 통해 잔류성유기오염물질(Persistent Organic Pollutants: POPs), 위험 · 유해물질(Hazardous and Noxious Substances: HNS), 신종오염물질(Emerging contaminants) 등으로 구분되는 환경오염물질이 관찰되는 경우 해당 표준물질을 분석하여 라이브러리(PCDL)로 구축하면, 다른 실험실에서는 표준물질 없이도 이 PCDL(라이브러리) 매칭을 통해 해당 오염물질의 모니터링(Suspect screening)에 활용할 수 있습니다.

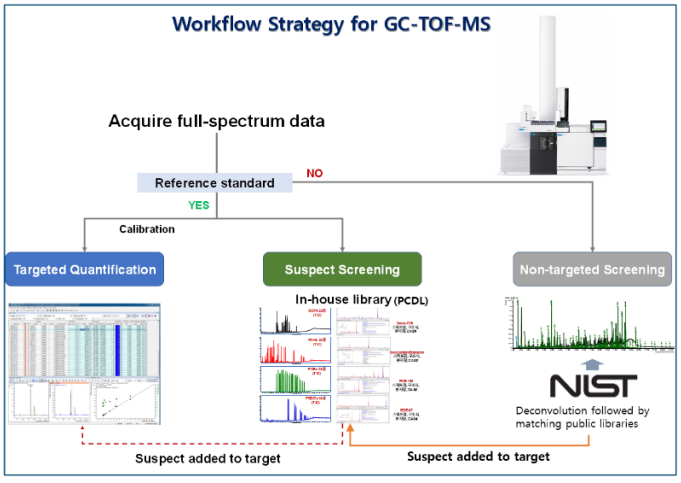


**그림 1.** Target/Suspect/Non-target screening Workflow

이에 본 응용 자료에서는 Agilent 7250 GC-QTOF를 이용하여 잔류성유기오염물질인 Polychlorinated biphenyls(PCBs), Organochlorinated pesticides(OCPs), Polybrominated diphenyl ethers(PBDEs) 등 그리고 신종오염물질로 위험·유해물질 (Hazardous and Noxious Substances: HNS)인 Phthalate esters(PAEs), Alternative plasticizers(APs), Organophosphate esters(OPEs), Siloxanes, Polyhalogenated carbazoles(PHCZs) 등의 PCDL(Personal Compound Database/Libraries)을 구축하고, 실제 환경시료 분석을 통해 환경오염물질의 모니터링을 진행하였습니다.

## 실험

### 표준물질 및 시료

라이브러리 구축에 사용된 표준물질은 Wellington Laboratory, Cambridge Isotope Laboratory, AccuStandard, Toronto Research Chemicals 등에서 개별물질 혹은 혼합물질을 구입하여 사용하였고, 최종적으로 헥산(n-Hexane)으로 희석 조제하여 기기분석 하였습니다.

모니터링 시료로는 러시아 표트르 대제만에 서식하는 점박이물범의 지방 시료를 활용하였습니다. 약 0.5g의 지방 시료를 무수황산나트륨(Na2SO4)와 함께 균질화하여 탈수한 후, Soxhlet 장치를 이용해 디클로로메탄(Dichloromethane)-헥산(n-Hexane) 1:1 혼합용매를 사용하여 16시간 동안 추출하였습니다. 추출물의 지질 제거는 Bio-beads S-X3을 이용한 겔 투과 크로마토그래피 (Gel Permeation Chromatography; GPC)를 활용하여 수행하였습니다. 이후 다층 실리카겔(Multi-Silica gel column)을 사용한 정제 과정을 거친 후, 최종적으로 노난(Nonane) 100μL로 용해하여 7250 GC-QTOF로 분석하였습니다.

### 분석 기기 및 조건

분석 장치로는 Agilent사의 7250 GC-QTOF를 사용하였습니다. 표준용액 및 전처리된 시료 각 1μL를 비분할주입모드로 주입하여, HP-5MS(30m x 0.25mm x 0.25μm) 컬럼으로 분리 분석하였습니다. 기기분석 조건은 다음의 표 1, 2와 같습니다.

**표 1.** Agilent 8890 GC 분석조건.

| 파라미터 | 값 |
|---|---|
| 분석 기기 | Agilent 8890 가스 크로마토그래피 |
| 주입구 | 1μL, 비분할 주입 |
| 주입구 온도 | 250°C |
| 컬럼 | HP-5MS(30m x 250μm x 0.25μm) |
| 컬럼 유량 | 1.0mL/분(일정한 유량, He) |
| 오븐 | 80°C에서 1분간 유지<br>10°C/분으로 200°C까지 올려서 0분간 유지<br>5°C/분으로 300°C까지 올려서 10분간 유지 |
| Transfer line 온도 | 300°C |

**표 2.** Agilent 7250 QTOF 분석조건.

| 파라미터 | 값 |
|---|---|
| 분석 기기 | Agilent 7250 QTOF |
| 이온 소스 | 전자 이온화(EI) |
| 이온화 에너지 | 70eV(Standard EI) |
| 소스 온도 | 230°C |
| 사중극자 | 150°C, TTI모드 |
| 신호획득 속도 | 4Hz |
| 질량범위 | m/z 50-800 |

# 결과

## 표준물질을 이용한 PCDL 구축

각 화학물질 종류별로 표준물질을 분석한 크로마토그램은 아래 그림 2.와 같습니다. 이와 같이 표준물질을 분석한 데이터에서 각 성분 Peak의 스팩트럼을 확인하고, Mass Hunter PCDL Manager 소프트웨어를 이용하여 생성한 PCDL 파일에 각 성분들의 스팩트럼을 포함한 정보를 추가하여 그림 3.과 같이 라이브러리를 구축하였습니다.

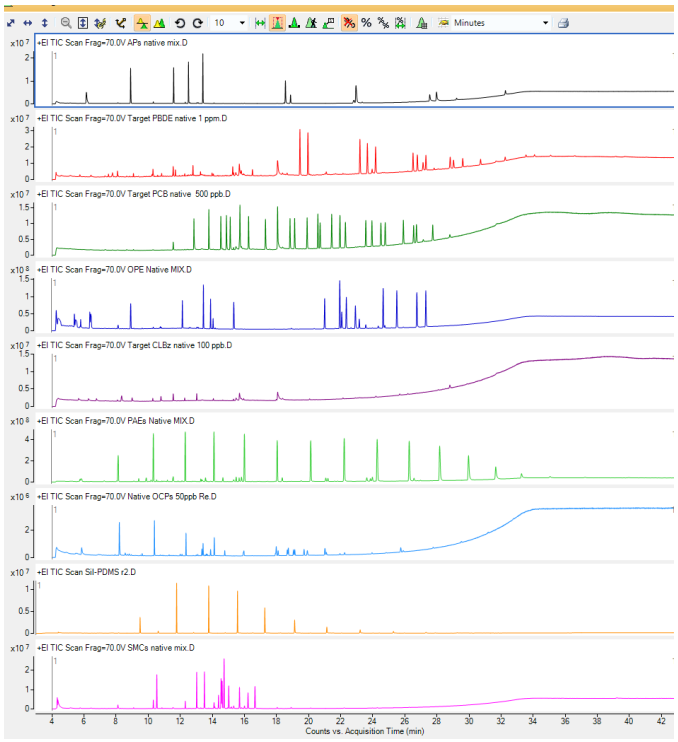


**그림 2.** POPs 및 신종오염물질들의 표준물질을 분석한 크로마토그램(TIC)

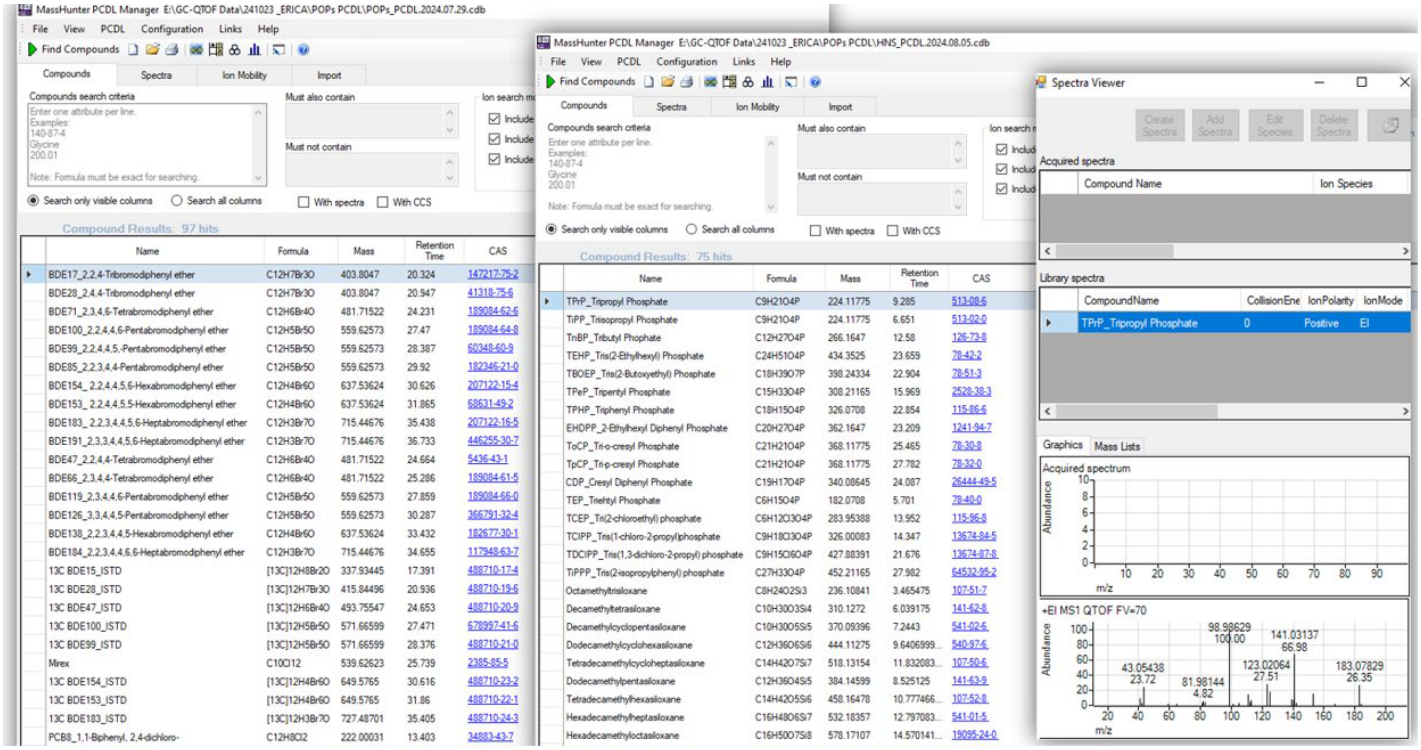


**그림 3.** 구축된 POPs 및 HNS PCDL.

잔류성유기오염물질(Persistent Organic Pollutants: POPs) 59개 성분과 신종오염물질로 위험·유해물질(Hazardous and Noxious Substances: HNS) 74개 성분 그리고 내부표준물질 39개를 포함하여 총 172개 성분의 PCDL을 구축하였습니다. 구축된 PCDL의 Compounds List는 다음의 표 3. 과 같습니다.

**표 3.** 구축된 PCDL의 Compounds List.

| No. | Compound Name | Formula | Mass | RT (min) | CAS | HMP | LMP |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | BDE28_2,4,4-Tribromodiphenyl ether | C12H7Br3O | 403.8047 | 20.947 | 41318-75-6 | PBDEs | BDE47 |
| 2 | BDE17_2,2,4-Tribromodiphenyl ether | C12H7Br3O | 403.8047 | 20.324 | 147217-75-2 | PBDEs | BDE17 |
| 3 | BDE71_2,3,4,6-Tetrabromodiphenyl ether | C12H6Br4O | 481.7152 | 24.231 | 189084-62-6 | PBDEs | BDE66 |
| 4 | BDE100_2,2,4,4,6-Pentabromodiphenyl ether | C12H5Br5O | 559.6257 | 27.470 | 189084-64-8 | PBDEs | BDE99 |
| 5 | BDE99_2,2,4,4,5,-Pentabromodiphenyl ether | C12H5Br5O | 559.6257 | 28.387 | 60348-60-9 | PBDEs | BDE119 |
| 6 | BDE85_2,2,3,4,4-Pentabromodiphenyl ether | C12H5Br5O | 559.6257 | 29.920 | 182346-21-0 | PBDEs | BDE154 |
| 7 | BDE154_ 2,2,4,4,5,6-Hexabromodiphenyl ether | C12H4Br6O | 637.5362 | 30.626 | 207122-15-4 | PBDEs | BDE85 |
| 8 | BDE153_ 2,2,4,4,5,5-Hexabromodiphenyl ether | C12H4Br6O | 637.5362 | 31.865 | 68631-49-2 | PBDEs | BDE126 |
| 9 | BDE183_ 2,2,3,4,4,5,6-Heptabromodiphenyl ether | C12H3Br7O | 715.4468 | 35.438 | 207122-16-5 | PBDEs | BDE191 |
| 10 | BDE191_2,3,3,4,4,5,6-Heptabromodiphenyl ether | C12H3Br7O | 715.4468 | 36.733 | 446255-30-7 | PBDEs | BDE153 |
| 11 | BDE47_2,2,4,4-Tetrabromodiphenyl ether | C12H6Br4O | 481.7152 | 24.664 | 5436-43-1 | PBDEs | BDE47 |
| 12 | BDE66_2,3,4,4-Tetrabromodiphenyl ether | C12H6Br4O | 481.7152 | 25.286 | 189084-61-5 | PBDEs | BDE191 |
| 13 | BDE119_2,3,4,4,6-Pentabromodiphenyl ether | C12H5Br5O | 559.6257 | 27.859 | 189084-66-0 | PBDEs | BDE191 |
| 14 | BDE126_3,3,4,4,5-Pentabromodiphenyl ether | C12H5Br5O | 559.6257 | 30.287 | 366791-32-4 | PBDEs | BDE126 |
| 15 | BDE138_2,2,3,4,4,5-Hexabromodiphenyl ether | C12H4Br6O | 637.5362 | 33.432 | 182677-30-1 | PBDEs | BDE138 |
| 16 | BDE184_2,2,3,4,4,6,6-Heptabromodiphenyl ether | C12H3Br7O | 715.4468 | 34.655 | 117948-63-7 | PBDEs | BDE184 |
| 17 | 13C BDE15_ISTD | [13C]12H8Br2O | 337.9345 | 17.391 | 488710-17-4 | PBDEs | 13C BDE15 |
| 18 | 13C BDE28_ISTD | [13C]12H7Br3O | 415.8450 | 20.936 | 488710-19-6 | PBDEs | 13C BDE28 |
| 19 | 13C BDE47_ISTD | [13C]12H6Br4O | 493.7555 | 24.653 | 488710-20-9 | PBDEs | 13C BDE47 |
| 20 | 13C BDE100_ISTD | [13C]12H5Br5O | 571.6660 | 27.471 | 678997-41-6 | PBDEs | 13C BDE100 |
| 21 | 13C BDE99_ISTD | [13C]12H5Br5O | 571.6660 | 28.376 | 488710-21-0 | PBDEs | 13C BDE99 |
| 22 | 13C BDE154_ISTD | [13C]12H4Br6O | 649.5765 | 30.616 | 488710-23-2 | PBDEs | 13C BDE154 |
| 23 | 13C BDE153_ISTD | [13C]12H4Br6O | 649.5765 | 31.860 | 488710-22-1 | PBDEs | 13C BDE153 |
| 24 | 13C BDE183_ISTD | [13C]12H3Br7O | 727.4870 | 35.405 | 488710-24-3 | PBDEs | 13C BDE183 |
| 25 | PCB8_1,1-Biphenyl, 2,4-dichloro- | C12H8Cl2 | 222.0003 | 13.403 | 34883-43-7 | PCBs | CB8 |
| 26 | PCB18_1,1-Biphenyl, 2,2,5-trichloro- | C12H7Cl3 | 255.9613 | 14.359 | 37680-65-2 | PCBs | CB18 |
| 27 | PCB29_1,1-Biphenyl, 2,4,5-trichloro- | C12H7Cl3 | 255.9613 | 15.143 | 15862-07-4 | PCBs | CB29 |
| 28 | PCB28_1,1-Biphenyl, 2,4,4-trichloro- | C12H7Cl3 | 255.9613 | 15.554 | 7012-37-5 | PCBs | CB28 |
| 29 | PCB33_1,1-Biphenyl, 2,3,4-trichloro- | C12H7Cl3 | 255.9613 | 15.759 | 38444-86-9 | PCBs | CB33 |
| 30 | PCB52_1,1-Biphenyl, 2,2,5,5-tetrachloro- | C12H6Cl4 | 289.9224 | 16.432 | 35693-99-3 | PCBs | CB52 |
| 31 | PCB44_1,1-Biphenyl, 2,2,3,5-tetrachloro- | C12H6Cl4 | 289.9224 | 16.954 | 41464-39-5 | PCBs | CB44 |
| 32 | PCB70_1,1-Biphenyl, 2,3,4,5-tetrachloro- | C12H6Cl4 | 289.9224 | 18.115 | 32598-11-1 | PCBs | CB70 |
| 33 | PCB101_1,1-Biphenyl, 2,2,4,5,5-pentachloro- | C12H5Cl5 | 323.8834 | 18.854 | 37680-73-2 | PCBs | CB101 |
| 34 | PCB87_1,1-Biphenyl, 2,2,3,4,5-pentachloro- | C12H5Cl5 | 323.8834 | 19.638 | 38380-02-8 | PCBs | CB87 |
| 35 | PCB110_1,1-Biphenyl, 2,3,3,4,6-pentachloro- | C12H5Cl5 | 323.8834 | 19.905 | 38380-03-9 | PCBs | CB110 |
| 36 | PCB118_1,1-Biphenyl, 2,3,4,4,5-pentachloro- | C12H5Cl5 | 323.8834 | 20.749 | 31508-00-6 | PCBs | CB118 |
| 37 | PCB153_1,1-Biphenyl, 2,2,4,4,5,5-hexachloro- | C12H4Cl6 | 357.8444 | 21.416 | 35065-27-1 | PCBs | CB153 |
| 38 | PCB105_1,1-Biphenyl, 2,3,3,4,4-pentachloro- | C12H5Cl5 | 323.8834 | 21.554 | 32598-14-4 | PCBs | CB105 |
| 39 | PCB138_1,1-Biphenyl, 2,2,3,4,4,5-hexachloro- | C12H4Cl6 | 357.8444 | 22.266 | 35065-28-2 | PCBs | CB138 |
| 40 | PCB187_1,1-Biphenyl, 2,2,3,4,5,5,6-heptachloro- | C12H3Cl7 | 391.8054 | 22.733 | 52663-68-0 | PCBs | CB187 |
| 41 | PCB128_1,1-Biphenyl, 2,2,3,3,4,4-hexachloro- | C12H4Cl6 | 357.8444 | 23.111 | 38380-07-3 | PCBs | CB128 |
| 42 | PCB180_1,1-Biphenyl, 2,2,3,4,4,5,5-heptachloro- | C12H3Cl7 | 391.8054 | 24.428 | 35065-29-3 | PCBs | CB180 |
| 43 | PCB200_1,1-Biphenyl, 2,3,6,2,3,4,5,6-octachloro- | C12H2Cl8 | 425.7665 | 24.778 | 52663-73-7 | PCBs | CB200 |

| No. | Compound Name | Formula | Mass | RT (min) | CAS | HMP | LMP |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 44 | PCB170_1,1-Biphenyl, 2,2,3,3,4,4,5-heptachloro- | C12H3Cl7 | 391.8054 | 25.333 | 35065-30-6 | PCBs | CB170 |
| 45 | PCB195_1,1-Biphenyl, 2,2,3,3,4,4,5,6-octachloro- | C12H2Cl8 | 425.7665 | 25.572 | 52663-78-2 | PCBs | CB195 |
| 46 | PCB194_1,1-Biphenyl, 2,2,3,3,4,4,5,5-octachloro- | C12H2Cl8 | 425.7665 | 26.717 | 35694-08-7 | PCBs | CB194 |
| 47 | PCB199_1,1-Biphenyl, 2,2,3,3,4,5,6,6-octachloro- | C12H2Cl8 | 425.7665 | 27.422 | 52663-75-9 | PCBs | CB199 |
| 48 | PCB205_1.1-Biphenyl, 2,3,3,4,4,5,5,6-octachloro- | C12H2Cl8 | 425.7665 | 27.539 | 74472-53-0 | PCBs | CB205 |
| 49 | PCB206_1,1-Biphenyl, 2,3,4,5,6,2,3,4,5-nonachloro- | C12HCl9 | 459.7275 | 28.562 | 40186-72-9 | PCBs | CB206 |
| 50 | 13C PCB28_ISTD | [13C]12H7Cl3 | 268.0016 | 15.548 | 208263-76-7 | PCBs | 13C CB28 |
| 51 | 13C PCB52_ISTD | [13C]12H6Cl4 | 301.9626 | 16.426 | 208263-80-3 | PCBs | 13C CB52 |
| 52 | 13C PCB118_ISTD | [13C]12H5Cl5 | 335.9237 | 20.744 | 104130-40-7 | PCBs | 13C CB118 |
| 53 | 13C PCB153_ISTD | [13C]12H4Cl6 | 369.8847 | 21.410 | 18537-58-3 | PCBs | 13C CB153 |
| 54 | 13C PCB202_ISTD | [13C]12H2Cl8 | 437.8067 | 23.711 | 105600-26-8 | PCBs | 13C CB202 |
| 55 | 13C PCB180_ISTD | [13C]12H3Cl7 | 403.8457 | 24.422 | 208263-72-3 | PCBs | 13C CB180 |
| 56 | 13C PCB206_ISTD | [13C]12HCl9 | 471.7678 | 28.556 | 208263-75-6 | PCBs | 13C CB206 |
| 57 | 13C PCB209_ISTD | [13C]12Cl10 | 505.7288 | 29.528 | 105600-27-9 | PCBs | 13C CB209 |
| 58 | 13C PCB77_SSTD | [13C]12H6Cl4 | 301.9626 | 19.988 | 32597-13-3 | PCBs | 13C CB77 |
| 59 | 13C PCB208_SSTD | [13C]12HCl9 | 471.7678 | 26.645 | 52663-77-1 | PCBs | 13C CB194 |
| 60 | 13C PCB194_SSTD | [13C]12H2Cl8 | 437.8067 | 27.411 | 35694-08-7 | PCBs | 13C CB208 |
| 61 | a-HCH_a-Lindane | C6H6Cl6 | 287.8601 | 13.348 | 319-84-6 | OCPs | a-HCH |
| 62 | HCB_Benzene, hexachloro- | C6Cl6 | 281.8131 | 13.414 | 118-74-1 | OCPs | HCB |
| 63 | Mirex | C10Cl12 | 539.6262 | 25.739 | 2385-85-5 | OCPs | |
| 64 | 13C BDE77_SSTD | [13C]12H6Br4O | 493.7555 | 26.197 | 1401355-55-2 | PBDEs | |
| 65 | 13C BDE169_SSTD | [13C]12H4Br6O | 649.5765 | 34.137 | 1401355-58-5 | PBDEs | |
| 66 | 13C trans-NonaCHL_ISTD | [13C]10H5Cl9 | 449.7923 | 19.130 | 1262969-06-1 | OCPs | |
| 67 | b-HCH_?Hexachlorocyclohexane | C6H6Cl6 | 287.8601 | 13.887 | 319-85-7 | OCPs | b-HCH |
| 68 | g-HCH_Lindane | C6H6Cl6 | 287.8601 | 14.109 | 58-89-9 | OCPs | g-HCH |
| 69 | d-HCH_d-Lindane | C6H6Cl6 | 287.8601 | 14.770 | 319-86-8 | OCPs | d-HCH |
| 70 | Heptachlor_3-Chlorochlordene | C10H5Cl7 | 369.8211 | 15.926 | 76-44-8 | OCPs | Heptachlor |
| 71 | Heptachlor-epoxide | C10H5Cl7O | 385.8160 | 17.982 | 1024-57-3 | OCPs | oxyCHL |
| 72 | transCHL_trans-Chlordane | C10H6Cl8 | 405.7978 | 18.671 | 5103-74-2 | OCPs | transCHL |
| 73 | op-DDE_o,p-DDE | C14H8Cl4 | 315.9380 | 18.732 | 3424-82-6 | OCPs | op-DDE |
| 74 | cisCHL_cis-Chlordane | C10H6Cl8 | 405.7978 | 19.049 | 5103-71-9 | OCPs | cisCHL |
| 75 | trans-NonaCHL_trans-Nonachlor | C10H5Cl9 | 439.7588 | 19.138 | 39765-80-5 | OCPs | trans-NonaCHL |
| 76 | pp-DDE_p,p-DDE | C14H8Cl4 | 315.9380 | 19.710 | 72-55-9 | OCPs | pp-DDE |
| 77 | op-DDD_mitotane | C14H10Cl4 | 317.9537 | 19.915 | 53-19-0 | OCPs | op-DDD |
| 78 | pp-DDD_1,1-Dichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)ethane | C14H10Cl4 | 317.9537 | 21.027 | 72-54-8 | OCPs | pp-DDD |
| 79 | cis-NonaCHL_cis-Nonachlor | C10H5Cl9 | 439.7588 | 21.010 | 5103-73-1 | OCPs | cis-NonaCHL |
| 80 | op-DDT_o,p-DDT | C14H9Cl5 | 351.9147 | 21.110 | 789-02-6 | OCPs | op-DDT |
| 81 | pp-DDT_p,p-DDT | C14H9Cl5 | 351.9147 | 22.244 | 50-29-3 | OCPs | pp-DDT |
| 82 | 13C a-HCH_ISTD | [13C]6H6Cl6 | 293.8802 | 13.340 | 222966-66-7 | OCPs | 13C a-HCH |
| 83 | 13C HCB_ISTD | [13C]6Cl6 | 287.8333 | 13.412 | 93952-14-8 | OCPs | 13C HCB |
| 84 | 13C b-HCH_ISTD | [13C]6H6Cl6 | 293.8802 | 13.879 | 222966-68-9 | OCPs | 13C b-HCH |
| 85 | 13C g-HCH_ISTD | [13C]6H6Cl6 | 293.8802 | 14.107 | 104215-85-2 | OCPs | 13C g-HCH |
| 86 | 13C d-HCH_ISTD | [13C]6H6Cl6 | 293.8802 | 14.763 | | OCPs | 13C d-HCH |
| 87 | 13C Heptachlor_ISTD | [13C]10H5Cl7 | 379.8546 | 15.918 | 2483736-02-1 | OCPs | 13C Heptachlor |

| No. | Compound Name | Formula | Mass | RT (min) | CAS | HMP | LMP |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 88 | 13C Heptachlor-epoxide_ISTD | [13C]10H5Cl7O | 395.8496 | 17.974 | 2483736-00-9 | OCPs | 13C OxyCHL |
| 89 | 13C transCHL_ISTD | [13C]10H6Cl8 | 415.8313 | 18.663 | 1262969-05-0 | OCPs | 13C transCHL |
| 90 | 13C op-DDE_ISTD | [13C]12C2H8Cl4 | 327.9783 | 18.724 | 2483735-97-1 | OCPs | 13C op-DDE |
| 91 | 13C pp-DDE_ISTD | [13C]12C2H5Cl9 | 499.7991 | 19.708 | 201612-50-2 | OCPs | 13C pp-DDE |
| 92 | 13C op-DDD_ISTD | [13C]12C2H10Cl4 | 329.9939 | 19.908 | 2483736-36-1 | OCPs | 13C op-DDD |
| 93 | 13C pp-DDD_ISTD | [13C]12C2H10Cl4 | 329.9939 | 21.019 |  | OCPs | 13C pp-DDD |
| 94 | 13C cisNonaCHL_ISTD | [13C]10H5Cl9 | 449.7924 | 21.002 | 2484171-06-2 | OCPs | 13C cisNonaCHL |
| 95 | 13C op-DDT_ISTD | [13C]12C2H9Cl5 | 363.9550 | 21.097 | 1396995-26-8 | OCPs | 13C op-DDT |
| 96 | 13C pp-DDT_ISTD | [13C]12C2H9Cl5 | 363.9550 | 22.236 | 104215-84-1 | OCPs | 13C pp-DDT |
| 97 | 13C BDE126_ISTD | [13C]12H5Br5O | 571.6660 | 30.282 | 1401355-56-3 | PBDEs |  |
| 98 | TPrP_Tripropyl Phosphate | C9H21O4P | 224.1177 | 9.285 | 513-08-6 | OPFRs | TPrP |
| 99 | TiPP_Triisopropyl Phosphate | C9H21O4P | 224.1177 | 6.651 | 513-02-0 | OPFRs | TiPP |
| 100 | TnBP_Tributyl Phophate | C12H27O4P | 266.1647 | 12.580 | 126-73-8 | OPFRs | TBP |
| 101 | TEHP_Tris(2-Ethylhexyl) Phosphate | C24H51O4P | 434.3525 | 23.659 | 78-42-2 | OPFRs | TEHP |
| 102 | TBOEP_Tris(2-Butoxyethyl) Phosphate | C18H39O7P | 398.2433 | 22.904 | 78-51-3 | OPFRs | TBOEP |
| 103 | TPeP_Tripentyl Phosphate | C15H33O4P | 308.2116 | 15.969 | 2528-38-3 | OPFRs | TPeP |
| 104 | TPHP_Triphenyl Phosphate | C18H15O4P | 326.0708 | 22.854 | 115-86-6 | OPFRs | TPHP |
| 105 | EHDPP_2-Ethylhexyl Diphenyl Phosphate | C20H27O4P | 362.1647 | 23.209 | 1241-94-7 | OPFRs | EHDPP |
| 106 | ToCP_Tri-o-cresyl Phosphate | C21H21O4P | 368.1177 | 25.465 | 78-30-8 | OPFRs | ToCP |
| 107 | TpCP_Tri-p-cresyl Phosphate | C21H21O4P | 368.1177 | 27.782 | 78-32-0 | OPFRs | TpCP |
| 108 | CDP_Cresyl Diphenyl Phosphate | C19H17O4P | 340.0864 | 24.087 | 26444-49-5 | OPFRs | CDP |
| 109 | TEP_Triehtyl Phosphate | C6H15O4P | 182.0708 | 5.701 | 78-40-0 | OPFRs | TEP |
| 110 | TCEP_Tri(2-chloroethyl) phosphate | C6H12Cl3O4P | 283.9539 | 13.952 | 115-96-8 | OPFRs | TCEP |
| 111 | TCIPP_Tris(1-chloro-2-propyl)phosphate | C9H18Cl3O4P | 326.0008 | 14.347 | 13674-84-5 | OPFRs | TCPP |
| 112 | TDCIPP_Tris(1,3-dichloro-2-propyl) phosphate | C9H15Cl6O4P | 427.8839 | 21.676 | 13674-87-8 | OPFRs | TDCPP |
| 113 | TiPPP_Tris(2-isopropylphenyl) phosphate | C27H33O4P | 452.2116 | 27.982 | 64532-95-2 | OPFRs | TiPPP |
| 114 | Octamethyltrisiloxane | C8H24O2Si3 | 236.1084 | 3.465 | 107-51-7 | Siloxanes | L3 |
| 115 | Decamethyltetrasiloxane | C10H30O3Si4 | 310.1272 | 6.039 | 141-62-8 | Siloxanes | L4 |
| 116 | Decamethylcyclopentasiloxane | C10H30O5Si5 | 370.0940 | 7.244 | 541-02-6 | Siloxanes | D5 |
| 117 | Dodecamethylcyclohexasiloxane | C12H36O6Si6 | 444.1127 | 9.641 | 540-97-6 | Siloxanes | D6 |
| 118 | Tetradecamethylcycloheptasiloxane | C14H42O7Si7 | 518.1315 | 11.832 | 107-50-6 | Siloxanes | D7 |
| 119 | Dodecamethylpentasiloxane | C12H36O4Si5 | 384.1460 | 8.525 | 141-63-9 | Siloxanes | L5 |
| 120 | Tetradecamethylhexasiloxane | C14H42O5Si6 | 458.1648 | 10.777 | 107-52-8 | Siloxanes | L6 |
| 121 | Hexadecamethylheptasiloxane | C16H48O6Si7 | 532.1836 | 12.797 | 541-01-5 | Siloxanes | L7 |
| 122 | Hexadecamethyloctasiloxane | C16H50O7Si8 | 578.1711 | 14.570 | 19095-24-0 | Siloxanes | L8 |
| 123 | Icosamethylnonsiloxane | C20H60O8Si9 | 680.2212 | 16.266 |  | Siloxanes | L9 |
| 124 | Docosamethyldecasiloxane | C22H66O9Si10 | 754.2399 | 18.130 |  | Siloxanes | L10 |
| 125 | Tetracosamethyllundesiloxane | C24H72O10Si11 | 828.2587 | 20.133 |  | Siloxanes | L11 |
| 126 | Hexacosamethyldodecasiloxane | C26H78O11Si12 | 902.2775 | 22.219 |  | Siloxanes | L12 |
| 127 | Octacosamethyltridecasiloxane | C28H84O12Si13 | 976.2963 | 24.286 |  | Siloxanes | L13 |
| 128 | Tricontamethyltetradecasiloxane | C30H90O13Si14 | 1050.3151 | 26.306 |  | Siloxanes | L14 |
| 129 | Dotricontamethylpentadecasiloxane | C32H96O14Si15 | 1124.3339 | 28.256 |  | Siloxanes | L15 |
| 130 | TXIB_.2,2,4-Trimethylpentanediol-1,3-diisobutyrate | C16H30O4 | 286.2144 | 11.988 | 6846-50-0 | APs | TXIB |

| No. | Compound Name | Formula | Mass | RT (min) | CAS | HMP | LMP |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 131 | DMP_Dimethyl phthalate | C10H10O4 | 194.0579 | 10.281 | 131-11-3 | PAE | DMP |
| 132 | DEP_Diethyl Phthalate | C12H14O4 | 222.0892 | 11.986 | 84-66-2 | PAE | DEP |
| 133 | DAP_Diallyl phthalate | C14H14O4 | 246.0892 | 13.764 | 131-17-9 | PAE | DAIP |
| 134 | DiPrP_Diisopropyl phthalate | C14H18O4 | 250.1205 | 12.703 | 605-45-8 | PAE | DiPrP |
| 135 | DnPrP_Di-n-propyl phthalate | C14H18O4 | 250.1205 | 14.081 | 131-16-8 | PAE | DnPrP |
| 136 | DiBP_Diisobutyl phthalate | C16H22O4 | 278.1518 | 15.226 | 84-69-5 | PAE | DiBP |
| 137 | DnBP_Di-n-butyl phthalate | C16H22O4 | 278.1518 | 16.476 | 84-74-2 | PAE | DnBP |
| 138 | DnPeP_Di-n-pentyl phthalate | C18H26O4 | 306.1831 | 19.154 | 131-18-0 | PAE | DnPeP |
| 139 | BBzP_Benzyl butyl phthalate | C19H20O4 | 312.1362 | 22.105 | 85-68-7 | PAE | BBzP |
| 140 | DCHP_Dicyclohexyl phthalate | C20H26O4 | 330.1831 | 24.583 | 84-61-7 | PAE | DCHP |
| 141 | DnHxP_Di-n-Hexyl phthalate | C20H30O4 | 334.2144 | 21.988 | 84-75-3 | PAE | DnHxP |
| 142 | DiHpP_Di-iso-heptyl phthalate | C22H34O4 | 362.2457 | 24.850 | 41451-28-9 | PAE | DiHpP |
| 143 | DEHP_Bis(2-ethylhexyl) phthalate | C24H38O4 | 390.2770 | 24.838 | 117-81-7 | PAE | DEHP |
| 144 | DnOP_Dioctyl phthalate | C24H38O4 | 390.2770 | 27.645 | 117-84-0 | PAE | DnOP |
| 145 | DEA_Diethyl adipate | C10H18O4 | 202.1205 | 9.359 | 141-28-6 | APs | DEA |
| 146 | DES_Diethyl succinate | C8H14O4 | 174.0892 | 6.531 | 123-25-1 | APs | DES |
| 147 | DIBA_Diisobutyl adipate | C14H26O4 | 258.1831 | 13.038 | 141-04-8 | APs | DIBA |
| 148 | DBA_Dibutyl adipate | C14H26O4 | 258.1831 | 13.993 | 105-99-7 | APs | DBA |
| 149 | DBS_Dibutyl sebacate | C18H34O4 | 314.2457 | 19.478 | 109-43-3 | APs | DBS |
| 150 | TBC_Tributyl citrate | C18H32O7 | 360.2148 | 19.667 | 77-94-1 | APs | TBC |
| 151 | DEGDB_Diethylene glycol dibenzoate | C18H18O5 | 314.1154 | 24.023 | 120-55-8 | APs | DEGDB |
| 152 | DPGDB_Dipropylene glycol dibenzoate | C20H22O5 | 342.1467 | 23.812 | 27138-31-4 | APs | DPGDB |
| 153 | DEHS_Bis(2-ethylhexyl) sebacate | C26H50O4 | 426.3709 | 28.618 | 122-62-3 | APs | DOS |
| 154 | DPHP_Bis(2-propylheptyl) phthalate | C28H46O4 | 446.3396 | 28.901 | 53306-54-0 | APs | DEHP |
| 155 | THC_Trihexyl citrate | C28H50O8 | 514.3506 | 30.179 | 82469-79-2 | APs | THC |
| 156 | THTM_Tri-n-hexyl trimellitate | C27H42O6 | 462.2981 | 33.424 | 1528-49-0 | APs | THTM |
| 157 | ecoDEHCH_1,4-Cyclohexanedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester | C24H44O4 | 396.3240 | 25.695 | 84731-70-4 | APs | |
| 158 | TmCP_Tri-m-cresyl Phosphate | C21H21O4P | 368.1177 | 26.460 | 563-04-2 | OPFRs | |
| 159 | TOTM_tri(2-ethylhexyl) trimellitate | C33H54O6 | 546.3920 | 37.642 | 3319-31-1 | APs | |
| 160 | DEHTP_1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester | C24H38O4 | 390.2770 | 27.823 | 6422-86-2 | APs | |
| 161 | DEHA_Bis(2-ethylhexyl) adipate | C22H42O4 | 370.3083 | 22.745 | 103-23-1 | APs | |
| 162 | ATBC_Acetyl tributyl citrate | C20H34O8 | 402.2254 | 20.611 | 77-90-7 | APs | |
| 163 | Galaxolide HHCB | C18H26O | 258.1984 | 14.684 | 1222-05-5 | SMCs | |
| 164 | Tonalid AHTN | C18H26O | 258.1984 | 14.767 | 21145-77-7 | SMCs | |
| 165 | Msuk Ketone | C14H18N2O5 | 294.1216 | 16.201 | 81-14-1 | SMCs | |
| 166 | TCEPi_Tri(2-chloroethyl) phosphite | C6H12Cl3O3P | 267.9590 | 12.202 | 140-08-9 | OPAs | |
| 167 | T24DtBPPi_Tris(2,4-di-tert-butylphenyl) phosphite | C42H63O3P | 646.4515 | 37.012 | 31570-04-4 | OPAs | |
| 168 | TPHPi_Triphenyl Phosphite | C18H15O3P | 310.0759 | 20.895 | 101-02-0 | OPAs | |
| 169 | T24DtBPP_Tris(2,4-di-tert-butylphenyl) phosphate | C42H63O4P | 662.4464 | 40.830 | 95906-11-9 | OPFRs | |
| 170 | 13C TBOEP_ISTD | [13C]2C16H39O7P | 400.2500 | 22.902 | | OPFRs | |
| 171 | 2IPPDPP_2-Isopropylphenyl diphenyl phosphate | C21H21O4P | 368.1177 | 24.738 | 64532-94-1 | OPFRs | |
| 172 | ToCPi_Tris(2-tolyl)phosphite | C21H21O3P | 352.1228 | 23.553 | 2622-08-04 | OPAs | |

## 모니터링 사례

환경오염물질 모니터링에 사용된 시료는 러시아 표트르 대제만에 서식하는 점박이물범 시료로 약 0.5g의 지방 시료를 전처리 한 후 7250 GC-QTOF로 PCDL 구축 시 기기분석 조건과 동일한 조건으로 분석하였습니다.

Mass Hunter의 Unknowns analysis를 활용하여 SureMass(고분해능 질량 스팩트럼의 Deconvolution)를 통해 Peak를 검출하고, 구축된 POPs 및 HNS PCDL(라이브러리)로 검색하였습니다. 그림 4.와 같이 러시아 물범 시료의 데이터를 프로세싱 결과 DEHP, DDE, PCBs 등의 검출을 확인할 수 있었습니다.

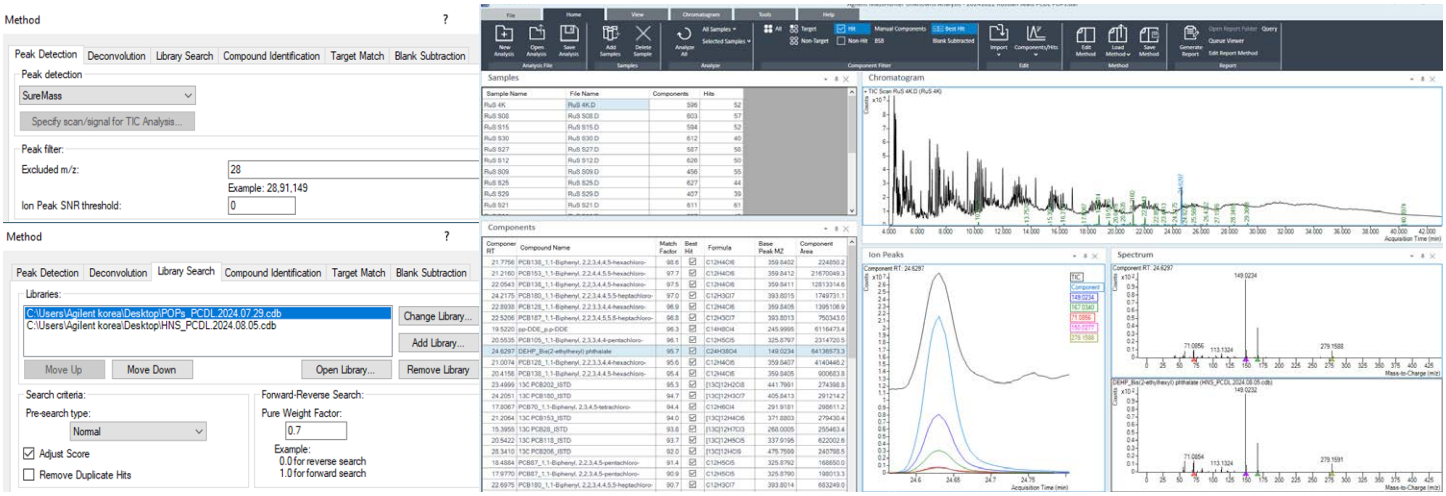


**그림 4.** 러시아 물범 시료의 POPs 및 HNS 모니터링 결과

참고로 PCDL 구축 시 머무름 시간(RT: Retention Time) 정보도 포함하여 구축하였으므로 시료 분석 시 기기분석 조건을 동일하게 분석하면 라이브러리 매칭에 머무름 시간도 Match factor로 사용할 수 있습니다.

아래의 그림 5.와 같이 Unknowns analysis의 Library Search 파라미터에 RT Match를 사용하여 위의 데이터를 다시 프로세싱한 결과 검출(Hit)되는 성분 수가 적어졌습니다.

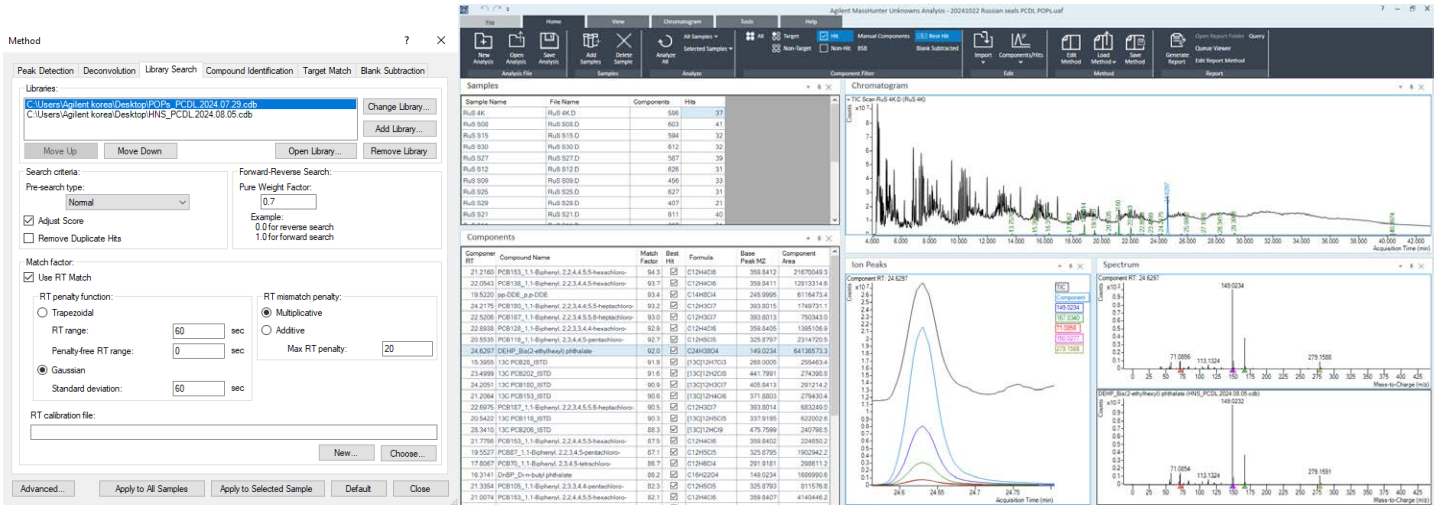


**그림 5.** 라이브러리 RT Match를 사용한 러시아 물범 시료의 POPs 및 HNS 모니터링 결과

## 결론 및 고찰

POPs 및 신종오염물질들에 대해 환경오염 저감을 위한 규제와 관리 그리고 새로운 오염물질을 식별하기 위한 모니터링이 지속적으로 필요 합니다. 이에 Agilent 7250 GC-QTOF를 이용하여 잔류성유기오염물질(POPs) 59개 성분과 신종오염물질로 위험·유해물질(HNS) 74개 성분 그리고 내부표준물질 39개를 포함하여 총 172개 성분의 PCDL을 구축하였습니다. 환경오염물질 모니터링 사례로 러시아 물범 시료를 분석하고, 구축된 POPs 및 HNS PCDL(라이브러리)로 Searching한 결과 DEHP, DDE, PCBs 등의 검출을 확인할 수 있었습니다. 신종오염물질들에 대해서도 PCDL에 추가 구축이 가능하고, 이와 같이 구축된 PCDL은 환경오염 모니터링 방법으로 매우 유용하게 활용될 수 있습니다.

## 참고 문헌


1. Sunggyu Lee, Kitae Kimb, Junho Jeon, Hyo-Bang Moon. Optimization of suspect and non-target analytical methods using GC/TOF for prioritization of emerging contaminants in the Arctic environment. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2019.
2. Junghyun Lee, Seongjin Hong, Taewoo Kim, Changkeun Lee, Seong-Ah An, Bong-Oh Kwon, Sunggyu Lee, Hyo-Bang Moon, John P. Giesy, Jong Seong Khim. Multiple Bioassays and Targeted and Nontargeted Analyses to Characterize Potential Toxicological Effects Associated with Sediments of Masan Bay: Focusing on AhR-Mediated Potency. *Environmental Science & Technology*, 2020.
3. Seong-Ah An, Seongjin Hong, Junghyun Lee, Jihyun Cha, Sunggyu Lee, Hyo-Bang Moon, John P. Giesy, Jong Seong Khim. Identification of potential toxicants in sediments from an industrialized area in Pohang, South Korea: Application of a cell viability assay of microalgae using flow cytometry. *Journal of Hazardous Materials*, 2020.
4. Junghyun Lee, Seongjin Hong, Taewoo Kim, Shin Yeong Park, Jihyun Cha, Youngnam Kim, Jiyun Gwak, Sunggyu Lee, Hyo-Bang Moon, Wenyou Hu, Tieyu Wang, John P. Giesy, Jong Seong Khim. Identification of AhR agonists in sediments of the Bohai and Yellow Seas using advanced effect-directed analysis and in silico prediction. *Journal of Hazardous Materials*, 2022.
5. Jiyun Gwak, Jihyun Cha, Junghyun Lee, Youngnam Kim, Seong-Ah An, Sunggyu Lee, Hyo-Bang Moon, Jin Hur, John P. Giesy, Seongjin Hong, Jong Seong Khim. Effect-directed identification of novel aryl hydrocarbon receptor-active aromatic compounds in coastal sediments collected from a highly industrialized area. *Science of the Total Environment*, 2022.·
6. Sori Mok, Sunggyu Lee, Younghun Choi, Junho Jeon, Young Hee Kim, HyoBang Moon. Target and non-target analyses of neutral per- and polyfluoroalkyl substances from fluorochemical industries using GC-MS/MS and GC-TOF: Insights on their environmental fate. *Environment Internationals*, 2023.
7. Sofia Nieto and Kai Chen. 고분해능 GC/Q-TOF를 이용한 지표수의 환경 오염물질에 대한 포괄적인 프로파일링. *Agilent Technologies 응용 자료, 5994-1371KO*, 2019.

www.agilent.com/chem

DE-002334

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

©Agilent Technologies, Inc.2024
2024년 10월 31일, 한국에서 발행
5994-7950KOKR

한국애질런트테크놀로지스㈜
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
DF타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com

Agilent
Trusted Answers