

GC/MS를 이용한 현장의 유기미지시료 분석

최 인 자(원진노동환경건강연구소)

유기용제 분석에는 가스크로마토그래프(GC)/불꽃이온화검출기(FID)를 많이 이용한다. 주로 탄화수소화합물(HCs)이기 때문에 표준용액을 이용하여 정성 및 정량분석이 어렵지 않다. 그러나 다양한 화학물질이 사용되는 작업장에서 간혹 미지 물질이 발견되는 경우도 있으며, FID에서 머무름 시간(RT)만을 이용하여 어떤 물질인지 확인하기 어려운 경우도 있다. 이러한 경우에 질량분석기(Mass Spectrometer, MS)를 이용하면 쉽고 정확하게 화학물질을 확인할 수 있다.

이 글에서는 유기화합물의 정성 및 정량 분석이 가능한 GC/MS의 기본 원리, 분리 모드 그리고 다양한 시료에서의 활용방법에 대해 다루고자 한다.

I. GC/MS 란?

GC/MS에서 MS는 Mass Spectrometer를 의미한다. 질량분석기로 해석할 수 있다. 또는 MSD라고도 하는데 Mass Selective Detector, 즉 질량 선택적 검출기라고도 한다. GC에 연결되는 FID 또는 ECD 같은 검출기의 한 종류라기보다는, 하나의 독립된 분석기기라고 볼 수 있다.

일반 검출기와 달리 MS는 미지시료 중에 포함된 화학물질의 정성분석이 가능한 것이 가장 큰 특징이다.

(1) 구성 및 원리

MS는 GC와 별도로 분리되어 있으며 컬럼으로 연결된다(그림 1). 컬럼에서 분리된 분자는 진공상태의 MS에서 이온화되어 분자구조가 깨지는데, 각 물질마다 고유한 질량 스펙트럼(mass spectrum)을 가지게 된다. 이를 이용하여 어떤 성분인지 알 수 있다.

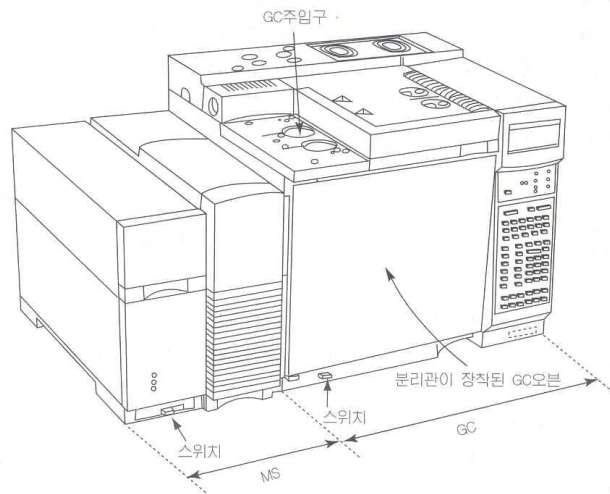


그림 1. GC/MS 모식도

MS는 크게 6개 부분으로 구성되는데 다음과 같다(그림 2).

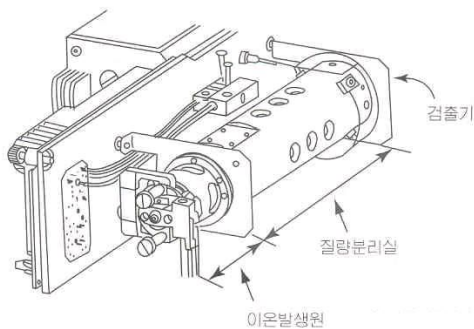


그림 2. MS 내부 모식도

- ① Interface(시료 주입부)
- ② Ion source(이온발생원)
- ③ Analyzer(질량에 따른 분리기)
- ④ Detector(검출기)
- ⑤ Vacuum system(진공장치)
- ⑥ Data system(컴퓨터)

① Interface(시료주입부)

MS로 시료를 도입하는 부분이며, 압력을 유지하는 역할을 하는 곳이다. GC에서 컬럼의 한쪽이 검출기와 연결되는 것처럼 MS 내의 ion source 까지 컬럼이 연결되어 있으며, 온도도 매우 고온으로 유지된다. 보통 시료분

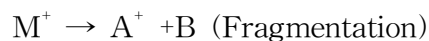
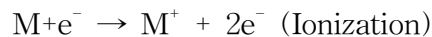
자는 대기압에서 진공상태로 시료주입부를 통해 이동하게 되는 것이다.

② Ion source(이온 발생원)

Ion source, Analyzer 그리고 detector는 펌프에 의해 진공상태로 유지된다. 이온원은 GC 컬럼에서 분리되어 interface를 통해 들어온 분자를, 여기에서 발생하는 전자와 충돌하여 이온화시키는 역할을 한다. 따라서 물질은 양이온으로 되는데, 어떤 분자들은 질량수가 작은 여러 조각으로 나누어진 양이온이 되기도 한다. (Fragmentation).

분자를 이온화시키는 방법에는 EI(Electron Ionization)와 CI(Chemical Ionization) mode가 있다. EI는 분자가 전자에 의해 이온화되는 방법으로, 일반적으로 많이 사용되는 방법이다.

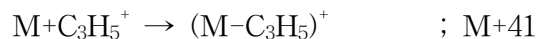
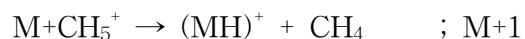
□□ EI(Electron Ionization)



CI mode는 화합물질을 사용하여 물질의 분자구조 또는 분자량을 알아내는 방법으로 Positive와 Negative 방식이 있다. 화합물질로는 메탄, 이소부탄 및 암모니아가스 등을 사용한다.

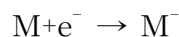
(일반적인 정성분석에서는 EI 모드를 많이 사용하므로 여기에서는 CI에 대한 자세한 설명은 생략한다.)

□□ PCI(Positive Chemical Ionization)



□□ NCI(Negative Chemical Ionization)

; Electron Affinities > 0.5eV(Halogen Compounds)



그리고 이온화된 이온들을 다음 공간으로 이동시키는 역할도 한다.

③ Analyzer(질량에 따른 분리기)

이온원에서 이온화되거나 쪼개진 양이온들은 전자기장이 형성되어 있는 analyzer로 이동된다. 전자기장에 의해 가속화된 양이온은 질량 대 전하비(m/z)에 따라 전기장 또는 자기장하에서 분리된다.

즉 Analyzer에서는 양이온을 가속화시키는 역할을 하는데, Ion trap 과 Quadrupole 방식이 대표적이다. 이는 MS를 구입할 때부터 한 가지 방식(보통 maker 회사에 따라 달라짐)으로 장착된다.

Quadrupole은 4개 막대로 구성되어 있으며, 여기에서 DC와 RF가 지속적으로 흐르게 되고, 이온을 선택적으로 통과시키는 것이다.

④ Detector(검출기)

특정한 질량 대 전하 비(m/z)를 가진 이온의 수를 검출한다. 이온은 셀 수 있는 기구에 의해 감지되고, 이러한 검출기의 결과는 증폭되어 기록계에서 기록되는데 이렇게 기록된 것이 질량 스펙트럼이다.

⑤ Vacuum system(진공장치)

Ion source, analyzer 그리고 detector는 진공으로 유지시키는 역할을 한다. 최적의 기기상태에서 분석을 하려면 MS내 존재하는 불순물을 없애야 하고, 분자의 자유 행로를 최대한 확보하기 위함이다. 공기 중 포함되어 있는 질소, 산소 및 물 등의 성분은 분석시 불순물로 작용할 수 있다. 진공을 유지하기 위해서는 펌프가 필요한데 Low vacuum과 high vacuum을 유지하기 위해 2대의 펌프가 필요하다. high vacuum은 $10^{-3} \sim 10^{-6}$ torr 수준이며 turbo 또는 diffusion 펌프를 이용한다.

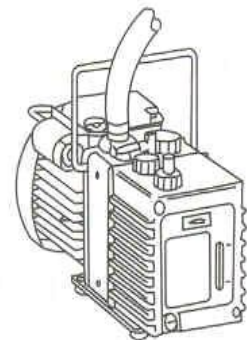


그림 3. 진공펌프

⑥ Data system(컴퓨터)

결과를 정성하는데 중요한 기능을 한다. 소프트웨어에는 화학물질의 분광학적 자료가 DB화 되어 있다. 따라서 시료에서 얻은 질량 스펙트럼을 DB에 있는 스펙트럼 자료와 비교하여 어느 물질인지 찾아내는 것이다. 이 DB는 'library'라고 하며 대상물질에 따라 다양한 library가 필요하기도 하다. 예를 들면, 농약에 대한 library가 따로 있기도 하다.

(2) TIC(Total Ion Chromatograph)

GC에서 얻어지는 결과는 흔히 ‘크로마토그램’이라고 한다. MS도 마찬가지로 분석물질의 피크를 크로마토그램으로 얻게 되는데 이를 TIC(Total Ion Chromatograph)라고 한다. TIC의 각 피크는 개별적인 m/z 에 따라 질량 스펙트럼을 나타내고 있다.

즉 GC는 시료와 표준용액의 크로마토그램에서 머무름 시간을 이용하여 어떤 물질 확인하는 반면, MS는 각 피크의 질량스펙트럼을 이용하여 어떤 물질인지 확인하는 것이다. 따라서 GC 분석에서는 분석물질의 화학적 조성에 관한 정보가 없을 경우 물리·화학적 성질이 비슷하거나 다른 이유로 컬럼에서 분리되지 못하고 한 개의 피크로 검출된다면 모두 같은 물질이라고 판단하는 오류를 범할 수가 있다. 그러나 MS에서는 이러한 오류를 최대한 줄일 수가 있다.

그림 4는 GC/MS에서 얻은 TIC이며 그림 5는 5.3분과 11.6분에 검출된 피크의 질량 스펙트럼을 나타낸 것으로, library 검색을 통해 각각 ethyl acetate와 toluene임을 확인한 것이다.

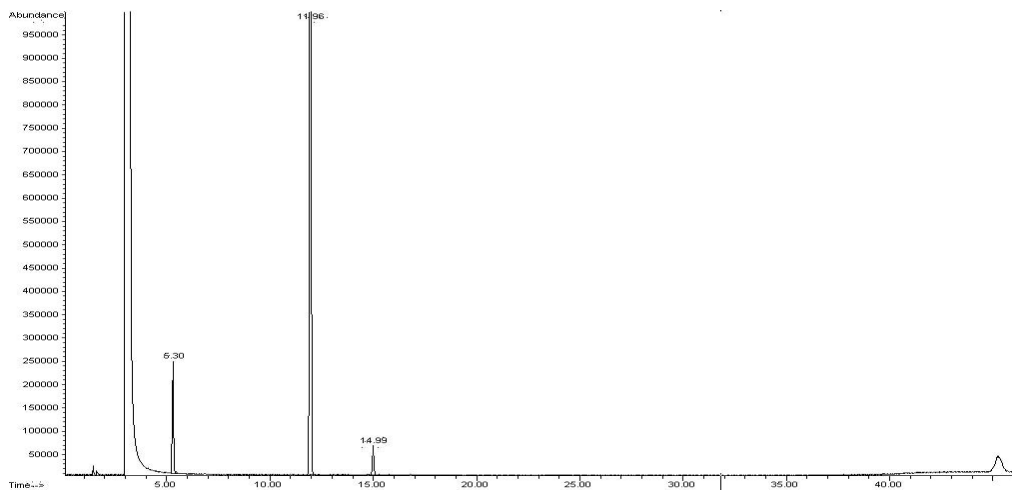


그림 4. Total Ion Chromatograph

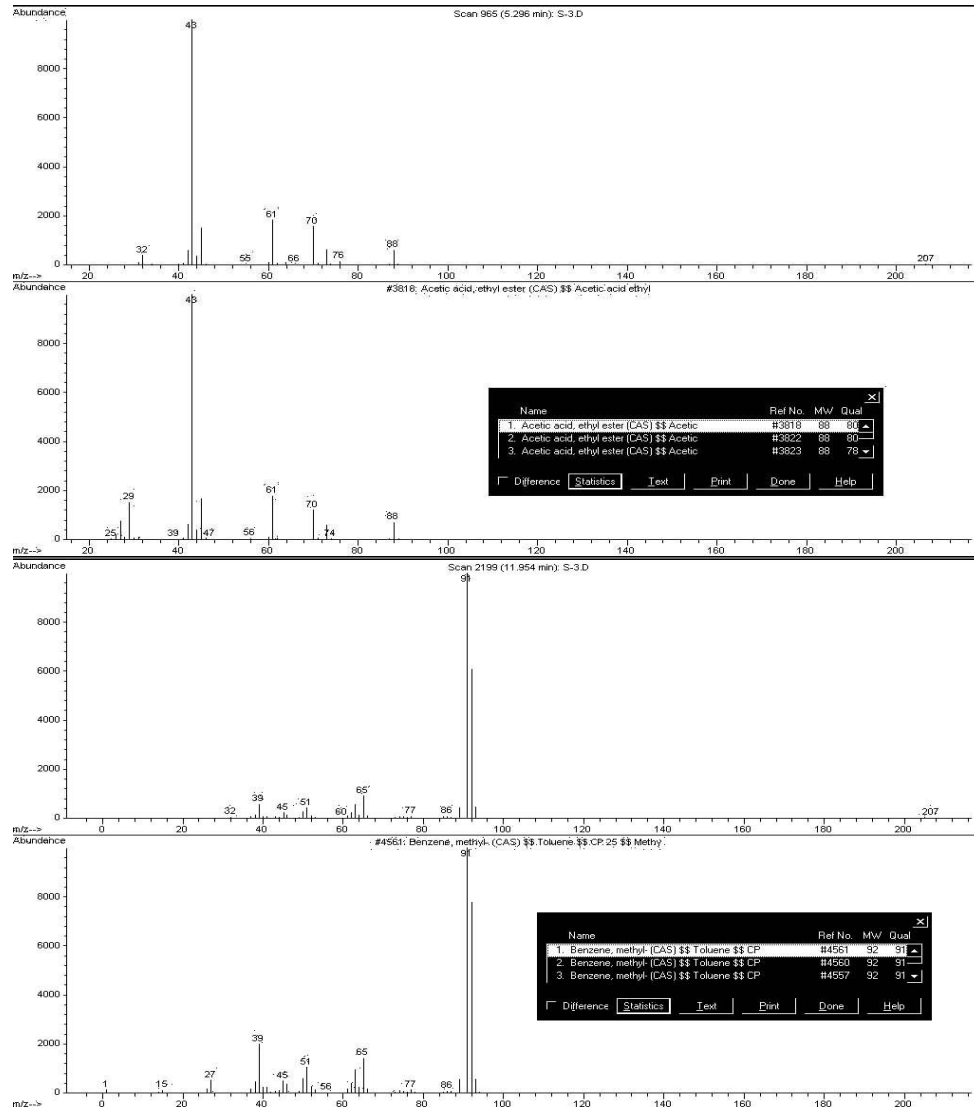


그림 5. 피크의 질량 스펙트럼

(3) 분리 모드

Scan mode와 SIM(Selective Ion Monitoring) mode로 구분된다. 전자는 정해진 분자량의 범위내에서 분자의 조각진 모습을 모니터링하는 방법이다. DB 검색을 통해서 각 피크에 대해 정성분석이 가능하다.

Scan mode가 정성분석을 위한 것이라면, SIM mode는 정량분석을 위한

방법이다. 미리 scan mode로 분석한 후에 TIC에서 대상피크의 머무름 시간과 질량스펙트럼을 알아내어, 선택되어진 분자량을 가진 이온만을 분석하는 것이다. 분자량을 선택함으로써 ECD 또는 NPD 정도의 고감도를 가질 수 있다. 그림 6에서 보듯이 MS는 범용적 검출기로 scan mode로 분석할 때에는 적용범위가 선택적 검출기(FID, NPD 등)보다는 낮다. 그러나 SIM mode를 이용하여 이를 해결할 수 있다.

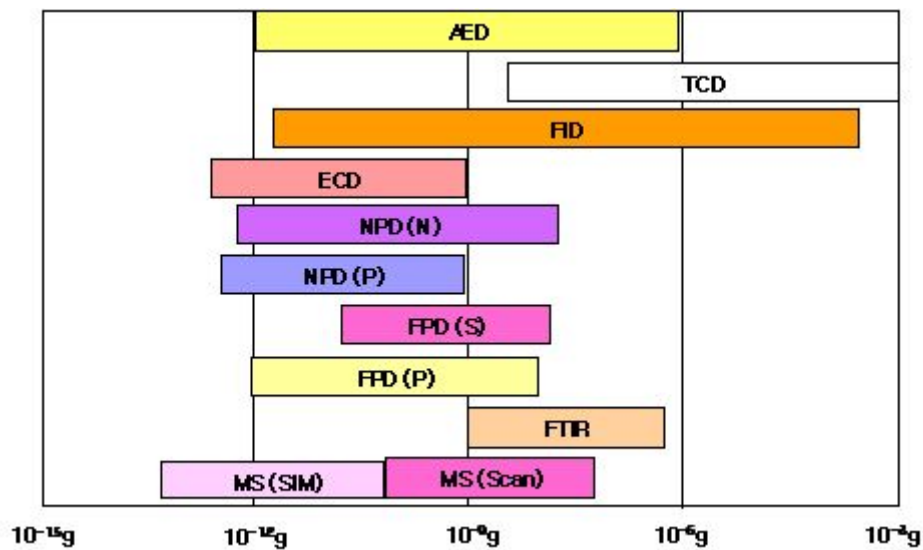


그림 6. 검출기의 감도 비교

따라서 SIM mode를 이용하면 PAH 및 농약 등 분석이 까다로운 항목들의 분석도 가능하다.

(4) 검출기 vs GC/MS

검출기는 분석대상물질에 따라 선택적으로 사용된다. 가장 흔히 사용되는 FID는 탄화수소 화합물을, ECD는 할로젠족 화합물을 검출하는데 적합하다. 반면에 MS는 모든 화합물의 검출이 가능하다. 표 1에는 MS를 포함한 검출기의 특징을 나타낸 것이다. 선택적 검출기와 비교하여 MS는 최소 검출한계가 높은 단점이 있다.

표 1. 검출기 특징

종류	형태	선택적인 화합물	최소 검출정도	직선성 범위
FID	선택적	Air/H ₂ 불꽃에서 이온화되는 화합물	5pg C/sec	10 ⁷
TCD	일반적	운반기체와 연전도도 차이가 있는 화합물	400pg C/ml carrier	10 ⁶
ECD	선택적	할로젠족 화합물	0.1 pg Cl/sec	10 ⁴
NPD	선택적	N, P 포함하는 화합물	0.4pg N/sec 0.2pg P/sec	10 ⁴
FPD	선택적	P, S 포함하는 화합물	20pg S/sec 0.9pg P/sec	10 ³ 10 ⁴
MS	일반적	모든 화합물	10pg ~ 10ng	10 ⁵

II. GC/MS를 이용한 미지시료 분석

MS를 이용하여 다양한 matrix의 작업환경 시료 중 정성 및 정량 분석에 대해 알아보자.

(1) 정성분석(=Scan mode)

□□ 시료: GC와 마찬가지로 다양한 전처리 과정을 거쳐서 용매에 녹아 있는 액체상태의 시료이어야 한다. 예를 들면 신너의 경우는 적절한 용매(이황화탄소, 메탄올)에 희석해야 하며, 활성탄인 경우는 용매로 추출해야 한다. 시료의 특성에 따라 적절한 전처리 장비와 연결하는 것도 가능하다.

□□ 분석조건: 컬럼, 오븐온도조건, 시료주입량, split ratio 등의 분석조건을 설정한다. 분석하고자 하는 대상이 극성물질이면 극성 컬럼을, 비극성이면 비극성 컬럼을 선택한다. 일반적인 유기용제 분석에는 VOC 전용 컬럼을, PAHs는 비극성 컬럼(1 또는 5 column)이 적절하다.

□□ MS의 진공유지 : 시료가 진공상태에서 이온화되기 때문에 가장 먼저 진공상태로 만들어야 한다. 각 제조회사마다 적절한 시간을 권고하는

데, Agilent사의 5973 MSD 경우는 약 2시간 동안 미리 기기를 켜서 진공 상태로 만든다. 그러나 기기는 켜 놓을수록 안정화가 되기 때문에 하루 전에 미리 기기를 켜두는 것도 좋다.

□□ MS의 tuning: MS에서 mass spectrum을 얻기 위해서 수행되어야 할 첫 번째 과정이다. 정밀하고 우수한 MS 데이터를 얻기 위해서는 MS의 여러 가지 기기적인 parameters를 조절하여 기기를 calibration 해 주어야 하는데, 이러한 일련의 과정이 tuning 이다. 이 과정은 기기를 사용할 때마다 해 주어야 하며, tuning data를 이용하여 MS 내의 이온원의 세척시기 등을 알 수 있다.

EI mode인 경우 MS 내부에 PFTBA(Perfluorotributylamine)라는 calibration 시약을 이용하는데, 최근에는 이 시약을 이용하여 자동적으로 기기의 sensitivity를 최대화시킨다.

□□ 시료 분석: GC와 MS가 최적의 상태이면 분석조건으로 시료를 분석한다. 이는 일반적인 GC 분석법과 동일하다. 단 MS의 조건에서는 mass spectrum을 얻기 위한 분자량의 범위를 설정해 주어야 한다. 예를 들면 30~500 amu로 설정하며 분자량이 30에서 500 사이에 있는 화합물질만 분석한다.

□□ TIC: TIC의 각 피크는 mass spectrum을 갖는데, 이 mass spectrum을 컴퓨터 내에 있는 DB 혹은 library와 비교하여 정성하는 것이다. 대부분 소프트웨어에서 예상되는 물질을 찾아주지만 정성과정은 분석자가 담당해야 할 몫이다.

Library는 기기회사마다 다를 수 있는데, 일반적으로 NIST(National Institute of Standards and Technology)에서 제공하거나, pesticide 용으로 사용되는 reference library 등이 있다.

□□ 피크 확인: 시료의 분석결과 얻은 mass spectrum과 library에 있는 mass spectrum을 비교한다. 앞에서 보여준 그림 5와 6이 이 과정에 해당된다.

(2) 정량분석(=SIM mode)

□□ 정량분석을 위해서는 가장 먼저 scan mode로 분석하여 미지성분이 어떤 물질인지 확인해야 한다.

□□ 정성 확인된 물질의 표준용액을 구하여 scan mode의 분석조건과 동일한 조건하에서 분석하여 mass spectrum을 얻은 뒤 동일한 것인지 확인한다.

□□ 두 개의 mass spectrum이 일치하면 그 스펙트럼에서 특징적인 mass peak를 2-5개 정도 선택하여 그들의 질량을 기록하고 그 피크의 머무름 시간을 기록한다.

□□ MS의 분석조건을 설정한 다음 표준용액과 시료를 분석한다.

□□ 표준용액을 이용하여 검량선을 작성한 후에, 시료의 면적을 이용하여 정량한다.

(3) 미지시료 분석

주로 벌크나 원액 중 미지성분을 확인하기 위한 방법이다.

① 작업환경측정시료, FID 분석했는데 처음 보는 피크가 있다!

작업환경측정시료는 GC/FID를 이용하여 분석이 가능하다. 표준용액과 시료를 동일한 조건하에서 분석한 후에, 머무름 시간을 이용하여 어떤 성분인지 확인하고 면적을 이용하여 정량한다. 시료와 표준용액의 머무름 시간이 일치한다면 MS를 이용하여 정성분석을 따로 할 필요는 없지만 때때로 필요한 경우가 있다. 그림 7은 동일한 시료를 GC/FID와 GC/MSD를 이용하여 분석한 결과이다. 두 크로마토그램의 패턴이 거의 유사함을 알 수 있다. 다만 GC/MS와 FID에 동일한 성상의 컬럼을 사용하였으나 길이, 내경 등의 차이가 있어 머무름 시간은 차이가 있다. 그러나 전체적인 피크의 패턴을 이용하여 정성이 가능하다.

② 페인트, 신너 등의 원액시료 성분분석

원액 중의 성분 분석이나 MSDS를 확인하기 위한 과정에서는 GC/MS 분석이 반드시 필요하다. 이런 경우에는 GC에 주입하기 알맞은 형태로 시료를 처리해야 한다.

□□ 전처리

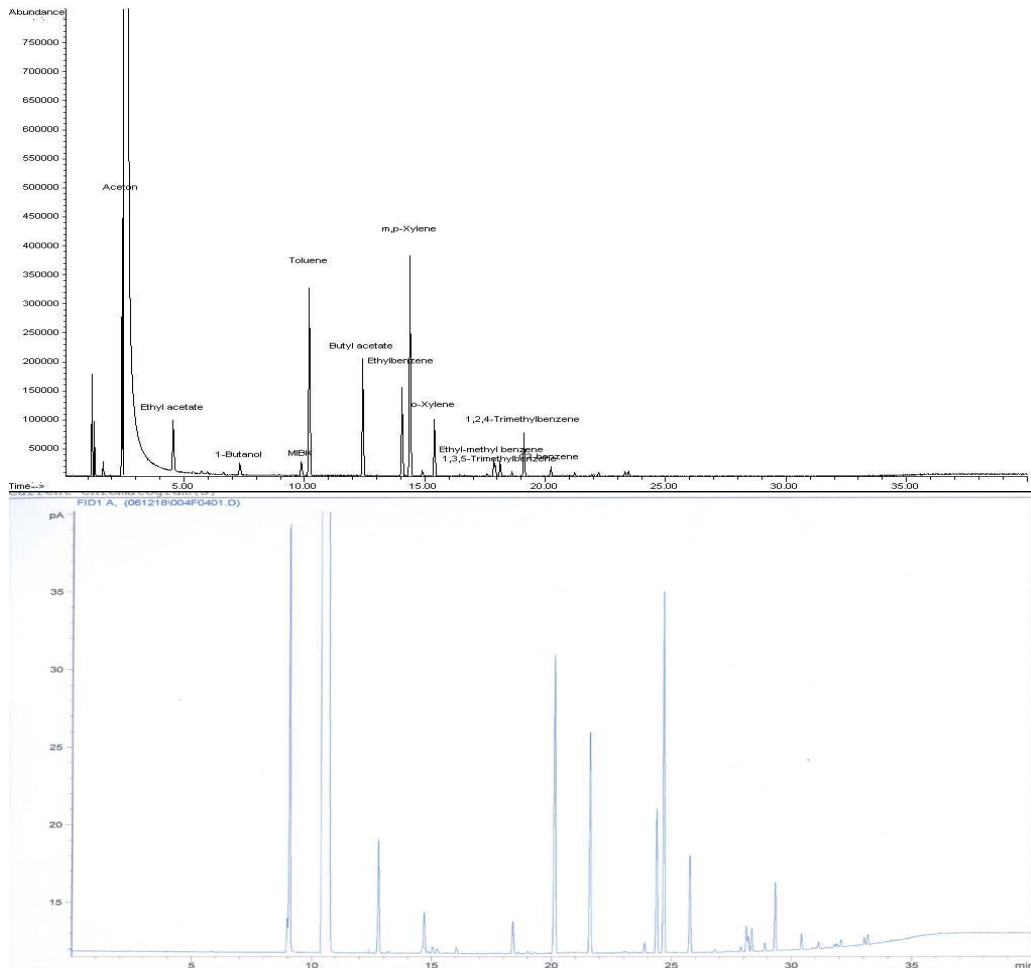


그림 7. GC/MS 및 GC/FID의 chromatogram 비교

- 신너, 세척제 등의 투명한 액상: 이황화탄소 또는 메탄올 등으로 희석하여 바로 분석이 가능하다.
- 페인트처럼 점성이 있는 시료: 정량적인 양을 취하기가 힘들기 때문에 바로 용매에 희석하는 것은 불가능하다. 이런 경우에는 일정량의 무게를 달아 용매로 희석한다. 또는 무게를 달아 삼각플라스크에 옮겨서 밀봉한 다음, 고온의 핫플레이트 위에서 가열시킨다. 이때 발생하는 가스를 활성탄으

로 채취한 후에 이황화탄소를 추출하여 분석용 시료로 이용하는 경우도 있다.

□□ 분석사례 하나

OO 사업장에서 한 달에 사용하는 이형제의 양이 약 200 리터 정도 된다. 다들 잘 알겠지만 만들고자 하는 제품이 금형에 들러붙지 않도록 해주기 위해서 이형제를 사용하는데, 현장에서는 이형제가 어떤 성분으로 구성되어 있는지 아무도 모르고 있었다. MSDS(물질안전보건자료)에도 영업상 비밀을 이유로 성분 및 함량이 표기되어 있지 않은 상태였다. 산안부장님의 바램은(?) 이형제를 “꼭” 성분 분석해서 “어떤 놈”인지 알고자하는 것이었으며 그 내용을 조합원들에게 공유했으면 좋겠다는 것과 노출로 인한 건강 영향을 알았으면 좋겠다는 것이었다.

그래서 성분분석을 해봤다. 분석 결과 노말헥산, 톨루엔, 그리고 자이렌 등의 방향족 탄화수소가 다량 함유되어 있었다. 더욱 놀라운 것은 벤젠이 0.1 % 함유되어 있었다는 것이었다. 그동안 발암성이 있는 이형제를 사용하고 있던 것이다.

물질안전보건자료 (MSDS)

1. 제품과 회사에 관한 사항

1.1 제 품 명 : CP-201

1.2 일반적 특성 : 우유 및 액체

1.3 유해성 분류 : -

1.4 제품의 용도 : 폴리우레탄 이형제

1.5 제조자 정보 : 일진 유화
경기도 안양시 인왕 9동 1219-112

관리번호

ED 000

2. 구성 성분의 명칭 및 함유량

2.1 화학물질명 : *Hydrocarbon mixture and Synthetic wax mixture*

2.2 이 명 : 이형제

2.3 CAS 번호 및 또는 식별번호 :

2.4 함 유 량 : 합성왁스의 5중 *

▲ OO 사업장에 비치된 이형제 물질안전보건자료

▼ 이형제 성분 분석결과 (%)

노말헥산	1.3
벤젠	0.1
헵탄	11.1
메틸시클로헥산	5.4
톨루엔	3.3
옥탄	11.6
에틸벤젠	1.7
크실렌	3.2
.	.
.	.

□□ 분석사례 둘

페인트의 MSDS 확인 결과 화학물질에 대한 정보가 부족하다. 실제로 분석을 통해서 벤젠 등을 확인하였다.

OO페인트, KSM 6020

MSDS 정보	
구성성분	함유량(%)
알키드 수지	33-43
노말헥산	15-25
크실렌	0-10
미네랄 스프릿	25-35
자당	1-11
탄산칼슘	0-8
영업비밀	0-10



노말헥산	1.08
크실렌	4.22
벤젠	0.16
헵탄	2.41
메틸시클로헥산	2.40
옥탄	2.32
노난	2.08
에틸벤젠	2.05
시클로헥산	1.54
톨루엔	1.01
.	.
.	.

③ 공기 중 미지성분 분석이 필요한 경우

활성탄으로는 정량적인 평가가 어려운 경우 또는 단위작업에서 발생되는 유해물질에 대한 확인이 필요한 경우가 있다. 예를 들면, 용접을 하는 경우 흠 이외의 가스상 성분 또는 특히 심한 냄새가 발생하는 경우에 어떻게 확인하면 좋을까? 짧은 시간동안 공기를 채취하는 것도 중요하지만 분석하는 것도 중요하다. 이런 경우에 사용할 수 있는 방법이 열탈착 후에 GC/MS로 분석하는 방법이다. 최근 관심이 되고 있는 실내 공기 중 휘발성 유기화합물 분석 방법으로 많이 사용되고 있다.

□□ 시료 채취: 활성탄이 용매추출이며 일회만 시료채취가 가능한 반면에, 동일한 흡착제 튜브이지만 열탈착법으로 전처리 하는 방법이 있다. 흡착제의 종류가 매우 다양하다. 휘발성 유기 화합물 채취에는 주로 Tenax-TA 흡착제를 사용하는데, 이는 소수성이며 탈착이 쉽고 C₅~C₁₂ 탄화수소 화합물에 적합하다. 그리고 탄수소가 2~5개 사이의 저비점 탄화수소 화합물에

는 Carbosieve 계열의 흡착제가 적합하다.

□□ 전처리 및 분석: 흡착관은 고온에서 탈착시켜야 하는데 열탈착용 전처리 장비가 따로 필요하다. 시료를 탈착하면 탈착된 가스 전량을 GC/MS로 분석한다. 흡착튜브는 흡착된 시료를 탈착하거 질소가스로 세척만 하면 계속적으로 시료채취가 가능하다.

□□ 분석사례

자동차 부품을 제조하는 사업장. 엑슬조립 작업부서에서 냄새에 대한 불만을 호소하였다. 실린트 처리 후에 용접작업을 하면서 흡이 발생되는데 특히 냄새가 많이 난다고 하였다. 작업자들은 그 흡의 냄새 성분과 건강영향에 대해 궁금하다고 하였다. 노동조합에서는 작업환경측정에서 이 문제를 다루기로 하였다.

용접작업이 끝난 후에 흡이 발생되는 위치에서 공기시료를 채취하였다. 그리고 대조군으로 동일한 시간대에 외기의 공기를 함께 채취하였다. 흡과 외기의 분석결과는 뚜렷한 차이를 보였는데, 흡을 분석한 결과에서는 여러 가지 유기물질이 검출되었다. 특히 ‘메틸에틸케톡심’이라는 물질이 많이 검출되었다. 흡에 어떻게 이런 성분이 있을까? 그 발생원을 찾기 위해 사용물질의 MSDS를 확인해 본 결과 용접 전에 처리하는 실린트에 메틸에틸케톡심이 포함되어 있었다(그림 8).

그리고 이 물질은 피부자극성이 큰 물질이며, 약하지만 유전독성과 혈액독성을 가진 물질임을 확인하였다. 따라서 해당 작업자는 실린트를 사용하는 중에는 피부노출을 주의해야 하며, 용접 작업 중 호흡기 노출에 대한 평가의 필요성이 생겼다.

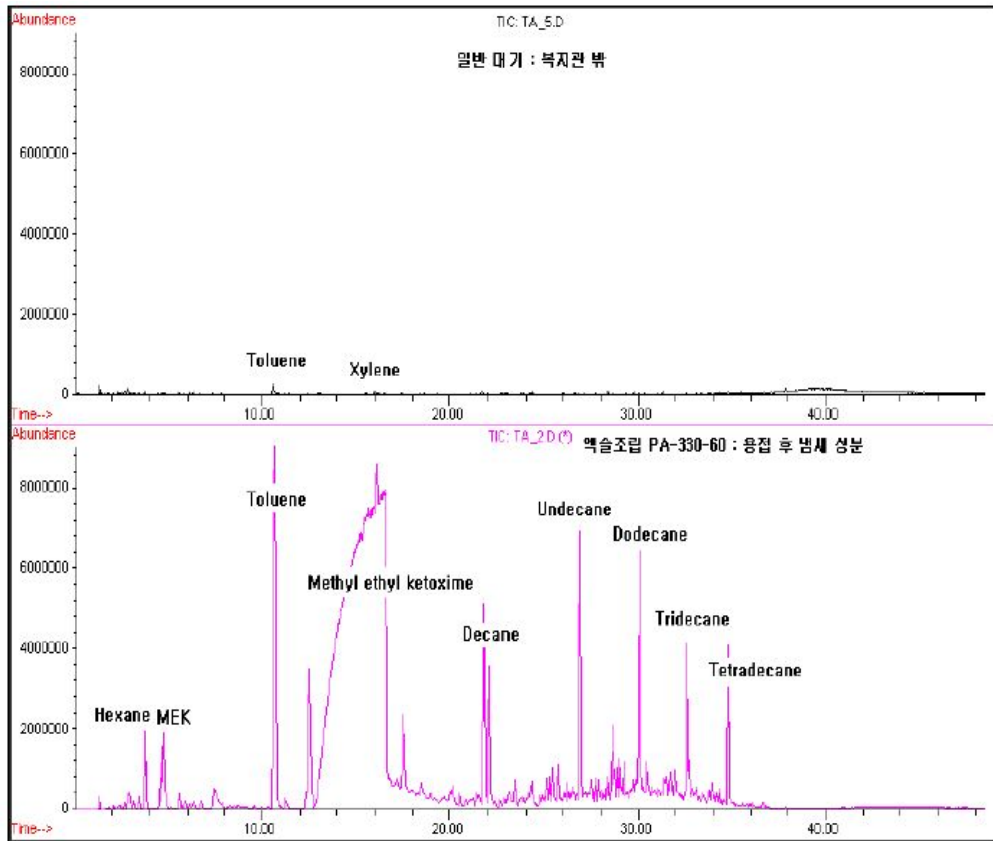


그림 8. 일반대기 및 흙의 가스상 화합물의 비교

④ 고체상 벌크의 성분 분석이 필요한 경우

고체상 벌크에서 유기성분 분석이 필요한 경우는 벌크 자체보다는 온도가 가해졌을 때 발생하는 가스상 성분을 확인하고자 하는 경우가 많다. 일반 상온에서는 상관없지만 온도나 압력 등의 작업공정에 따라 유해물질이 발생되기도 한다.

□□ 분석사례

타이어를 만드는 사업장. 원료와 각종 첨가제가 사용되며 공정에서 온도 및 압력이 가해지기 때문에 냄새가 심하고 가스상 물질의 발생이 많다. 타이어 원료인 고무 자체가 매우 다양한 물질로 구성되어 있기 때문에 온도를 가하게 되면 휘발성 유기 성분이 발생된다. 따라서 고무원료를 공정온도와 비슷한 온도까지 가열시킨 후에 발생하는 가스상 화합물을 GC/MS로

분석하였다.

*Headspace-sampler*를 이용한 전처리: 바이엘에 일정량의 시료를 넣은 후에 고온의 오븐에서 가열시키면 가스상 물질이 휘발된다. 이때 바이엘 속 가스상 물질의 농도는 시료의 농도와 동일하다(동적평형). 이때 바이엘의 온도조건은 공정의 온도와 동일하게 140, 160 및 180℃로 하였다.



그림 9. Headspace sampler-GC/MS

GC/MS 분석: 전처리에서 발생된 가스는 GC의 주입구와 바로 연결되어 있어 전처리 후에 바로 컬럼으로 주입되어 분석된다.

결과: 고무원료에서 발생하는 유기화합물의 TIC는 그림 10과 같다. 온도가 증가할수록 발생하는 가스상 물질도 증가하였다. 과 같으며, 각 피크의 정성결과는 표 2와 같다.

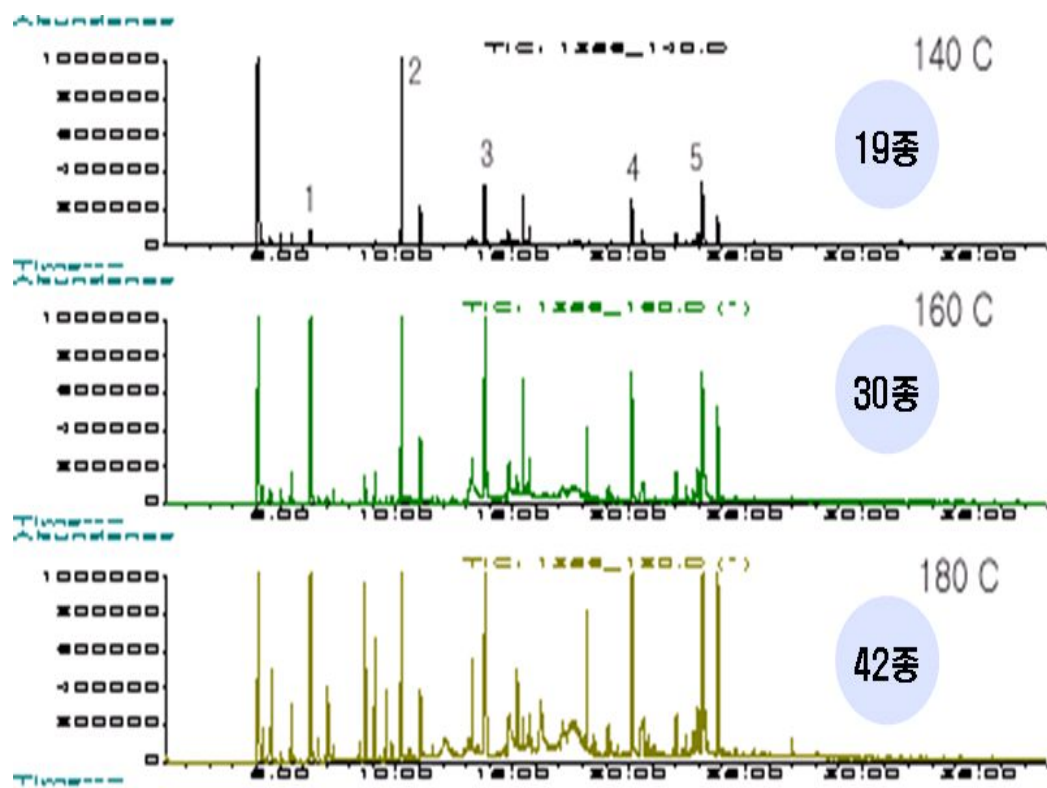


그림 10.. 고무 원료를 각 온도별로 가열했을 때 발생하는 가스상 물질의 크로마토그램 비교

표 2. 온도별 고무에서 발생된 가스상 화합물

VOCs	검출여부		
	140℃	160℃	180℃
Ethanal + 2-methyl-1-propene	○	○	○
Ethanol	○	○	○
Acetone	○	○	○
Furan			○
Carbon disulfide	○	○	○
2,3-dimethyl-2-butene		○	○
n-butanal			○
2-methyl furan		○	○
1-butanol			○
Benzene		○	○
Cyclohexene	○	○	○
1,4-dioxane		○	○
Methyl isobutyl ketone	○	○	○
Pyridine			○
Toluene	○	○	○
Ethylbenzene			○
Cyclohexaneamine + Ethylbenzene	○	○	
m,p-Xylene	○	○	○
Cyclohexanol			○
Styrene	○	○	○
Cyclohexanone	○	○	○
α-pinane			○
N-butyl-1-butanamine		○	○
Benzaldehyde		○	○
Benzeneamine	○	○	○
trans-pinane	○	○	○
N-ethyl-benzeneamine		○	○
1-piperidinecarboxaldehyde			○
α-Terpineol		○	○
Naphthalene			○

표 2. 온도별 고무에서 발생된 가스상 화합물(계속)

VOCs	검출여부		
	140℃	160℃	180℃
Benzothiazole	○	○	○
N,N-dibutyl-formamide			○
Methyl benzothiazole		○	○
Tetradecane			○
N-(2,2-dimethylpropyl)-N-methyl-benzenamine	○	○	○
1,1'-Biphenyl			○
Longicyclene	○	○	○
Isolongifolene		○	○
Junipene	7○	○	○
1,2-Dihydro-2,2,4-trimethyl-quinoline	○	○	○
2,4-dimethyl-quinoline		○	○
2,3-dihydro1,3,3-trimethyl-2-methylene-1H-indole			○
4-Methyl-2,6-di-tert-butylphenol	○	○	○
Total	19	30	42

⑤ SIM mode를 이용하여 다핵방향족탄화수소 화합물 분석

SIM mode는 GC/FID보다 감도가 좋기 때문에 분석이 어렵거나 농도가 낮을 것으로 예상되는 물질의 분석에 적합하다. 원액 시료 중 PAHs의 경우는 대부분 matrix가 복잡하기 때문에 FID에서 분석하는 겨우 정성하기가 매우 어렵다. 그러나 SIM mode를 이용하면 원하는 대상물질만 선택적으로 분석하기 때문에 matrix의 효과를 최대한 줄일 수 있으며 감도도 향상시킬 수 있다.

PAH는 비점이 높기 때문에 분석시 온도 조건이 약 300℃ 고온까지 올라간다. 따라서 온도가 증가함에 따라 baseline도 뜨는 현상이 나타난다. 그러나 SIM mode로 분석할 경우 선택전 질량에 대해서만 분석하기 때문에 baseline의 들뜸 현상이 거의 나타나지 않는다.

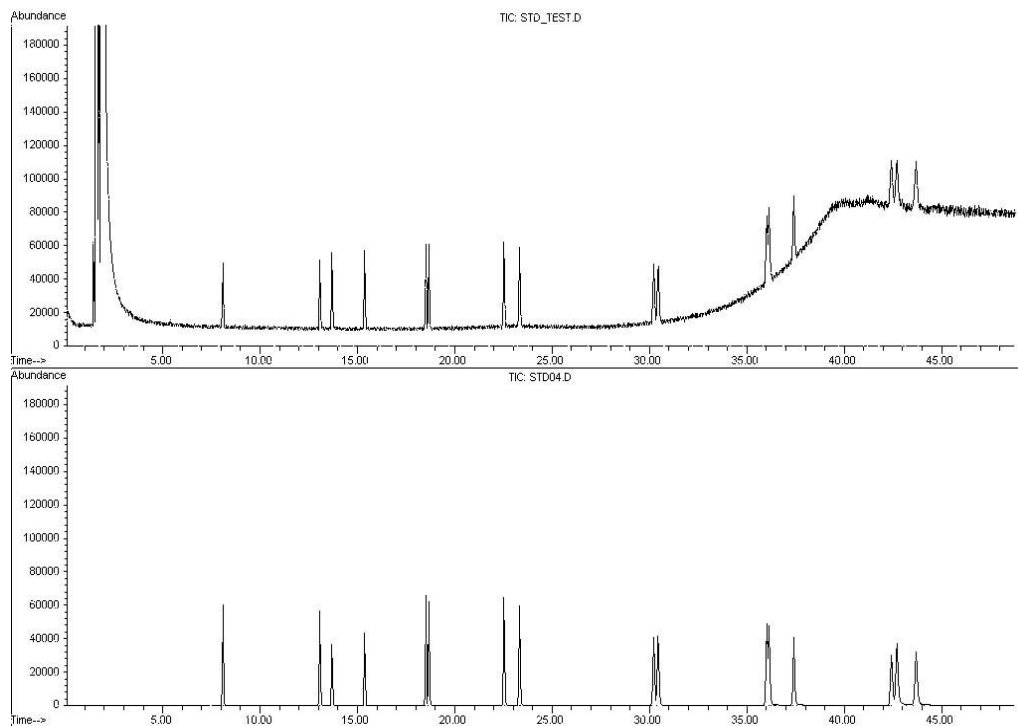


그림 11. PAHs의 Scan & SIM mode의 분석결과 비교

16종 PAHs를 대상으로 하는 경우 각 물질별 대표적인 질량 대 전하비 (m/z)는 표 3과 같다.

표 3. PAHs(16종)의 질량 대 전하 비(m/z)

NO.	PAHs	m/z
1	Naphthalene	128
2	Acenaphthylene	152
3	Acenaphthene	153
4	Fluorene	166
5	Phenanthrene	178
6	Anthracene	178
7	Fluoranthene	202
8	Pyrene	202
9	Benzo(a)anthracene	228
10	Chrysene	228
11	Benzo(b)fluoranthene	252
12	Benzo(k)fluoranthene	252
13	Benzo(a)pyrene	252
14	Indeno(1,2,3-c,d)pyrene	276, 278
15	Dibenzo(a,h)anthracene	276, 278
16	Benzo(g,h,i)perylene	276, 278

지금까지 GC/MS를 이용하여 다양한 시료에서 유기성분을 분석하는 방법에 대해 알아보았다. 단순히 회석하는 방법에서부터 별도의 전처리 장비가 필요한 경우까지 다양하였다. 화학물질의 노출을 평가하기 위해서는 GC/FID를 이용하여 정량하는 것이 대부분이지만 필요한 경우 MS를 활용하여 보다 정확한 화학물질을 확인하는 것도 필요하며, 광범위한 범위에서 활용이 가능하다.