

## 사고대비물질 현장 탐지 · 분석에 관한 연구

노혜란<sup>†</sup> · 이진선 · 김정민 · 김기준 · 석광설

국립환경과학원 화학물질연구과

### A Study on the On-site Detection and Analysis for Accident Preparedness Substances

Hyeran Noh<sup>†</sup>, Jinseon Lee, Jungmin Kim, Kijoon Kim, and Kwangseol Seok

Chemicals Research Division, National Institute of Environmental Research, Environmental Research Complex, Incheon 404-708, Korea

Received February 27, 2012/Accepted March 24, 2012

Sixty nine chemicals that have high probability of chemical accidents are designated as the substances requiring preparedness for accidents and managed for public health protection under the Toxic Chemicals Control Act. When a chemical accident or chemical terror is occurred, the exact detection and analysis of the chemicals is rapidly required for acquiring the qualitative information. In this study, the substances requiring preparation for accidents were detected and analyzed to establish stage of detection and analytical method using portable GC/MS (Gas Chromatograph-Mass Spectrometer), portable FT-IR (Fourier Transform Infrared spectrometer) and portable XRD (X-Ray Diffractometer). Volatile organic chemicals and organic gases were analyzed by GC/MS and solids having crystal structure were analyzed by XRD. Organic, inorganic liquids and solids were analyzed by portable FT-IR. Therefore, twenty four chemicals were analyzed by portable GC/MS and forty eight chemicals were analyzed by portable FT-IR. Also eleven chemicals were analyzed by portable XRD. Sixty nine chemicals were classified according to their physicochemical properties. As a result, an on-site library containing the spectra generated by the above mentioned portable analysis equipments was constructed for early detection and characterization of chemical agents.

**Key words:** accident preparedness substances, portable GC/MS, portable XRD, portable FT-IR

## 1. 서 론

화학물질의 제조, 사용, 운반과정 등에서 화학물질사고가 빈번하게 발생되어 많은 인명피해가 일어나고 있으며, 2001년 미국 9.11 테러 이후 국내에서도 화학물질 테러발생 가능성에 대한 사회적인 우려도 가중되고 있는 상황이다. 이에 유해화학물질관리법에서는 화학물질 중 사고·테러 발생에 대비하여 급성독성·폭발성 등이 강하여 사고발생 가능성이 높거나 사고가 발생한 경우에 그 피해 규모가 클 것으로 우려되는 화학물질 69종을 사고대비물질로 지정하여 관리하고 있다<sup>1)</sup>. 이러

한 사고대비물질이 급속히 확산된다면 소량으로도 인체에 치명적인 영향을 미치고 대규모 피해를 발생시킬 가능성이 크다<sup>2)</sup>. 실제로 2005년에는 전북 전주시에서 재활용 선별작업 중 안전관리 미흡으로 유독물질 용기가 깨져 독성가스 누출로 인해 17명이 중독되는 사건이 발생하였고, 2006년에는 경기도 시흥에서 화학물질 혼합으로 인해 생성된 독성가스로 인하여 근로자 72명이 중독되는 사고가 발생하였다.

이와 같이, 화학사고가 발생하면 현장에서 신속·정확하게 사건원인물질을 확인하여 물질 특성에 맞게 대처하는 것이 중요하다. 이에, 국내·외 화학사고·테

<sup>†</sup>To whom correspondence should be addressed.

Tel: +82-(0)32-560-7240, Fax: +82-(0)32-568-2040, E-mail: anran1@korea.kr

러 대응기관에서는 다양한 기술을 적용한 탐지분석 장비를 활용하고 있다<sup>3-5)</sup>. 휘발성유기화합물(Volatile Organic Compounds: VOC)의 정성적인 정보를 얻기 위해서 GC/MS(Gas Chromatograph-Mass Spectrometer)가 사용된다. MS 검출방식은 화학물질의 고유한 분해 패턴에 의해서 물질의 정성확인이 가능한 방식으로 미지물질의 정성확인 방법에 유용하게 사용될 수 있다. 이러한 특성 때문에 많은 연구자들은 화학물질 사고나 테러 물질의 정성 분석 연구에 GC/MS 분석장비를 적용하였다<sup>6-8)</sup>. FT-IR(Fourier Transform Infrared Spectrometer) 분광계는 시료에 적외선을 흡수시키거나 투과시켜 정성·정량분석을 수행하는 장비로 IR 스펙트럼으로부터 특정 작용기의 흡수띠 정보를 얻음으로써 해당 분자의 구조적인 정보를 얻는데 유용하다. 특히, 휴대용 FT-IR은 현장에서 바로 측정가능함으로 상업적으로 다양하게 이용될 뿐 아니라 화학작용제 탐지 장비로 이용된다<sup>9,10)</sup>. XRD(X-Ray Diffractometer)는 고체 시료를 대상으로 X선 회절현상을 이용하여 분자의 결정적인 구조를 밝히는데 유용한 장비로<sup>11)</sup> X선 기술은 폭발물류와 마약류 탐지에 넓게 이용되며 과산화물 폭발물류인 TATP(Triacetone triperoxide)결정을 확인하는데 XRD가 이용되고 있다<sup>12,13)</sup>.

국내에서도 화학사고·테러 현장에서 휴대용 장비를 사용하고 있지만, 분석방법에 대한 정립이 미흡한 실정이다. 특히, 휴대용 XRD은 2011년에 국내 최초로 도

입된 장비로서 사고대비물질에 대한 탐지·분석방법 정립에 대한 기초적인 연구가 더욱 필요하다.

따라서 본 연구에서는 화학사고·테러 현장에서의 사건원인물질을 신속·정확하게 규명하고 초기대응자들이 즉각적으로 활용할 수 있도록 사고·테러 개연성이 높은 사고대비물질에 대하여 휴대용 GC/MS, 휴대용 FT-IR과 휴대용 XRD의 현장 적용성을 검증하고 탐지·분석방법에 관한 연구를 수행하였다.

## 2. 재료 및 방법




### 2.1. 연구대상물질

본 연구에서는 유해화학물질관리법에 사고대비물질로 지정된 69종 중 미확보 물질 7종(Methyl hydrazine, Arsine, Chlorine dioxide, Sodium, Diborane, Cyanogen chloride, O-Isopropyl methyl phosphonofluoridate)을 제외하고 62종을 대상으로 Sigma, Junsei, Kanto와 Wako 제조사의 고순도 시약을 확보하여 실험하였다.

### 2.2. 현장분석장비

본 연구에서는 국내·외적으로 화학사고·테러 현장에서 사건원인물질을 분석하고 있는 휴대용 GC/MS, 휴대용 FT-IR과 휴대용 XRD 장비를 이용하였다. 분석대상물질 성상에 따라 적용 가능한 분석 장비들이 상

Table 1. On-site analytical equipments

Portable GC/MS	Portable FT-IR	Portable XRD
<ul style="list-style-type: none"> <li>▶ Equipment</li> <li>- Hapsite Smartplus</li> <li>▶ Manufacturer</li> <li>- Inficon</li> <li>▶ Analysis range</li> <li>- 45~300 amu.</li> <li>- below B.P. 250°C</li> <li>- C<sub>1</sub>~C<sub>12</sub></li> <li>- pH 1~10</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▶ Equipment : Exoscan</li> <li>▶ Manufacturer</li> <li>- A2 Technologies</li> <li>▶ Range : 4000cm<sup>-1</sup>~650cm<sup>-1</sup></li> <li>▶ Response time : 1min</li> <li>▶ Beam splitter</li> <li>- Zinc Selenide</li> <li>▶ detector : dTGS</li> <li>▶ interferometer Geometry</li> <li>- High throughput Michelson interferometer with fixed and moving flat mirrors</li> <li>▶ Sample Interface</li> <li>- Single bounce diamond ATR</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▶ Equipment : Terra 250</li> <li>▶ Manufacturer</li> <li>- Olympus Innov-X</li> <li>▶ Resolution : 0.25° 2θ FWHM</li> <li>▶ Range : 5°~55° 2θ</li> <li>▶ Response time : 15min</li> </ul>
		

이하므로 우선 분석 장비별 특성 및 적용 분석범위를 조사하였고, 현장 분석 장비특성 및 분석범위는 Table 1에 나타내었다.

### 2.2.1. 휴대용 GC/MS

#### 2.2.1.1. 표준가스 조제

초기상태 농도를 수백 ppm의 고농도로 조제하여 실험에 적용하기 위하여 1L 테들러 백(Supelco co., German)에 초순수 질소를 수백 mL 충전한 후, 표준용액 수  $\mu\text{L}$ 를 마이크로시린지를 이용하여 테들러 백에 직접 주입하고 70°C의 온도에서 가열을 통해 기화시켜 사용하였다.

#### 2.2.1.2. 분석장비 및 조건

본 실험에서는 HAPSITE(Inficon co., U.S.A.) 휴대용 GC/MS를 이용하였다. 분석대상 표준가스를 채운 테들러 백을 기기의 air probe에 직접 연결하여 GC에 주입하였고 scan 모드의 질량범위는 45~300 amu이었다. probe 온도는 30°C이었으며, 오븐(컬럼) 온도 50°C에서 5분간 유지시켜 주었으며 1분당 5°C씩 100°C까지 상승시킨 후 1분당 15°C씩 200°C까지 상승시켜 전체 분석시간은 20분이었다. 이때 운반기체는 질소를 사용하였으며 내부표준가스로 1,3,5-Tris(trifluoromethyl) benzene, Bromopentafluoro benzene를 이용하였다. 컬럼은 SPB-1로 길이가 30 m, 내경이 0.32 mm, 두께가 1  $\mu\text{m}$ 였다. GC/MS의 작동 조건은 Table 2에 나타내었다.

#### 2.2.2. 휴대용 FT-IR

본 실험에서는 Exoscan(A2 Technologies, U.S.A.) 휴대용 FT-IR를 사용하여 액상과 고상의 사고대비물질

을 분석하였고, 분석 파수범위는 650~4000  $\text{cm}^{-1}$ 였다. 물질을 분석하기 전에 기기의 docking system을 이용하여 바탕선을 조정하고 고체물질일 경우 막자사발을 이용하여 분쇄하여 분석하였고, 액체물질인 경우 피펫과 오링을 이용하여 분석하는 약 30초 동안 sample probe interface에 물질이 잘 접촉하도록 고정시켰다.

### 2.2.3. 휴대용 XRD

본 실험에서는 TERRA(Olympus Innov-X co., U.S.A.) 휴대용 XRD를 이용하였다. Angle range는 5°~55°, X-ray target material은 Cu를 이용하였다. 분석대상물질은 막자사발을 이용하여 분쇄하고, 150  $\mu\text{m}$  거름망에 거른 후 기기 전용 약수저와 진동기를 이용하여 물질을 챔버에 넣고 10초당 1회 분석되는 X-ray 회절을 이용하여 약 150회 분석, 결정 구조와 원소를 분석하였다.

## 3. 결과 및 고찰

본 연구에서는 현장 분석방법으로서 휴대용 GC/MS, 휴대용 FT-IR, 휴대용 XRD를 이용하여 사고대비물질을 분석하였으며 그 결과를 토대로 화학물질의 물리화학적 특성에 따라 적용 가능한 분석장비를 Table 3과 같이 분류할 수 있었다<sup>14)</sup>. 가스상 물질인 경우는 휴대용 GC/MS로 현장분석이 가능하였으며 액상의 휘발성 물질인 경우는 휴대용 GC/MS로 분석하고 액상 및 고상물질은 휴대용 FT-IR로서, 고상물질 중 결정구조를 가지는 물질은 휴대용 XRD로 정성 분석하여 현장 라이브러리를 구축하였다. 특히, 휴대용 FT-IR과 휴대용 XRD의 경우에는 사용자 라이브러리를 구축하여 장비에 탑재된 라이브러리를 이용하여 정성분석할 수 있는 물질보다 더 많은 물질들을 정성분석에 이용할 수 있었다. 본 연구에서 사용된 휴대용 장비로 적용할 수 없는 Hydrogen cyanide 등의 화학물질들은 검지관 탐지 장비(Kitagawa, Drager), 전자식 탐지장비(Chempro 100i) 등의 장비를 이용하여 화학사고 · 테러 발생 시 현장에서 탐지가능하며,<sup>15)</sup> 실제 화학사고 · 테러 발생 시 사건원인물질을 확인하는 데에는 다양한 현장 탐지 · 분석 장비를 이용한 교차분석을 통해 정확한 사건원인물질을 확인하는 것이 중요하다.

### 3.1. 휴대용 GC/MS

사고대비물질로 인한 사고 발생 시 휴대용 GC/MS를

**Table 2.** Analytical parameters of portable GC/MS

Parameters	Conditions		
Column	SPB-1 (30 m×0.32 mm×1 $\mu\text{m}$ )		
Carrier gas	$\text{N}_2$ (1.0 mL/min)		
Sample input device	probe		
Temperature information			
- Probe temperature	30°C		
- Oven temperature	Rate (°C/min)	Temp. (°C)	Time (min)
	5	100	0
	15	200	0

**Table 3.** Analysis equipments for the substances requiring preparation for accidents

No.	Chemical substances	Formular	M.W.	B.P.	portable GC/MS	portable FT-IR	portable XRD
1	Formaldehyde	CH <sub>2</sub> O	30.03	-19.5	×	○	×
2	Methyl hydrazine	CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	46.07	87.5	-	-	-
3	Methanol	CH <sub>4</sub> O	32.04	64.7	×	○	×
4	Benzene	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	78.11	80.1	○	○	×
5	Methyl chloride	CH <sub>3</sub> Cl	50.49	-23.7	○	×	×
6	Hydrogen cyanide	HCN	27.03	25.6	×	×	×
7	Vinyl chloride	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl	62.5	-13	○	×	×
8	Carbon disulfide	CS <sub>2</sub>	76.14	46.5	○	○	×
9	Ethylene oxide	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	44.1	10.7	×	×	×
10	Phosgene	COCl <sub>2</sub>	98.92	8.2	×	×	×
11	Propylene oxide	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	58.08	34.23	○	○	×
12	Methyl ethyl ketone	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	72.11	79.6	○	○	×
13	Methyl vinyl ketone	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O	70.1	81.4	○	○	×
14	Nitrobenzene	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	123.11	211	○	○	×
15	p-Nitrotoluene	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	137.14	238	×	○	○
16	Acrolein	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O	56.06	52.5	○	○	×
17	Acrylonitrile	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N	53.06	77.3	○	○	×
18	Allyl alcohol	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	58.08	96~97	○	○	×
19	m-Cresol	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O	108.14	202	×	○	×
20	Toluene	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	92.14	110.6	○	○	×
21	Phenol	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O	94.11	181.8	×	○	×
22	Ethyl acetate	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	88.11	77	○	○	×
23	Sodium cyanide	NaCN	49.01	1,496	×	○	○
24	Zinc phosphide	Zn <sub>3</sub> P <sub>2</sub>	258.12	1,100	×	○	○
25	Isophorone diisocyanate	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	222.32	158	×	○	×
26	Sodium	Na	22.99	881.4	-	-	-
27	Hydrogen chloride	HCl	36.5	108.58	×	○	×
28	Hydrogen fluoride	HF	20.01	19~20	×	○	×
29	Ammonia	NH <sub>3</sub>	17.03	-33.4	×	×	×
30	Sulfuric acid	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	98.08	290	×	○	×
31	Nitric acid	HNO <sub>3</sub>	63.01	83	×	○	×
32	Phosphorus trichloride	PCl <sub>3</sub>	137.35	76.1	○	○	×
33	Arsine	AsH <sub>3</sub>	77.95	-62.5	-	-	-
34	Chloro sulfonic acid	HSO <sub>3</sub> Cl	116.53	151	×	○	×
35	Phosphine	PH <sub>3</sub>	34	-87.7	×	×	×
36	Phosphorus oxychloride	POCl <sub>3</sub>	153.33	105.8	○	○	×
37	Formic acid	CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	46.02	100.8	○	○	×
38	Methylamine	CH <sub>5</sub> N	31.06	-6.3	×	×	×
39	Trimethylamine	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N	59.11	2.8	×	×	×
40	Acrylic acid	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	72.06	141	○	○	×
41	Methyl acrylate	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	86.09	80.5	○	○	×
42	Benzyl chloride	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> Cl	126.9	179	○	○	×
43	Allyl chloride	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> Cl	76.53	45	○	○	×
44	Ethylene diamine	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	60.1	116	×	○	×
45	n-Butylamine	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N	73.14	78	○	○	×
46	Triethylamine	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N	101.19	89.3	○	○	×
47	Ethylenimine	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N	43.08	55~56	×	×	×
48	Toluene-2,4-diisocyanate	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	174.16	251	×	○	×

Table 3. Continued

No.	Chemical substances	Formular	M.W.	B.P.	portable GC/MS	portable FT-IR	portable XRD
49	Carbon monoxide	CO	28.01	-191.5	×	×	×
50	Acrylyl chloride	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> ClO	90.5	75	○	○	×
51	Methyl ethyl ketone peroxide	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O <sub>6</sub>	210.22	19	×	○	×
52	Fluorine	F <sub>2</sub>	37.997	-188.13	×	×	×
53	Chlorine	Cl <sub>2</sub>	70.9	-34.04	×	×	×
54	Hydrogen sulfide	H <sub>2</sub> S	34.08	-60.33	×	○	×
55	Chlorine dioxide	ClO <sub>2</sub>	67.45	11	-	-	-
56	Diborane	B <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	27.69	-92.5	-	-	-
57	Nitric oxide	NO	30.006	-151.74	×	×	×
58	O-Isopropylmethyl phosphonofluoridate	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> FO <sub>2</sub> P	140.11	147	-	-	-
59	Cyanogen chloride	CClN	61.47	13	-	-	-
60	Nitromethane	CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	61.04	101.1	○	○	×
61	Ammonium nitrate	NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	80.06	200~260	×	○	○
62	Hexamine	(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	140.19	263	×	○	○
63	Hydrogen peroxide	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	34.02	152	×	○	×
64	Potassium chlorate	KClO <sub>3</sub>	122.55	400	×	○	○
65	Potassium nitrate	KNO <sub>3</sub>	101.11	400	×	○	○
66	Potassium perchlorate	KClO <sub>4</sub>	138.55	-	×	○	○
67	Potassium permanganate	KMnO <sub>4</sub>	158.04	-	×	○	○
68	Sodium chlorate	NaClO <sub>3</sub>	106.44	106	×	○	○
69	Sodium nitrate	NaNO <sub>3</sub>	85.01	380	×	○	○

이용하여 20분 이내에 사고물질을 확인할 수 있는 분석조건을 정립하였다. Propylene oxide, Acrolein 등 분자량이 작고 증기압이 큰 물질들은 머무름시간 (Retention Time, RT)이 3분 이내로 신속한 물질 확인이 가능하였고 분자량이 크고 증기압이 작은 Nitrobenzene, Benzyl chloride는 15분 이상의 RT를 얻었다. 휴대용 GC/MS를 이용하여 분석된 24종에 대한 RT를 Table 4에 나타내었다.

### 3.2. 휴대용 FT-IR

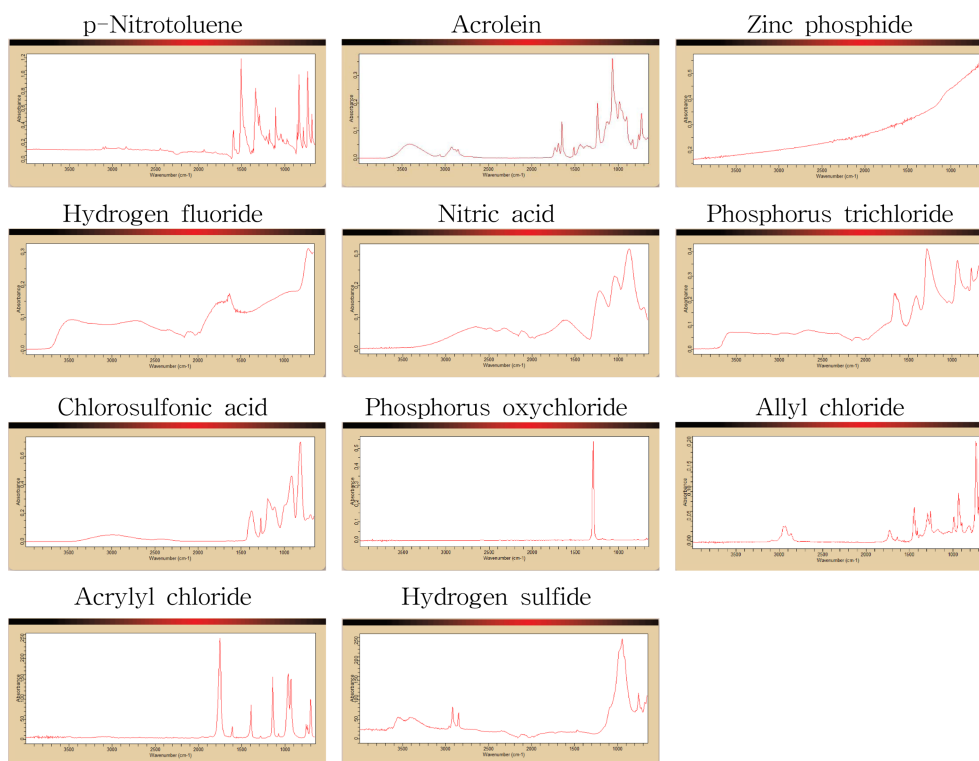
FT-IR을 이용하여 분석물질의 적외선 스펙트럼과 라이브러리를 비교함으로써 염소산칼륨 등 37종에 대한 정성분석이 가능함을 확인하였다. Phosphorus trichloride, Acrolein 등 11종 물질에 대한 신규 라이브러리를 구축하였으며 Table 5와 Fig. 1에 물질정보, 구조정보 및 적외선 스펙트럼을 나타내었다. 적외선 분광학은 시료에 적외선을 비추어서 쌍극자 모멘트가

Table 4. Analysis of chemical substances by portable GC/MS

Chemical substances	RT	Chemical substances	RT
Propylene oxide	1.43	Triethylamine	4.09
Carbon disulfide	2.2	Acrylic acid	4.39
Methyl ethyl ketone	2.23	Acrylyl chloride	2.25
Ethyl acetate	2.33	Allyl chloride	1.57
Benzyl chloride	15.17	Nitromethane	2.1
Toluene	6.23	Acrolein	1.4
Acrylonitrile	1.48	Methyl chloride	1.23
Allyl alcohol	2.1	Vinyl chloride	1.26
Methyl vinyl ketone	2.18	n-Butyl amine	3.25
Methyl acrylate	2.38	Formic acid	1.46
Benzene	3.27	Nitrobenzene	17.06
Phosphorous trichloride	2.55	Phosphorous oxychloride	4.37

**Table 5.** Information of chemical substances in new libraries by portable FT-IR

Chemical substances	Cas no.	Rational formula	Form
p-Nitrotoluene	99-99-0	CH <sub>3</sub> C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	solid
Acrolein	107-02-8	CH <sub>2</sub> =CHCHO	liquid
Zinc phosphide	1314-84-7	Zn <sub>3</sub> P <sub>2</sub>	solid
Hydrogen fluoride	7664-39-3	HF	liquid
Nitric acid	7697-37-2	HNO <sub>3</sub>	liquid
Phosphorus trichloride	7719-12-2	PCl <sub>3</sub>	liquid
Chlorosulfonic acid	7790-94-5	HSO <sub>3</sub> Cl	liquid
Phosphorus oxychloride	10025-87-3	POCl <sub>3</sub>	liquid
Allyl chloride	107-05-1	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> Cl	liquid
Acrylyl chloride	814-68-6	CH <sub>2</sub> =CHCOCl	liquid
Hydrogen sulfide	7783-06-4	H <sub>2</sub> S	solid

**Fig. 1.** Infrared spectrum by portable FT-IR.

변화하는 분자 골격의 진동, 회전에 대응하는 에너지의 흡수를 측정하는 것으로 유기화합물을 구성하는 작용기는 각각 거의 고유의 진동 스펙트럼을 제공함으로써 흡수 파수로부터 정성분석이 가능하다. 따라서 미지 화합물의 진동수를 이미 알고 있는 구조의 진동수와 비교함으로써 미지 화합물 중에 있는 작용기를 동정하고 다시 미지 화합물의 구조를 추정할 수 있다<sup>16)</sup>. 신규 라이브러리로 작성된 11종 물질 중 유기물은

p-Nitrotoluene, Acrolein, Allyl chloride, Acrylyl chloride 총 4종으로 적외선 스펙트럼을 통해 특정 작용기에 대한 흡수띠를 확인할 수 있었다. p-Nitrotoluene은 1400~1600 cm<sup>-1</sup>에서 흡수띠를 나타내어 방향족과 나이트로 화합물에서 나타나는 작용기를 확인할 수 있었고, Acrolein은 1600~1700 cm<sup>-1</sup>에서 흡수띠를 나타내어 탄소와 탄소 이중결합과 알데하이드류에서 나타나는 카르보닐기를 확인할 수 있








었다. Allyl chloride는 650~800 cm<sup>-1</sup>에서 강한 흡수띠를 나타내어 탄소와 염소의 할로겐화알킬기를 확인할 수 있었고, Acrylyl chloride는 600~800 cm<sup>-1</sup>, 1700~1800 cm<sup>-1</sup>에서 강한 흡수띠를 나타내어 탄소와 염소의 할로겐화알킬기와 카르보닐기를 확인할 수 있었다<sup>17)</sup>.

**3.3. 휴대용 XRD**

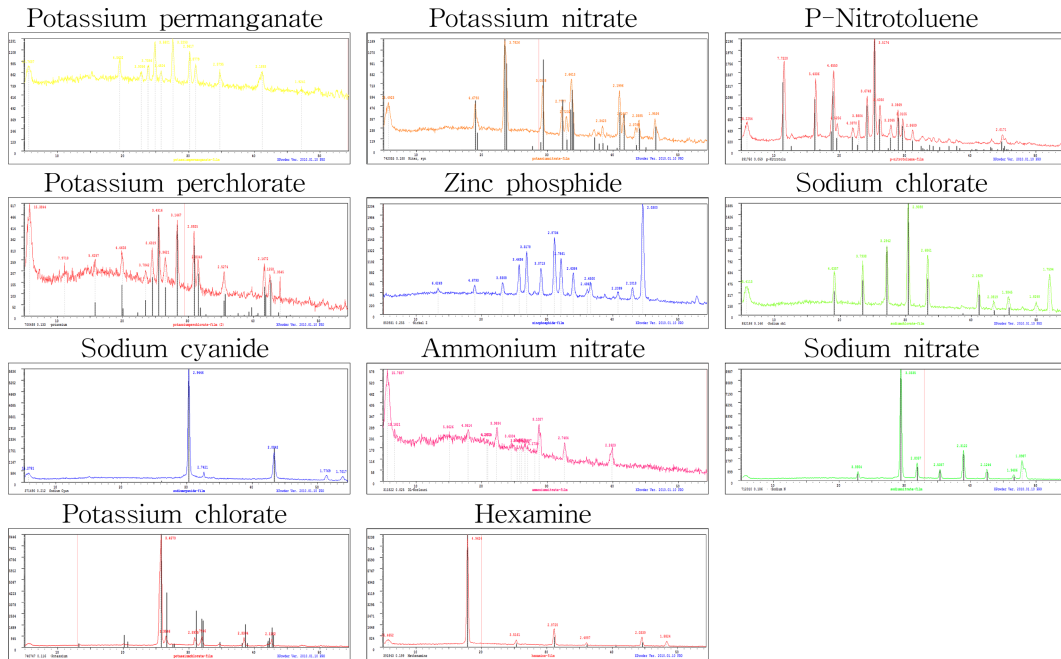
휴대용 XRD는 결정질 고체 분석장비로 고체상 사고대비물질 중 Sodium nitrate, Potassium chlorate을 포함한 11종에 대해 결정구조와 정정확인이 가능하였다. Potassium permanganate, Potassium nitrate, p-Nitrotoluene, Potassium perchlorate은 Orthorhombic 구조를 가지며, Zinc phosphide은 Tetragonal, Sodium chlorate은 Isometric, Sodium cyanide은 Cubic, Ammonium nitrate와 Sodium nitrate는 Trigonal, Potassium chlorate는 Monoclinic, Hexamine은 Tetrahedral 구조로 이루어져 있다.

11종 물질의 2θ값은 6°~44°로 본 실험에서 사용된 휴대용 XRD의 분석범위에 해당되었으나 Ammonium nitrate의 2θ값은 분석한계인 5°에 가까운 6°로 분석되어 현장에서 분석 시 다른 분석 장비와의 교차분석이 필요할 것으로 판단된다. 각 물질의 결정구조와 main

**Table 6.** Crystalline structure and 2θ of chemical substances by portable XRD

Chemical substances	2θ(°) of main peak	Crystal structure
Potassium permanganate	28	Orthorhombic 
Potassium nitrate	23	
p-Nitrotoluene	25	
Potassium perchlorate	26	
Zinc phosphide	44	Tetragonal 
Sodium chlorate	30	Isometric 
Sodium cyanide	30	Cubic 
Ammonium nitrate	6	
Sodium nitrate	30	Trigonal 
Potassium chlorate	26	Monoclinic 
Hexamine	18	Tetrahedral 

peak의 2θ를 Table 6에 나타내었고 X선 스펙트럼을 Fig. 2에 나타내었다.



**Fig. 2.** Infrared spectrum by portable XRD.

#### 4. 결 론

본 연구는 화학물질 사고·테러 발생에 대비하여 유해화학물질관리법에 지정되어 있는 사고대비물질 69종에 대한 현장 탐지·분석방법을 정립하기 위하여 수행하였다. 먼저 사고대비물질을 물리화학적 특성에 따라 분류하였으며, 휴대용 GC/MS, 휴대용 FT-IR과 휴대용 XRD를 이용하여 사고대비물질 50종에 대한 정성분석 및 현장 라이브러리를 구축하였다. 단, 분석장비의 분석가능범위를 벗어나거나 시료확보가 어려운 Sarin 등 19종은 해당기기로 분석할 수 없었다. 이러한 결과로서 정립된 사고대비물질에 대한 탐지·분석 방법은 실제 화학사고·테러 현장에서 사건원인물질을 확인하고 신속하게 대응하는데 유용하게 활용될 수 있을 것이라 판단된다. 향후에는 혼합물질, 미지물질 등 다양한 사건원인물질에 대한 탐지·분석기술과 휴대용 장비별로 만들어진 분석법의 한계점 및 활용도에 관한 다양한 연구가 필요하다.

#### 참고문헌

1. 환경부, 2010, 유해화학물질관리법.
2. 국립환경과학원, 2007, 사고·테러 대비물질 현장탐지 기법 연구.
3. U.S. EPA, *Field screening equipment information document, Companion to standardized analytical methods for environmental restoration following homeland security events(SAM) - Revision 5.0*, EPA/600/R-10/091, 2010.
4. U.S. Department of Justice, *Guide for the Selection of Chemical Agent and Toxic Industrial Material Detection Equipment for Emergency First Responders, NIJ Guide 100-00*, 2000, vol I.
5. U.S. Department of Justice, *Guide for the Selection of Chemical Agent and Toxic Industrial Material Detection Equipment for Emergency First Responders, NIJ Guide 100-00*, 2000, vol II.
6. Philip A. Smith, David Koch, Gary L. Hook, Richard P. Ericksonl, *Trends in Analytical Chemistry*, 2004, 23, 296-306.
7. Hiroyuki Sekiguchi, Koji Matsushita, Shigeharu Yamashiro, Yasuhiro Sano, Yasuo Seto, Taisuke Okuda, Akiyoshi Sato, *Forensic Toxicol*, 2006, 24, 17-22.
8. Eckenrode B.A., *American Society for Mass Spectrometry*, 2001, 12, 683-693.
9. Rajendrani Mukhopadhyay, *Analytical chemistry*, 2004, 369-372.
10. Yasuo Seto, Mieko Kanamori-Kataoka, Kouichiro Tsuge, Isaac Ohsawa, Hisashi Maruko, Hiroshi Sekiguchi, Yasuhiro Sano, Shigeharu Yamashiro, Koji Matsushita, Hiroyuki Sekiguchi, Teruo Itoi, Kazumitsu Iura, *Toxin Reviews*, 2007, 26(3), 299-312.
11. Augusto Pifferi, Gaetano Campi, Carmelo Giacobozzo, and Ettore Gobbi, *Croatica Chemica Acta*, 2009, 82(2), 449-454.
12. Catharine H. Malden, Robert D. Speller, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2000, 449, 408-415.
13. U.S. House of committee on homeland security, *The Resilient Homeland - Broadening the Homeland Security Strategy*, 2008, 9-10
14. 국립환경과학원, 2011, 사고대비물질 KEY INFO GUIDE.
15. 국립환경과학원, 2011, 화학물질 사고·테러 현장조치 행동매뉴얼.
16. 신은상, 최석순, 우달식, 정수경, 최장승, 황갑성, 1998, *기기분석*, pp 73-81, 동화기술.
17. John E. McMurry, 2008, *유기화학*, 7판, pp 407-408, 사이플러스.