

추정·비표적 분석기법 도입을 통한 유해화학물질 모니터링 고도화 방안 연구

Advancing the Korean Chemical Monitoring System by Introducing Suspect
and Non-target Screening Methods

정윤선 | 정다운 | 김준태 | 강하병

K O R E A
E N V I R O N M E N T
I N S T I T U T E

저자

정윤선, 정다운, 김준태, 강하병

연구진

연구책임자 정윤선 한국환경연구원 부연구위원
참여연구원 정다운 한국환경연구원 연구위원
김준태 한국과학기술연구원 선임연구원
강하병 한양대학교 조교수

연구자문위원(가나다순)

김형섭 국립환경과학원 연구관
박민규 제주대학교 조교수
서양원 한국환경연구원 선임연구위원
이영수 한국환경연구원 선임연구위원
전준호 창원대학교 교수
추교진 강원대학교 조교수
한지현 한국환경연구원 부연구위원

| 연구보고서 2024-13 |

추정·비표적 분석기법 도입을 통한 유해화학물질 모니터링 고도화 방안 연구

Advancing the Korean Chemical Monitoring System by Introducing Suspect and Non-Target Screening Methods

© 2024 한국환경연구원

발행인 이 창 훈
발행처 한국환경연구원
(30147) 세종특별자치시 시청대로 370
세종국책연구단지 B동(과학 인프라동)
전화 044-415-7777 팩스 044-415-7799
www.kei.re.kr

인 쇄 2024년 12월 26일
발 행 2024년 12월 31일
등 록 제 2015-000009호(1998년 1월 30일)
ISBN 979-11-5980-969-9 93530
인쇄처 (주)다원기획 044-865-8115

이 보고서를 인용 및 활용 시 아래와 같이 출처를 표시해 주십시오.
정윤선 외(2024), 「추정·비표적 분석기법 도입을 통한 유해화학물질 모니터링 고도화 방안 연구」, 한국환경연구원.

값 7,000원

서 언

“봄이 왔지만, 새가 울지 않는다.” 1962년 발표된 레이첼 카슨의 ‘침묵의 봄(Silent Spring)’에서는 화학물질로 인한 환경오염이 초래할 생태계 균형의 붕괴에 대해 경고하였습니다. 약 60년의 세월이 흐른 지금, 안타깝게도 인간은 끊임없이 화학물질을 개발 및 사용해 왔으며 현재의 무분별한 행동이 가져올 미래의 비극에 대해서는 묵인하고 있습니다. 부족한 정보로 인해 관리되지 않는 유해화학물질에 대한 지속적인 노출은 우리 세대뿐 아니라 미래 세대에게도 피해가 누적됩니다. 이러한 불가역적인 피해를 방지하기 위해서는 현세대가 위기를 의식하고 피해를 줄이기 위해 반드시 노력해야 합니다.

유해화학물질 노출을 파악하기 위해서는 지속적인 모니터링이 필요합니다. 우리나라에서는 여러 체계를 통해 인체 및 환경 모니터링을 수행하고 있지만, 생산되는 화학물질 수에 비해 미약한 모니터링 물질의 범위는 관리의 사각지대를 형성합니다. 과학기술의 진보를 통해 발전해 온 추정·비표적 분석은 미규제 화학물질을 파악할 수 있는 효과적인 도구로, 정해진 물질만 확인했던 기존 모니터링의 사각지대를 보완할 수 있는 기술입니다. 따라서 추정·비표적 분석의 도입을 면밀히 검토한 본 연구가 국내 유해화학물질 관리의 저변을 넓혀 향후 유해화학물질 관리를 위한 정책 결정에 중요한 자료가 될 것으로 기대합니다.

끝으로 본 연구를 수행한 한국환경연구원 환경보건연구실의 정운선 박사, 정다운 박사, 한국과학기술연구원 김준태 박사, 한양대학교 강하병 교수께 감사를 표합니다. 바쁘신 와중에도 자문을 통해 연구에 도움을 주신 국립환경과학원 김형섭 연구관, 제주대학교 박민규 교수, 창원대학교 전준호 교수, 강원대학교 추교진 교수께 깊은 감사를 드립니다. 또한 우리 원의 서양원 박사, 이영수 박사, 한지현 박사의 자문에도 감사를 표합니다.

2024년 12월
한국환경연구원
원장 이창훈

추정·비표적 분석기법 도입을 통한 유해화학물질 모니터링 고도화 방안 연구

정윤선 외

1. 국내 유해화학물질 체계의 주요 문제점

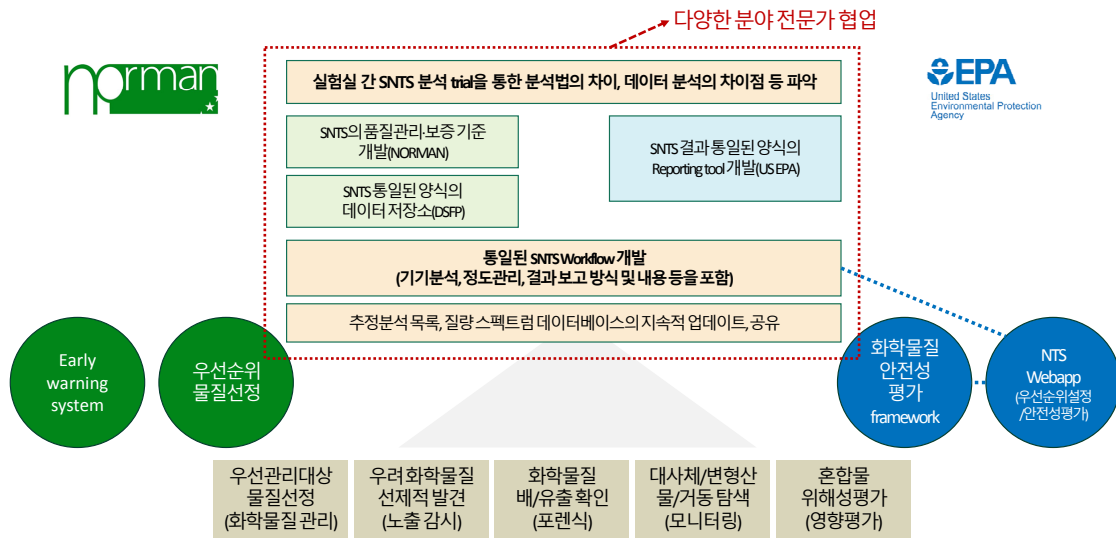
전 세계적으로 생산되는 화학물질 수와 사용량이 지속해서 증가해 옴에 따라 유해화학물질의 환경 중 배출 및 인체 노출 개연성도 증가하고 있다. 하지만, 모니터링 대상 물질을 사전에 선정하는 표적 분석(Target analysis) 기반의 국내 유해화학물질 모니터링 체계는 감시할 수 있는 화학물질의 범위가 매우 제한적이다. 이러한 문제점은 화학물질 관리의 사각지대를 형성하여 모니터링의 본 목적인 국민과 환경의 건강 보호를 충족하지 못할 수 있다. 실제 2018년 대구 정수장 과불화화합물 검출 등 일련의 화학물질 노출 사건은 국민의 불안을 야기하였고 커다란 사회적 파동을 가져온 바 있다. 따라서 현 체계를 보완할 수 있는 새로운 방법론이 필요한 시점이다.

2. 추정·비표적 분석법

‘추정·비표적 분석기법(SNTS: Suspect and Non-Target Screening)’은 높은 질량 측정 정확도와 분해능을 가진 고도의 분석기기를 활용하여 물질의 대량 동시 스크리닝과 데이터 분석을 수행한다. 따라서 기존에 알려지지 않은 새로운 유해 우려 물질을 확인할 수 있는 분석 방법이다.

2.1. 추정·비표적 분석법 개발 국외 동향

SNTS의 개발은 유럽의 신규 유해화학물질 모니터링 네트워크인 NORMAN 네트워크와 미국 환경보호청(US EPA)이 주도하고 있으며, 각 기관의 주요 업무는 실험실 간 SNTS 기술 검증 실험, 품질 관리를 위한 도구 개발, 일관성 있는 데이터 생산을 위한 SNTS 워크플로 개발, 추정분석 목록 등의 데이터베이스 공유 활동 등이 있다. 이외 영국, 오스트리아, 덴마크, 독일, 스위스 등 다양한 국가에서도 SNTS의 활용을 위해 노력하고 있으며, 유럽의 대형 연구프로젝트인 유럽 내 인체 모니터링 연구(HBM4EU), 화학물질의 위해성 평가를 위한 파트너십(PARC)에서도 SNTS 관련 연구를 적극 수행한다.



자료: 저자 작성.

그림 1 NORMAN, US EPA의 SNTS 관련 활동 요약

2.2. 추정·비표적 분석법 개발 국내 동향

2018년부터 현재까지 국내에서 SNTS 관련 27개의 과제가 수행되었으며, 상세 활용 내용에 따라 6가지 카테고리로 구분하면 아래와 같다. SNTS 분석기술 개발은 국립환경과학원을 포함한 국가 모니터링 책임 기관에서도 수행되었으며, 다양한 분야로 응용되어 활용이 확장되어 왔다. 특히 ‘국가 환경보건 바이오뱅크 구축 및 운영 로드맵 마련’ 연구에서는 국가 모니터링 대상 시료에 SNTS를 적용하여 현재 모니터링 대상 물질이 아닌 우려 유해화학물질을 검출해 낸 바 있어, 이미 SNTS의 모니터링 체계 활용 가능성이 검증되었다.

표 1 국내 SNTS 관련 과제 수행 현황

SNTS 활용 카테고리	수행완료/수행 중인 과제 수
SNTS 분석법 개발	3
화학물질 관리를 위한 SNTS 활용	4
유해화학물질 노출 감시를 위한 SNTS의 활용	6
독성영향평가, 건강영향평가를 위한 SNTS의 활용	5
유해화학물질 노출 수사를 위한 SNTS의 활용	4
모니터링 고도화를 위한 SNTS의 활용	5

자료: 저자 작성.

3. 국내 추정·비표적 분석법 정책적 활용 기반 구축

3.1. 범용적 스크리닝이 가능한 SNTS 표준 분석 가이드라인의 개발

SNTS 표준 가이드라인의 개발은 일관성 있는 분석과 결과 보고를 위해 매우 중요하므로 이를 위해 필요한 요소가 포함된 가이드라인(안)을 제안하였다. 목차는 총 10개의 항목을 포함하여 항목별로 필요한 상세 내용을 제시하였는데, 이는 필요에 따라 개발 단계에서 가감될 수 있다.

표 2 범용 SNTS 가이드라인 목차 및 내용(안)

목차	내용
SNTS 개요	SNTS 개념, 원리, SNTS 일반적 수행 절차 등 소개
용어와 정의	용어 설명, 일반적 정의, 약어 소개
시료 수집과 전처리	매체별 표준 시료 수집법 제시 및 SNTS 분석을 위한 주의사항 명시
장비와 소프트웨어	크로마토그래프(LC, GC), 질량분석기(TOF, Orbitrap)의 SNTS 분석을 위한 최소한의 선택 기준 제시(분해능, 질량 오차 등)
데이터 처리	소프트웨어 선택, Blank 처리 등 데이터 전처리법, 통계분석 등
물질 확인 및 신뢰도 결정	신뢰도 결정법 제시(신뢰도 레벨별 기준값 제시)
정도관리	내부, 외부 표준물질 정보, Blank, 재현성, 민감도, 기기 검량선, 데이터 처리 기법(알고리즘), 워크플로 등
추정적 정량 기법	정량 기법 선택법 및 적용법 제시
결과 평가	결과 평가 요소를 상세하게 제시
결과 보고	결과를 보고할 수 있는 상세 양식 제시

자료: 저자 작성.

3.2. 추정분석 목록 마련 및 공유 시스템 및 HRMS 데이터베이스 개발

추정분석 목록에는 생산량, 배출량, 용도, 유해성, 기준치 존재 여부, 고유의 물리화학적 정보, 분석 관련 정보 등 물질에 관한 정보가 다양하게 포함되어 있을수록 결과의 신속하고 적절한 활용이 가능하다. 따라서 이미 범용화되어 있는 추정분석 목록을 통해 항목을 결정하고, 이에 따라 기본 틀을 정한 후 목록의 목적에 따라 추가 항목이 결정될 수 있도록 한다. HRMS 데이터베이스는 이미 구축된 NORMAN 네트워크의 DSFP, 또는 US EPA의 NTS Web-app을 참고하여 개발될 수 있도록 한다.

3.3. 물질 확인 신뢰도에 따른 정책적 결정 방안 제안

유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS를 적용하여 새로운 물질이 확인될 시, 그 물질은 과학적 기준에 의해 신뢰도가 결정되게 되고, 이를 바탕으로 정책적 결정이 내려지게 된다. 따라서 일반적인 SNTS 물질 확인의 신뢰도 레벨 결정을 위해 확인되는 사항과 더불어 정책적 결정 방향에 대한 의견을 제안하였다.

표 3 신뢰도 레벨에 따른 모니터링 관련 조치 결정(안)

신뢰 레벨	필수 확인 사항	확인 사항(체크리스트)		조치
레벨 1	확인된 물질과 매칭되는 물질의 표준물질과의 질량 값, 동위원소 패턴 RT, 질량 스펙트럼 일치	<ul style="list-style-type: none"> • 독성 영향 확인 • 검출 빈도 확인 • 정량값(농도) 확인 		[모니터링에 포함] ▶ 모니터링 물질로 포함 또는 관리 대상 물질로 목록화
레벨 2a	확인된 물질과 매칭되는 물질의 질량 스펙트럼 라이브러리 일치	<ul style="list-style-type: none"> • 검출 빈도 확인 • 추정적 정량 수행 및 유사 물질 기준치와 비교 	<ul style="list-style-type: none"> • 표준물질 합성 • 독성 영향 확인 	[우선관찰대상물질] ▶ 상세 검토 이후, 모니터링 물질로 포함 또는 관리 대상 물질로 목록화 [우선관리대상물질] ▶ 상세 검토 이후 모니터링 물질로 포함 또는 관리 대상 물질로 목록화
레벨 2b	매칭된 물질의 비교 가능한 질량 스펙트럼이 라이브러리에 부재하지만, (1) 기존 발표된 연구의 실험 결과와 질량 스펙트럼이 일치하는 경우; (2) 확인된 물질의 질량 스펙트럼을 통해 구조 분석 수행. 특정한 진단적 질량 스펙트럼이 존재하는 경우			
레벨 3	매칭된 물질 구조의 일부가 확인된 물질의 질량 스펙트럼으로 확인됨			
레벨 4	매칭된 물질과 확인된 물질의 질량이 작은 오차(< 5ppm)로 확인되며, 동위원소 패턴 일치	[신규 관심물질] ▶ 낮은 우선순위로 구분하며 지속적 정보 수집 및 검토 예정 물질로 포함		
레벨 5	모니터링 대상으로 고려하지 않음			

자료: 저자 작성.

3.4. SNTS 전문가 협의체 구축

앞서 언급된 여러 가지 사항들이 진행되려면 방대한 전문적 지식이 필요한 전문가 협의체의 도움이 필수적이다. 독일과 네덜란드의 가이드라인 또한 전문가 워킹그룹을 통해 개발된 바가 있듯이, 우리나라에서도 SNTS 관련 가이드라인 등의 기틀을 구축해 나갈 때, 기술적 또는 경험적 조언을 제공할 전문가 그룹이 형성되어야 한다. 따라서 협의체에 기술적, 경험적 조언을 제공할 유해화학물질 모니터링, SNTS, 화학물질 관리 전문가, 모니터링 체계 실무자 등을 목록화하였다.

표 4 SNTS 협의체 구성을 위한 연관 기관 및 부서 목록화

구분	조직	담당부서	설명
유해화학물질, 측정, 모니터링, SNTS	한국 잔류성유기오염물질 포럼 (Korea POPs* Forum)	-	2010년 발족된 다양한 분야의 유해화학물질 전문가의 국내 네트워크로, 고도화된 측정 및 모니터링 기술과 SNTS 경험자로 구성되어 있음
측정 및 모니터링	K-Water	환경에너지본부 물환경관리처	수질분석, 환경조사, 첨단기술, 분석기술, 물안전감시의 담당 부서
	한국환경공단	POPs 측정망부, POPs 배출원조사부 등 관리 매체별 다양한 부서 존재	잔류성오염물질측정망, 대기환경측정망, 수질자동측정망 등 운영
	해양환경공단	해양환경조사연구원 해양수질처	해양환경 측정망 관련 매체별 잔류성유기오염물질 분석 수행 등
측정, 모니터링 체계 및 정책	국립환경과학원	환경건강연구부 환경보건연구과 물환경연구부 물환경공학연구과 환경기반연구부 상하수도연구과, 환경측정분석센터	국민환경보건 기초조사, 어린이 환경보건 출생코호트, 물환경측정망, 퇴적물측정망, 먹는물 미규제 미량오염물질 조사, 측정 정도관리, 공정시험기준, 국제표준 등
정책 결정자	환경부	화학물질정책과	주요 정책 결정 및 수립

주: *Persistent Organic Pollutants.
 자료: 저자 작성.

4. 국내 추정·비표적 분석법 도입 방안 및 중장기 로드맵

4.1. 인체 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입 제안

인체 유해화학물질 모니터링 체계의 경우, 노출농도가 높은 집단을 선택하여 SNTS를 적용하는 방법을 제안한다. 노출농도 기반의 선정 방식 외의 다른 선정 근거가 될 수 있는 것은 측정된 유해화학물질의 농도 분포 패턴이 다른 대상에 비해 독특하거나(특정 물질이 매우 높거나), 설문조사를 기반으로 특정 지역에 거주하는 등의 특이 사항이 고려될 수 있다. 또한 분석 난이도를 고려했을 때, 소변이 혈액에 비해 방해 물질이 적어 분석 절차가 간소하므로 소변 시료를 먼저 적용하는 방안도 제안한다. SNTS 기술이 어느 정도 보편화가 되었을 때, 활용할 수 있는 또 하나의 방법은 현재 모니터링 대상 물질의 대체재, 이성질체, 동족체 등을 함께 추정 분석 목록에 포함하는 것이다. 따라서 실제 모니터링 대상 물질과 관련 있는, 즉 독성 영향이 유사할 가능성이 높은 물질의 존재 여부를 파악할 수 있을 것이다.

표 5 인체 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입(안)

체계	추정 분석 적용(안)
국민환경보건 기초조사 (국립환경과학원)	<ul style="list-style-type: none"> • 각 주기의 분석 이후, 노출량 계산하여 10~15% 시료 선정 • 시료를 풀링해서 활용 • 설문조사 결과에 따라 집단 선정 가능 • 분석 난이도 고려, 소변에 우선 적용될 수 있음 • 현재 분석 대상물질의 관련 물질 통합 스크리닝
어린이 환경보건 출생코호트 (국립환경과학원)	<p>[상세 코호트]</p> <ul style="list-style-type: none"> • 일반 분석물질 분석 후, 노출량 계산하여 10~20% 시료 선정 • 시료를 풀링해서 활용 • 설문조사 결과에 따라 집단 선정 가능 • 연속적으로 수집된 시료에 대해 적용 • 분석 난이도 고려, 소변에 우선 적용될 수 있음
유해물질 인체노출 안전조사(식약처)	<ul style="list-style-type: none"> • 대상 물질과 목적이 이미 정해져 있으나, 위와 마찬가지로 노출량 기반 SNTS 분석 대상 선정 가능 • 위해성평가 대상물질의 대체재, homologue 등을 선정해서 추가 분석 가능

자료: 저자 작성.

4.2. 환경 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입 제안

환경 시료의 경우, 오염원으로 예측되는 지역(산단 등)이 가까운 지역 또는 과거의 자료를 분석하여 농도가 높거나 특이했던 지점을 선정하고, 추정 분석을 수행하는 방법이 가장 합리적인 접근법이라고 생각된다. 이후 추정 분석의 결과에 따라 지역의 정밀 분석을 수행할 수 있다. 다양한 매체가 수집되는 측정망의 경우, 물 시료 또는 (물 시료가 해수인 경우) 퇴적물 시료에 SNTS를 우선적으로 적용하는 것이 시료 분석의 난이도 측면에서 용이할 것이다.

표 6 환경 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입(안)

체계	추정 분석 적용(안)
잔류성오염물질측정망	<ul style="list-style-type: none"> • 과거 농도 자료와 정점 위치를 분석하여 우려 지역 선정 • 총 정점 수의 10% 정점에 추정 분석 적용 • 분석 난이도 고려, 물에 우선 적용될 수 있음
해양생태계 내 잔류성유기오염물질조사	<ul style="list-style-type: none"> • 과거 농도 자료와 정점 위치를 분석하여 우려 지역 선정 • 분석 난이도 고려, 퇴적물에 우선 적용될 수 있음
물환경측정망	<p>[수질]</p> <ul style="list-style-type: none"> • 산단하천, 주요 지점 등 정점별로 모니터링되는 물질을 파악하여 모니터링 항목이 겹치는 정점 분석, 연 1회 적용 • 산단하천 연 1회 적용(같은 공단의 여러 지점은 풀링) • 측정망 분석 결과 중 특이 측정값을 나타내는 정점 포함 고려 • 분석 난이도 고려, 물에 우선 적용될 수 있음
	<p>[퇴적물]</p> <ul style="list-style-type: none"> • 산단정점과 겹치거나 유사한 정점 파악 필요, 이후 정점 수 결정 • 퇴적물 연 1회 적용
먹는물 수질감시	<ul style="list-style-type: none"> • 추정 분석을 활용하여, 물질 우선순위를 설정하고 있음 • 산단지역 근처 또는 더 많은 주민에게 용수공급이 되는 지역 위주로 우선 접근

자료: 저자 작성.

5. STNS 도입 로드맵 제안

앞서 검토된 내용을 기반으로 SNTS 도입 중장기 로드맵을 제안하였다. 크게 SNTS 기반 구축과 기술 고도화로 구성된 중장기 로드맵의 이행을 통해 우리나라 유해화학물질 모니터링 체계가 가지고 있는 한계와 사각지대를 보완하고 이를 통해 궁극적으로 국민과 환경보호에 기여할 수 있을 것이다.

	국내 SNTS 활용성 제고를 위한 기반 구축				SNTS 활용 고도화		
	2025	2026	2027	2028	2029	2030	2030~
유해화학물질 모니터링 체계 고도화	SNTS 표준분석법 개발						국민환경보건기초조사 (소변 시료 우선 적용)
		국가 HRMS 데이터베이스 구축			인체 모니터링(고노출군) SNTS 적용		
		추정분석 목록 국내 공유 시스템 개발(선택)			환경 모니터링(산단 수계) SNTS 적용		
	STNS 협동 연구						물환경측정망 또는 전류성오염물질 측정망(수질)
	SNTS 전문가 협의체 구축 및 활용						
SNTS의 기술 고도화 및 범용적 활용	SNTS 오픈소스 workflow 개발						
	SNTS 도입을 통한 화학물질 우선순위설정 기법 개선 방안						
	SNTS 적용 확장을 위한 다양한 연구(예: 하수역학, EDA와의 결합, 오염원 추적 기술 개발 등)						

자료: 저자 작성.

그림 2 SNTS 도입을 통한 유해화학물질 모니터링 체계 고도화 로드맵

6. 결론

본 연구에서는 국내 유해화학물질 모니터링 체계를 고도화하고자 SNTS의 도입 방안을 다각적으로 검토하고 중장기 로드맵을 제안하였다. 국내외 기술 발전 및 정책적 활용 동향을 검토하여 국내 SNTS 도입 기반 구축을 위해 필요한 사항을 목록화하였으며, 우선순위 과제를 제시하고 실제 도입 방안을 제안하였다. 마지막으로, SNTS 도입 기반 구축에서 기술 고도화 및 정책 적용에 이르기까지의 단계를 포함한 로드맵을 제시했다. 이를 통해 현 유해화학물질 모니터링 체계를 개선 및 보완하고, 나아가 전반적인 화학물질 관리 체계의 패러다임 전환을 도모할 수 있을 것이다. 본 연구 결과는 기존의 모니터링 체계를 보완하는 혁신적인 접근법으로, 국내 유해화학물질 관리의 사각지대를 줄이는 데 중요한 기여를 할 것으로 기대된다. SNTS 기법의 도입 및 확산은 과학적 기반의 정책 결정을 지원하고, 궁극적으로 국민과 환경의 안전을 강화하는 데 핵심적인 역할을 할 것이다.

주제어 추정 분석, 비표적 분석, 신규 유해화학물질, 화학물질 모니터링, 화학물질 관리

CONTENTS

추정·비표적 분석기법 도입을 통한 유해화학물질 모니터링 고도화 방안 연구

국문요약

i

제1장

서론

- | | |
|-------------|---|
| 1. 연구의 필요성 | 1 |
| 2. 연구의 목적 | 5 |
| 3. 연구 수행 체계 | 6 |

제2장

추정·비표적 분석기법

- | | |
|-------------------------|----|
| 1. 추정·비표적 분석기법 개요 | 7 |
| 2. 상호보완적 유해화학물질 모니터링 기법 | 15 |

제3장

추정·비표적 분석기법 해외 동향

- | | |
|---------------------|----|
| 1. NORMAN 네트워크 | 20 |
| 2. 미국 환경보호청(US EPA) | 39 |
| 3. 영국 환경청 | 46 |
| 4. 오스트리아 환경청 | 48 |
| 5. 덴마크 환경보호청 | 49 |
| 6. 독일 연방환경청 | 50 |
| 7. 스위스 EAWAG | 51 |
| 8. 네덜란드 | 53 |
| 9. 기타 SNTS 프로젝트 | 56 |

제4장	추정·비표적 분석기법 국내 동향	
	1. 국내 수행 과제 현황	61

제5장	국내 유해화학물질 모니터링 체계	
	1. 국내 유해화학물질 모니터링 체계 조사	77

제6장	추정·비표적 분석 정책적 활용 기반 구축을 위한 동향 분석	
	1. SNTS 정책적 활용 기반 구축을 위한 동향 분석	99
	2. 국내 SNTS 기술 발전 현황 파악	99
	3. SNTS 표준 가이드라인 개발	104
	4. SNTS 확인 물질의 신뢰도에 따른 정책 결정	111
	5. 추정적 정량(Semi-quantification) 기법	112
	6. 추정 분석 목록 및 HRMS 데이터베이스 구축	113
	7. 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입 사례	114
	8. 기타 NTS 활용 사례	116
	9. 시사점	117

제7장	국내 추정·비표적 분석법 도입 방안 및 중장기 로드맵	
	1. 국내 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입을 위한 선행 작업	119
	2. 국내 유해화학물질 체계 내 SNTS 도입(안)	126
	3. 국내 유해화학물질 체계 내 SNTS 도입을 통한 고도화 로드맵	136

제8장	결론 및 향후 과제	
	1. 결론	137
	2. 향후 과제 제안	138

참고문헌		139
-------------	--	-----

부 록	I. Study Reporting Tool(SRT) - US EPA	153
------------	---------------------------------------	-----

Executive Summary		157
--------------------------	--	-----

■ 표차례

표 2-1	WBE를 이용하여 화학물질 노출이 조사된 사례	18
표 3-1	NORMAN 네트워크 내 NTS 워킹그룹의 주요 업무 내용	22
표 3-2	NORMAN SLE에서 제공하는 주요 추정 분석 목록	25
표 3-3	DSFP 내 업로드된 파일의 상세 정보	28
표 3-4	NORMAN 물질 우선순위 선정의 카테고리화 기준(표적 분석)	30
표 3-5	NORMAN 물질 우선순위 선정의 카테고리화 기준(추정 분석)	33
표 3-6	SNTS가 지원할 수 있는 규제 이슈 목록	38
표 3-7	NTS의 도입을 위한 규제기관과 연구자의 실제 또는 잠재적 기여	38
표 3-8	US EPA에서의 SNTS 응용 분야	39
표 3-9	NTS 프레임워크와 관련된 각 분야 과학자의 필요 내용	42
표 3-10	EAA의 SNTS로 확인된 물질의 등급 개요	49
표 3-11	정기적 모니터링과 SNTS 융합 시의 고려 사항	55
표 4-1	국내 추정·비표적 분석 관련 과제 목록	62
표 4-2	미관리 수질오염물질 탐색체계 구축 연차별 추진 일정	68
표 4-3	추정·비표적 분석 수행으로 제안된 모니터링 물질	71
표 5-1	「환경보건법」의 국민환경보건 기초조사 관련 조항	78
표 5-2	국민환경보건 기초조사 조사 내용	79
표 5-3	국민환경보건 기초조사 기수별 모니터링 대상 유해화학물질	80
표 5-4	코챌스 시료 수집 개요	82
표 5-5	코챌스 생체모니터링 물질 목록	84
표 5-6	유해물질 인체노출 안전조사 분석 대상 물질 목록	86
표 5-7	「잔류성오염물질 관리법」의 잔류성오염물질 측정망 관련 조항	87
표 5-8	잔류성오염물질 측정망 측정항목(수은 제외)	88
표 5-9	「해양환경관리법」의 해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사 관련 조항	89
표 5-10	「해양환경관리법 시행규칙」 내 해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사 관련 조항	89
표 5-11	「환경정책기본법」 내 물환경측정망 관련 조항	91
표 5-12	「물환경보전법」 내 물환경측정망 관련 조항	91
표 5-13	물환경측정망 측정 주기 및 조사항목(일부)	93
표 5-14	「수도법」 내 먹는물 수질기준 관련 조항	94
표 5-15	먹는물 수질감시항목 운영 등에 관한 고시, [별표 1] 중 유해영향 유기물질 목록	95
표 5-16	「환경정책기본법」의 국가환경시료은행 관련 조항	97

표 5-17	「환경정책기본법 시행령」의 국가환경시료은행 관련 조항	97
표 5-18	국가환경시료은행 환경시료 분양 절차	98
표 6-1	국내 추정·비표적 분석 수행 과제 활용 기기 및 데이터 분석 기법	102
표 6-2	독일 물 분석용 NTS 가이드라인 목차	105
표 6-3	독일에서 수행된 SNTS 협동 연구 구성	107
표 6-4	네덜란드 물 분석용 NTS 가이드라인 목차	108
표 6-5	신뢰도 수준의 확인을 위해 필요한 데이터 종류	109
표 6-6	NORMAN 네트워크의 NTS의 신뢰도 결정법과 추가 의견	110
표 6-7	NORMAN 가이드라인에서 제시하는 NTS 연구 보고 포함 내용 제안 예시	111
표 6-8	NORMAN 추정 분석 목록 SUSDAT에 물질별로 포함된 정보(예)	113
표 6-9	SNTS 도입을 위한 기반 검토 사항, 결과 및 우선순위	118
표 7-1	범용 SNTS 가이드라인 목차 및 내용(안)	120
표 7-2	NORMAN 추정 분석 목록 SUSDAT에 물질별로 포함된 정보(일부)	121
표 7-3	신뢰도 레벨에 따른 모니터링 관련 조처 결정(안)	123
표 7-4	SNTS 협의체 구성을 위한 연관 기관 및 부서 목록화	124
표 7-5	인체 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입(안)	128
표 7-6	국민환경보건 기초조사 4기 측정 바이오마커 및 검출률	131
표 7-7	대상자 특성에 따른 Exposure Load 평균값	133
표 7-8	Exposure Load를 이용한 SNTS 대상자 선정 방안(숫자는 대상자 수를 의미)	134
표 7-9	환경 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입(안)	135
표 8-1	SNTS 도입 기반 구축 및 활용을 위한 향후 과제 제안	138



■ 그림차례

그림 1-1	세계 10대 화학물질 판매국	2
그림 1-2	국내 연도별 발암물질 배출량 현황	2
그림 1-3	일반적인 화학물질 모니터링 절차도	4
그림 1-4	미지 화학물질의 영역	4
그림 1-5	연구 수행 체계	6
그림 2-1	분해능에 따른 peak 분리 (a)QTOF-MS (b)Orbitrap-MS	9
그림 2-2	표적분석 및 추정·비표적 분석의 일반적 절차	10
그림 2-3	추정·비표적 분석 방법으로 검출이 가능한 화합물의 범위	10
그림 2-4	화학물질 특성에 따른 기기 선택 방법	11
그림 2-5	SNTS에서 확인된 물질의 확인 신뢰도 기준	12
그림 2-6	SNTS로 확인된 과불화화합물의 신뢰도 결정 방법	14
그림 2-7	머신러닝을 통한 NTS 확인물질 신뢰도 부여 방법	15
그림 2-8	EDA 절차 모식도	17
그림 3-1	NORMAN SLE와 연결된 기타 데이터베이스	25
그림 3-2	회고적 분석이 수행된 시료(세로)와 검출된 물질(가로) 목록	27
그림 3-3	DSFP 내 데이터 저장 프로세스	29
그림 3-4	NORMAN의 관리대상 물질 우선순위 설정 워크플로	32
그림 3-5	표적 분석, 추정 분석의 우선순위 설정 알고리즘 통합 결과의 예(하수에 적용)	35
그림 3-6	NORMAN의 규제기관, 정책결정자를 위한 워크숍	36
그림 3-7	NTS 기법과 HTS 도구의 통합 프레임워크	41
그림 3-8	ENTACT의 프로젝트 모식도	43
그림 3-9	BP4NTA와 ENTACT의 역할	44
그림 3-10	전통적 위해성 평가 패러다임 내 표적, 비표적 분석의 통합 예	45
그림 3-11	US EPA의 NTS WebApp의 작용 절차도	46
그림 3-12	영국 환경청의 우선순위와 선제 경고 시스템(PEWS)	47
그림 3-13	물질 확인 및 신뢰도 수준 결정을 위한 NTS 워크플로	50
그림 3-14	독일 연방환경청 NTS 프로젝트 개요	51
그림 3-15	바젤 수질측정소의 SNTS 분석 체계	53
그림 3-16	라인강 비표적 분석 프로젝트 개요	56
그림 3-17	라인강 비표적 프로젝트 컨소시엄	57
그림 3-18	HBM4EU의 내 SNTS 업무	57

그림 3-19	PARC 내 SNTS를 활용한 PFAS 분석 전략	59
그림 3-20	PARC 이니셔티브 내 EDC의 모니터링 전략	60
그림 4-1	환경 시료 적용성 평가를 위한 표적, 추정 분석 절차	64
그림 4-2	환경 및 제품시료에 적용된 추정·비표적 분석 프로토콜	65
그림 4-3	SNTS를 통한 물질 확인을 위한 워크플로	66
그림 4-4	EDCs 통합 위해성평가 및 모델 개발 과제의 비표적 분석 개념도	67
그림 4-5	혈액시료 추정·비표적 분석 프로토콜	69
그림 4-6	소변시료 추정·비표적 분석 프로토콜	70
그림 4-7	SNTS를 활용한 수산물 중 위해요소 우선순위 설정기법	73
그림 4-8	SNTS와 EDA의 접목을 통한 독성 분석 플랫폼 구축 개요	74
그림 4-9	미세먼지 오염원 추적을 위한 표적, 비표적 분석 워크플로	75
그림 4-10	미세먼지 오염원 추적을 위해 개발·적용된 환경 수사기법 모식도	75
그림 5-1	국민환경보건 기초조사 추진체계	79
그림 5-2	유해물질 인체노출 안전조사 추진 체계	85
그림 5-3	잔류성오염물질 측정망 정점도	88
그림 5-4	해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사 정점도	90
그림 5-5	물환경측정망 운영 체계	92
그림 5-6	국가환경시료은행 환경, 인체시료 저장 예시	98
그림 6-1	NTS 분석을 통해 분석되는 화학물질의 범위	100
그림 6-2	독일 가이드라인 내 SNTS 검출 물질 신뢰도 구분 기준	106
그림 6-3	독일 가이드라인 제시 SNTS workflow의 예와 물질 확인 신뢰도	106
그림 6-4	FLEHS의 인체 바이오모니터링 주기별 특징과 목표	116
그림 7-1	Exposure load 계산을 위한 분석 대상자 추출	129
그림 7-2	EL-P50과 EL-P90 적용 시 대상자 분포	132
그림 7-3	SNTS 도입을 통한 유해화학물질 모니터링 체계 고도화 로드맵	136



제 1 장

서론

1. 연구의 필요성
2. 연구의 목적
3. 연구 수행 체계

1. 연구의 필요성

현대사회에서 화학물질은 인간의 삶에 밀접하게 개입되어 있으며, 개인 기호품부터 다양한 생활용품, 의약품 등 매우 넓은 분야에서 사용되고 있다. 2024년 3월 기준, 세계에서 가장 큰 화학물질 데이터베이스인 SciFinder에는 275백만 종 이상의 화학물질이 등록되어 있으며,¹⁾ 15,000종의 물질이 매일 추가되고 있다.²⁾ 또한 전 세계적으로 20만여 종의 화학 물질이 유통되고 매년 3천여 종의 화학물질이 새로 개발되고 있다.³⁾

우리나라에서도 화학물질의 생산과 사용은 지속해서 증가하고 있다. 2023년 유럽 화학산업 협회(Cefic)가 발표한 자료에 따르면, 우리나라는 중국, 유럽연합, 미국, 일본 다음으로 세계에서 다섯 번째로 화학산업 매출액이 높다(그림 1-1 참조).⁴⁾ 또한, 환경부의 '2018년도 화학 물질 통계조사' 결과를 살펴보면, 2018년 기준 우리나라에서 약 29,000종의 화학물질이 보고되었고, 약 63,000만 톤이 유통되었다.⁵⁾ 이는 이전 조사 연도인 2016년에 비해 물질 수는 41% 증가, 유통량은 14%가 증가했음을 의미한다. 2021년도 화학물질 배출량 조사에 따르면, 사용량 증가에 따라 화학물질의 환경 중 배출량도 증가하고 있으며, 이와 더불어 발암물질, 휘발성 유기화합물 등 유해화학물질의 배출량도 지속해서 증가하고 있다(그림 1-2 참조).⁶⁾

1) CAS, "CAS Databases", 검색일: 2024.3.22.

2) Eawag, "Searching for Unknown Substances", 검색일: 2024.3.22.

3) 환경부(2020), p.2.

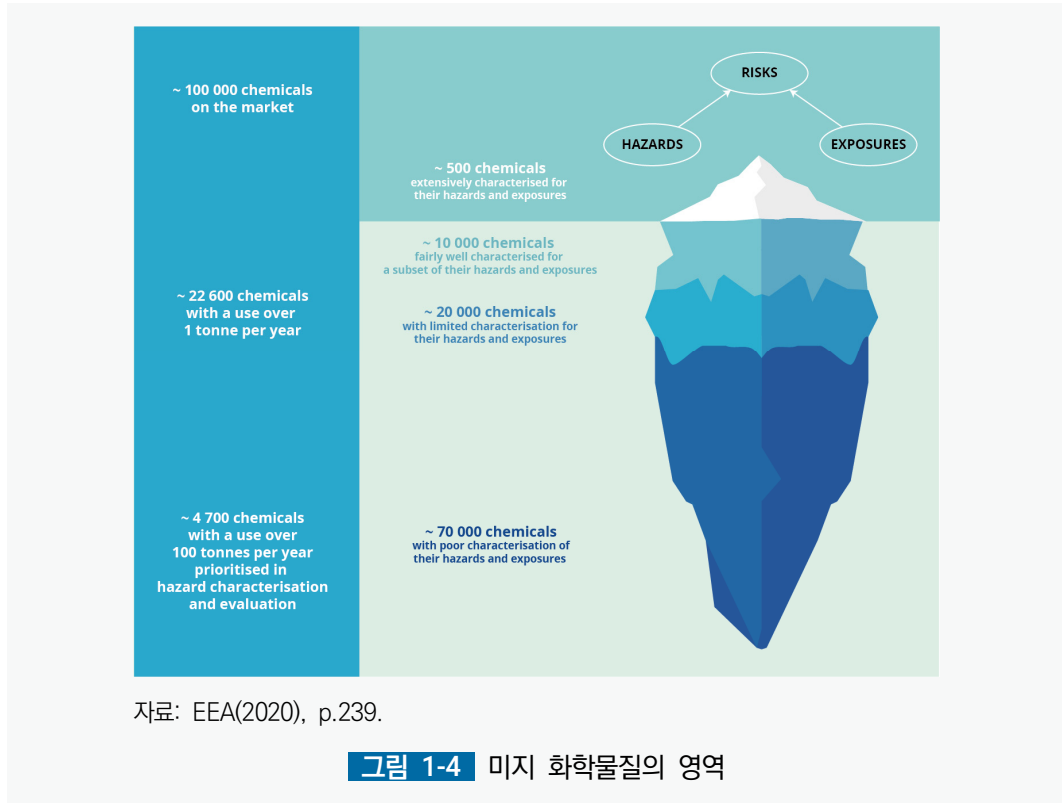
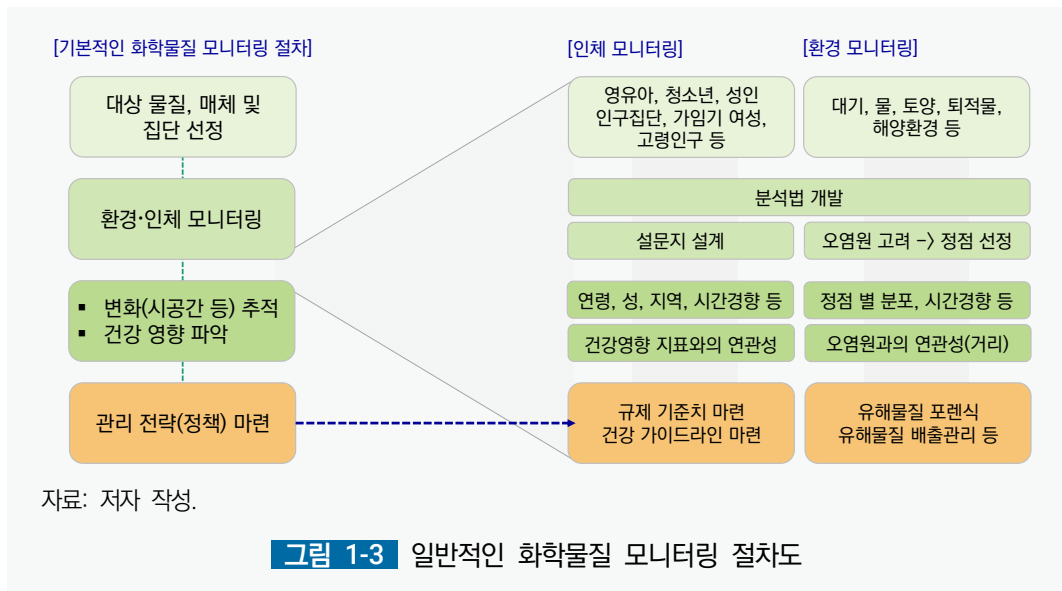
4) Cefic(2023), "Profile", p.6, 검색일: 2024.4.24.

5) 환경부(2021), p.2.

일반적으로 수행되는 유해화학물질 모니터링 절차를 <그림 1-3>에 나타내었다. 화학물질 모니터링을 수행할 때, 우선적인 것 중 하나는 분석 대상이 될 화학물질을 선정하는 것이다. 모니터링 대상 화학물질은 생산량, 독성, 생물농축성 등 매체에 관련된 특이 사항, 국내 사용 화학물질, 선진국 환경 기준물질 및 후보물질, 국내 모니터링 데이터베이스, 국제적 또는 사회적 관심 여부 등 여러 가지 요소가 고려되어 선정된다. 모니터링 대상 물질이 선정되면, 대상 화학물질을 관심 매체로부터 효율적으로 추출하는 방법을 개발하고, 적합한 기기분석을 수행하여 화학물질의 검출 여부 및 농도를 확인한다. 이렇게 얻어지는 결과를 활용하여 농도, 패턴, 시공간적 경향 등을 파악하여 인체 또는 환경을 유해화학물질로부터 보호할 수 있는 정책적인 전략을 수립하게 된다. 이는 화학물질을 모니터링하는 일반적인 방법으로, 표적 분석(Target analysis)으로 일컬어지며 대다수 국가에서 이러한 절차에 따라 모니터링을 수행 중이다.

하지만, 언급된 유해화학물질 모니터링 방식의 주요한 한계점 중 하나는, 선정된 물질만을 제한적으로 확인할 수 있다는 것이다. 유럽환경청(EEA: European Environment Agency)이 2020년에 발간한 보고서에 따르면, 현존하는 화학물질 중 대략 500종의 유해성과 노출이 잘 알려졌지만, 약 70,000종의 화학물질의 유해성과 노출이 밝혀지지 않고 있다고 제시하였다(그림 1-4 참조).⁸⁾ 이처럼 화학물질의 유통량 및 배출량이 계속해서 증가하고 신규 유해화학물질이 매년 개발되는 현대사회에서는, 물질을 사전에 선정하는 일반적인 화학물질 모니터링 방식이 유해화학물질을 감시하는 데 있어 충분한 역할을 하지 못할 가능성이 높다. 또한 환경과 인간은 혼합물 형태로 화학물질에 노출되게 되는데, 현재의 표적 분석 모니터링 체계에서는 혼합물 형태를 파악하기 어렵고, 유해성을 지닌 물질과 물리화학적 유사성을 지닌 대체 물질 등을 일괄적으로 파악하기 어렵다. 따라서 화학물질 관리의 사각지대가 존재하게 된다. 2018년 대구 정수장에서의 일부 과불화화합물 검출, 2021년 국내 화장품 일부에서 과불화화합물 검출, 대표적인 내분비계장애물질인 비스페놀 A의 대체재인 비스페놀 S의 검출 증가가 대표적인 사례이다.

8) EEA(2020), p.239.



이러한 한계를 극복하기 위해 최근 유해화학물질 측정 분야에서는 고분해능 질량분석기 (HRMS: High Resolution Mass Spectrometry)를 활용하여 기존에 알려지지 않은 신규 또는 미지의 화학물질을 분석해 낼 수 있는 추정·비표적 분석(SNTS: Suspect and Non-Target Screening)⁹⁾ 기법이 활발하게 개발 및 논의되고 있다. SNTS 기법은 화학물

9) 비표적 분석기법은 Non-Target Screening(NTS) 또는 Non-Target Analysis(NTA)로 칭해지나, 본 연구에서는 NTS로 통일하였다.

질을 더욱 정밀하게 측정할 수 있는 비행시간(ToF: Time-of-Flight) 질량분석기, 오비트랩(Orbitrap) 질량분석기와 같은 고분해능 분석기기를 활용하여 관심의 대상이 되는 매체 내 존재하는 수만 종의 화학물질을 동시에 스크리닝한 후, 정밀한 데이터 분석을 통해 존재하는 또는 관심 있는 물질을 찾아내는 기법이다.¹⁰⁾ SNTS는 표준물질 없이 기존에 존재 여부가 확인되지 않던 화학물질을 발견할 수 있다는 장점을 기반으로, 표적 분석의 사각지대를 보완하는 역할이 가능하며 향후 그 활용도가 더욱 높아질 것이라고 기대된다. 현재 미국, 스위스, 독일, 네덜란드 등 여러 국가에서 모니터링 내 SNTS의 개발과 도입을 위한 업무를 수행 중이며 이를 통해 그 활용성이 더욱 증대될 것이라고 기대된다.

또한 국내에서도 「환경보건법」 제6조에 따라 10년 주기로 수립되는 『환경보건종합계획』에서 생체 시료 분석 방법 개선과 관련하여 신규 분석기법(비표적 스크리닝, 동시분석법 등) 도입에 대해 언급하였으며, 「잔류성오염물질 관리법」 제5조에 따라 5년 주기로 수립되는 『잔류성오염물질 관리 기본계획』에서도 비표적 방식의 거동 특성 연구가 잔류성오염물질 배출 저감조치 강화를 위한 정책에 활용되고 있음을 명시하였다. 이처럼 비표적 분석기법의 정책적 활용성은 다양한 분야에서 계속 논의되어 왔다.

따라서 본 과제에서는 국내 유해화학물질 모니터링 체계에 추정·비표적 분석 기법을 도입할 수 있는 방안 및 전략을 검토하고, 이를 기반으로 향후 추정·비표적 분석의 정책적 활용 전략 및 중장기 로드맵을 마련하여 국내 유해화학물질 모니터링 기술을 고도화하고 적용 범위를 확대하고자 한다.

2. 연구의 목적

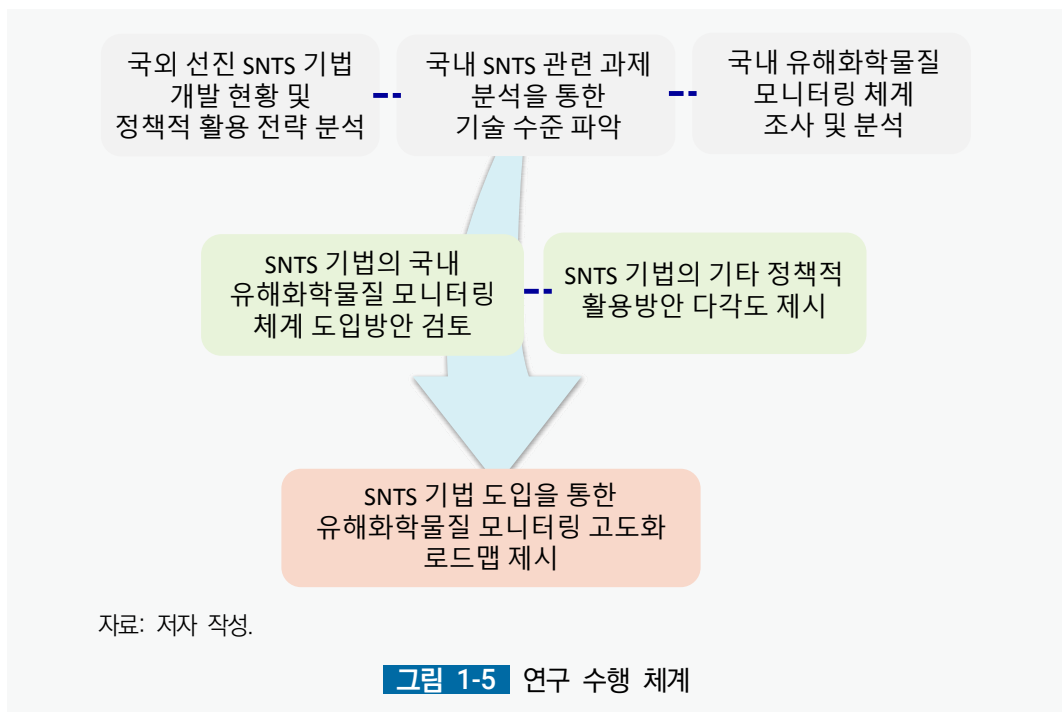
본 연구의 목적은 선진 유해화학물질 모니터링 기술인 추정·비표적 분석기법(SNTS)의 방법론, 국내·외 동향 등을 상세히 검토하고, 이를 바탕으로 SNTS를 도입하여 국내 유해화학물질 모니터링 체계를 고도화하는 방안을 제안하는 것이다. 나아가 국내 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS의 중장기적 도입 로드맵을 제시하고자 한다. 본 연구를 통해 현 국내 유해화학물질 모니터링 체계의 사각지대를 보완하고, 궁극적으로 더 나은 환경 및 국민건강 보호에 기여하고자 한다.

10) Hollender et al.(2023), p.18.

3. 연구 수행 체계

연구의 수행 체계를 <그림 1-5>에 나타내었다. 우선 SNTS에 관한 논의가 활발히 진행되어 온 유해화학물질 관리 선진 국가의 SNTS 기술개발 및 논의 현황을 검토한다. 세계적인 기술 발전 현황에 대한 이해를 바탕으로 국내에서 현재까지 수행된 SNTS 과제를 검토하고 국내 기술의 발전 수준을 파악한다. 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입 방안 검토를 위하여 국내법 기반 인체 및 환경 중 유해화학물질 모니터링 체계(목적, 대상, 시료, 주기 등)를 분석한다.

이렇게 수집된 정보를 바탕으로 국내 유해화학물질 모니터링 체계에 SNTS를 어떻게 도입할 수 있을지 구체적인 방안을 정리하고, 이 외에도 SNTS가 활용될 수 있는 기타 정책적인 활용 방안을 제안한다. 검토된 모든 내용을 바탕으로 국내 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입을 통한 중장기적 고도화 로드맵을 제시한다.



제 2 장

추정·비표적 분석기법

1. 추정·비표적 분석기법 개요
2. 상호보완적 유해화학물질 모니터링 기법

대부분 국가에서 수행하고 있는 유해화학물질 모니터링은 물질을 미리 선정하고 대상 물질을 탐색하는 표적 분석법을 활용한다. 표적 분석은 일반적인 유해화학물질 모니터링에 가장 보편적으로 활용되고 있는 분석기법으로 사전에 분석 대상 물질을 결정하여 시료를 정밀하게 분석하는 방법이다. 표적 분석기법은 개별 화학물질의 규제와 발맞추어 발전해 왔으며, 정확하고 신뢰성 있는 결과를 제공한다는 장점이 있다.¹¹⁾ 하지만 이러한 표적 분석은 새로운 오염물질이나 예상치 못한 물질을 탐지하지 못한다. 따라서 화학물질 사용량 증가에 따른 더 방대한 화학물질 조사의 필요성에 의해 2010년대 중반부터 추정·비표적 분석기법이 주목 받기 시작했다. 본문에서는 추정·비표적 분석의 개념과 활용 방안 등을 설명하고 이를 중심으로 하여 국내 유해화학물질 모니터링 체계를 고도화할 수 있는 상호보완적인 신규 모니터링 기법을 검토하였다.

1. 추정·비표적 분석기법 개요

가. 배경

SNTS의 발전은 질량분석기(MS: Mass Spectrometry)의 개발과 함께 알려지지 않은 물질(Unknown pollutants)을 확인하는 분석기법 개발이 시작되었고, 강, 퇴적물 등에서 확인된 물질의 구조를 검증하는 연구가 수행되었다.¹²⁾¹³⁾ 20세기 말, 3가지의 주요 기술 발전이

11) Pourchet et al.(2020), p.105545.

12) Jungclaus et al.(1978).

복잡한 환경 시료에서 미지 물질의 구조 확인을 가능하게 하였는데, 그 내용은 아래와 같다.

- 분석기기¹⁴⁾에서 높은 민감도를 유지하는 더 부드러운 이온화 기술의 개발
- 발견되는 물질이 더 작은 질량의 차이로 분해될 수 있도록 하는 민감한 고분해능질량 분석기(HRMS)의 개발
- 연구자가 오픈된 공간에서 데이터를 교환하고 처리할 기회를 제공해 주는 인터넷의 개발

이 중에서도 HRMS는 정교한 질량 측정 정확도와 높은 분해능을 제공하며, 넓은 범위의 분자량을 탐색할 수 있어, 환경이나 인체 시료 내 존재하는 다양한 물질을 동시 분석할 기회를 제공하였다. 대표적으로 활용되고 있는 HRMS는 비행시간 질량분석기와 오비트랩 질량분석기가 있다(그림 2-1 참조).¹⁵⁾ 질량분석 기술의 개발과 함께 화학물질 데이터베이스 내 정보 등록 수 또한 급격하게 늘어났다. 대표적인 플랫폼으로는 ChemSpider, PubChem 등이 있으며 이를 통해 화학물질에 대한 정보를 공유하게 되면서 SNTS의 발전이 가능하게 되었다.

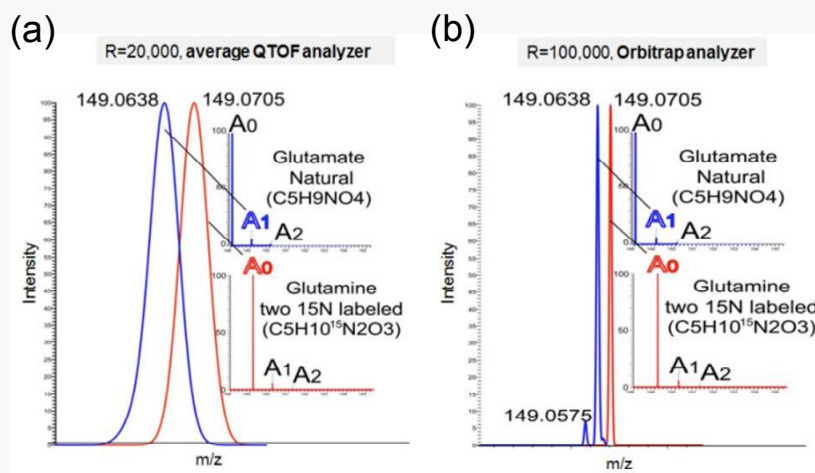
나. SNTS 적용 절차

표적분석과 SNTS는 공통적으로 시료 채취부터 시작하지만, 그 이후의 절차에서 차이를 보인다(그림 2-2 참조). 표적 분석법은 방해 물질의 간섭을 최소화하기 위해 여러 단계의 전처리를 거쳐, 크로마토그래프-질량분석기에 주입된다. 이때, 분석 대상물질의 정확한 판별과 정량을 위해 표준물질을 이용한다. 또한 물질의 머무름 시간(RT: Retention Time) 변화를 감지하고 실험 과정 또는 기기분석으로 인한 오차의 회수율을 보정하기 위해 동위원소 치환 표준물질이 활용되기도 한다. 이 방법은 특정 물질에 대해 높은 정확도와 정밀도를 제공한다.

13) Sheldon et al.(1978).

14) 기체 크로마토그래프-질량분석기(GC-MS: Gas Chromatography-MS) 또는 액체 크로마토그래프-질량분석기(LC-MS: Liquid Chromatography-MS)와 같은 분석기기를 뜻함.

15) 비행시간 질량분석기는 물질이 고유한 질량에 따라 다른 속도로 비행하여 검출기 도달 소요 시간이 다름을 이용하는 분석법이며 오비트랩 질량분석기는 푸리에 변환(Fourier transformation)에 의한 질량 스펙트럼을 얻는 기법임.



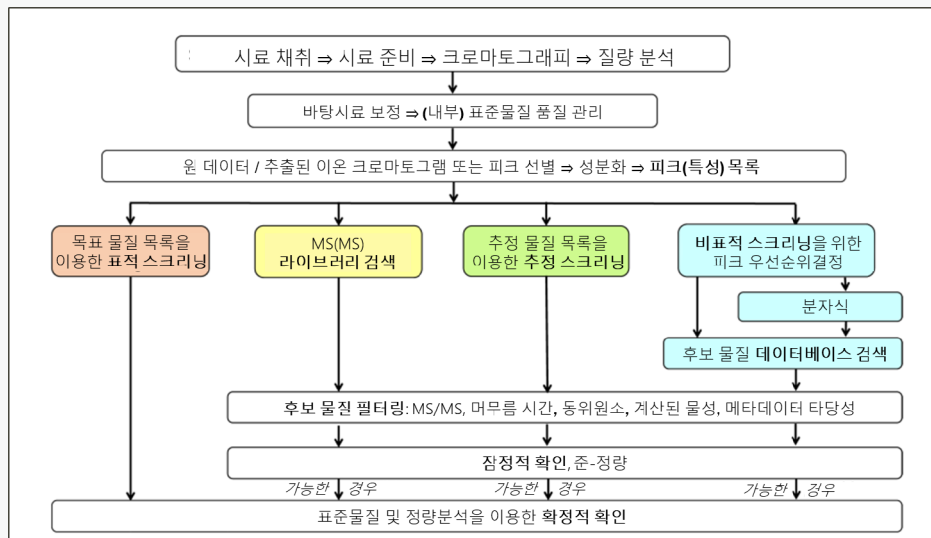
자료: ThermoFisher, “대사체학을 위한 HRMS 질량분석법”, 검색일: 2024.5.17.

그림 2-1 분해능에 따른 peak 분리 (a) QTOF-MS (b) Orbitrap-MS

반면 SNTS는 전처리를 최소화하고, 모든 물질에 대한 스캔¹⁶⁾이 가능한 고분해능 크로마토그래프-질량분석기에 주입된다. 이후 표준물질이 있는 물질은 표적 분석과 같은 절차로 물질을 정성하며 추정 분석은 기기 제조사가 제공하는 라이브러리, 오픈소스 라이브러리 또는 사용자의 목적에 따라 매체 및 환경에 맞춘 추정물질 리스트에서 의심 물질을 정성하는 작업을 통해 수행된다. 이때, 기기분석으로 얻어진 크로마토그램 내 적용된 대상 물질 목록과 일치하는 물질이 있는지 확인하는 작업을 거친다. 일반적으로 분자 질량, 동위원소 분포 패턴, 질량 쪼개짐 이온을 확인하고 예측되는 머무름 시간 등을 활용하여 물질을 최종적으로 의심 물질을 확인한다. 비표적 분석은 총 크로마토그램에서 일정한 기준으로 노이즈(Noise)를 제거하고 데이터에서 추출한 고유의 특징(Feature)을 바탕으로 미지의 물질을 추정하는 과정을 거친다.

SNTS의 주요 목적은 표적 분석에서 정성하지 못한 물질의 유무를 판단하는 것이다. 그러나 이 방법의 효과는 물질의 분자량, 극성, 휘발성 등 특성과 전처리 방법과 기기의 선택 등 여러 조건에 따라 크게 달라질 수 있다. 예를 들어 가스 크로마토그래프(GC-MS)는 휘발성이 있고 열에 안정한 화학물질에 적합하나 액체 크로마토그래프(LC-MS)는 비휘발성 또는 열에 불안정한 화학물질에 더 적절하다. 따라서 추출, 농축, 크로마토그래피, 이온화 과정에서 적합한 화합물만 검출될 수 있으므로, 분석 목적에 따라 적합한 기기를 선택해야만 성공적인 SNTS 적용이 가능하다(그림 2-3 참조).

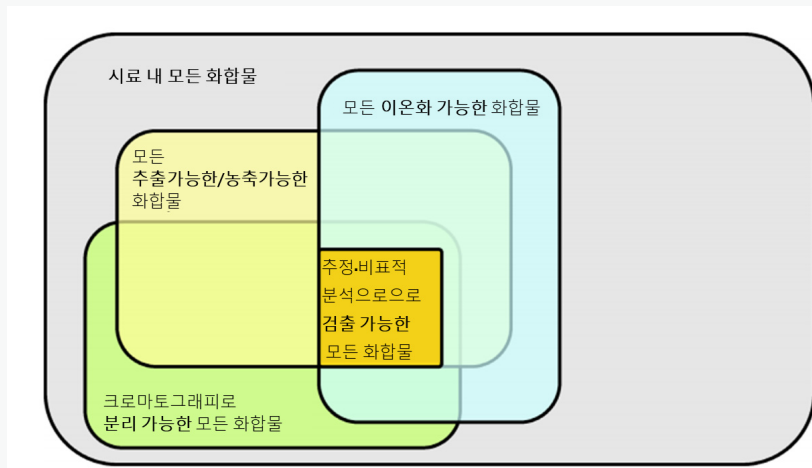
16) 전체 질량 스펙트럼을 연속적으로 스캔하는 방식으로, 넓은 질량 범위에서 모든 이온을 검출할 수 있어 포괄적인 데이터를 얻을 수 있음.



자료: Hollender et al.(2023), p.3을 토대로 저자 번역.

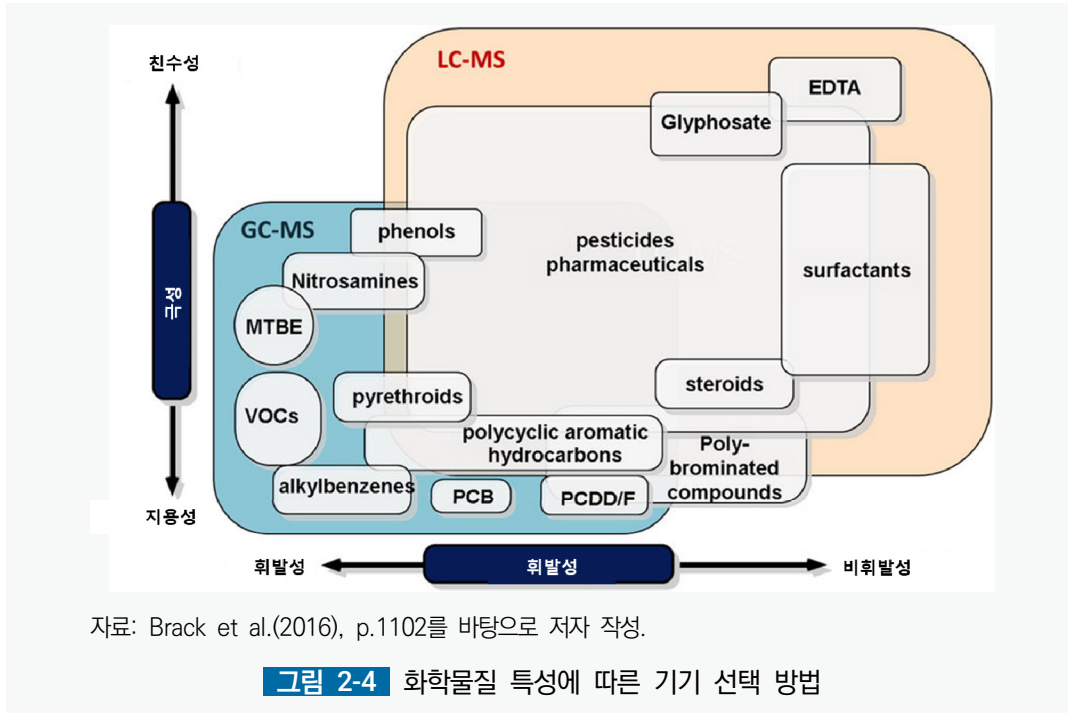
그림 2-2 표적분석 및 추정·비표적 분석의 일반적 절차

예를 들어, 유해화학물질 그룹 중, 휘발성유기화합물(VOC: Volatile Organic Compounds), 폴리염화비페닐(PCB: Polychlorinated Biphenyl)과 유사한 물리화학적 특성을 가진 물질은 GC-MS가 분석에 적합하며, 의약품(Pharmaceuticals), 일부 농약류(Pesticides), 과불화화합물 그룹 내 일부 물질과 유사한 계면활성제(Surfactant) 등은 LC-MS로 분석하는 것이 적합하다. SNTS는 물질 그룹을 특정하여 분석하는 기법은 아니지만, 연구 목적을 설정할 때 대략적으로 목표하는 물질의 특성을 고려하여 기기를 선택, 분석하여야 한다.



자료: Hollender et al.(2023), p.4를 토대로 저자 번역.

그림 2-3 추정·비표적 분석 방법으로 검출이 가능한 화합물의 범위



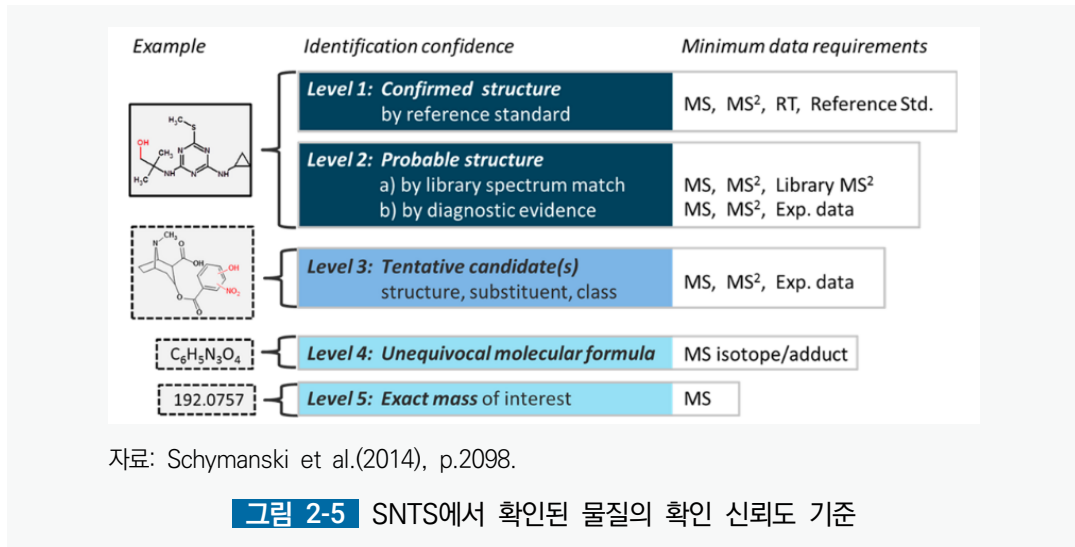
다. SNTS 분석 결과의 신뢰도 판단

SNTS를 통해 확인된 물질은 표준 물질을 통해 검증된 물질이 아닌 경우에는 물질 확인의 신뢰도를 결정하는 것이 매우 중요하다. 이 단계가 선행되어야만 확인된 물질의 정책적 중요도를 판단하여 결과의 활용성을 제고할 수 있기 때문이다.

현재까지 SNTS 연구에서 제일 보편적으로 활용되고 있는 물질의 신뢰도 결정법은 Schymanski et al.(2014)가 제안한 방법이다(그림 2-5 참조). Schymanski 레벨은 확인할 수 있는 정보의 수준에 따라 다음과 같이 구분된다.

- **레벨 1:** SNTS로 확인된 물질의 모분자 질량, 쪼개짐 패턴, 머무름 시간이 표준물질과 일치
- **레벨 2a:** SNTS로 확인된 물질의 모분자 질량, 쪼개짐 패턴이 라이브러리와 일치
- **레벨 2b:** SNTS로 확인된 물질의 모분자 질량, 쪼개짐 패턴이 실험적으로 얻어진 결과와 일치
- **레벨 3:** SNTS로 확인된 물질의 모분자 질량, 실험적으로 얻어진 쪼개짐 패턴이 모분자의 특정한 분자구조를 나타냄
- **레벨 4:** SNTS로 확인된 물질의 동위원소 패턴이 매칭되는 물질의 이론적 패턴 값과 일치하는 경우
- **레벨 5:** SNTS로 확인된 물질과 매칭되는 물질의 모분자 분자량이 일치하는 경우

레벨 1로 확인되는 물질은 표준물질과 분석 정보가 일치해야 하므로, 이미 표준물질이 존재하는 경우이다. 따라서 물질의 독성 정보가 알려진 경우가 많다. 또한 표준물질을 통해 정량도 가능하므로 물질의 존재 또는 유해성이 확인되었을 때 모니터링 등 적극적인 대처가 가능하다. 레벨 2a 또한 라이브러리에서 확인된 물질의 질량 쪼개짐 정보가 등록되어 있으므로, 표준물질이 존재하거나 기존에 분석되어 정보가 알려진 물질일 가능성이 높다. 레벨 2b의 경우에는 2a의 경우보다는 확인의 신뢰도가 낮을 수 있으나, 실험 데이터를 통해 확인된 물질이므로 어느 정도 이상의 신뢰도를 보장한다. 레벨 3의 물질은 얻어진 데이터를 상세히 살펴보고, 충분한 근거가 있을 때 정보를 더 수집해야 할 유의 물질로 구분될 수 있다. 레벨 4와 5의 경우에는 신뢰도가 매우 낮으므로 빈번하게 검출되거나 특정한 패턴을 보이지 않는 경우, 중요도가 낮게 판단된다.



기존의 국내 SNTS 연구과제에서는, SNTS로 확인된 물질의 Schymanski 레벨 결정의 상세한 방법을 아래와 같이 제시하였다.¹⁷⁾

- **레벨 1:** 추정되는 분자구조에 해당하는 물질의 표준물질 구비가 가능한 경우, 추정 물질과 해당 표준물질과의 크로마토그램 상 머무름 시간과 측정된 동위원소 패턴 (Isotopic pattern), 질량 쪼개짐 패턴이 일치하는 경우
- **레벨 2a:** 추정되는 분자구조에 해당하는 물질에 대한 표준물질 구비가 불가능할 경우, mzCloud, massBank와 같은 데이터베이스 내 해당 구조의 물질을 검색, 데이터베이스 내 해당 물질의 기록된 질량 쪼개짐 패턴 정보가 존재하며, LC-HRMS 분석을 통한 실험적 질량 쪼개짐 패턴 정보가 데이터베이스와 일치
- **레벨 2b:** 데이터베이스 내에 추정되는 물질에 대한 질량 쪼개짐 패턴 정보가 존재하지

17) 한국환경산업기술원(2022), p.82.

않는 경우, 질량 쪼개짐 패턴 데이터를 통한 분자구조 검증 작업을 수행. 이 때, 물질이 가질 것으로 예상하는 특정한 분자구조를 증명할 수 있는 특정 질량 쪼개짐 패턴이 존재하는 경우, 이를 diagnostic 질량 쪼개짐 패턴이라 지칭하며 이를 통하여 분자구조를 확인한 후 레벨 2b를 부여

- **레벨 3:** 측정된 질량 쪼개짐 패턴 정보가 데이터베이스 내에 존재하지 않을 뿐만 아니라, 특정 작용기에 대한 분자구조를 증명할 diagnostic 질량 쪼개짐 패턴이 없으나, 추정되는 구조 내에 일부 구조가 질량 쪼개짐 패턴 정보로 해석 가능
- **레벨 4:** 측정된 크로마토그램 상 물질에 대한 분자 구조식의 오차를 5ppm 이내로 할당하고 측정된 동위원소 패턴이 simulation 된 결과와 일치하는 경우
- **레벨 5:** 이 외에 측정된 질량대 전하비 값을 가지는 peak에 대하여 레벨 5를 부여

이러한 상세 구분 내용은 향후 국내 SNTS 적용 가이드라인 개발 시, 일정한 기준으로 물질을 구분하는 데 있어 유용하게 활용될 수 있다.

1) 과불화화합물의 신뢰도 판단

최근에는 SNTS를 통한 과불화화합물 분석의 신뢰도 결정 방법이 제안되기도 했다.¹⁸⁾ 새롭게 제안된 방법은 화학물질 그룹의 특징(예: PFAS의 경우 homologue 형태로 존재)을 고려하여 더 적절한 신뢰도 결정 방법을 제안한 것이다(그림 2-6 참조). Schymanski 레벨을 바탕으로 각 레벨을 좀 더 세분화한 이 신뢰도는, 매우 다양한 형태로 존재하는 과불화화합물 분석을 위한 SNTS 적용 시 활용될 수 있다. 예를 들어, 레벨 2가 2a, 2b, 2c로 세분되며 2b는 질량 쪼개짐 패턴이 PFAS의 특징을 보이는 경우, 2c는 homologue 그룹에 포함되는 개별 물질이라는 증거가 있을 때 레벨을 부여한다. 이처럼 특정한 화학적 성질을 가진 물질그룹은 적용되는 요소를 고려하여 신뢰도 수준을 세분화할 수 있다.

18) Charbonnet et al.(2022), p.474.

레벨	확인 신뢰도	질량 정확도	질량 결손	동위원소 패턴 일치	머무름 시간 일정도	동족체 (수, 레벨)	쪼개짐 이온 (수, 종류)	쪼개짐 패턴 라이브러리	표준 물질
레벨 1a	표준물질로 확인	✓	✓	✓	✓			✓	✓
레벨 1a	표준물질과 구별 불가	✓	✓	✓	✓			✓	✓
레벨 2a	라이브러리와 일치	✓	✓	✓	✓			✓	
레벨 2b	질량 쪼개짐 패턴 근거	✓	✓	✓	✓	≥ 1; ≥ 레벨 3	≥ 3; 진단		
레벨 2c	동족체 근거	✓	✓	✓	✓	≥ 2; ≥ 레벨 2a	≥ 2; 진단		
레벨 3a	위치 이성질체 후보	✓	✓	✓	✓	≥ 1; ≥ 레벨 3	≥ 1; ≥ 하위그룹 일치		
레벨 3b	질량 쪼개짐 기반 후보	✓	✓	✓	✓	≥ 1; ≥ 레벨 3	≥ 1; ≥ 하위그룹 일치		
레벨 3c	질량 쪼개짐 패턴 근거 기반 정황적 후보	✓	✓	✓	✓	≥ 1; ≥ 레벨 3	≥ 1; ≥ 하위그룹 일치 (<i>in silico</i>)		
레벨 3d	동족체 근거 기반 정황적 후 보 물질	✓	✓	✓	✓	≥ 2; ≥ 레벨 2a			
레벨 4	명확한 분자식 일치	✓	✓	✓					
레벨 5a	PFAS 질량 일치(추정분석)	✓							
레벨 5b	PFAS 질량 일치(비표적분석)	✓	✓			≥ 3	≥ 2; ≥ 하위그룹 일치 (<i>in silico</i>)		

자료: Charbonnet et al.(2022), p.474를 토대로 저자 번역.

그림 2-6 SNTS로 확인된 과불화화합물의 신뢰도 결정 방법

2) 머신러닝을 통한 물질 확인 신뢰도 부여

제2장에서 소개될 유럽의 신규 유해화학물질 네트워크인 NORMAN 프로젝트 연구의 일환으로, 최근에는 머신러닝을 활용하여 SNTS로 확인된 물질의 신뢰도를 점수화하는 방법도 개발되었다(그림 2-7 참조). 머신러닝을 통한 물질 확인 신뢰도 부여 방법을 간략히 요약하면, 물질의 신뢰도 확인을 위해 요구되는 사항에 따라 차등되는 점수를 부여하여 최종 점수를 매기고, 그 점수의 합에 따라 레벨을 부여하는 방식이다.¹⁹⁾ 이러한 방식도 국내 SNTS 기법이 정착화되고 고도화가 필요할 시, 통일된 신뢰도 레벨 부여를 위하여 참고될 필요가 있다.

19) Alygizakis et al.(2023).

Requirements	Identification Points (IP) earned
Precursor ion (Accuracy < 2 mDa / 5 ppm, R>15000)	mandatory
Retention time \pm 0.2 min (only applicable in target)	0.40
Predicted Retention time index (only applicable in suspect where retention time match is not available, validated approach with provided uncertainty)	0.15
Isotopic fit (at least one isotope: abundance and accuracy of M+1, M+2,...)	0.20
Most intense experimental fragment ion	0.20
All other experimental fragment ions Number of experimental fragments normalized to the total number of fragments in the library	0.20
The "All other experimental fragment ions" score is penalized if the number of other experimental fragments present in the database is 2 or less	-0.10
<i>In silico</i> predicted fragment ions in case experimental fragments are not available Number of experimental fragments normalized to the total number of fragments in the library max number of fragments in library=10 most intense	0.20
Only DIA	-0.10

자료: Alygizakis et al.(2023), p.7.

그림 2-7 머신러닝을 통한 NTS 확인물질 신뢰도 부여 방법

2. 상호보완적 유해화학물질 모니터링 기법

가. 생물영향지향분석(EDA: Effect-Directed Analysis)

1) EDA 개요

생물영향지향분석(EDA: Effect-Directed Analysis)은 환경 시료에 존재하는 주요 독성 원인 물질을 식별하는 유용한 도구이다.²⁰⁾²¹⁾ 폐수, 퇴적물, 생물, 토양 등의 환경 시료에는 약 수천 종 이상의 화합물이 포함되어 있어 이 중에서 주요 독성 원인 물질을 식별하는 것은 매우 도전적이다. EDA의 원리는 생물검정 결과를 바탕으로 상대적으로 높은 독성을 보이는 시료를 분액화하여 시료의 복잡성을 줄이는 것이다. 이후, 각 분액에 대해 생물검정 및 화학 분석을 수행하여 높은 독성을 보인 분액에서 주요 독성물질을 식별하게 된다. 이 과정은 실험 과정이 길고 복잡하지만, 이전에 모니터링되지 않은 독성물질을 식별하는 데 유용하게 이용될 수 있다. 표적 화학물질은 종종 관찰된 생물학적 영향의 일부만을 설명하며, 이는 즉 시료 내에 모니터링되지 않은 독성물질이 존재할 수 있음을 의미한다.

20) Brack et al.(2016), p.1075.

21) Hong et al.(2023), p.19148.

2) SNTS와의 결합성

SNTS는 시료에 존재하는 모든 물질을 검출하고 식별하는 것을 목표로 하며, EDA에 유용하게 적용되어 특정 분액에서 독성 원인 물질을 식별할 수 있다. 따라서 EDA와 NTS의 결합 사용은 환경 시료에서 화합물의 잠재적 독성에 대한 정보가 부족한 단일 NTS의 한계를 극복하는데 효과적으로 활용될 수 있다.²²⁾ 이 접근 방식은 기존의 표적 분석에 의존하는 방법에서 벗어나, 미지의 물질을 포함하는 분석 범위를 확장하는 데 도움이 된다. 또한, 영향 기반 모니터링(EBM: Effect-Based Monitoring)을 환경 모니터링 프로그램에 효율적으로 통합하는 것을 촉진할 것으로 기대된다. EDA의 적용을 위해서는 EBM의 도입이 선행되어야 하며, 이는 다양한 생물검정 툴을 이용하여 환경 시료 내 잠재적 생물 영향을 정량적으로 평가하는 것이다. EBM은 화학분석에 의존한 모니터링을 보완할 수 있으며 EU를 중심으로 개발되고 있다.²³⁾

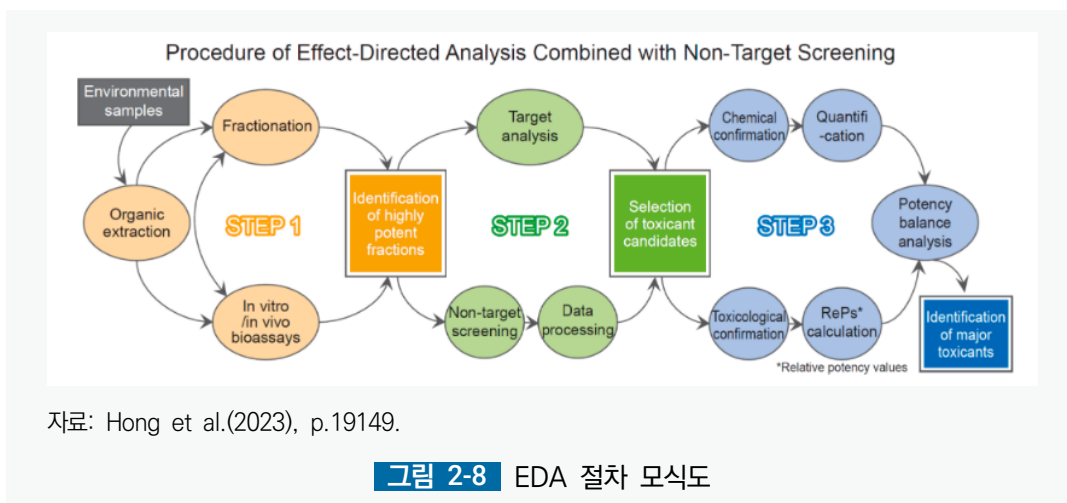
3) EDA와 NTS가 결합된 분석 절차

EDA와 NTS가 결합된 분석 절차를 <그림 2-8>에 나타내었다. 과정은 총 3단계로 나누어진다. 먼저, 1단계(Step 1)에서는 시료의 추출 및 분획화와 생물검정을 수행하며,²⁴⁾ 원 추출물이 유의한 반응을 보일 때, 주요 독성 분획을 식별하기 위한 분액화를 실시한다. 2단계(Step 2)에서는 독성 종말점과 일치하는 화합물 그룹에 초점을 맞춰 분액에서 이들 화합물의 농도를 정량화하고, 표적 화합물의 농도와 상대 독성 값을 사용하여 관찰된 독성을 비교함으로써 독성 균형 분석(Potency balance analysis)을 수행한다. 하지만 분석된 화학물질이 발현된 독성을 충분히 설명하지 못할 경우에는 NTS를 수행한다. NTS를 수행할 때 HRMS의 기기 조건 최적화는 매우 중요하며, 사용자의 숙련도가 결과에 크게 영향을 미칠 수 있다. NTS의 데이터 처리도 독성 후보물질을 식별하는 데 매우 중요하다. 분액에서는 종종 수백 개-수천 개의 화합물이 검출되기 때문에, 생물검정 종말점을 기준으로 하거나 질량 스펙트럼 라이브러리 또는 *in silico* 정보와의 일치도 분석을 통해 후보물질을 선택한다. 3단계(Step 3)에서는 선정된 후보물질에 대한 화학 및 독성학적 확인을 수행한다. 이 단계는 표준물질이 있어야만 수집하기 때문에, 표준물질이 없는 경우에는 *in silico* 모델링과 독성 예측 데이터베이스를 활용한다. 새로 식별된 독성물질이 유발된 독성의 상당 부분을 설명할 때, NTS와 결합된 EDA가 성공적으로 수행된 것으로 볼 수 있다. 이러한 화합물이 설명력을 많이 증가시키지 않는다면 주요 독성물질이 식별되지 않은 것이다. 이러한 실패 요인으로는 질량 스펙트럼 라이브러리 부족, 표준물질의 부재 및 선택 기준 제한 등이 고려된다.

22) Escher et al.(2020), p.390.

23) Escher et al.(2018), p.749.

24) *in vitro* 및 *in vivo*로 수행하며, 선택한 생물 검정법에 따라 시료에서 반응하는 화합물의 그룹이 달라질 수 있음.



나. 하수 기반 역학(WBE: Wastewater-Based Epidemiology)

1) WBE 개요

하수 기반 역학(WBE: Wastewater-Based Epidemiology) 또는 하수 기반 감시체계는 1939년 소아마비 바이러스 감시를 위해 처음 활용되었으며, 2003년 세계보건기구가 소아마비 바이러스 감시를 위한 하수 기반 역학을 공식적으로 채택하였다.²⁵⁾ 하수는 내인성과 외인성의 다양한 인체 배설물, 예를 들어 불법 마약류, 의약품, 음식, 환경 오염물질, 화학물질, 감염성 병원체, 대사산물 등을 포함한다. 따라서 WBE는 특정 바이오마커를 하수에서 측정하고 그 결과로 하수 내 포함된 화학, 생물학적 요소의 종류와 양을 밝힌다. 따라서 WBE를 통해 포괄적이고 익명화된 특정 지역의 거주자와 주변 환경에 대한 실시간 노출 정보를 얻을 수 있다.²⁶⁾

화학물질의 노출을 방지, 조절하며 위해를 완화하기 위해서는 빠른 평가가 필요하다. 하지만 현재의 인체 모니터링 체계는 제한적인 규모의 대상 집단 설정과 제한된 수(보통 1회)의 시료 수집, 그리고 다수의 개인으로부터 시료를 수집하고 분석하는데 시간과 자원이 많이 든다는 단점이 있다. 그러므로 장기간 포괄적이고 다양한 화학물질과 누적된 노출 상태를 보여주는 시공간적인 데이터베이스, 그리고 대중 건강의 증진과 질병을 방지하는 신속한 규제를 촉진하는 증거 기반 노출 진단과 위해 예측 시스템이 필요하다.

비록 WBE는 개인의 노출을 식별하거나 건강과의 연관성을 밝히는 데 한계가 있으며, 인체 중 배설과 관련된 바이오마커만 식별할 수 있지만, WBE가 실시간으로 작동하면서 시기적절한 반응을 하는 체계와 연결된다면 노출 위협을 비용 효율적으로 신속하게 확인하고 공중 보건

25) Singer et al.(2023), p.408.

26) Kasprzyk-Hordern et al.(2023), p.131009.

제안하였다. 또한, 미국에서 물질 남용 등 공중보건의 도전과제 해결을 위한 하수 감시 모니터링 체계에서는 표적분석과 동시에 수행된 NTS를 통해 표적분석에 포함되지 않는 추가적인 물질을 우선순위화 하였고, 이를 통해 NTS의 활용 잠재력을 검증하였다.²⁸⁾ 향후 시료 수집의 자동화와 센서 개발을 통해 하수 내에서 실시간으로 HRMS를 활용한 유해화학물질의 유입을 감시하는 연구가 수행된다면 향후 하수 내 유해화학물질 관리 정책을 개발하는 데 유용한 기초 자료가 될 것이다.

28) Vogel et al.(2024), p.8518.

제 3 장

추정·비표적 분석기법 해외 동향

1. NORMAN 네트워크
2. 미국 환경보호청(US EPA)
3. 영국 환경청
4. 오스트리아 환경청
5. 덴마크 환경보호청
6. 독일 연방환경청
7. 스위스 EAWAG
8. 네덜란드
9. 기타 SNTS 프로젝트

1. NORMAN 네트워크

가. 배경

NORMAN은 신규 환경유래 유해물질의 모니터링을 위한 표준 실험실, 연구소 및 관련기관의 네트워크로,²⁹⁾³⁰⁾ 2005년 9월에 유럽의회(EC: European Commission)의 요청으로 설립되었다. 이후 2009년에 영구적이며 자립적이고 신규 유해화학물질을 다루는 모든 이해관계자의 비영리 네트워크로 전환되었다. NORMAN 네트워크의 목표는 아래와 같다.

- 독립적이고 투명하고 열린 네트워크로 유해 물질이 없는 지속가능한 환경
- 환경 내 신규 유해화학물질 이슈 대응
- 신규 환경위험에 대한 감시 및 경보
- 과학과 정책의 가교(Bridge) 역할
- 새로운 모니터링 도전과제 탐색을 위한 혁신적인 상향식(Bottom-up) 이니셔티브를 위한 플랫폼

29) Network of Reference Laboratories, Research centres, and related organisations for monitoring of emerging environmental substances.

30) NORMAN, "Welcome to the NORMAN Network", 검색일: 2024.5.17.

또한 신규 환경유해 물질의 정보 교환과 자료수집, 위해 평가자의 더 효율적인 정보 활용을 위해 공통적인 측정 기법이나 모니터링 도구를 검증하고 통합하는 것의 독려, 문제 중심(Problem-oriented) 연구와 지식의 전달에 관련된 다학제간 프로젝트를 통해 신규 유해화학 물질에 대한 지식 개발 독려라는 미션을 가지고 활동하고 있다. 이를 위해 NORMAN 네트워크는 전문가 그룹 미팅, 워크숍, 데이터베이스, 방법론 검증 활동 등의 다양한 활동을 조직하며 과학자 커뮤니티뿐 아니라 정책 결정이 관련된 다양한 기관과 협력하고 있다.

NORMAN 네트워크에서 개별 워킹그룹의 형태로 다루고 있는 연구 주제는 신규 유해화학 물질의 우선순위화, 수질 모니터링을 위한 생물검정(Bioassay)와 생체표지자(Biomarker), 유해화학물질의 확인을 위한 EDA, 나노 및 마이크로 규모의 미립자 오염물질, 하수의 재사용과 우려 신규 유해화학물질, 실내 환경 내 신규 유해화학물질이 있으며, 교차 워킹그룹의 형태로 신규 유해화학물질을 위한 수동 시료 채취와 환경 모니터링을 위한 비표적 분석기술을 다루고 있다.³¹⁾

NORMAN 네트워크는 EC, 유럽화학물질청(ECHA: European CHemicals Agency), 유럽 환경청, 여러 국가 당국과 협력하고 있다. 이들 이해관계자는 NORMAN 프로젝트에 의해 수행된 결과를 공유하고 NORMAN 네트워크의 향후 로드맵 등에 자문하는 등 신규 유해화학 물질과 정책개발에 기여하고 있다.

나. 추정·비표적 분석 업무

NORMAN 네트워크는 HRMS에 대한 전문성을 바탕으로 다양한 NTS 관련 연구를 수행하고 있다. NTS 워킹그룹은 교차 워킹그룹 형태로 설립되었는데 그 이유는 NTS가 NORMAN 네트워크의 주요 업무인 유해화학물질의 우선순위 설정, 화학물질의 노출과 영향, 실내환경에서의 신규 유해화학물질 확인에 중요한 기술이기 때문이다.

NTS 워킹그룹은 2015년 9월에 공식적으로 착수되어,³²⁾ 스위스 연방 물과과학기술연구소(Eawag: Swiss Federal Institute of Aquatic Science and Technology)³³⁾가 주관하고 있으며, 슬로바키아의 Environment Institute,³⁴⁾ 노르웨이 물연구소(NIVA: Norwegian Institute for Water Research),³⁵⁾ 노르웨이 기후와 환경 연구소(NILU: Norwegian Institute for Air Research),³⁶⁾ 헬름홀츠 환경연구센터(UFZ: Helmholtz Centre for

31) Dulio et al.(2018), p.3.

32) NORMAN, "Cross-Working Group Activity NTS", 검색일: 2024.5.17.

33) Eawag, "Portrait", 검색일: 2024.5.17.

34) Environment Institute, "Company Profile", 검색일: 2024.5.17.

35) NIVA, "About Us", 검색일: 2024.5.17.

Environmental Research),³⁷⁾ 아테네 대학교(National and Kapodistrian University of Athens),³⁸⁾ 룩셈부르크 대학교 내 생의학 시스템 센터(LCSB: Luxembourg Centre for Systems Biomedicine)³⁹⁾와 협력하고 있다.

NTS 워킹그룹의 주요 업무를 <표 3-1>에 나타내었다. 워킹그룹은 LC-HRMS와 GC-MS를 활용한 NTS 프로토콜의 통합을 추진하며 여기에는 다양한 환경 매체에의 응용과 생물학적 모니터링 기법의 통합도 포함되어 있다. 또한 유해물질 구조의 확인과 오염의 패턴을 확인하여 강 유역의 특정 오염물질과 같은 잠재적 유해화학물질을 확인하는 업무를 수행한다. 이에 따라 Digital Sample Freezing Platform, NORMAN MassBank 데이터베이스 등이 개발되었고, 현재 1,000개 이상의 환경유래 유해화학물질의 질량 쪼개짐 패턴 정보가 공유되어 SNTS에 활용되고 있다. 또한 NORMAN에서는 Collaborative Trial(CT)을 조직하여 실험실 간 용어, 워크플로, 보고서의 포맷을 통일할 수 있도록 시도하였다. 그뿐만 아니라 물질의 특성에 따라 달라지는 검출 시간을 예측할 수 있는 머무름 시간 지표(RTI: Retention Time Index)를 예측할 수 있는 통합모델을 개발하고 많은 수의 잠재적 신규 유해화학물질을 회고적 분석(Retrospective analysis)으로 탐색하였다.

표 3-1 NORMAN 네트워크 내 NTS 워킹그룹의 주요 업무 내용

구분	주요 업무 내용
1	시료 추출부터 분석, 최종 구조 검증까지 포함하는 smart 워크플로의 공유와 추후 개발
2	새로운 유해화학물질 확인의 지원을 위한 신뢰있는 데이터의 교환을 촉진하기 위해 Suspect List Exchange, NormaNEWS, RTI prediction 모델과 같은 이니셔티브를 셋업하고 유지
3	비표적 물질 확인을 위한 질량 스펙트럼 데이터베이스(예: NORMAN MassBank, Digital Sample Freezing Platform)를 셋업
4	비표적 분석에 관한 협력 프로젝트를 디자인, 조정 및 검증
5	기타 미팅과 연계된 정기적인 워크숍을 개최하여 최신 개발의 속도를 유지

자료: NORMAN, "Cross-Working Group Activity NTS", 검색일: 2024.5.17을 바탕으로 저자 작성.

NORMAN 네트워크의 NTS와 관련된 현재까지의 주요 업무와 진행 현황을 아래와 같이 정리하였다.

1) 추정 분석 목록의 공유(SLE: Suspect List Exchange)

SLE 이니셔티브는 2015년에 유럽과 북미의 연구자들이 유해 오염물질의 확인, 우선순위화,

36) NILU, "About NILU", 검색일: 2024.5.17.

37) UFZ, "Our Vision", 검색일: 2024.5.17.

38) National and Kapodistrian University of Athens, "About Us", 검색일: 2024.5.17.

39) LCSB, "Oveview", 검색일: 2024.5.17.

회고적 스크리닝 노력에 대한 공동의 협력으로 착수되었으며,⁴⁰⁾ 다양한 플랫폼 내 유해 물질에 대한 정보 및 연관된 메타데이터의 교환이 목적이다. 환경 또는 인체 중 유해화학물질을 모니터링 시, 연구 목적에 맞게 추정 분석 목록을 선택할 수 있다.

2024년 5월 기준, 118개의 목록이 제공되고 있으며, 대표적인 목록을 선정하여 <표 3-2>에 정리하였다. 각 목록에는 기본적으로 화학물질의 명칭과 동의어, 화합물의 구조를 간단한 문자열로 표시하는 SMILE(Simplified Molecular-Input Line-Entry) 정보, 국제 화학물질 식별자(InChI: International Chemical Identifier) 등의 식별을 위한 정보가 담기며, 추정 분석 적용을 위한 분자의 질량 값, 구조 등이 포함되어 있다. 이러한 정보는 엑셀 파일로 제공되어 쉽게 적용할 수 있도록 제공된다.

NORMAN SLE가 공유하는 추정 분석 목록은 매우 다양한 매체와 유해 물질의 그룹이 포함되어 있다. 예를 들어 음용수에서 발견된 신규 유해화학물질(KWRSJERPS, S5),⁴¹⁾ 새롭게 대두되는 유해화학물질을 회고분석하기 위한 목록(NORMANEWS, S12; NORMANEWS2, S62), 주목받고 있는 화학물질 그룹인 과불화화합물과 관련된 목록(PFASTRIER, S9; KEMIPFAS, S17; OECDPFAS, S25; PFASNTREV19, S46; PFASGLUEGE, S80; PRORISKPFAS, S89; PFASANEXCH, S95; ECIPFAS, S96; PFASREACH, S100; PARCPFAS, S102; PFASFCCDB, S117; PFASFCCMIGEX, S118), 소비자 제품 스크리닝용 목록(EPACONS, S22), 살생물제를 다루고 있는 목록(EUBIOCIDES, S28), REACH 등록 화학물질 목록(REACH2017, S32), ECHA에서 발표한 플라스틱 첨가제 목록(ECHAPLASTICS, S47), 유럽의 생체 모니터링 관련 대형 프로젝트인 HBM4EU(Human Biomonitoring for EU)의 신규 우려물질 및 대사체 목록(CECScreen, S71) 등이 있다.

이러한 리스트는 많은 연구자가 연구 결과를 통해 얻거나 생산, 사용 등의 자료를 취합한 것으로, 우리나라에서도 상황에 알맞게 취사선택하여 사용할 수 있다. 많은 목록이 신규 유해화학물질의 발견, 관리대상물질의 우선순위 설정 등에 적용될 수 있다. 또한 관리 대상 유해 물질을 목록화한 REACH 목록은 관리 대상이 되었지만, 아직 모니터링에서는 확인되고 있지 않은 부분을 확인할 수 있어 유용하다. 또한 많은 화학물질이 첨가되는 소비자 제품도 추정 분석 내 목록 적용을 통해 확인 가능하며, 최근 주목받고 있는 플라스틱 첨가제 또한 그 존재 여부를 비용 효과적으로 확인할 수 있을 것이다.

NORMAN SLE가 등록되면 마스터 데이터베이스 형태인 NORMAN SusDat collection으로 통합되는데 이는 “MS-ready”의 형태로 정리되며, MS-ready가 가지는 의미는 물질의 쪼개짐

40) NORMAN, “NORMAN SLE”, 검색일: 2024.5.20.

41) NORMAN SLE의 추정 분석 목록은 S와 숫자의 조합으로 구분되어 있음(S0-S118).

패턴이나 분석 시 나타나는 머무름 시간, 예측되는 독성 값 등을 담고 있어 질량 스펙트럼 스크리닝, 궁극적으로 물질의 정확한 확인에 활용될 수 있다는 것이다. 따라서 추정 분석 수행 시, 확인된 물질과 관련된 정보를 쉽게 활용할 수 있게 되어있다. 또한, NORMAN SLE는 환경과 독성학적 정보를 포함한 데이터베이스인 US EPA CompTox Dashboard, 방대한 화학물질 정보를 가지고 있는 화학물질 데이터베이스인 PubChem과도 지속적으로 통합되고 있다(그림 3-1 참조).

현재 계속해서 기존 데이터베이스가 업데이트되고 있으며, 새로운 데이터베이스가 제출되고 있다. 또한 화학물질의 사용 정보의 수집과 데이터베이스의 카테고리화에 관한 연구자의 관심에 따라 NORMAN은 내부 우선순위화 워킹그룹 활동 내에서 화학물질 사용 정보를 수집 및 정의하고 카테고리 하는 업무를 수행하고 있다. 이러한 내용은 향후 PARC⁴²⁾나 ZeroPM⁴³⁾과 같은 유럽의 대형 연구프로젝트에서 더 개발될 것이다.

NORMAN SLE는 현존하는 규제 프레임워크 간 협력을 촉진하는 데 중요한 역할을 하고, 데이터 공유와 화학물질 위해성 평가를 개선하는 데 도움이 되어, 이를 통해 유럽의 하나의 물질, 하나의 평가(OSOA: One Substance, One Assessment) 패러다임으로의 전환을 촉진할 수 있을 것으로 기대된다.

42) Partnership for the Assessment of Risks from Chemicals. 화학물질 위해성 평가 파트너십으로, 차세대 화학물질 위해성 평가 개발을 목표로 하는 Horizon Europe의 7년 장기 연구프로젝트.

43) Zero Persistent and Mobile chemicals. 잔류성과 이동성이 높은 물질의 오염 및 이러한 물질로의 대체를 방지하고 우선순위화하며 궁극적으로 제거하기 위한 Horizon Europe의 프로젝트.

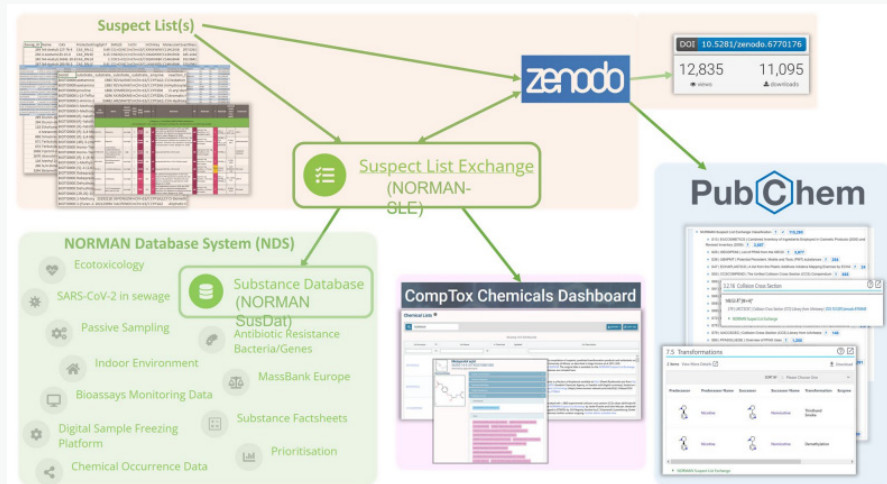
표 3-2 NORMAN SLE에서 제공하는 주요 추정 분석 목록

No.	약어	설명	출처
S0	SUSDAT	NORMAN 추정 분석 목록 총 리스트	(1)
S5	KWR ⁴⁴⁾ Drinking Water Suspect List	네덜란드 Nieuwegein 지역 음용수에서 확인된 인체 건강과 관련된 물질의 우선순위 목록	(2)
S9	PFAS Suspect List: fluorinated substances	국제 커뮤니티가 수집한 PFAS 목록	(3)
S12	NORMANEWS	새로운 유해화학물질의 회고적 스크리닝	(4)
S16	French Monitoring List	프랑스에서의 예비 모니터링을 위한 물질 목록	(5)
S17	KEMI* Market List	시장에 존재할 것이라고 예측되는 화학물질 (EU 시장을 중심으로)	(6)
S22	EPACONS	US EPA 소비자 제품에서 추정 분석을 통해 스크리닝 된 물질 목록	(7)
S28	EUBIOCIDES	현재 EU에서 살생물제로 사용되고 있는 물질 또는 2015 NORMAN List 이후로 현재 살생물제로 금지되고 있는 물질 목록	(8)
S32	REACH2017	> 68,600 REACH ⁴⁵⁾ 등록 화학물질	(9)
S34	EXPOSOMEXPL	질병의 환경적 위해 요인에 대한 노출 바이오마커 데이터베이스	(10)
S47	ECHAPLASTICS	유럽화학물질청의 플라스틱 첨가제 이니셔티브에서 제공한 목록	(11)
S54	EFSAPRI	유럽식품안전청의 212개의 REACH 등록물질 우선순위 목록	(12)

주: *Swedish Chemicals Agency.

- 1) NORMAN Network et al.(2024).
- 2) Sjerps et al.(2016).
- 3) Trier and Lunderberg(2015).
- 4) Alygizakis et al.(2018).
- 5) Dulio and Aalizadeh(2017).
- 6) Fischer(2023).
- 7) Phillips et al.(2018).
- 8) Rüdell(2018).
- 9) Alygizakis and Slobodnik(2018).
- 10) Neveu et al.(2019).
- 11) ECHA(2019).
- 12) Oltmanns et al.(2019).

자료: NORMAN, "NORMAN Suspect List Exchange", 검색일: 2024.5.20을 바탕으로 저자 작성.



자료: Taha et al.(2022), p.5.

그림 3-1 NORMAN SLE와 연결된 기타 데이터베이스

44) 네덜란드의 Nieuwegein에 위치한 물 연구소.

45) 유럽의 신화학물질관리정책(Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals).

2) NORMAN 선제 경고 시스템(NormaNEWS)

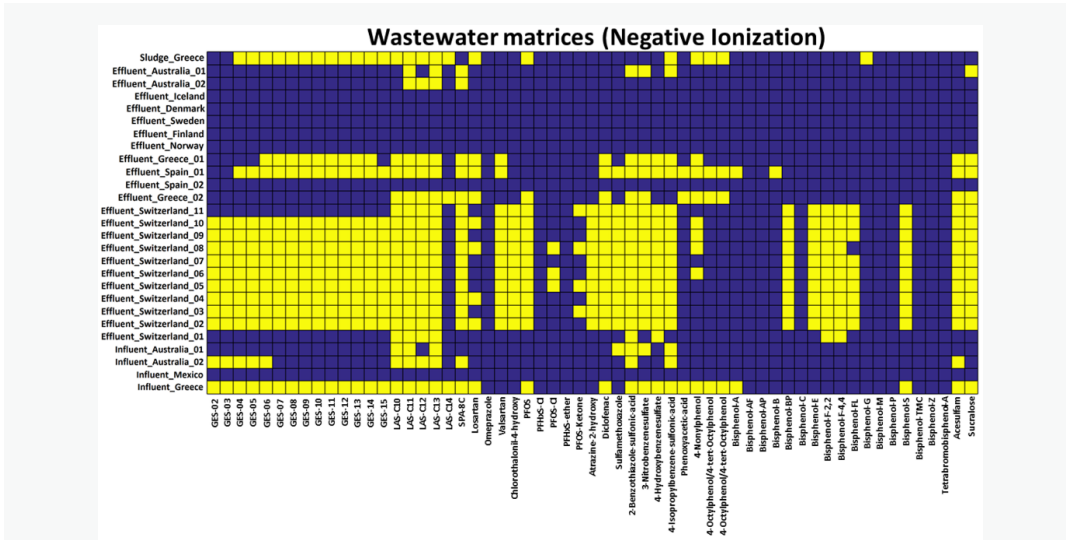
NORMAN 네트워크는 NTS 활동의 일환으로 NIVA와 퀸즐랜드 대학이 주관하는 회고적 분석 플랫폼인 NORMaNEWS(The NORMAN Early Warning System)를 운영하고 있다. NormaNEWS는 NORMAN의 연구그룹이 새로운 우려 유해화학물질을 확인하였을 때, 확인 시 사용되었던 다양한 기준이 다른 참여 그룹으로 보내지고, 참여 그룹은 회고적 분석기술을 통해 기존에 분석되었던 시료들에서 새로 발견된 물질의 검출을 확인하도록 하는 기술이다. 이렇게 함으로써 분석 당시에는 문제가 되지 않았지만 추후 연구를 통해 새롭게 확인된 물질의 넓은 지역에서 검출을 빠르고 비용 효과적으로 확인할 수 있다.

NormaNEWS는 2016년에 처음으로 HRMS를 이용한 회고적 분석을 통해 새롭게 확인된 우려 유해화학물질의 시공간적 분석을 수행하였다(그림 3-2 참조).⁴⁶⁾ 이 선행연구에서는 8개의 실험실이 공동으로 저장된 기존의 수매체(예: 하수처리장 유입수·유출수, 표층수, 지하수 등) 분석 HRMS 데이터를 회고 분석하여 새롭게 우려가 되는 여러 표면 활성 물질(Surfactant)과 의약품 대사체, 산업용 화학물질(예: 비스페놀 S)의 검출을 14개 국가에서 확인하였다.

이때 사용되었던 추정 분석 목록은 다양한 그룹의 156개의 물질을 포함하며 환경 시료에서 검출이 잘 되는 물질을 포함하여 전반적인 데이터 분석 단계를 평가하고자 하였고, 검출 및 분포를 확인하기 위해 일반적인 신규 유해화학물질과 기존 NTS 분석에서 검출되었던 새로운 유해화학물질을 포함하였다. 데이터의 정도관리는 단계마다 (질량) 측정 오차 등 기준값을 제시하여 통일성을 부여하고자 하였다. NormaNEWS에 적용된 추정 분석 목록은 NORMAN SLE에 NORMANEWS(S12)와 NORMANEWS2(S62)의 형태로 제공되고 있다. 이러한 목록의 공유는 이전의 연구에서 포함되지 않았던 연구자료에도 적용되어 결과를 비교해 볼 기회를 제공한다.

기존의 데이터를 활용한 회고적 분석은 모니터링 체계에 포함되어 있지는 않지만, 이후 발견 되는 신규 유해화학물질을 빠르게 확인할 기회를 제공하며, 향후 모니터링이나 거동, 영향을 연구할 때 우선순위가 될 화학물질을 선정하는 데 정보를 얻을 수 있다. 따라서 NTS 연구자 커뮤니티 내 오픈소스 형태의 데이터 공유가 중요하고, 이는 더 넓은 세계를 포괄할 수 있어 환경적 해석이나 유해 화학물질과 관련된 정책 결정에 도움을 줄 것이다.

46) Alygizakis et al.(2018), pp.5135-5144.



자료: Alygizakis et al.(2018), p.5138.

그림 3-2 회고적 분석이 수행된 시료(세로)와 검출된 물질(가로) 목록

3) DSFP: Digital Sample Freezing Platform

NORMAN의 DSFP는 디지털화되어 저장된 분석 데이터 내 화학물질의 스크리닝을 지원하기 위해 NORMAN 커뮤니티에서 개발한 도구와 데이터베이스이다. 환경과학자 커뮤니티가 생성하는 거대한 양의 환경 질량 스펙트럼 정보를 저장 및 처리하고 분석하고 데이터를 발굴하며 정보를 검색하기 위해 만들어졌다.

DSFP는 HRMS 스크리닝의 최신 개발 내용을 통합하고 환경 중 새로운 우려 유해화학물질을 광범위하게 분석하는 도구를 제공한다. 또한 저장된 데이터베이스를 통해 새로운 유해화학물질의 회고적 분석을 수행하고 매체 간(예: 물, 생물, 퇴적물, 실내 환경 등) 질량 스펙트럼을 비교하며 특정 물질의 전 세계적인 분포를 비교할 수 있다. 이러한 광범위한 데이터 분석은 환경 중 화학물질 관리와 관련된 정책 제언에 기반이 된다. 그 예로, 흑해 내 해수, 퇴적물과 생물을 분석한 시료에서 회고적 분석을 수행하여 낮은 농도에서도 동식물에 부정적 영향을 줄 수 있는 670개의 항생제를 찾았으며, 유럽화학물질청과 협력하여 REACH 대상 물질 777개를 스크리닝한 사례가 있다.⁴⁷⁾

DSFP는 데이터 수집 양식을 제공하여 입력하도록 하며 이와 함께 초기 질량 스펙트럼 파일을 수집한다. 데이터는 DSFP 웹사이트를 통해 직접 업로드할 수 있다.⁴⁸⁾ 데이터 수집 양식은 기관, 머무름 시간 지표 정보, 시료 정보, 분석 정보, 기기 정보와 질량 스펙트럼 등이 포함되어 있다. 이와 함께 데이터는 R을 통해 구현된 내부 워크플로를 통해 분석되고 통합된 포맷으로

47) Alygizakis et al.(2019), pp.129-137.

48) DSFP, "Digital Sample Freezing Platform", 검색일: 2024.9.9.

바로 분석이 가능한 형태로 저장되게 된다(그림 3-3 참조). 결과적으로 DSFP를 활용하여 신규 유해화학물질과 그 대사체 등을 매우 다량의 시료에서 일관성 있는 방식으로 분석할 수 있으며, 최종적으로는 이러한 플랫폼이 유럽, 나아가 글로벌 표준이 되는 것을 목표로 한다. 이러한 목표를 가지고 DSFP는 계속해서 검증 및 개발되고 있다. 가장 최근에는 머신러닝 접근을 활용하여 DSFP의 데이터 내 물질 확인 신뢰도를 체계적으로 보고할 수 있도록 제안되었다.⁴⁹⁾

DSFP에 데이터를 저장할 때는 분석과 관련된 메타데이터도 함께 업로드된다. 예를 들어 DSFP 웹사이트에 업로드된 자료 중에서 European Dust(유럽의 실내먼지)⁵⁰⁾를 살펴보면, 데이터가 어떤 목적으로 수집되었고 화학물질 추출은 어느 방식으로 수행되었는지, 어떠한 기관이 참여했는지 등이 적혀있다. 또한 DSFP 내 데이터 업로드 과정에서는 <표 3-3>과 같은 정보가 엑셀 파일로 함께 저장된다. 이러한 상세 정보는 SNTS로 얻어진 결과를 해석하고 함의를 찾는 데 매우 중요하다. 또한 여러 업로드된 데이터가 같은 형태로 저장되고 유사한 주요 정보를 체계적으로 포함한다는 것은 SNTS의 범용적인 활용을 위해 반드시 필요한 과정이다.

표 3-3 DSFP 내 업로드된 파일의 상세 정보

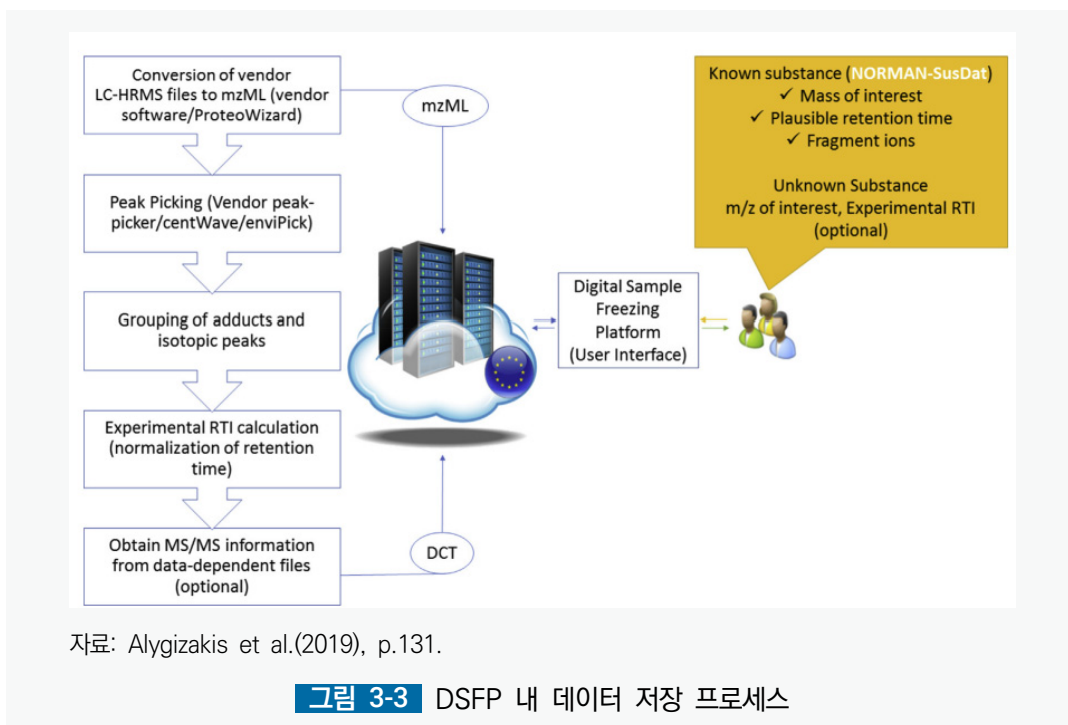
정보명	상세 내용
시료	시료 아이디, 수집 정보, 시료 타입, 약어, 시료 수집 일자, 분석 일자, 기기 설정 조건, 도시명, 국가명, 위도, 경도 등
기기 정보	기기 아이디, 기관, 기기명, 기기 타입, 기기 제조사, 기기 모델 및 간략한 설명
기기 설정	기기 종류, 이온화 종류, 컬럼, 컬럼 제조사, 컬럼 길이 및 내경, 컬럼 입자 크기, 이동상, 주입 용량, 온도, 분자량 분석 범위, collision energy, 질량 쪼갬 기법, 질량 측정 에러 범위, 정확도, calibrants 정보 등
파일	분석 매체, 기타 데이터 정보 등(data dependent, data independent, full scan 등)

자료: DSFP, "European Dust", 검색일: 2024.9.10에 업로드된 엑셀 파일을 바탕으로 저자 작성.

DSFP는 화학물질의 규제 이후 개별적으로 모니터링되는 현재의 패러다임에서 규제와 규제되지 않은 물질을 복잡한 매체에서 동시에 스크리닝할 수 있는 기술로의 변화를 도모하며 DSFP를 국제적으로 통합하기 위해 유럽 위원회 환경국(DG ENV: Directorate-General for ENVironment), 유럽화학물질청, JRC(Joint Research Centre) 등과 함께 노력한다.

49) Alygizakis et al.(2023), p.116944.

50) DSFP, "European Dust", 검색일: 2024.9.10.



4) NORMAN NTS prioritisation algorithm

가) 표적 분석 기반 알고리즘

NORMAN의 유해화학물질 우선순위 선정 알고리즘은 기본적으로 표적 분석을 기반으로 설계되었다(표 3-4 참조). 우선순위 선정은 두 가지 단계의 접근법을 따르는데, 먼저 물질은 수집할 수 있는 정보의 수준에 따라 action 카테고리로 배정된다. 카테고리 1은 조절 및 완화 조치가 가장 우선순위로 필요한 그룹이며, 예를 들어 카테고리 1에 포함된 물질은 Water Framework Directive에 우선순위 물질 후보로 제안되게 된다. 카테고리 2에서 높게 매겨진 물질은 감시 목록(Watch List) 후보에 포함되어 노출 수준과 환경 내 분포 등 더 높은 정보를 얻기 위해 노력하게 된다. 카테고리 3 내 물질 또한 환경 중 검출이 잦기 때문에, 정책 결정자에게 관심사이며, 카테고리 4와 5의 물질은 아직 더 많은 정보 수집이 필요한 물질들이다. 카테고리 6 내 물질은, 모니터링 우선순위가 낮은 물질이며, 자주 검출되는 물질에서만 혼합 효과(Mixture effect)가 조사될 필요가 있다. NORMAN이 제시한 표적 분석 물질 우선순위 선별은 정보의 수집 수준에 따라 결정되므로, 향후 덜 알려진 물질에 관한 정보를 수집하기 위한 노력이 기울여질 수 있다.

이 접근법은 유럽 내 4개의 강에 적용되어 물질의 우선순위를 설정하였고, 유럽집행위원회(EC)에 유럽 표층수 감시 목록(European Surface Watch List)⁵¹⁾으로 권고되었다. 이러한

51) EUR-Lex(2015), "Commission Implementing Decision (EU) 2015/495: Establishing a Watch List of Substances for Union-Wide Monitoring in The Field of Water Policy Pursuant to Directive 2008/105/EC of the European Parliament and of the Council", 검색일: 2020.5.22.

내용은 프랑스와 슬로바키아의 규제기관에 채택되어 자국 내 유해화학물질 우선순위 선정에 적용되었다.

표 3-4 NORMAN 물질 우선순위 선정의 카테고리화 기준(표적 분석)

구분	현재 상황/지식의 격차(gap)	현황 (+) Yes; (-) No; (?) Maybe	행동 카테고리
1	노출 및 무영향 임계값의 초과에 대한 충분한 증거 (실험 quality target)	(+) Quality target의 초과 (+) 충분한 분석 역량 (+) 충분한 노출 데이터 (+) 실험적 영향 데이터	통제 조치 필요/일상적 모니터링에 포함 및 법적 구속력 있는 quality standards*를 강화
2	유해성 평가는 실험 데이터에 기반하나 모니터링 데이터가 부족	(?) Quality target의 초과 (+) 충분한 분석 역량 (-) 충분한 노출 데이터 (+) 실험적 영향 데이터	감시 리스트/노출 정도와 공간적 분포에 대한 정보를 얻기 위한 스크리닝 연구 필요
3	노출 근거가 있으나 유해성 평가가 예측된 (생태)독성학 데이터(P-PNEC**)	(?) Quality target의 초과 (?) 충분한 분석 역량 (+) 충분한 노출 데이터 (-) 실험적 영향 데이터	위해성에 대한 결론을 내리기 전에 엄격한 유해성 평가 필요
4	분석 능력이 충분하지 않음	(?) Quality target의 초과 (-) 충분한 분석 역량 (-) 충분한 노출 데이터 (?) 실험적 영향 데이터	분석 능력 증진 필요
5	모니터링 데이터가 없거나 적고, 유해성 평가가 예측된 (생태)독성학 데이터(P-PNEC)	(?) Quality target의 초과 (+) 충분한 분석 역량 (-) 충분한 노출 데이터 (-) 실험적 영향 데이터	스크리닝 연구와 엄격한 유해성 평가 필요
6	무영향 임계값을 넘지 않는 충분한 근거 (실험 quality target)	(-) Quality target의 초과 (+) 충분한 분석 역량 (+) 충분한 노출 데이터 (+) 실험적 영향 데이터	모니터링을 위한 노력이 감소할 필요가 있으나, 자주 검출되는 물질에 대한 혼합 위해성이 확인되어야 함

주: *특정 품질 수준을 충족하기 위해 따라야 하는 규정, 지침 또는 요구사항.

**예측 무영향 농도(Predicted No-Effect Concentration).

자료: Dulio et al.(2024), p.5를 바탕으로 저자 작성.

나) 추정 분석 기반 알고리즘

SNTS 기술의 개발과 함께, NORMAN은 표적 분석 기반 우선순위 선정에 SNTS 기법을 포함하여 우선순위 체계를 고도화하고자 하였다(그림 3-4 참조).⁵²⁾ 여기에는 회고 분석과 같은 최근의 개발 내용과 예측 모델링 기술이 포함된다. 기존 알고리즘의 업데이트는 여러 다른 요소에서도 진행이 되었지만, 본문에서는 SNTS에 관한 내용에 초점을 맞춰 내용을 검토하였다. 업데이트된 기타 요소는 Dulio et al.(2024)에서 확인할 수 있다.

52) Dulio et al.(2024), pp.1-22.

SNTS와 관련하여 새로 도입된 지표는 확인 Identification Point(IP) 점수 체계와 추정적 정량(Semi-quantification) 기법이다. IP 점수는 머신러닝을 도입하여 SNTS 기법을 통해 확인되는 물질의 확인 신뢰도를 자동화되고 간결하며 모호하지 않은 방법으로 결정하게 한다. 추정적 정량화 기법은 SNTS로 확인된 물질을 특정 워크플로를 통해 대략적 농도 추정을 가능하게 한다. 만약, 표적 분석 워크플로에 제시된 모든 데이터가 충족된다면 관리 우선순위가 쉽게 결정될 수 있지만, 정책 결정자가 추정 분석의 결과도 추가적 자료(예: 시공간적 범위 확장을 위한 추가적인 정점, 국가, 연도)로 고려하고자 한다면 추정 분석 워크플로를 선택하여 추가적인 정보를 얻는 데 사용할 수 있다.

추정 분석 우선순위 결정 알고리즘은 물질의 우려 수준에 대한 예비 평가를 수행하고 그 결과에 따른 행동 방향을 고려하는데 출발점이 될 수 있으며, 이 출발점은 “IP 점수가 기준값을 초과하는가?”라는 질문에서부터 시작하게 된다. 만약, IP 점수를 통해 물질이 레벨 3으로 구분된다면, ‘물질의 조사가 필요하다’라는 최소 요건을 충족하게 된다. 추정 분석의 결정 트리는 이러한 알고리즘을 거쳐 7개의 행동 카테고리 연결되게 된다(표 3-5 참조).

카테고리 S1은 즉각적인 행동이 권고되는 물질이며 S3은 가장 낮은 무영향 예측농도(PNEC: Predicted No-Effect Concentration)의 수정 이후 행동을 권고하는 물질로, 위해의 가능성이 높아 가장 중요한 카테고리이다. 물질이 S1이나 S3으로 분류되면, 우선 표적분석을 통해 농도를 파악하고 모니터링의 우선순위 후보물질로 고려되어야 한다. 카테고리 S2와 S5로 분류되는 물질은 혼합 위해의 잠재적 기여 물질로 고려되며, 그 이유는 빈번한 환경 중 검출과 동시에 검출되는 경향을 보이며 가장 낮은 PNEC보다 살짝 낮은 값을 보이기 때문이다. 이 그룹도 표적 분석을 통한 농도 확인이 권고되며, 실제 모니터링 되기 전, 여러 독성학적 정보가 더 수집될 필요가 있다. 카테고리 S4A와 S4C는 IP가 고려 대상 기준값을 넘지 않는 등 초기 기준을 통과하지 않은 물질이며 S6에 포함되는 물질은 위해성이 없는 물질이라고 판단될 수 있다.

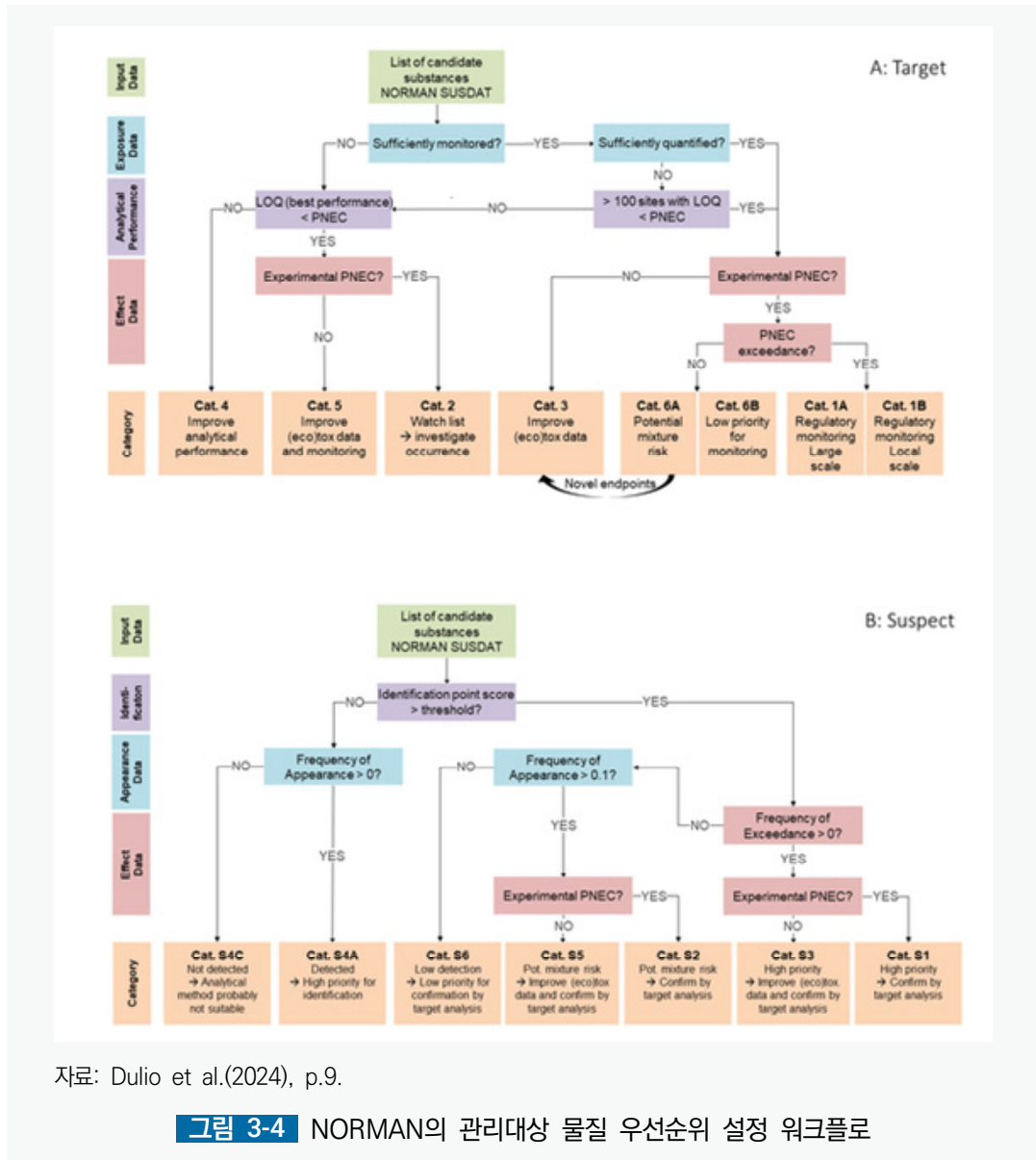


표 3-5 NORMAN 물질 우선순위 선정의 카테고리화 기준(추정 분석)

구분	현재 상황/지식의 격차(gap)	현황 (+) Yes; (-) No; (?) Maybe	행동 카테고리
S1	- 노출 및 무영향 임계값 초과에 대한 증거 - 유해성 평가가 실험적 데이터에 기반함	(+) Quality target의 초과 (+) 충분한 분석 역량 (+) 빈번한 검출 (+) 실험적 영향 데이터	표적 분석을 통한 물질 확인 및 모니터링 조치의 높은 우선순위
S2	- 초과에 대한 근거는 낮으나, 혼합 위해성의 잠재적 기여가 있음 - 유해성 평가가 실험적 데이터에 기반함	(-) Quality target의 초과 (+) 충분한 분석 역량 (+) 빈번한 검출 (+) 실험적 영향 데이터	표적 분석을 통한 물질 확인 및 모니터링 조치의 중간 우선순위
S3	- 노출 및 무영향 임계값 초과에 대한 증거 - 유해성 평가가 예측 데이터에 기반함(P-PNEC)	(+) Quality target의 초과 (+) 충분한 분석 역량 (+) 빈번한 검출 (-) 실험적 영향 데이터	무영향 임계값 재검토 후 표적 분석을 통한 물질 확인 및 모니터링 조치의 높은 우선순위 권고
S4A	노출 근거 있으나 확인된 물질의 신뢰도가 불충분함	(?) Quality target의 초과 (-) 충분한 분석 역량 (+) 빈번한 검출 (?) 실험적 영향 데이터	표적 분석을 통한 물질의 확인을 위한 분석기법 개선 높은 우선순위
S4C	노출 근거 부재, 확인된 물질의 또는 적용된 분석 방법의 신뢰도가 불충분함	(?) Quality target의 초과 (-) 충분한 분석 역량 (-) 빈번한 검출 (?) 실험적 영향 데이터	분석 방법이 적절하지 않을 수 있음/분석 방법의 개선이 필요
S5	- 위해의 근거가 낮으나 혼합 위해도의 잠재적 기여가 있음 - 유해성 평가가 예측 데이터에 기반함(P-PNEC)	(?) Quality target의 초과 (?) 충분한 분석 역량 (+) 빈번한 검출 (-) 실험적 영향 데이터	무영향 임계값 재검토 후 표적 분석을 통한 물질의 확인과 모니터링이 중간 우선순위
S6	노출 근거가 낮고 무영향 임계값을 초과하지 않음	(-) Quality target의 초과 (+) 충분한 분석 역량 (-) 빈번한 검출 (?) 실험적 영향 데이터	현시점에서는 물질의 확인과 모니터링의 낮은 우선순위

자료: Dulio et al.(2024), p.10을 바탕으로 저자 작성.

다) 표적 분석과 추정 분석 워크플로의 통합

두 개의 상호보완적 워크플로를 통해 표적 분석과 추정 분석으로부터 얻어진 우선순위 결정 결과를 통합할 수 있다. 따라서 다양한 결과를 분석한 이후 여러 근거를 바탕으로 각 물질에 ‘전반적 행동 카테고리(Overall action category)’를 부여하고, 최종 점수를 얻는 것이 가능하다.

Dulio et al.(2024)은 하수 시료에 두 가지 우선순위 설정 알고리즘을 통합한 결과를 제시하였다(그림 3-5 참조). 이러한 통합적 접근은 NORMAN SUSDAT 내 총 65,690개 물질, 84개의 하수 시료에 적용되었다. 가용한 정보의 수준에 따라 카테고리가 다르게 나뉘었다. 예를 들어 카테고리 2와 5로 구분되는 표적 분석의 근거가 불충분한 물질과 추정 분석에서 자주 검출되는 카테고리 S2와 S5의 물질은 표적 분석으로 검증해야 하는 우선순위가 중간 정도이다. 또한 연두색으로 구분되는 부분은 PNEC를 초과한다는 근거가 낮거나 잘 검출되지 않는 물질이다. 회색으로 구분되는 부분은 표적 분석과 추정 분석 모두의 근거가 불충분하거나 분석 방법이 적합하지 않은 물질이다. 추정 분석에서 검출 빈도의 증가는 환경 중 노출이 증가한다는 것을 의미하지만 표적 분석에서는 간과될 수가 있다. 또한 반대로, 오래된 표적 분석 데이터에 비해 낮은 농도나 감소하는 검출 빈도는 화학물질의 감소를 의미할 수 있다.

NORMAN에서 추진되는 환경 중 STNS 결과의 우선순위 물질 스크리닝 활용은 STNS의 정책적 활용 가능성을 보여준다. 따라서 주기적인 NTS 모니터링의 실천과 데이터베이스 구축은 우려 물질의 선제적 발견과 회고적 분석을 통한 시간에 따른 물질의 패턴 변화를 분석할 수 있게 한다. 이러한 도구의 개발은 EU의 지속가능한 화학물질 전략에서 구상된 바와 같이 모니터링과 규제 조치의 우선순위 설정을 위해 환경 모니터링 데이터를 더 효율적으로 활용되는데 중요하게 기여할 것이다.

Target category	Exceeds PNEC	Sufficient. analytics	Sufficient exposure data	Experimental. effect data	Mixture Risk	Suspect category							
						+	+	-	-	?	?	-	Exceeds PNEC
						+	+	+	+	-	-	+	Suff. analytics
						+	+	+	+	+	-	-	Frequently detected
						+	-	+	-	?	?	?	Exp. effect data
Cat. S1	Cat. S3	Cat. S2	Cat. S5	Cat. S4A	Cat. S4C	Cat. S6	Total substances						
Cat. 1	+	+	+	+	+	3	n.a.	16	n.a.	12			31
Cat. 3	?	?	+	-	?	n.a.	1	n.a.	44	81	17	2	145
Cat. 2	?	+	-	+	?	8	n.a.	49	n.a.	197	91	2	347
Cat. 5	?	+	-	-	?	n.a.	12	n.a.	277	979	486	17	1771
Cat. 4	?	-	-	?	?	4			1	72	68		145
Cat. 6A	-	+	+	+	+	1	n.a.	10	n.a.	9	1		21
Cat. 6B	-	+	+	+	-	1	n.a.	28	n.a.	63	17		109
No data	-	-	-	-	-	3	472	26	5744	37907	18672	289	63113
Total substances						20	485	129	6066	39320	19352	310	65682
Priority Legend:						677	high	7455	medium	326	low		
								37907	medium w/ uncertainty	19317	uncertainty		

자료: Dulio et al.(2024), p.12.

그림 3-5 표적 분석, 추정 분석의 우선순위 설정 알고리즘 통합 결과의 예(하수에 적용)

다. NTS의 정책적 활용

NORMAN 네트워크는 2018년 ‘NTS 기술의 환경 모니터링과 화학물질 관리 지원’이라는 주제로 워크숍을 개최하였다(그림 3-6 참조).⁵³⁾ 총 20개의 유럽 국가에서 80명 이상의 참석자가 모여 규제기관과 정책 결정자에게 NTS 기술 응용의 최신 발전 현황을 알리고 NTS 데이터의 환경 중 모니터링과 화학물질 법안을 위한 활용에 대해 논의하였다. 이 워크숍에는 유럽 위원회 환경국(DG ENV), 유럽화학물질청(ECHA), 독일과 슬로바키아 등의 환경 기관에서 발제하였다. 논의된 주제는 환경 모니터링과 화학물질 법을 지원하기 위한 NTS의 활용, 경과와 향후 방향, 환경 중 신규 유해화학물질의 선제 경고와 빠른 평가, 환경 중 존재하는 화학물질의 특성 파악, 데이터의 저장과 공유 등이 있었다.

NORMAN 웹사이트에 공유된 자료를 살펴보면, 유럽 위원회 환경국에서는 비표적 분석을 통한 미확인 물질의 스크리닝 데이터 생산의 필요성을 언급하였고, ECHA는 NTS가 스크리닝 목적으로 활용되기 위해서는 REACH와 관련 있는 물질이 대상이어야 하고, 신뢰도가 높아야 하며, EU 내 시공간적으로 대표성을 가져야 하고 중앙 중심적으로 활용할 수 있어야 한다는 것을 언급하였다. 또한 도전과제로 비표적 데이터의 적용 가능 영역 및 한계를 이해하고 기본적인 연구 설계 및 분석을 평가할 수 있는 전문 지식 등 규제에서 요구되는 사항과 검출

53) NORMAN, “NORMAN Workshop on NTS for Regulators”, 검색일: 2024.5.23.

되는 화학물질의 구조와 시장에서 사용되는 REACH 등록 물질의 연결을 제시하였다.

NORMAN 네트워크가 워크숍을 통해 결론적으로 제시한 내용은, (1) NTS는 환경 모니터링과 화학물질 법안을 지원할 잠재력이 있고, (2) 통합된 NTS 프로토콜과 최소한의 품질 보증 요청사항이 필요하며, (3) 프로토콜의 표준화는 규제나 법규를 채택하거나 적용하는 것과 함께 이루어져야 하며, (4) NTS 데이터 관리와 공유를 위해 새로운 프로토콜이나 인프라가 필요하며, (5) NTS는 현재의 모니터링 체계가 가지고 있는 모든 문제를 해결하는 것이 아니라 하는 것을 인지하고, (6) NTS와 effect-based 방법론의 시너지를 증진해야 한다는 것이다.



워크숍 이후 NORMAN 네트워크에서는 논의된 내용과 향후 방향을 정리한 논문을 발표하였다.⁵⁴⁾ 이 논문에서는 6개의 주제로 나누어 토의 내용을 정리하였다.

- 주제 1: NTS는 환경 또는 화학물질 관련 법안의 규제 과정을 지원할 수 있음(예: REACH, WFD, Marine Strategy Framework 등)
- 주제 2: NTS는 노출평가에서 첫 번째 스크리닝 단계에 활용되어 추후 표적 분석을 촉발할 근거가 될 수 있으나 대체할 수는 없음
- 주제 3: 통합된 NTS 프로토콜과 최소한의 품질 요구수준이 개발되어야 함
- 주제 4: 효율적인 NTS 데이터 관리, 평가, 공유를 위한 새로운 프로토콜/인프라가 필요함
- 주제 5: NTS가 더 넓게 적용될 수 있도록 교육이 필요함
- 주제 6: NTS와 영향 기반(effect-based)의 방법론의 시너지가 강화되어야 함

54) Hollender et al.(2019), pp.1-11.

논문에서는 주제 1, 2와 관련하여 SNTS가 응용될 수 있는 법을 예시로 제시하였다(표 3-6 참조). 예를 들어, 대표성을 지닌 환경 시료의 NTS 분석 데이터를 회고적으로 탐색하는 것은 WFD 감시 목록에 화학물질을 추가하는 속도를 증진하거나 규제의 효과를 확인할 수 있다.

이와 함께 규제 목적에 따라 모니터링, 화학물질 관리, 우선순위 결정 등 NTS의 활용 방법이 다르므로 이를 인지하고 적절한 전략을 세우는 것이 중요하다는 것과, SNTS가 규제를 위한 위해성 평가의 첫 스크리닝 단계로 도입되어 표적 분석을 촉발하는 형태로 도입될 수 있다는 것을 언급하였다. 표적 분석의 촉발은 NTS로 확인되는 물질을 추정적으로 정량화하여 기존의 기준치(예: PNEC)와 비교하는 과정을 거쳐 추후 우려 물질을 선정하는 기초적인 평가를 수행하는 데 적용될 수 있다. 예를 들어 EU Watch List 메커니즘에서 방대한 물질을 스크리닝하고 관련이 높은 물질을 우선순위화 한 후, 정량화되어야 할 물질을 표적 분석 리스트에 넣는 방식이 적용될 수 있을 것이다. 이러한 방법은 관련성이 없는 물질을 오랜 기간 모니터링 하는 노력을 피할 수 있다, 이러한 방식은 수매체 뿐 아니라 생물 매체에도 적용되어 국가 모니터링 프로그램이나 시료 은행 등에 적용될 수 있을 것이다.

또한, SNTS의 정책적 활용을 위한 고려사항으로는 규제자의 필요가 고려된 모니터링의 목적을 설정해야 하고 데이터 분석의 로드를 줄이기 위해 규제 측면의 의도에 적합한(연관된) 추정 분석 목록을 선택해야 한다는 것이 있다. 이러한 것을 가능하게 하려면 법적 규제가 화학 물질의 사용량, 노출 경로, 화학적 특징을 포함하게 하고 이 내용이 공개 데이터베이스를 통해 과학자와 표준 연구실에서 활용할 수 있어야 한다고 언급하였다(표 3-6 참조).

NORMAN의 규제자를 위한 워크숍에서는 언급된 내용을 포함하여 향후 NTS가 환경 모니터링과 화학물질 관리의 지원을 위해 필요한 내용을 아래와 같이 정리하였다.

- 통합된 NTS 프로토콜과 품질 요구사항(quality requirement)
- 효과적인 데이터 관리, 평가와 공유를 위한 인프라
- 충분한 자원과 연구와 규제 집단에서 훈련된 인력

특히 물질의 확인을 위해 물질의 질량 스펙트럼의 해석과 관련된 정보와 물질의 생산 및 사용량 등이 개방형 데이터베이스를 통해 과학자 집단에 공개 및 공유되어야 한다는 것을 강조하였다.

표 3-6 SNTS가 지원할 수 있는 규제 이슈 목록

법 구분		규제적 맥락	NTS 접근
환경법	Water Framework Directive(WFD)	환경 모니터링	관련성 있는 미지의 오염 물질을 확인하기 위한 시공간적 경향 분석
	Marine Strategy Framework Directive (MSFD)		실시간 경고를 위한 현장 시스템의 도입
	Ambient Air Quality Directive		추정 물질을 포함한 방대한 수의 물질 스크리닝
	Drinking Water Directive		
	Industrial Emissions Directive		
식품법	Regulation on maximum levels for certain contaminants in food	식품 진위성, 사기 및 혼입물을 포함한 식품 모니터링	특정 질량 스펙트럼이나 동위원소 패턴을 통한 물질의 그룹 스크리닝
	Regulation on food additives		
	Regulation on residues of veterinary medicinal products		
	Regulation on residues of plant protection products		
	Regulation on Authenticity		
물질법	REACH Regulation	<ul style="list-style-type: none"> 유실의 검출, 비의도적 배출을 포함한 화학물질 관리 우선순위 선정 (예: PBT¹⁾, PMT²⁾ 스크리닝) 	<ul style="list-style-type: none"> 감소 조치의 효과를 결정하기 위한 전-후 모니터링 (예: 새로운 기술) 디지털 데이터의 회고적 탐색
	Plant Protection Products and Biocidal Products		
	Human and veterinary medicinal products Directives		
	Food contact materials Regulation		
노동자 보호법	Carcinogens and mutagens Directive	인체 모니터링	Effect-directed analysis
	Chemical agents Directive		

주: 1) Persistent, Bioaccumulative, Toxic(잔류성, 생물농축성, 독성).

2) Persistent, Mobile, Toxic(잔류성, 이동성, 독성).

자료: Hollender et al.(2019), p.2를 바탕으로 저자 작성.

표 3-7 NTS의 도입을 위한 규제기관과 연구자의 실제 또는 잠재적 기여

규제 기관	연구 집단
마케팅된 화학물질의 완전한 목록	분석 방법
화학물질의 특성(from dossiers)	데이터 검증 도구, 워크플로와 플랫폼
톤(Tonnage) 수 데이터와 노출 범주(from dossiers)	PBT와 PMT의 개선된 예측 모델
산업체로부터 추가적인 분석 데이터 (예: 질량 스펙트럼)	실험적 발생, 거동, 독성 데이터에 기반한 우선순위 설정 체계
산업체로부터의 표준물질	시범 사례(Pilot study) 연구
데이터 소유권 및 데이터 공유 명확화	

자료: Hollender et al.(2019), p.6을 참조하여 저자 작성.

2. 미국 환경보호청(US EPA)

가. 배경

US EPA(United States Environmental Protection Agency)의 연구자는 SNTS를 개발하고 발전시켜 접근성을 증진하고, 표준화된 방법론을 개발하여 다른 실험실에서 채택 및 활용할 수 있도록 한다. 이런 활동은 이해관계자와 협력자에게 공유되며, 이에 따라 지역, 주, 연방의 실험실이 SNTS 기법을 도입 및 활용할 수 있도록 노력하고 있다.⁵⁵⁾ US EPA에서의 주요 SNTS 응용 분야는 다섯 가지로 정리된다(표 3-8 참조).

표 3-8 US EPA에서의 SNTS 응용 분야

SNTS 응용	고려 사항
노출 감시	어떤 화학물질이 음식, 제품, 실내 먼지, 혈액 등에 존재하는가?
화학물질 우선순위 설정	어떤 화학물질과 혼합물이 주요한지?
노출 포렌식	노출원의 화학물질 특징이 무엇인지?
Effect-directed analysis	복잡한 혼합물에서 어떤 물질이 생물활성 화학물질인지?
바이오마커 탐색	어떤 화학물질이 건강 손상을 예측하는지?

자료: US EPA, "Genesis and Study Design for EPA's Non-Targeted Analysis Collaborative Trial (ENTACT)", p.5를 바탕으로 저자 작성.

응용 분야 중 노출 감시와 관련하여 연구개발부서(ORD: Office of Research and Development)는 2018년 100개의 소비자 제품에서 추정 분석을 수행하였다.⁵⁶⁾ 분석은 4,270개의 잠재적 인체 위해성이 있는 물질을 스크리닝하였고, 약 1,600개의 물질을 잠정적으로 확인하였다. 그 결과, 약 1,400개의 물질은 소비자 제품에 함유되는 화학물질 데이터베이스에 부재한 물질이었다. 따라서 인체에 노출되는 화학물질에 대한 이해의 범위를 확장할 수 있었다고 발표하였다. 화학물질 우선순위 설정 관련, ORD는 2018년 음용수에서 SNTS 분석을 수행하였고, 독성 데이터베이스로 탐색하였다.⁵⁷⁾ 그 결과, 91개의 후보물질을 높은 우선순위가 있다고 확인하였으며 이 중 15개의 물질을 제외한 나머지는 일상적인 모니터링이 되고 있지 않은 물질이었다. 따라서 음용수를 통한 화학물질 노출을 확인하는 현재 시스템이 보완되어야 한다는 것을 제안하였다. 또한, 재활용 제품에서의 노출 포렌식, 태반 시료를 이용한 바이오마커 탐색도 수행하였다.⁵⁸⁾

55) US EPA, "Non-Targeted Analysis Research", 검색일: 2024.5.29.

56) Phillips et al.(2018), pp.3125-3135.

57) Newton et al.(2018), pp.297-306.

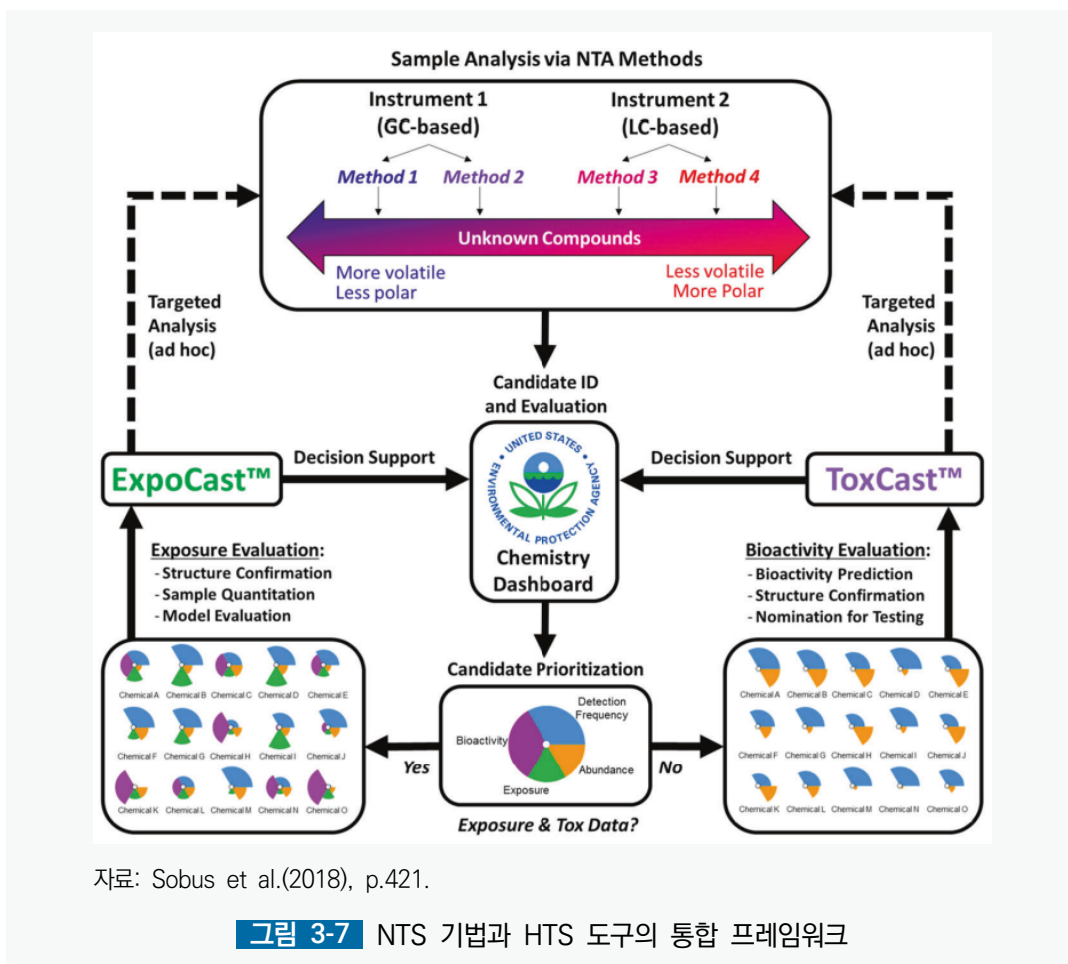
58) US EPA, "EPA's Non-Targeted Analysis Research Program: Building Tools to Enable Rapid Exposure Surveillance", 검색일: 2024.5.29.

이러한 내용을 통해, US EPA는 SNTS를 1차적인 모니터링에 활용하여 임시 노출 자료를 수집하는 데 응용 가능하며, 이를 위한 표준 분석법을 만드는데 많은 평가가 필요하다고 명시하였다. 또한, 분석 화학자, 환경 및 노출 모델 개발자, 화학정보학자, 프로그래머/개발자 등 NTS가 응용될 주제와 관련된 전문가의 협력이 필요하다고 언급하였다.

나. US EPA의 NTS 프레임워크

US EPA의 ORD는 비표적 분석과 화학물질 안전성 평가를 위한 통합 도구를 제안하였다(그림 3-7 참조).⁵⁹⁾ 프레임워크의 목적은 SNTS 연구를 기존의 화학물질 스크리닝 이니셔티브와 통합하기 위함이다. 제안된 프레임워크는 SNTS를 통한 물질의 확인 과정에서 고속대량스크리닝(HTS: High Throughput Analysis) 도구를 활용한다. SNTS를 통해 시료를 분석한 데이터는 US EPA의 웹기반 데이터베이스인 CompTox Chemistry Dashboard를 통해 질량의 범위 또는 구조를 탐색할 수 있도록 하며 이를 통해 확인되지 않은 물질의 대략적인 분자구조가 제안된다. 다음 단계로 탐색된 물질의 우선순위 설정을 위하여 생물활성(Bioactivity)과 잠재 노출력을 판단하게 된다. 생물활성도 예측을 위해서는 구조-활성 모델 등이 활용되며 잠재 노출력은 ExpoCast(모델을 통해 알려진 물질의 환경과 생물 내 농도 예측)을 통해 예측한다. 이렇게 우선순위가 정해진 물질은 EPA Toxicity Forecaster(ToxCast) 프로그램 내 in vitro 기법을 통해 스크리닝된다. 이러한 결과를 통해 EPA가 내리는 화학물질 관련 정책적 결정의 기반을 제공한다.

59) Sobus et al.(2018), pp.411-426.



다. 비표적 분석 협동 연구(ENTACT)

ORD는 2015년에 “환경과 생체 시료에서 외부 유래 유해화학물질을 분석하는 SNTS 분석의 진보(Advancing non-targeted analyses of xenobiotic chemicals in environmental and biological media)”라는 워크숍을 개최하였다.⁶⁰⁾ 워크숍의 목적은 SNTS 전문가가 모여 SNTS 측정 데이터의 생성, 해석 및 교환에 대한 최신 방법론을 논의하는 것이었다. 이 워크숍에서는 기기 분석, 시료, 분석 방법, 전략, 소프트웨어 등의 도구, 데이터 분석 워크플로, 데이터베이스 등을 논의하였고 노출 과학자, 독성학자와 분석화학 연구자의 향후 필요 사항에 대해 논의하였다(표 3-9 참조). 또한 EPA의 자원(예: ToxCast)를 어떻게 활용할 것인가에 대해서도 논의하였다. 이 워크숍은 EPA의 비표적 분석 협동 연구(ENTACT: EPA’s Non-Targeted Analysis Collaborative Trial)의 초석이 되었다.

60) ORD의 국가 노출 연구 실험실(NERL: National Exposure Research Laboratory)과 지속가능한 화학물질 안전(Chemical Safety for Sustainability) 연구 프로그램이 주최함.

표 3-9 NTS 프레임워크와 관련된 각 분야 과학자의 필요 내용

분야	필요 사항
노출 과학자	<ul style="list-style-type: none"> • 소비자 제품 및 상업제품에서 화학물질의 측정 • 환경과 거주 매체에서 화학물질의 측정 • 생물학적 매체에서의 화학물질의 측정
독성학자	<ul style="list-style-type: none"> • 후보 모화학물질(Parent chemical)의 우선순위 목록 • 후보 분해물질/대사산물의 우선순위 목록 • 후보 혼합 화학물질의 우선순위 목록
분석화학 연구자	<ul style="list-style-type: none"> • 물질 확인을 위한 방대하고 관련성이 높으며 선별되고 개방된 화학물질 데이터베이스 • 물질의 선정과 우선순위를 위한 정보 도구(소프트웨어, 알고리즘 등) • 후보물질 확인을 위한 화학물질 표준품(chemical standard)과 참고할 질량 스펙트럼을 포함한 방대한 인벤토리 • 포괄적인 분석과 표준화된 분석법을 지원하기 위한 실험실 네트워크

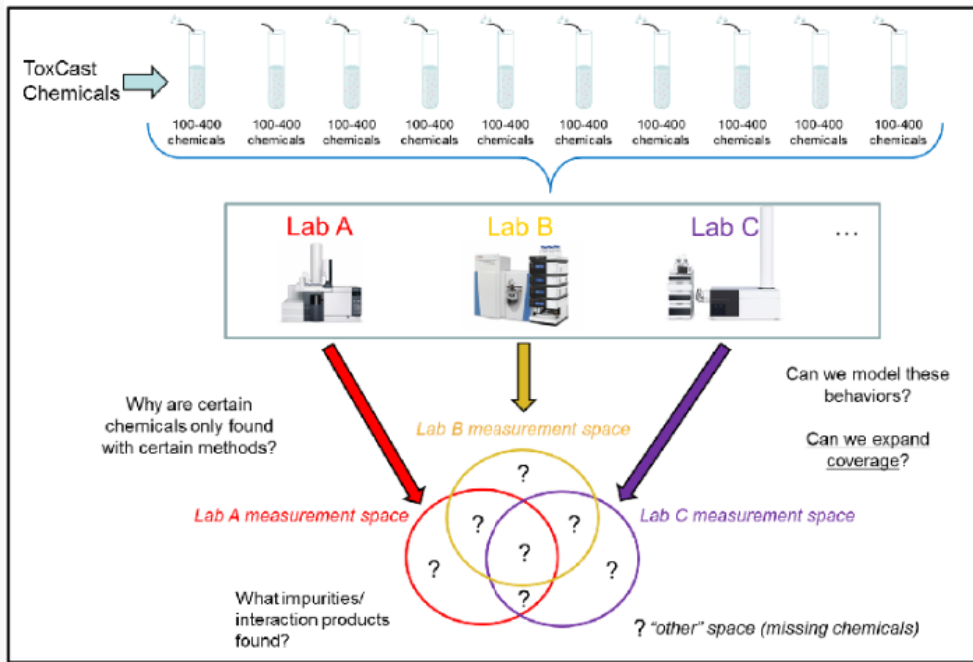
자료: Sobus et al.(2018), p.420을 바탕으로 저자 작성.

ENTACT의 SNTS 목적은 현재 분석 방법의 성능 특징을 특정화하고, SNTS의 성능과 방법 벤치마크를 설정하고 STNS 방법을 활용한 연구의 보고 기준을 개발하고 물질과 질량 스펙트럼의 표준 라이브러리를 개선하는 것이다. ENTACT는 학계, 정부, 민간에서 약 30곳의 실험실이 참여하며, 실험실 간 결과 비교 방식으로 프로젝트를 수행한다. 예를 들어, ENTACT는 화학물질이 섞인 혼합물과 이 혼합물이 포함된 인체 노출 관련 시료(예: 실내 먼지, 혈청)를 준비하여 각 실험실에 배분한다. 각 실험실은 배분된 시료를 NTS 방식으로 분석하고 주어진 데이터베이스로 자료를 분석, 그 결과를 비교하여 NTS의 표준화와 발전을 추진한다.⁶¹⁾ 이를 통해 분석 전처리법, 기기 분석, 데이터 분석의 실험실별 공통점과 차이점을 파악하고 결과가 노출 예측에 어떻게 활용될 수 있을지 등에 대해 논의한다(그림 3-8 참조).

현재 기준, 가장 최근의 참조할 수 있는 자료를 살펴보면, ENTACT 활동을 통해 다음과 같은 결론을 도출하고 있다. 우선, NTS는 많은 ToxCast 화학물질을 검출하기 적합하다는 것이 확인되었다. 추후 더 광범위한 물질 확인을 위해 다양한 전처리 기법과 기기분석법의 적용이 필요하며, 화학물질의 농도, 매체, 물질 추출 기술이 NTS 수행에 영향을 미친다는 결론을 얻었다. 또한 여러 한계점도 발견되었는데, NTS 방법과 결과 보고에 투명성이 부족하다는 것과 실험실 및 방법 간 차이가 많다는 것, 정도관리에 더 집중해야 한다는 내용이 있었다. ENTACT의 추후 업무는 이후 여러 실험실 간 NTS의 수행 및 성능 평가와 데이터베이스 개발, 그리고 NTS 연구의 가이드라인과 허용 기준을 제공하는 것을 목표로 하고 있다.⁶²⁾

61) Ulrich et al.(2019), pp.853-866.

62) US EPA, "Cross-Laboratory Comparison of Non-Targeted Analysis Method Performance using Complex Synthetic Mixtures", 검색일: 2024.5.29.



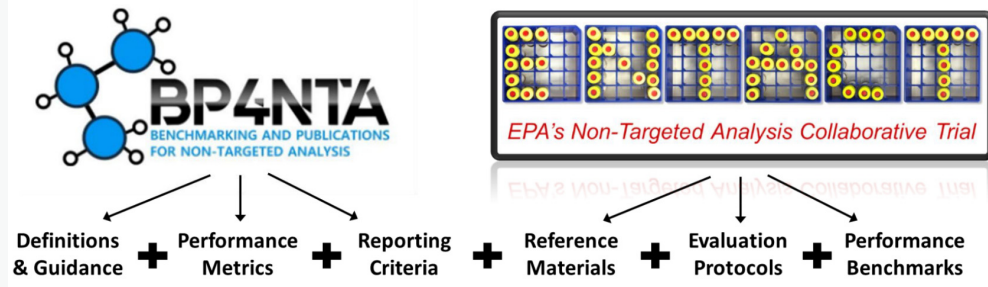
자료: US EPA, "EPA's Non-Targeted Analysis Research Program: Building Tools to Enable Rapid Exposure Surveillance", p.15, 검색일: 2024.5.29.

그림 3-8 ENTACT의 프로젝트 모식도

라. BP4NTA

비표적 분석의 최선의 실행(BP4NTA: Best Practice for Non-Target Analysis) 워킹그룹은 NTS의 도전과제를 해결하기 위해 설립되었다(그림 3-9 참조).⁶³⁾ 2018년 ENTACT 워크숍에서는 실험실 간 결과의 효율적인 비교를 위한 NTS의 용어와 정의 공유, 분석 절차와 결과 보고가 통일될 때의 벤치마크 결정, 벤치마크 결정 이후에는 NTS 측정의 능숙도 테스트 등의 실행 등에 대한 필요에 동의가 있었고, 이러한 컨셉에 관한 논의와 발전이 계속되어야 한다는 참여자의 동의로 BP4NTA가 설립되었다. BP4NTA는 US EPA와 미국 표준연구소(NIST: National Institute of Standards and Technology)가 주관하고 있다.

63) BP4NTA, "About", 검색일: 2024.5.29.



자료: US EPA, “Cross-Laboratory Comparison of Non-Targeted Analysis Method Performance Using Complex Synthetic Mixtures”, p.23.

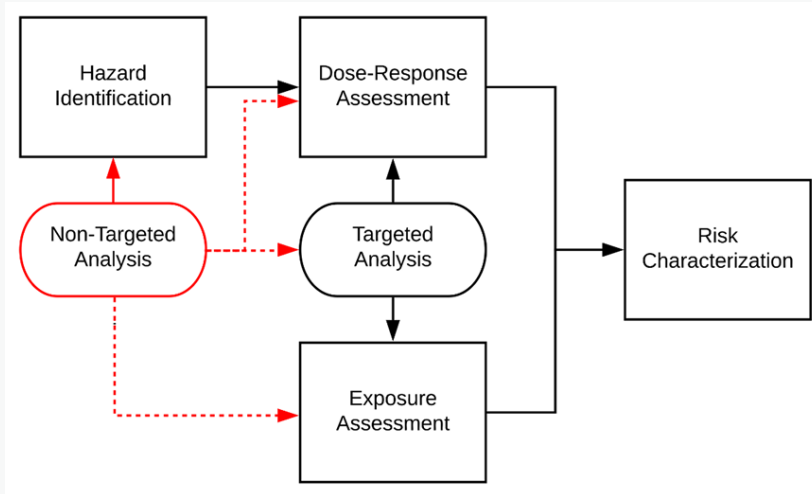
그림 3-9 BP4NTA와 ENTACT의 역할

BP4NTA의 최신 업무를 살펴보면, SNTS 연구 결과를 보고하는 도구의 개발⁶⁴⁾과 SNTS 결과를 정량화하는 내용을 확인할 수 있다. 현존하는 NTS 결과를 보고하는 지침에서 충분하지 않은 부분을 보완하기 위해 NTS Study Reporting Tool(SRT)이 개발되었고, 개발된 내용이 연구의 디자인과 논문 또는 보고서 작성에 타당한 구조를 제공하며 결과의 질을 평가하는데 효율적임을 확인하였다.⁶⁵⁾ 정량 데이터의 생산, 그리고 불확실성은 SNTS를 정책적으로 도입하는 데 있어 주요한 한계점 중 하나이다. 이러한 문제를 해결하기 위하여 High-throughput data stream과 예측 모델을 활용하여 위해 기반의 결정을 위한 SNTS 사용을 증진하고자 하였으며, SNTS 데이터를 위해성 평가 프레임워크에 포함하는 체계를 제안하였다(그림 3-10 참조).⁶⁶⁾ 체계에서는 표적 분석이 활용되는 체계 안에서 SNTS 데이터가 어떻게 활용될 수 있을지를 제시하였다. 그리고 위해성 평가를 위한 SNTS 활용 관련, 3가지 시나리오를 제시하였는데 예를 들어, 추정적으로 정량된 SNTS 데이터를 직접 활용 가능한 기준치와 비교하는 것(예: 음용수 기준), 기준치의 부재 시, 임시의 생물활성 또는 독성 데이터나 임시적 위해 기준값과 비교하는 것(예: ToxCast 활용), 마지막으로 이러한 모든 자료가 없을 시, read-across나 *in silico* 독성 예측을 활용하여 위해도를 평가하는 것이다. 체계를 통해 SNTS로 확인된 화학물질의 위해도를 낮음, 중간, 높음 등으로 구분할 수 있다. 현재 시점에서 SNTS 데이터의 정량화 한계점이 있지만, 궁극적으로 SNTS의 정량 데이터는 수천 개의 연구되지 않은 화학물질에 대해 빠르고 적절하게 위해 기반의 의사 결정하는 것에 기여할 것이라고 언급하였다.

64) BP4NTA, “NTA Study Reporting Tool(SRT)”, 검색일: 2024.5.29.

65) Peter et al.(2021), pp.13870-13879.

66) McCord et al.(2022), p.107011.



자료: McCord et al.(2022), p.3.

그림 3-10 전통적 위해성 평가 패러다임 내 표적, 비표적 분석의 통합 예

1) NTS Study Reporting Tool(SRT)

BP4NTA는 SNTS가 다양한 연구 분야에서 활용될 수 있도록 유연성을 제공하며 초보자도 쉽게 접근할 수 있기 위하여 주요 연구 분야에서 일관된 평가를 지원할 수 있는 표준화된 지표 제공을 위해 SRT를 개발하였다.⁶⁷⁾ SRT는 SNTS 결과 보고의 품질을 평가하기 위한 프레임워크이다. SRT는 크게 연구 디자인, 기기분석, 데이터 처리 및 분석, 데이터 아웃풋, 정도관리로 나뉘어 있으며, 각 카테고리 내 세부 카테고리마다 품질을 판단할 수 있는 상세한 내용이 포함되어 있어 0부터 3까지 점수를 줄 수 있도록 구성되어 있다. 점수에 따라 필요한 정보가 얼마나 포함되어 있는지가 판단되며 이는 결과의 신뢰도와 활용성에 영향을 미친다. 다양한 검토자가 NTS 결과에 대해 SRT를 통한 평가를 하고, 이를 취합하여 결과의 품질을 판단한다. SRT의 상세 내용은 부록에 정리하였다.

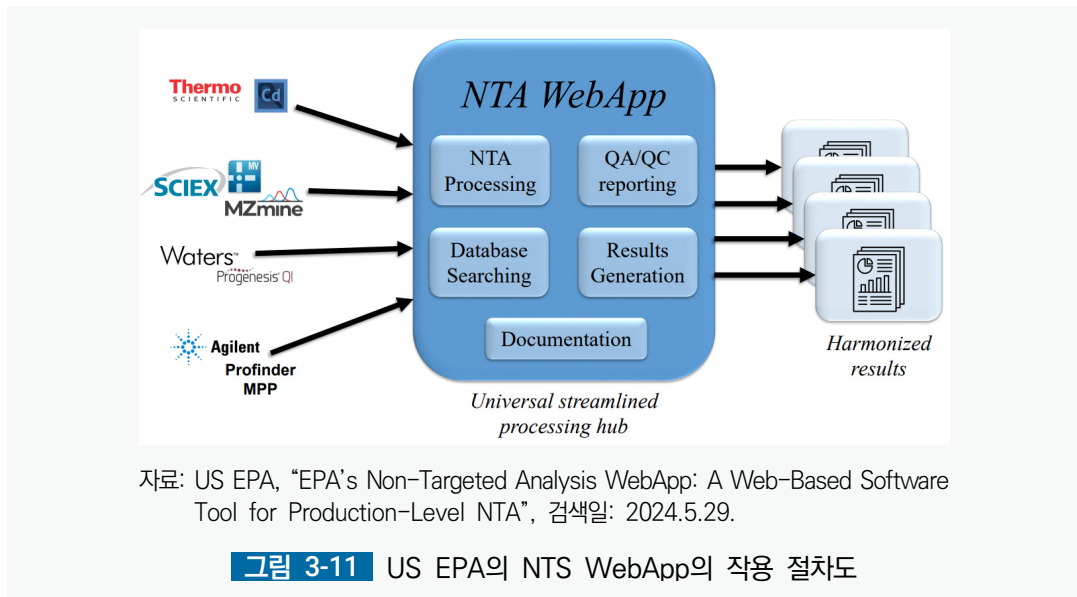
마. NTS WebApp

EPA에서는 SNTS의 데이터 분석 속도와 효율성을 증진하기 위하여 50명 이상의 연구자가 함께 NTS WebApp을 개발하고 있다(그림 3-11 참조).⁶⁸⁾ SNTS는 분석자에 따라 사용하는 프로그램이 다르고 데이터 분석 절차가 달라 통합이 어려우며, 시간이 오래 걸리고 작업자에 따른 차이가 크기 때문에 이러한 통합적 도구를 통하여 문제점을 개선하고자 하였다. NTS WebApp의 적용 절차는, 우선 HRMS로 분석된 데이터 파일을 엑셀 형태로 WebApp에

67) Peter et al.(2021), pp.13870-13879.

68) US EPA, "EPA's Non-Targeted Analysis WebApp: A Web-Based Software Tool for Production-Level NTA", 검색일: 2024.5.29.

업로드하면 WebApp이 결과를 파일로 제공하고, 파일 안에는 데이터를 시각화한 자료와 엑셀 파일이 포함되어 있다. 엑셀 파일에는 분석하는 데 활용된 파라미터, 분석 결과의 통계, 데이터베이스에 기반한 매칭되는 화학물질 이름과 메타데이터가 포함된다. 또한 물질의 확인과 임시 유해성, 위해성 평가를 위해 EPA의 DSSTox 데이터베이스와 *in silico* 질량 스펙트럼 자료를 사용하고, ToxCast, ExpoCast, Cheminformatics Hazard Module을 활용한다. 현재 WebApp은 계속해서 개발 및 개선되고 있으며, 결과적으로 SNTS 연구에 소요되는 시간과 비용을 줄이고 재현성을 높이며 통합된 형태로 과학적인 정책 결정 절차를 지원할 것이다.

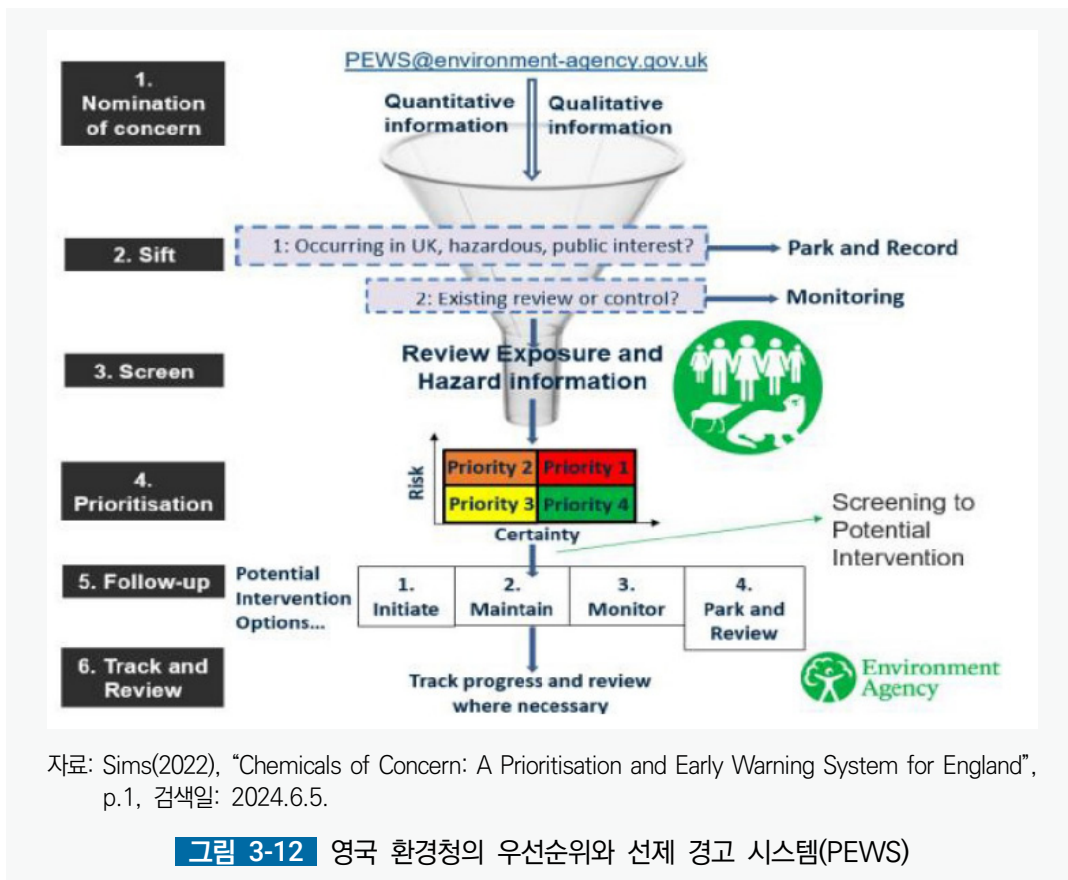


3. 영국 환경청

영국 환경청(United Kingdom Environment Agency)은 영국 내 화학물질 관리 전략을 증진하기 위해 SNTS 접근법을 개발하고 적용하며 영국의 기관 및 기타 국제적인 기관과 함께 협력하고 있다.⁶⁹⁾ 현재는 물, 퇴적물, 토양, 생물 시료를 분석하기 위한 in-house 분석법을 개발하고 있으며, 추정 분석법은 H4 Otter Project의 업무 중 하나인 Eurasian Otters(Lutra lutra) 내 신규 우려 화학물질 모니터링, 화학물질 조사 프로그램(CIP4: Chemicals Investigation Programme 4)의 일부인 하수의 유입수와 방출수, 우선순위와 선제 경고 시스템(PEWS: Prioritisation and Early Warning System)에 적용되고 있다 (그림 3-12 참조). 또한 추정 분석과 비표적 분석을 위한 영국의 정부 간 워킹그룹(UK

69) HSAC, "Recommendations for a Prioritisation and Early Warning System (PEWS) on Chemicals in the Environment", 검색일: 2024.6.5.

Cross-government Working Group)이 착수되었으며, 여기에는 스코틀랜드 환경청(SEPA: Scottish Environment Protection Agency), 영국 보건안전청(UK Health Security Agency), 영국 환경식품농촌부(Department for Environment, Food & Rural affairs) 등이 포함되어 있다. 이 워킹그룹은 지식을 교환하는 포럼을 제공하며 영국의 환경에 관련된 우선순위를 설정하는 역할을 한다. 2021년 환경 중 화학물질에 대한 PEWS 권고와 관련하여 유해 물질 자문 위원회(HSAC: Hazardous Substances Advisory Committee)⁷⁰⁾에서 발간한 문서에서는 영국 환경청이 물과 생물 시료에서 NTS를 수행할 역량을 갖추게 될 것으로 기대되며, 이러한 발전이 존재를 몰랐거나 기준에 모니터링 되지 않는 화학물질을 확인하는 것을 가능하게 할 것이라고 언급하였다. 또한 이를 통해 NORMAN 네트워크에 기여할 것이며, HSAC는 환경청이 환경 시료에 NTS를 적용하는 기술을 개발하는 것을 강력히 지지한다고 명시하였다.⁷¹⁾



70) HSAC는 잠재적 유해물질로부터 환경과 인간 건강을 보호하는 것에 대한 전문가 자문을 제공하는 그룹임.

71) HSAC, "Recommendations for a Prioritisation and Early Warning System (PEWS) on Chemicals in the Environment", 검색일: 2024.6.5.

4. 오스트리아 환경청

오스트리아 환경청(EAA: Environment Agency Austria)은 오스트리아 정부 소속 기관이며 기후 행동, 환경, 에너지, 이동성, 혁신 및 기술 담당 연방 부서(Federal Ministry for Climate Action, Environment, Energy, Mobility, Innovation and Technology)가 기관을 대표한다. EAA는 오스트리아의 환경 보호와 관련된 다양한 업무를 수행하며, 환경 모니터링, 환경 정책 자문, 환경 연구와 개발 등을 담당하고 있다.⁷²⁾

NTS 관련 업무 중 하나로, EEA에서는 2022년 산업 클러스터에서 나오는 폐수를 공공 하수 처리 시설로 유입할 때 인간과 환경을 보호하기 위한 현대적 처리 방법이라는 보고서를 발간하였다.⁷³⁾ 보고서의 목적은 복잡한 산업폐수의 처리를 위한 기준과 방법론을 개발하는 것이다. 산업폐수의 NTS 적용은 변형물질이나 미지의 물질의 검출을 고려하여 위해성 평가 전략을 개선하고 정점 특정된 fingerprint를 설정하며, 향후 상세 검토를 위한 물질의 우선순위화에 응용된다.

보고서는 산업폐수 포함 화학물질의 오염원 추적과 관련하여 물질의 확인 기준을 마련하였다(표 3-10 참조). 또한, SNTS를 통해 확인된 물질을 공개하였고 산업폐수의 배출과의 관련성을 추적하였다. 이를 통해 SNTS를 통해 얻는 정보가 우선순위 물질의 식별이 가능하다는 것과 특정 시점 이후에도 특정 물질의 존재에 대한 회고적 평가가 가능하다는 것을 보여주었다. 추후 2단계 프로젝트가 진행되면 SNTS를 통해 방출되는 하수의 fingerprint 확인이 가능하며, 산업 단지와의 연관성을 파악할 수 있을 것이다. 또한 NTS와 독성 평가를 위한 EDA(예: CALUX®: Chemically Activated LUCiferase gene eXpression)⁷⁴⁾가 결합하는 방법이 조사될 예정이다.

72) UBA, "Organisation", 검색일: 2024.6.3.

73) Bundesministerium(2022), pp.1-191.

74) CALUX®은 특정 화학물질의 존재 여부를 검출하고 정량화하는 데 사용되는 바이오센서 시스템으로, 화학물질이 세포 내 특정 유전자 발현을 유도할 때 발광하는 효소가 이용되며, 이를 통해 화학물질의 생물학적 효과 측정과 화학물질의 독성 평가 용도로 활용됨.

표 3-10 EAA의 SNTS로 확인된 물질의 등급 개요

기준 단계		기준 내용
1	1a, 1b	<ul style="list-style-type: none"> 내부(1a) 또는 외부(1b) 데이터베이스를 이용하여 물질을 식별하고 아래 사항으로 확인 - 머무름 시간, 물질의 질량 정확도, 질량 스펙트럼의 질량 정확도 - 기준: 모분자 질량 오차 5ppm 이내, 머무름 시간 0.5분 차이 이내, 질량 스펙트럼 질량오차 10ppm 이내
2	2a, 2b	<ul style="list-style-type: none"> 내부(2a) 또는 외부(2b) 데이터베이스와 비교하여 물질을 식별하고 아래 사항으로 확인 - 물질의 질량 정확도, 질량 스펙트럼의 질량 정확도 - 기준: 모분자 질량 오차 5ppm 이내, 질량 스펙트럼 질량오차 10ppm 이내
3	3	<ul style="list-style-type: none"> 가능한 물질 제안이 가능하거나 없는 분자식, 아래 사항으로 확인 - 물질의 질량 정확도, 머무름 시간 확인 가능(내부 데이터베이스) - 기준: 모분자 질량 오차 5ppm 이내, 머무름 시간 0.5분 차이 이내,
4	4	<ul style="list-style-type: none"> 정확한 분자식을 확인할 수 없음 - 기준: 물질의 정확한 분자 질량

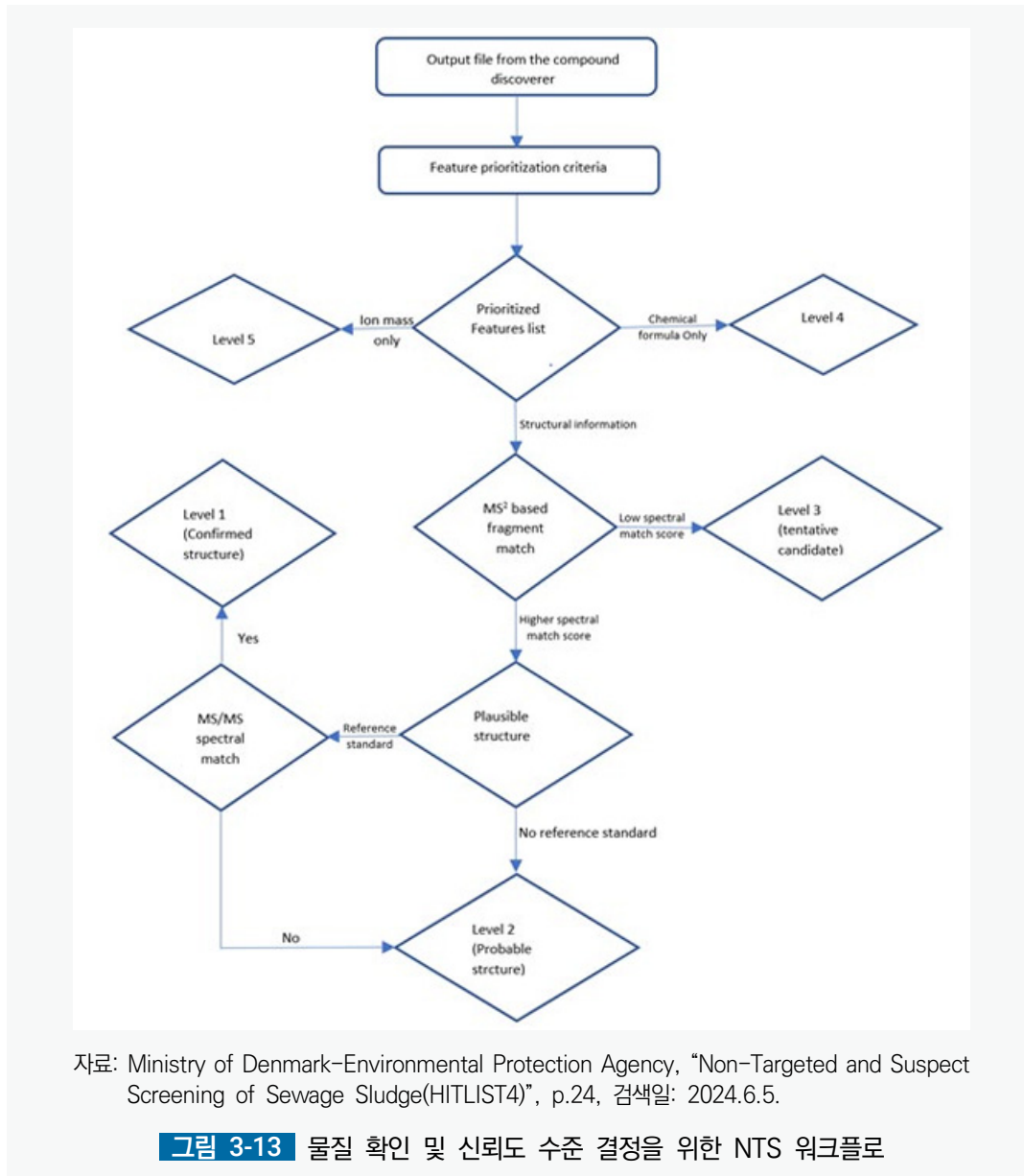
자료: Bundesministerium(2022), p.89를 바탕으로 저자 작성.

5. 덴마크 환경보호청

덴마크 환경보호청(The Danish Environmental Protection Agency)은 2022년, 덴마크의 하수처리장에서 얻어진 활성 슬러지에 SNTS를 적용한 연구보고서를 발간하였다(그림 3-13 참조).⁷⁵⁾ 프로젝트명은 HITLIST4로, 하수 슬러지 시료에 총 다섯 종류의 SNTS 플랫폼이 적용되었고, in-house와 국제 데이터베이스를 이용, 수천 개의 물질을 발견하였다. 총 41개의 물질이 신뢰도 레벨 1로 구분되었으며, 약 1,700개의 물질이 신뢰도 레벨 2로 확인되었다. 또한 새로운 추정적 정량 기법을 활용하여 513개 물질의 농도를 예측하였다.

덴마크 환경보호청의 NTS 기술은 덴마크 환경보호청의 농약 연구 프로그램 하의 연구 과제인 HITLIST1에서 개발되고 적용되었다. 이후 HITLIST2에서 검출할 수 있는 화학물질의 범위가 매핑되었고, NOVANA(the National Monitoring and Assessment Programme for the Aquatic and Terrestrial Environment) 수질 프로그램에 신뢰도 있는 모니터링 기법으로 활용되도록 NTS 기법이 검증되었다. HITLIST3에서는 SNTS 개념을 덴마크 표층수 시료에 적용하였다.

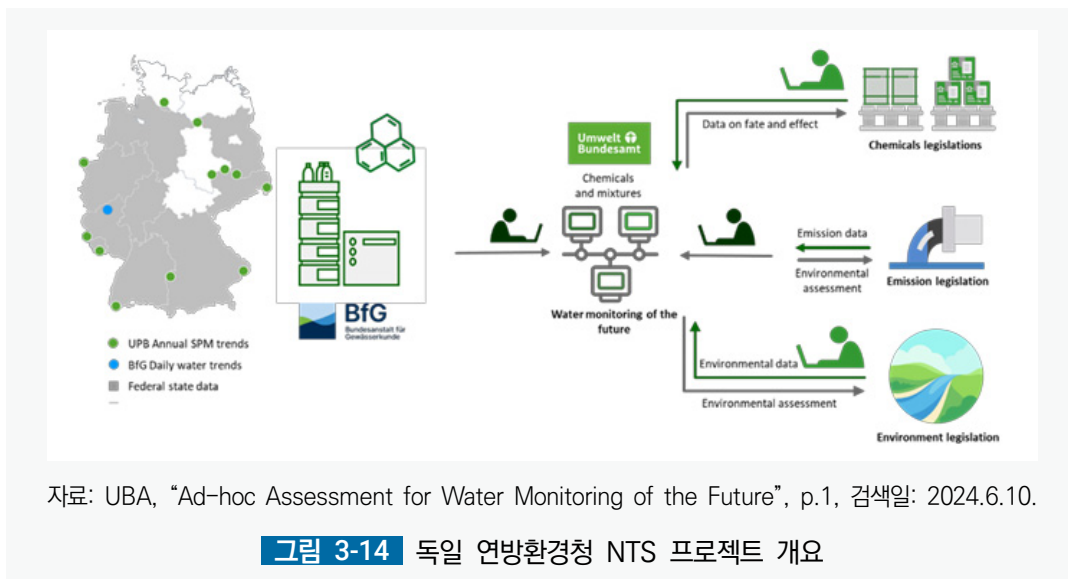
75) Ministry of Denmark-Environmental Protection Agency, "Non-Targeted and Suspect Screening of Sewage Sludge(HITLIST4)", 검색일: 2024.6.5.



6. 독일 연방환경청

독일 연방환경청(UBA: UmweltBundesAmt)은 독일의 환경, 자원, 자연보호와 관련된 정책과 제도를 개발하고 조정하는 국가 기관이다. 연방환경청이 주도하고 있는 프로젝트 중 미래의 수질 모니터링을 위한 임시 평가(Ad-hoc Assessment for Water Monitoring of the Future)는 방대한 NTS 데이터를 평가하는 방법을 개발하는 것이 목적이며, 신속하게 문제가 되는 물질을 식별하고 노출을 완화하려는 조치를 개발하는 도구를 제공한다(그림 3-14 참조). 프로젝트의 중요한 업무 중 하나는 의도적인 용도와 근본적인 화학물질 규제(예: REACH EC 1907/2006, Plant Production Products EC 1107/2009, Pharmaceuticals 2001/83/EC,

Biocides EU 528/2012)의 취지를 고려하여 선별된 물질 목록을 개발하는 것이다. 따라서 수계 내 화학물질 데이터를 통해 잠재적으로 문제가 되는 물질의 평가를 지원하고자 한다.



자료: UBA, “Ad-hoc Assessment for Water Monitoring of the Future”, p.1, 검색일: 2024.6.10.

그림 3-14 독일 연방환경청 NTS 프로젝트 개요

과제의 중심 요소는 독일 연방 수문학 연구소(BfG: Federal Institute of Hydrology)가 UBA를 위해 개발하고 있는 NTS 포털⁷⁶⁾이다. 포털은 독일의 연방과 주의 수계 모니터링에서 얻어진 NTS 데이터를 포함하고 있다. UBA와 BfG는 협력하여 포털을 발전시키고, 이를 통해 화학물질과 환경법 내 물질에 대한 중요한 질문들을 대답하는 데 포털이 주요하게 활용되도록 하고자 한다. 이러한 목적 달성을 위하여 평가와 관련 있는 특성들, 예를 들어 물리-화학적 지표와 생물 독성학적 종말점을 NTS 포털에 합치고 있다. 이러한 작업을 통해 신규 우려 유해화학물질의 선제 경고 시스템도 동시에 설치될 수 있다. 이와 더불어 환경시료은행도 매우 중요하게 고려되는데, 이는 회고적 분석이 가능하게 하며 시간에 걸친 오염의 추적과 장기간의 오염 패턴 추적이 가능하기 때문이다.⁷⁷⁾

7. 스위스 EAWAG

스위스의 연방환경청(FOEN: Federal Office for the Environment)은 법에 따라 국가 지하수 모니터링(NAQUA: National Groundwater Monitoring)과 표층수 모니터링(NAWA: National Surface Water Quality Monitoring Programme)을 수행 중이다. 스위스의 연방 수생 과학 및 물 연구소(Eawag)의 환경 화학 부서는 연방 및 주 당국과 협력하여 SNTS를 NAQUA와 NAWA에 적용하는 프로젝트를 수행하였다.⁷⁸⁾ NAQUA와 관련된

76) UBA, “NTS Portal”, 검색일: 2024.6.10.

77) UBA, “Ad-Hoc Assessment for Water Monitoring of the Future”, 검색일: 2024.6.10.

프로젝트에서는 먼저 수계 시료에서 600개 이상의 물질에 대해 표적 분석을 수행하고 추정 분석을 통해 분석된 물질의 변형 물질을 확인하였고, 두 번째로는 SNTS를 통해 오염원, 변형 물질과 미지 물질을 탐색하였다. 프로젝트의 결과는 NAQUA 또는 다른 유럽의 모니터링 프로그램에서 추후 대상 물질을 선정하는 것을 지원할 것이라고 언급하였다.⁷⁹⁾

뒤에서 설명될 Rhine 2040 프로젝트와 관련, Eawag에서는 FOEN과 바젤의 환경 및 에너지국(Office for the Environment and Energy of Canton Basel-City)⁸⁰⁾과 협력하여 바젤 정점에서 유기오염물질을 측정하는 프로젝트를 수행하였다. 프로젝트의 두 가지 목적은 선택된 물질의 장기간 추세 분석과 적시에 오염원 유출을 분석하는 것이다. 이 프로젝트에서 Eawag은 최신의 분석 기법이 현재 모니터링 프로그램에서 포함하지 않는 물질을 분석하는 데 어떻게 활용될 수 있을지 조사하였다.

프로젝트 관련, Eawag은 바젤 수질측정소에서 약 300개 물질에 대해 표적 분석을 수행하였다. 이처럼 방대한 모니터링은 데이터 처리 프로세스를 자동화함으로써 가능했는데, Eawag이 개발한 소프트웨어인 EnviMass를 활용하였다(그림 3-15 참조).

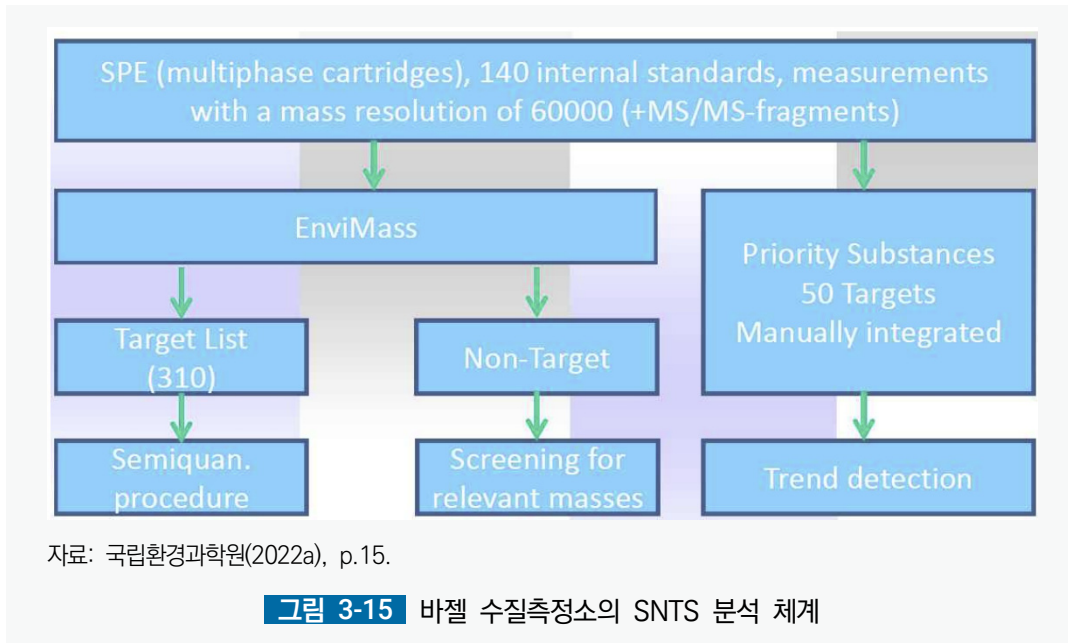
두 번째로는 유출 사고를 즉시 감지하고 사고 유출을 확인하는 업무를 수행하였다. 업무에서는 미지의 물질의 검출과 확인을 위해 HRMS를 활용한 분자량의 정확한 측정과 매일 생산되는 방대한 양의 데이터를 빠르게 처리하는 것이 도전과제였다. Eawag은 측정된 데이터를 효과적으로 필터링하고 우선순위화 하는 지능형 처리 알고리즘을 활용한 여러 방법을 개발하고 테스트했으며, 이 방식은 2014년부터 바젤 정점에서 라인강을 일상적으로 감시하는 데 활용되고 있다. 이러한 새로운 기법을 통해 몇 건의 누출 사고를 발견하였고, 지역의 산업 생산 지역, 하수처리장, 지역 당국과 적극적으로 협력하여 사고를 멈출 수 있었다.⁸¹⁾

78) Eawag, "Searching for Unknown Substances", 검색일: 2024.3.22.

79) Eawag, "Suspect and Non-Target Screening of Organic Micropollutants in Swiss Groundwaters", 검색일: 2024.6.12.

80) 라인강 프로젝트의 바젤지역 모니터링 정점을 운영함.

81) Eawag, "Target- and Non-target Screening of Organic Pollutants at the International Monitoring Station of the River Rhine at Basel", 검색일: 2024.6.12.



Eawag 환경화학부서의 Juliane Hollender가 2022년 국립환경과학원이 주최한 세계 물의 날 기념 국제 심포지엄에서 NTS와 관련하여 발표한 자료를 살펴보면, NTS의 활용에 관해 아래와 같은 의견을 공유한 바 있다.⁸²⁾

- HRMS를 활용한 표적, 추정, 비표적 분석은 국가 모니터링 연구에서 대사체를 포함한 혼합 오염물질을 스마트하고 민감하게 확인하는 것을 가능하게 하며, 회고적 위해성 평가를 지원함
- 표적, 추정, 비표적 분석의 적절한 우선순위 설정은 매우 중요함
- 규제 기반 추정 분석 리스트는 모니터링에 매우 중요함
- 질량 스펙트럼을 표준물질이나 라이브러리로 확인하는 것은 매우 중요함
- Eawag과 환경, 연구에 관련된 연방 사무국의 협력은 서로에게 이득이 됨

8. 네덜란드

네덜란드의 국립 공공사업 및 수자원 관리청(Rijkswaterstaat)은 네덜란드의 독립적인 수자원 연구소인 KWR Watercycle Research Institute에 요청하여 SNTS와 관련된 업무를 수행하고 있다. 현재 확인할 수 있는 내용 중에서 SNTS 수행과 관련된 다섯 가지 주요 사항으로는 이해관계자 분석, SNTS에 대한 설명, 미래 모니터링에서의 SNTS에 관한 설명, 행동 전망, 여러 SNTS 결과에 대한 구체적인 내용이다.⁸³⁾

82) Juliane Hollender(2022), p.26.

이 중에서 미래 모니터링에서의 SNTS에 관한 설명 보고서에는 SNTS를 어떻게 정기적인 모니터링과 현재 측정망에 통합할 수 있는지에 대한 내용을 제공한다.⁸⁴⁾ 정규 모니터링에 SNTS를 도입하기 위해 고려해야 할 사항들, 예를 들어 시료 수집, 운반 및 저장, 시료 전처리, 크로마토그래프 및 질량분석기, 데이터 저장 및 분석, 결과 보고 및 사후 작업에 관한 내용을 담고 있다(표 3-11 참조). 이와 함께 분석법의 통합을 위하여 실험실 간 측정 데이터를 비교할 때, 고려되어야 할 사항들도 제시하고 있다.

이해관계자의 SNTS에 관한 비전은 다음과 같이 제시되어 있다. SNTS는 수질 변화를 감지할 수 있는 효과적인 방법으로 인식되며, 이 접근 방식은 알려진 및 알려지지 않은 수천 개 이상의 물질을 동시에 모니터링하여 새로운 신호의 발생을 밝혀낼 수 있다. 이는 주요 목적의 분석 외에도 아직 의심이나 모니터링 목록에 없는 물질들을 파악할 수 있는 장점이 있다. 또한 SNTS 데이터를 서로 비교하여 과거 조사, 시간에 따른 특정 위치의 변화, 특정 시간에 서로 다른 위치에서의 비교로 이어질 수 있으며, 이를 통해 오염의 원인을 추적할 수 있다. 이러한 방식을 통해 수질 관리자들은 변화에 더 적극적으로 대응할 수 있으며 오염을 효과적으로 예방, 발견 및 대응할 수 있다.

83) Rijkswaterstaat, “Non-Target Screening (NTS) bij Rijkswaterstaat - werkzaamheden 2023”, 검색일: 2024.6.12.

84) KWR(2023), pp.1-12.

표 3-11 정기적 모니터링과 SNTS 융합 시의 고려 사항

	항목	고려사항
LC-MS	시료 수집	<ul style="list-style-type: none"> • 현존하는 모니터링 체계에 맞게 시료를 수집하여 표적 분석과 SNTS에 사용 • 시료 채취가 NTA 8033*을 준수한다면 현존하는 체계에서 수정이 불필요함
	운반 및 저장	<ul style="list-style-type: none"> • NTA 8033에는 스크리닝을 위한 시료의 냉장 운반 및 저장, 채취 후 분석까지의 시간에 대한 지침이 기술되어 있음 • 이는 일반적으로 표준이며, 표적 분석에도 적용할 수 있음
	시료 전처리	<ul style="list-style-type: none"> • 표적 분석은 다양한 전처리 단계가 포함되지만, SNTS에서는 내부 표준물질 추가와 여과 이외에는 다른 전처리가 필요하지 않음 • 하지만 특정 물질 그룹의 경우(예: 과불화화합물), 때때로 정제나 사전 농축 등의 전처리가 필요함 • SNTS를 위한 시료 전처리의 경우 이를 명확히 명시해야 함
	크로마토그래프	<ul style="list-style-type: none"> • 표적 분석에서는 크로마토그래프가 목적하는 물질에 대해 최적화되지만, SNTS 목적으로는 가능한 넓은 범위를 포괄하는 크로마토그래프를 선택함 • SNTS의 목적(극성, 비극성 등)에 따라 크로마토그래프와 그라디언트가 선택됨
	질량분석기	<ul style="list-style-type: none"> • 표적 분석에는 종종 저해상도 질량분석기가 사용되나, SNTS에는 고해상도 질량분석기를 사용해야 함
GC-MS	데이터 저장 및 분석	<ul style="list-style-type: none"> • 표적 분석에서는 물질 농도를 확인하고 그 이후로는 원데이터(Raw data)의 활용성이 높지 않음 • SNTS의 경우, 원데이터의 보관이 중요하며, 이는 저장되고 보관되며 향후 회고적 분석 등을 위해 활용됨 • 효과적인 활용을 위해서는 메타데이터도 함께 저장되어야 함 • 보고서 발표연도 기준(2023년), 네덜란드는 파일 저장을 위한 플랫폼을 개발 중이며, 예시로 NORMAN의 DSFP를 제시함
	보고 및 사후 조치	<ul style="list-style-type: none"> • 저해상도 GC-MS를 활용하여 SNTS를 적용할 수 있음 • LC-MS와 유사한 전략을 사용할 수 있음 • SNTS는 표적 분석과 함께 해석될 때 가장 유용함 • 보고서 작성 시 중요한 부분은 연구 질문이 명확해야 하고, 정책 결정자가 필요로 하는 부분을 인지해야 함 • 현재 SNTS에서의 발견이 과거 데이터에서 얼마나 확인되는지를 분석하는 것도 중요함 • 또한 SNTS로 식별된 새로운 물질 확인의 신뢰성을 제시하는 것도 중요함

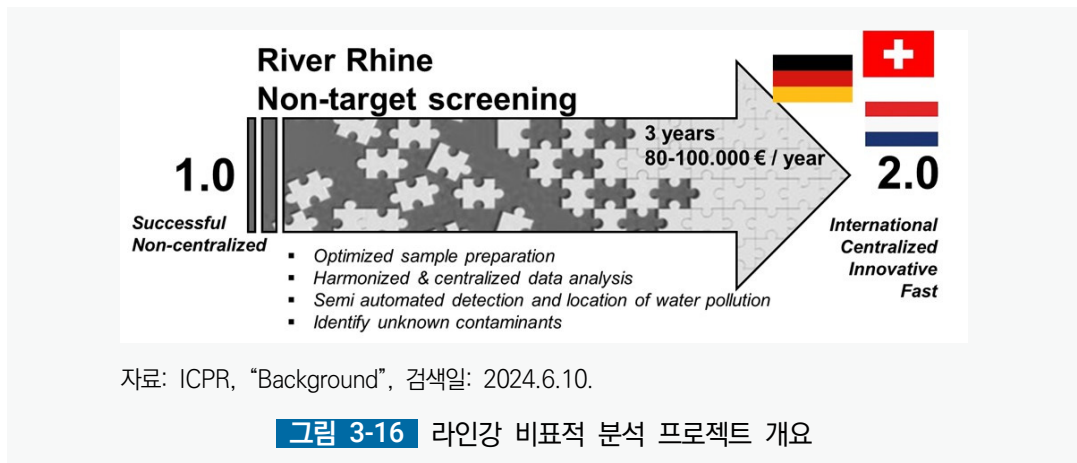
주: *NTA 8033은 크로마토그래피-질량분석기를 이용하여 수중에 존재하는 작은 유기 물질을 스크리닝하기 위한 측정, 유효성 검증 및 보증 기준을 제공하는 국가 가이드라인으로, Royal Netherlands Standardization Institute(NEN)에서 제공.

자료: KWR(2023), pp.5-6을 바탕으로 저자 작성.

9. 기타 SNTS 프로젝트

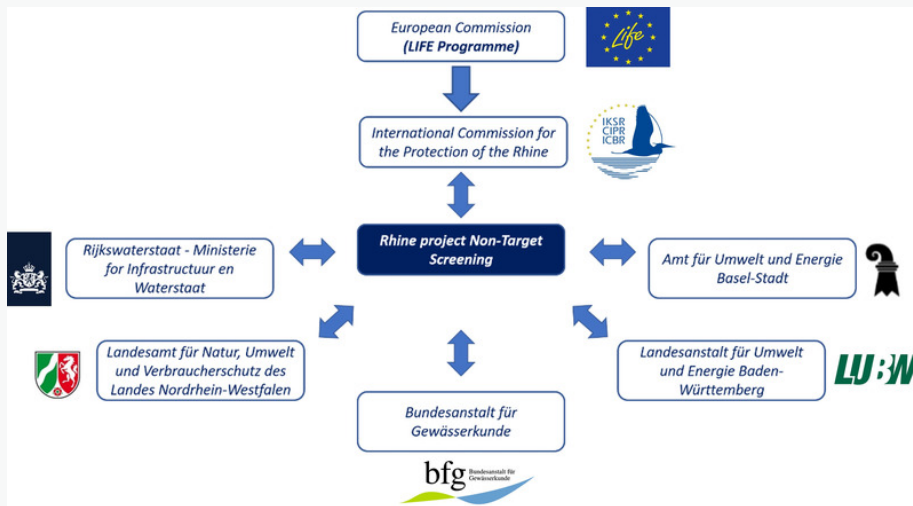
가. 라인 2040(Rhine 2040)

라인강은 유럽 중북부를 가로지르는 강으로, 개발에 따른 오염이 심각해짐에 따라 독일, 프랑스, 룩셈부르크, 네덜란드, 스위스가 공동으로 오염을 분석하고 강을 보호하는 조치를 위해 시작된 프로젝트이다. 라인강을 따라 여러 정점에서 표적 분석을 통해 수질을 측정해 왔으며 최근에는 LC-HRMS를 이용한 SNTS 기법을 선택된 측정 지점에 적용하고 있다. 라인강 모니터링 프로그램을 책임지는 라인강 보호 국제 위원회(ICPR: International Commission for the Protection of the Rhine)와 5개 당국⁸⁵⁾은 분석기법을 최적화하고 다른 정점에서의 이니셔티브를 연결하기 위해 2021년부터 2024년까지 파일럿 과제를 수행 중이다(그림 3-16, 그림 3-17 참조).⁸⁶⁾ 이 프로젝트의 목적은 모니터링 정점에서 일상적으로 적용될 수 있는 국제적이고 중앙 집중적이며 신속한 데이터 처리와 평가 및 비표적 스크리닝 데이터를 저장하는 새로운 접근법을 개발하는 것이다. 프로젝트에서 개발될 SNTS 툴은 기존에 알려진 오염물질뿐만 아니라 추정되거나 아직 밝혀지지 않은 방대한 수의 환경 유래 오염 물질을 일상적으로 모니터링하는 데 기여할 것이다. 또한 이러한 접근은 알려진 또는 알려지지 않은 물질의 빠른 식별, 즉 선제적 경고와 오염원(예: 가정, 산업, 농업, 자연적 유래 등)의 발견을 가능하게 한다.



85) 스위스 바젤슈타트주 환경 에너지청(AUE: Amt für Umwelt und Energie des Kantons Basel-Stadt), 독일 바덴뷔르템베르크주 환경청(LUBW: Landesanstalt für Umwelt Baden-Württemberg), 독일 연방 수문학 연구소(BfG: Bundesanstalt für Gewässerkunde), 독일 노르트라인베스트팔렌주 자연 환경 소비자 보호청(LANUV: Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen), 네덜란드 국립 공공사업 및 수자원 관리청(RWS: Rijkswaterstaat).

86) ICPR, "Pilot Project on Non-Target Screening", 검색일: 2024.6.10.



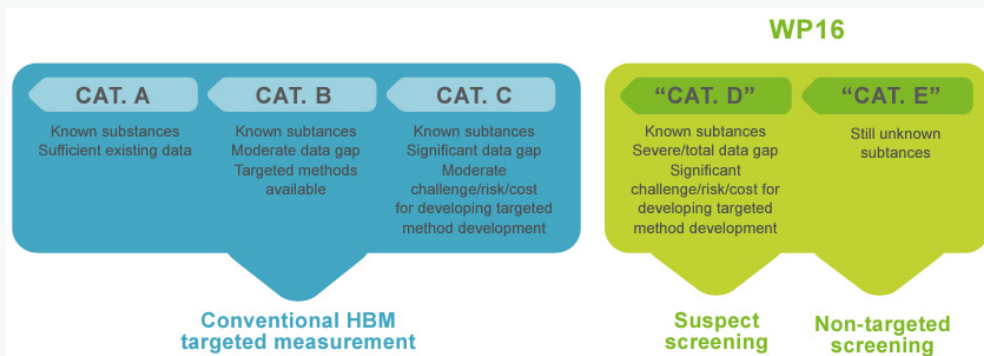
자료: ICPR, "Participants and Structure of the Project", 검색일: 2024.6.10.

그림 3-17 라인강 비표적 프로젝트 컨소시엄

나. 유럽의 바이오모니터링(HBM4EU)

HBM4EU(Human Biomonitoring for European Union) 이니셔티브는 유해화학물질의 노출과 건강영향에 대한 근거를 제공하여 정책개발을 지원하기 위한 프로젝트로, 약 30개국과 유럽 환경청(EEA), 유럽 위원회(EC)가 협력하여 5년간(2017~2021년) 수행되었다.

HBM4EU가 수행한 내용 중 하나로 인체 시료에서 신규 유해화학물질을 탐색하는 과제(W16: Work Package 16)가 있으며, 이 과제의 목표는 새로운 기법을 사용하여 인체 시료 내 신규 유해화학물질을 전체적으로 분석하고, 인체 모니터링 데이터가 혼합 화학물질의 위해 및 노출을 평가하는 데 활용되는 것을 증진하는 것이다(그림 3-18 참조).



자료: HBM4EU, "Emerging Chemicals Screened in Human Samples", p.2, 검색일: 2024.6.12.

그림 3-18 HBM4EU의 내 SNTS 업무

프로젝트 수행 결과, 유럽 내에서 우려 신규 유해화학물질로 다뤄질 데이터베이스가 마련되었 으며, 이 데이터베이스는 70,000개 이상의 모체 화학물질과 300,000개의 대사체를 포함 한다(CECScreen).⁸⁷⁾ 이는 추정 분석을 확장하여 시행할 수 있는 새로운 자원이며 이와 관련된 정책 능력을 지원할 수 있다. 또한 인체 시료에서 새로운 유해화학물질의 분석을 SNTS로 접근하는 경쟁력 있고 조화된 EU 네트워크가 마련되어 진보된 정책지원을 할 수 있는 데이터를 생산해 낼 수 있다. 나아가 SNTS의 효과적인 응용과 정책지원의 가능성을 확인하는 몇몇 개념이 검증되었는데, 이는 선제 경고, 혼합물 평가, 우선순위 설정이다. 이를 통해 위해성 평가 수행 시 심층적으로 고려될 노출 지표 후보 및 현실적인 혼합물의 첫 번째 후보를 도출해냈다.

HBM4EU의 정책적 기여를 살펴보면,⁸⁸⁾ SNTS를 통해 발견된 잠재적 우려 물질은 REACH 규제의 일환으로 물질 평가를 거칠 수 있으며, Water Framework Directive의 Watch List에 포함될 수 있다. 또한 유럽 위원회의 필요에 따라 환경, 보건 및 신종 위해에 관한 의견을 제공하는 과학 위원회(SCHEER: Scientific Committee on Health, Environmental and Emerging Risks)는 새로운 이슈를 신속하게 식별하고 인식하는 것이 중요함을 강조하였다. 이를 통해 당국이 적절하고 시의적절한 조치를 취할 수 있으며, 궁극적으로 공중보건과 환경 보호를 보장할 수 있다.⁸⁹⁾ 네덜란드의 인프라 및 환경 부처(Infrastructuur en Milieu)와 국립 공공사업 및 수자원 관리청(Rijkswaterstaat), 벨기에 플랜더스 지방의 공공폐기물 기관(OVAM: Openbare Vlaamse AfvalstoffenMaatschappij)은 유럽의 신규 유해화학물질에 대한 인식과 정책에 대한 인벤토리를 위탁하였고, 이 인벤토리의 목표는 법률, 거버넌스 및 정책과 관련된 활용 가능한 지식과 경험을 축적하는 것이다. 또한 HBM4EU에서는 SNTS와 EDA를 결합한 접근법에 관해서도 연구를 수행하였다.

몇 가지의 도전과제도 확인되었는데, 정책 수준에서의 주요 도전은 우려 유해화학물질이 신속하게 생체모니터링 및 위해성 평가 과정을 거칠 수 있도록 선제 경고 시스템을 개발하는 것이다. 과학 수준에서는 이러한 우려 유해화학물질의 노출과 관련된 건강 영향을 빠르게 보고하고 노출 및 독성학적 데이터를 기반으로 해당 물질을 식별하여 우선순위를 설정하는 것이다. 또한, 신규 유해화학물질은 현존하는 인체 모니터링에서 잘 다뤄지지 않고 있는데, 그 이유는 다양한 성질을 가진 많은 노출의 지표를 검출하고 정량할 수 있는 효과적인 분석 기법이 부재하기 때문이다. 이러한 노출 데이터의 부재는 인구 집단 내 이러한 물질이 미치는

87) Meijer et al.(2020), “S71 | CECScreen | HBM4EU CECScreen: Screening List for Chemicals of Emerging Concern Plus Metadata and Predicted Phase 1 Metabolites (NORMAN-SLE-S71.0.1.1) [Data set]”, 검색일: 2024.6.12.

88) HBM4EU, “Policy Brief-Emerging Chemicals”, 검색일: 2024.6.12.

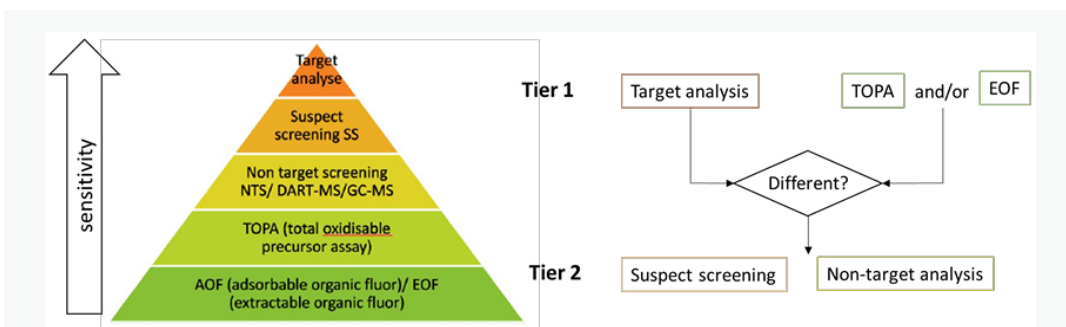
89) EC, “Emerging Issues and the Role of the SCHEER Position Paper (2018)”, 검색일: 2024.6.12.

부담(burden)을 파악하는데 불확실성을 발생시켜 적절한 정책 개발이 어려울 수 있다고 언급하였다.

다. 화학물질 위해성 평가를 위한 유럽 파트너십(PARC)

PARC(European Partnership for Chemicals Risk Assessment) 이니셔티브는 인간 건강과 환경을 보호하기 위해 차세대 위해성 평가 기법을 개발하며, 생성되는 데이터와 지식, 결론을 통해 유럽 그린딜 내 오염제로(Zero Pollution)을 지원한다. 2022년 착수하여 7년간 수행되는 이 과제는 28개국과 유럽화학물질청(ECHA), 유럽식품안전청(EFSA: European Food Safety Authority), 유럽환경청(EEA)이 협력한다.⁹⁰⁾

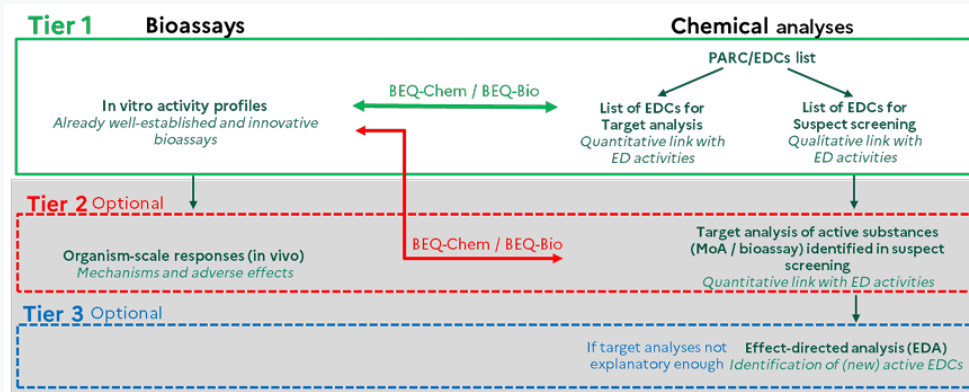
PARC 이니셔티브 내, Work Package 4(WP 4)에서는 모니터링과 노출에 관련된 연구가 진행 중이다. 여기에는 약 60~70개의 기관이 포함되어 있으며, SNTS와 관련하여 데이터 처리 워크플로의 개발, 선제 경고 시스템, 품질 보증과 관련된 업무를 협력하여 수행하고 있다. 현재까지 공개된 자료를 살펴보면, SNTS는 과불화화합물(PFAS: Per- and polyfluoroalkyl substances), 내분비계 장애물질(EDCs: Endocrine Disrupting Chemicals)에 적용되고 있다. 과불화화합물의 경우 매우 다양한 종류의 화합물이 존재하기 때문에 SNTS를 이용한 스크리닝으로 알려지지 않은 물질(전구체, 대사체 등)까지 확인할 수 있도록 SNTS를 적용하고 있으며(그림 3-19 참조), EDCs는 유사한 독성 영향으로 연결된 화학물질 그룹임을 고려하여, SNTS와 EDA의 결합을 통해 인체에 유해한 물질을 파악하고 우선순위를 설정하는 방향으로 연구가 진행되고 있다(그림 3-20 참조). PARC 이니셔티브의 수행 통해 정책개발 지원을 위한 SNTS의 활용 방안이 더 견고해질 것으로 기대된다.



자료: PARC, "Additional Deliverable AD4.5", p.20, 검색일: 2024.6.13.

그림 3-19 PARC 내 SNTS를 활용한 PFAS 분석 전략

90) PARC, "What We Do", 검색일: 2024.6.12.



자료: PARC, “Additional Deliverable AD4.5”, p.20, 검색일: 2024.6.13.

그림 3-20 PARC 이니셔티브 내 EDC의 모니터링 전략

제4장

추정·비표적 분석기법 국내 동향

1. 국내 수행 과제 현황

1. 국내 수행 과제 현황

현재까지 국내에서 수행되었거나 수행 중인 SNTS 관련 과제를 조사하였다(표 4-1 참조). 검색어는 '추정', '비표적'을 활용하였고, 정책연구관리시스템 프리즘,⁹¹⁾ 정책정보포털(POINT),⁹²⁾ 국가과학기술지식정보서비스(NTIS)⁹³⁾에서 검색을 수행하였다. 최종적으로 총 27개의 과제가 목록화되었으며, 목록화된 과제를 추정·비표적 분석기법이 응용된 방식에 따라 '분석', '화학물질 관리', '노출 감시', '영향평가', '포렌식', '모니터링'으로 분류하였다.

조사된 대부분의 과제에서 SNTS는 표적으로 하지 않은 물질을 탐색하기 위해 활용되었다. SNTS를 통한 탐색의 결과는 유해 물질의 오염원 추적(포렌식), 신종 유해화학물질 처리 효율 평가, 건강영향조사의 추가적인 검증 도구로의 활용, 신규 유해화학물질 그룹의 모니터링(과불화화합물), 유해화학물질 환경 거동 이해, 소비자 제품 내 유해화학물질 스크리닝 및 노출 가능성 확인, 하수 기반 역학을 이용한 집단 노출평가, 식품을 통한 노출 및 위해성 평가 등에 활용되었다. 목록화된 과제 중에서 수행이 완료되고 연차 또는 최종 보고서가 공개되어 자료를 상세히 확인할 수 있는 과제는 14개였으며, 이 과제의 수행 내용을 통해 국내 SNTS의 개발, 도입 및 활용 현황 및 향후 활용의 확장 가능성을 파악하고자 하였다.

91) 정책연구관리시스템(PRISM), 검색일: 2024.6.20.

92) 정책정보포털(POINT), 검색일: 2024.6.20.

93) 국가과학기술지식정보서비스(NTIS), 검색일: 2024.6.20.

표 4-1 국내 추정·비표적 분석 관련 과제 목록

구분	과제명	수행 연도	발주기관	구분	보고서
1	고분해능 질량분석기를 활용한 미지오염물질 다중검색기법 연구	2018년	국립환경과학원	분석	● (최종)
2	신규-미지 유해화학물질 분석을 위한 LC-HRMS 기반 추정 및 비표적 분석기법 개발	2019년	과학기술정보통신부	분석	● (최종)
3	표적/비표적 분석기법 활용 미확인(Unknown) 미량오염물질 측정 및 분석 기술 개발	2019~2021년	한국환경산업기술원	분석	● (최종)
4	내분비계장애물질(EDCs) 통합 위해성평가 및 모델 개발	2015~2019년	한국환경산업기술원	화학물질 관리	● (최종)
5	환경오염물질 신속탐색기법 연구(II)-수환경 중 유해물질 추정/비표적탐색(LC-Orbitrap)	2020~2021년	국립환경과학원	화학물질 관리	×
6	미관리 수질오염물질 탐색체계 구축	2022년	국립환경과학원	화학물질 관리	● (최종)
7	수계 내 미규제 미량오염물질 모니터링 및 관리기준 개선 연구	2022년	국립환경과학원	화학물질 관리	● (최종)
8	수돗물 중 미규제 미량유해물질 관리방안 연구	2018년	국립환경과학원	노출 감시	● (최종)
9	국가 환경보건 바이오뱅크 구축 및 운영 로드맵 마련	2019년	국립환경과학원	노출 감시	● (최종)
10	추정 및 비표적 스크리닝을 통한 인체 내 잠재적 유해물질 규명 및 인체 노출 평가	2018~2021년	과학기술정보통신부	노출 감시	×
11	수용체 중심 생체시료 suspected-target screening을 통한 일회용 생리대 환경유해요인 파악 연구	2020년	과학기술정보통신부	노출 감시	● (연차)
12	수산물 중 신규 위해요소 시험법 개발 및 잔류실태 조사	2020~2021년	식품의약품안전평가원	노출 감시	● (최종)
13	하수기반역학 및 비표적/추정/표적 기법을 이용한 지역사회 생활 속 유해화학물질 사용 및 건강성 평가	2021~2024년	과학기술정보통신부	노출 감시	×
14	초고분해능질량분석법을 응용한 추정/비표적 분석 및 미지 독성 혼합물질 분석기술 개발	2020~2022년	한국환경산업기술원	영향평가	● (연차)
15	청주 북이면 소각시설 주변 지역 환경 오염물질 비표적 분석 연구	2022~2023년	환경부	영향평가	×
16	표적/비표적 분석 기반 매립지 침출수 내 플라스틱 첨가제 및 변형 산물의 환경 영향 구명	2022~2025년	과학기술정보통신부	영향평가	×
17	미세먼지 비표적 분석기법을 활용한 신규 유기오염물질 모니터링과 위해도 파악	2023~2026년	과학기술정보통신부	영향평가	×
18	표적/추정/비표적 분석 기반 식품 중 유해물질 규명 및 위해성 평가	2023~2026년	과학기술정보통신부	영향평가	×
19	미세먼지 오염원 추적을 위한 비표적 잔류성유기오염물질의 환경수사기법 개발	2017~2020년	과학기술정보통신부	포렌식	● (최종)
20	해양산업시설 배출 HNS 비표적 스크리닝 분석 기술 개발	2021~2025년	해양수산과학기술진흥원	포렌식	×

표 4-1의 계속

	과제명	수행 연도	발주기관	구분	보고서
21	비표적 분석기법을 이용한 수계 중 오염원 추적연구	2022~2024년	국립환경과학원	포렌식	×
22	유기독성물질의 비표적 분석기술을 활용한 오염원 추적기술개발	2023~2024년	과학기술정보통신부	포렌식	×
23	비표적 기법을 이용한 과불화화합물의 거동 특성 연구(I)	2019년	국립환경과학원	모니터링	×
24	비표적 기법을 이용한 과불화화합물의 거동 특성 연구(II)	2020년	국립환경과학원	모니터링	×
25	비표적 스크리닝 기반 환경 내 신종 및 미지 과불화화합물 분포 및 거동 평가	2023~2026년	과학기술정보통신부	모니터링	×
26	수질자동측정기법 개발 및 개선연구 -LC/HRMS를 이용한 낙동강 중류 유기화합물질 온라인 분석법 개발(1)	2018년	국립환경과학원	모니터링	● (최종)
27	신종오염물질 지표물질 선정/평가를 통한 신종오염물질 처리 효율 평가에 관한 연구	2021년	국회 정책연구용역	모니터링	● (최종)

주: ●, ×표기는 보고서의 활용 가능 여부를 나타냄.

자료: 저자 작성.

가. 분석법

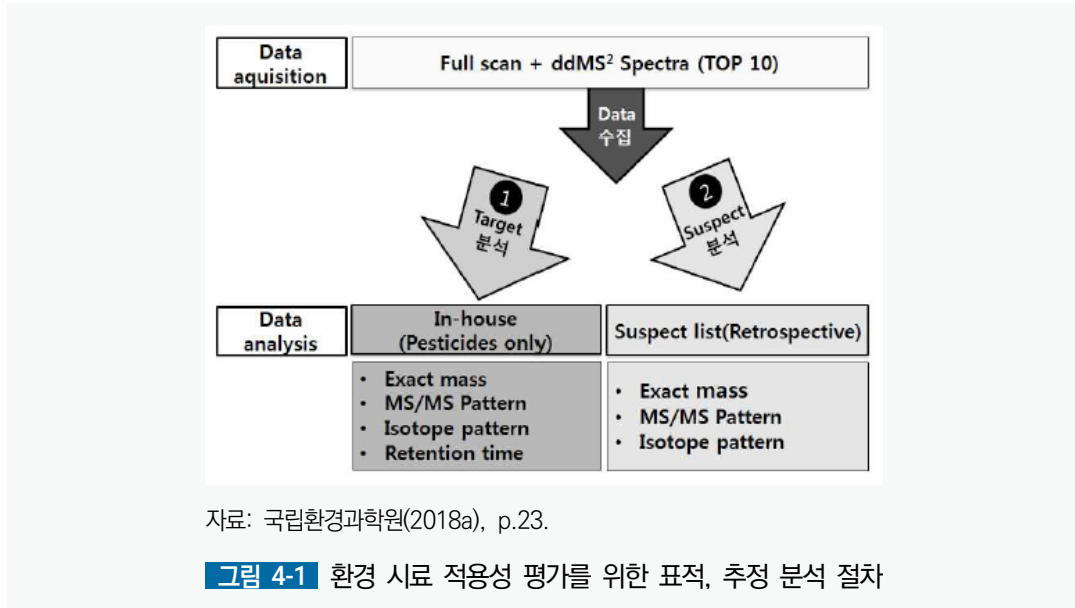
1) 고분해능 질량분석기를 활용한 미지오염물질 다중검색기법 연구

고분해능 질량분석기를 활용한 미지오염물질 다중검색기법 연구는 국립환경과학원에 도입된 Online SPE⁹⁴⁾-LC-Orbitrap-MS의 적정 가동 기반 구축과 실제 환경 시료를 대상으로 미지 오염물질 탐색 기법의 적용 가능성을 검토하였다.⁹⁵⁾ 이를 위해 HRMS 기기 분석 조건을 확립하였고, 수질 및 대기 시료 내 적용성을 확인하였다. 화학물질의 표준물질 확보를 통해 실험실 내부 라이브러리를 작성하고, 웹기반 오픈소스 등을 활용하여 1차적 추정 분석용 라이브러리를 작성하였다. 혼합 농약 시료를 통해 기기 분석 조건을 최적화하고 분석법의 유효성을 검증하였다. 또한, 약 360종의 농약의 실험실 내부 라이브러리를 구축하고 웹 기반 오픈소스 자료(예: mzCloud) 등으로부터 약 1,500개 물질의 라이브러리를 작성하였다. 또한 SNTS의 환경 시료 적용성 평가를 위한 절차를 마련하였다(그림 4-1 참조). 최적화된 기기 분석 조건과 SNTS 데이터 처리 절차를 실제 수질 및 대기 시료에 적용해 본 결과(적용성 평가), 수질 시료에서는 농약류 17종, 난연제 11종, 대기 시료에서는 플라스틱 가소제, 천연 살충제 성분 등 16종의 추정 물질이 검출되었다. 수질 시료에서 확인된 물질은 미규제 미량 유해 물질 국가 모니터링 사업의 우선 관리 대상 물질(Priority Monitoring List) 선정을

94) SPE(Solid Phase Extraction)은 고체상 추출법을 의미하며 대상 시료를 정제, 농축 또는 분리하는 경우 활용됨.

95) 국립환경과학원(2018a).

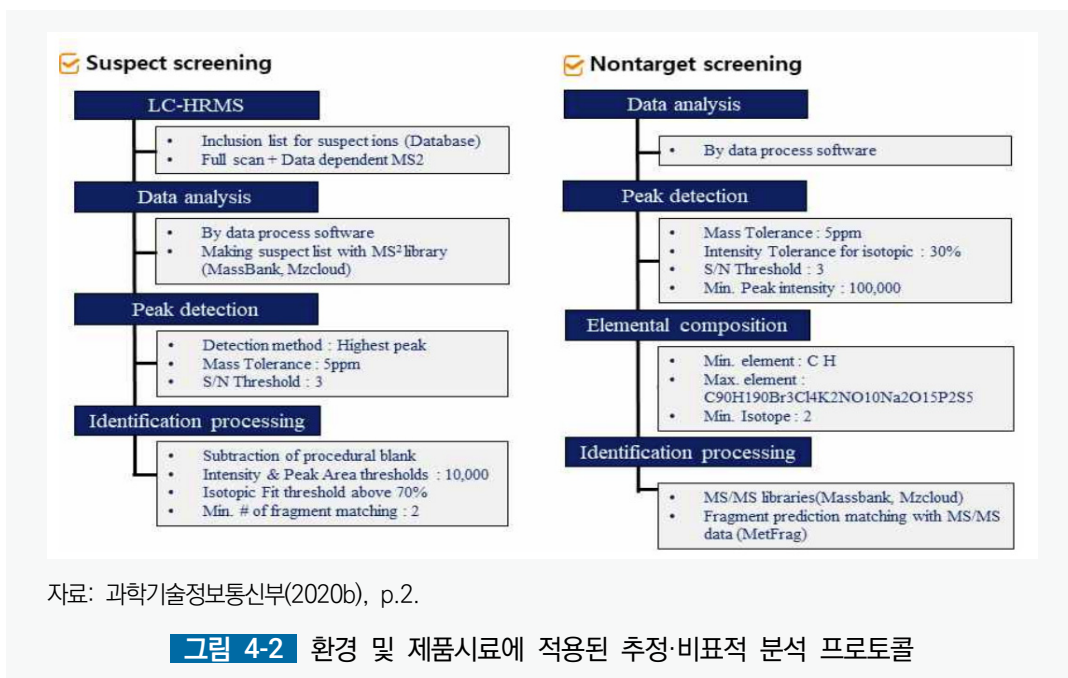
위한 평가 자료로 제공되었다. 연구 결과, 구축된 미지 물질 분석시스템이 환경 오염 사고의 신속한 대응 및 매체 환경기준 설정을 위한 미규제 오염물질 모니터링 사업에 응용될 수 있다는 잠재력이 확인되었다.



2) 신규·미지 유해화학물질 분석을 위한 LC-HRMS 기반 추정 및 비표적 분석기법 개발

신규·미지 유해화학물질 분석을 위한 LC-HRMS 기반 추정 및 비표적 분석기법 개발⁹⁶⁾과제는 SNTS 분석 절차를 구축하고, 이를 환경과 생활용품 시료 분석에 적용하였다. 구축된 SNTS 절차와 사용된 기준값은 <그림 4-2>에 정리되어 있다. 표적 분석과 확립된 SNTS 기법을 북극 하수처리장 방류수 및 해수 분석에 적용한 결과, 표적 분석으로 16종을, SNTS를 통해 추가적인 30가지 물질을 확인하였다. 검출된 물질의 노출값과 독성 지표를 확인하여 tripehnyl phosphate, PFOS, irbesartan, acetaminophen, caffeine, diethyl toluamide, paraxanthine/theophyllin을 우선순위 물질로 제안하였다. 같은 기법을 낙동강과 영산강, 화포천, 우포늪 등 여러 환경 시료에 적용한 결과, 표적 분석을 통해 확인되지 않았던 약 10~30개의 유해물질과 그 대사체를 추가적으로 확인하였다. 생활 화학제품(예: 샴푸, 바디 워시, 세척제 등)에서도 benzophenone 등 6가지 정도의 물질이 SNTS를 통해 검출되었다. 과제에서는 SNTS를 통해 확인된 물질로 ‘신규·미지 유해화학물질 데이터베이스’를 구축하였다. 본 과제 수행 결과, SNTS를 활용하여 환경 시료 내 잔류 유해물질을 확인하고 그 결과는 생태위해성평가에 사용될 수 있으며, 인체 보건 측면에서 제품 사용 화학물질을 검출하는 데 있어 표적 분석과 함께 SNTS 기법을 적용할 것을 제안하였다.

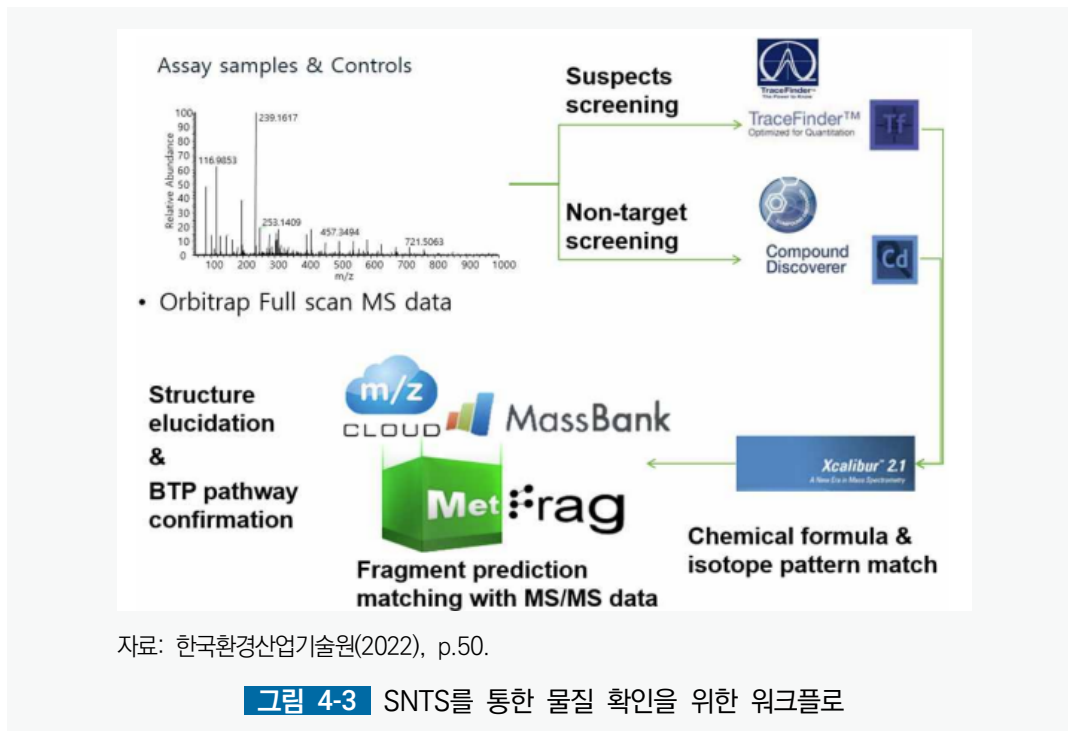
96) 과학기술정보통신부(2020b).



3) 표적/비표적 분석기법 활용 미확인(Unknown) 미량오염물질 측정 및 분석 기술 개발

과제는 SNTS 분석기법을 활용한 미확인 미량오염물질 측정 및 분석 기술을 개발하는 것이 최종 목표이며, 이를 위해 LC-HRMS 기반 표적 분석 기술 개발, 신규, 신종, 미확인 물질 확인 및 분석을 위한 SNTS 개발, 현장 적용을 통한 최적화 등을 수행하였다.⁹⁷⁾ 과제에서는 환경 시료(상수원, 하천수, 방류수) 내 주요 미량오염물질 표적 분석을 수행하였고, 상수, 하천수, 방류수에 적용할 추정 분석용 물질 목록을 만들었으며, SNTS 워크플로를 개발하였고, 분자 구조 확인을 위한 데이터베이스 활용 기법을 확립하였다. 연구 결과를 통해 상하수도 수처리기술 효율 평가 적용(수처리 부산물의 확인), 수계 유해화학물질 모니터링 물질 우선 순위 설정, 신종 유해화학물질 확인 및 검증, 독성 예측을 위한 SNTS 활용이 검증된다.

97) 한국환경산업기술원(2022).

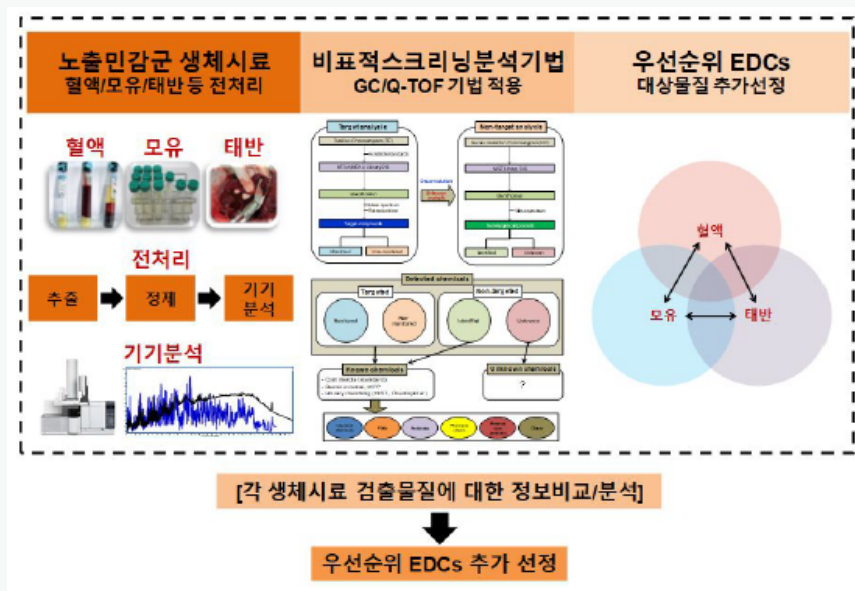


나. 화학물질 관리

1) EDCs 통합 위해성평가 및 모델 개발

본 과제에서는 신규 내분비계장애물질(EDCs) 선정을 목적으로 SNTS를 생체 시료에 적용했다.⁹⁸⁾ 대상 생체 시료는 모체(산모)의 혈액, 모유, 태반 시료와 매칭되는 아이의 혈청 시료였다. SNTS로 검출된 물질의 확인을 위하여 실험실 내부에 구축된 물질 라이브러리와 미국 국립표준기술원(NIST) 물질 라이브러리를 이용했다(그림 4-4 참조). 우선순위 대상 물질 선정을 위하여 여러 생체 시료에서 동시에 검출된 화학물질을 목록화하였고, 그 결과 유기인계 난연제, 합성 머스크 화합물, 벤조트리아졸계 자외선 안정제가 EDCs 통합 위해평가 및 관리를 위한 우선순위 EDCs로 제안되었다.

98) 환경부(2019).



자료: 환경부(2019), p.406.

그림 4-4 EDCs 통합 위해성평가 및 모델 개발 과제의 비표적 분석 개념도

2) 미관리 수질오염물질 탐색체계 구축

미관리 수질오염물질 탐색체계 구축⁹⁹⁾ 과제에서는 한국형 미관리 수질오염물질 탐색체계 구축을 목적으로 국외 미관리 수질오염물질 관리체계 현황을 조사하고 대상 물질을 선정하여 우리나라 수계에서 모니터링을 수행했다. 2022년 보고서 기준, 4대강 유역 내 130개소 정점에 대해 과불화화합물, 프탈레이트 가소제 등 유해화학물질 74종을 모니터링하였고, 물질의 농도를 파악하였다. 미관리 수질오염물질 탐색체계 구축은 5년 주기로 수행되는 과제로, 2025년까지 표적과 SNTS가 동시에 수행된다. 과제는 SNTS 분석을 통하여 검출되는 물질을 표적 분석으로 포함할 수 있도록 물질 목록을 제시하며, 국립환경과학원에 결과를 공유한다. 2024년 동 과제 수행을 위해 등록된 제안요청서에는 연차별 추진 내용을 <표 4-2>와 같이 제시하고 있다. 이에 따르면, 2차 연도부터 비표적 조사가 수행되며, 2025년까지 취합된 결과는 다음 주기(2026~2030년)에 반영하도록 계획하고 있다.

99) 국립환경과학원(2022b).

표 4-2 미관리 수질오염물질 탐색체계 구축 연차별 추진 일정

1차(2021년)	2차(2022년)	3차(2023년)	4차(2024년)	5차(2025년)
(표적 방법) 후보물질 선정 후 예비조사를 통해 본조사 최종항목 선정	표적 조사 (1)	표적 조사 (2)	표적 조사 (3)	표적 조사 (4)
(비표적 방법) 후보물질 선정	비표적 조사*(1)	비표적 조사(2)	비표적 조사(3)	비표적 조사(4)

주: *비표적조사(Non-Target)(1~4) 결과 검토를 통해 차년도 표적조사 모니터링(2026~2030년) 물질 선정 시 반영 예정.
 자료: 국립환경과학원, “제안요청서-미관리 수질오염물질 탐색체계구축(2024)”, 검색일: 2024.8.7.

3) 수계 내 미규제 미량오염물질 모니터링 및 관리기준 개선 연구

수계 내 미규제 미량오염물질 모니터링 및 관리기준 개선 연구¹⁰⁰⁾ 과제는 미량오염물질 모니터링 체계 운용 및 미량오염물질 관리기준 설정과 관련된 선진국의 사례를 분석하고, 이를 벤치마킹하여 우리나라 수계에 적합한 미규제 미량오염물질 모니터링 및 관리기준 설정 및 개선에 기여하는 목적으로 수행되었다. 연구에서는 벤치마킹 대상 선진국 사례로, 본 보고서에서 검토된 라인강 모니터링 바젤 정점에서의 SNTS 활용을 소개하였으며, 미규제 오염물질을 선정하는 데 있어 추정·비표적 분석 모니터링 결과를 고려하여 대상 물질을 확대할 필요성에 대해 명시하였다.

다. 노출 감시

1) 수돗물 중 미규제 미량유해물질 관리방안 연구

수돗물 중 미규제 미량유해물질 관리방안 연구¹⁰¹⁾ 과제는 수돗물 중 미량 유해물질의 함유 실태를 조사하여 수질관리의 필요성이 있는 물질을 먹는물 수질기준 또는 감시항목으로 설정하여 먹는물 안전관리를 강화하기 위해 수행되었다. 과제에서는 낙동강 수계에 극미량으로 존재하는 미규제 유해화학물질을 효과적으로 모니터링하기 위한 분석방법을 연구하고 정도 관리 체계를 확립하였으며, 이를 통해 관리우선순위 선정 등 미관리 유해화학물질 관리 정책을 수립하는 데 과학적 근거를 제공하고자 하였다. SNTS 분석의 적용을 위해 워크플로를 확립하고 왜관수질자동측정소에서 수집된 하천수 시료를 분석하였다. 추정 분석을 위하여 의심 물질 목록을 사용하였고, 비표적 분석은 상용화된 질량 라이브러리를 이용하였다. SNTS를 통해 총 124종의 물질이 검출되었으며, 이들의 검출 빈도와 사용 용도 및 분석 방법, 표준물질 확보를 검토하여 모니터링 후보 항목으로 선정하고자 하였다. 이 물질은 추후 정량 분석된 후 장기 모니터링 대상항목이 될 수 있다.

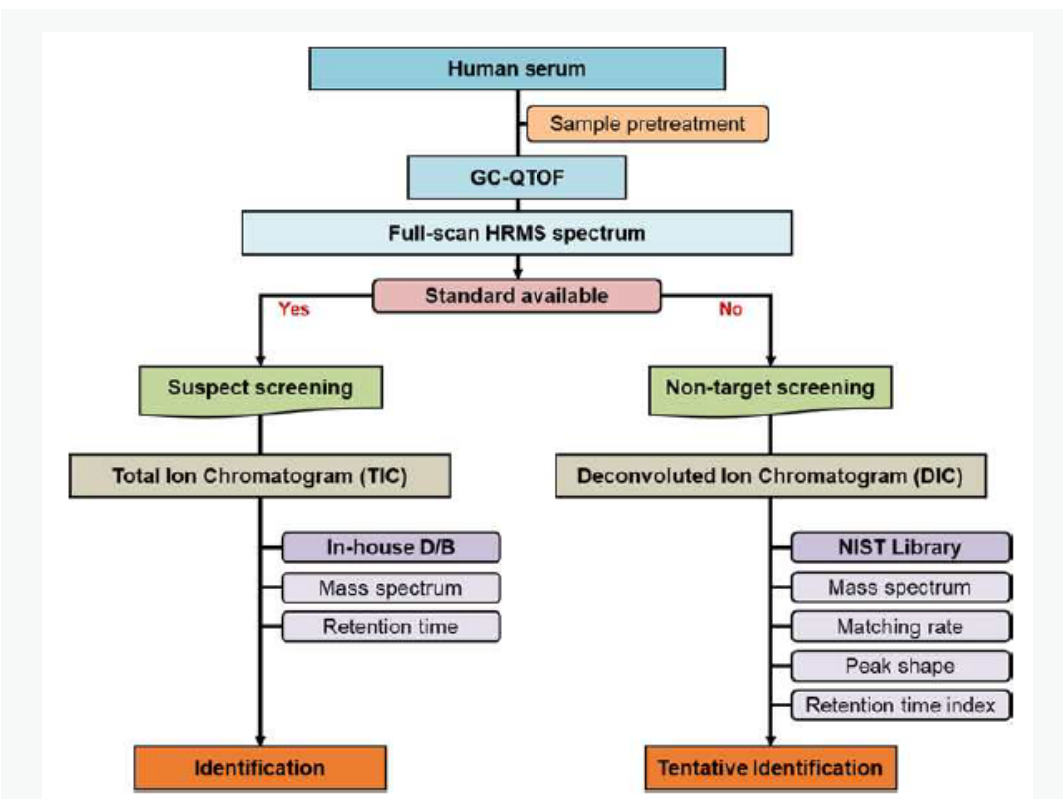
100) 국립환경과학원(2022a).

101) 국립환경과학원(2018b).

2) 국가 환경보건 바이오뱅크 구축 및 운영 로드맵 마련

국가 환경보건 바이오뱅크 구축 및 운영 로드맵 마련¹⁰²⁾ 과제는 현재는 구축이 완료되었으나 과제 수행 당시에는 구축 예정이었던 바이오뱅크(현 국가환경보건시료은행)의 활용성 극대화를 위한 연구 및 운용 로드맵을 마련하는 목적으로 수행되었다. 바이오뱅크의 활용에 관한 시범 사업 중 하나로 SNTS를 이용하여 생체 시료 내 정성분석을 수행하였다.

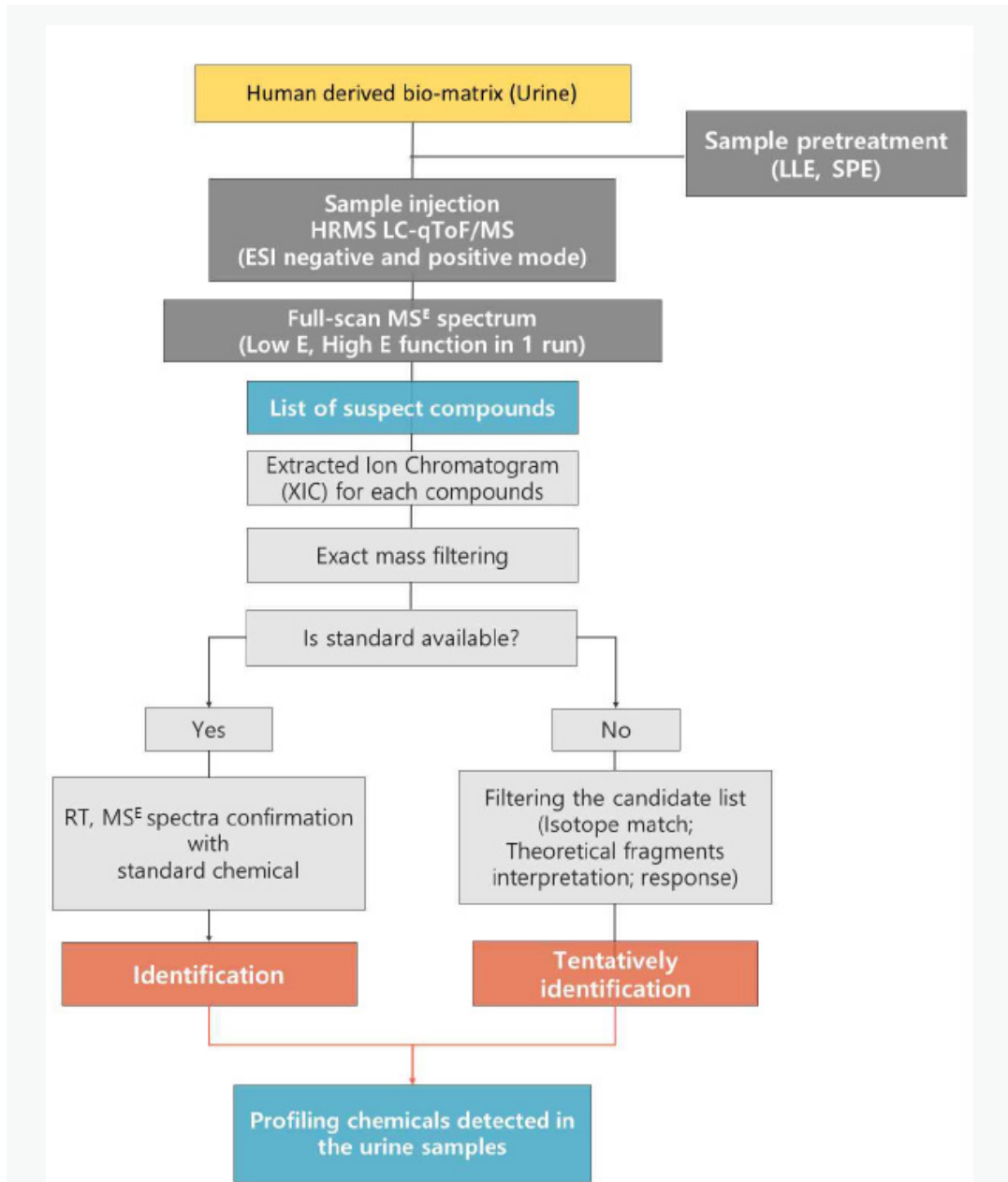
연구 대상은 제3기 국민환경보건 기초조사 대상자 중 성별과 연령 분포를 고려하여 총 400명을 무작위 추출하고, 집단 내에서 10명의 시료를 풀링하여 사용하였다. 혈액 시료의 SNTS 분석은 GC-QTOF-MS를 통해 수행되었고, 추정 분석은 in-house 라이브러리, 비표적 분석은 NIST 라이브러리를 활용하였다(그림 4-5 참조). 소변 시료는 공개된 추정 분석 물질 목록 데이터 베이스와 국가 바이오모니터링 사업의 바이오마커, 기존 내분비계장애물질의 대체물질 목록을 활용하여 새로 작성된 환경유래 화학물질 추정 분석 목록(대략 2,000개의 물질)을 활용하여 LC-QTOF-MS(그림 4-6 참조)로 분석하였다.



자료: 국립환경과학원(2019), p.43.

그림 4-5 혈액시료 추정·비표적 분석 프로토콜

102) 국립환경과학원(2019).



자료: 국립환경과학원(2019), p.47.

그림 4-6 소변시료 추정·비표적 분석 프로토콜

SNTS 분석 결과(표 4-3 참조), 혈액 시료에서는 실록산류, 유기인계난연제류, 유기염소계농약류, 프탈레이트 및 프탈레이트 대체재[예: Tris(2-ethylhexyl) trimellitate] 등 11개 화학물질이 검출되었다. 소변 시료 검출 물질 중 제4기 국민환경보건 기초조사에 포함되지 않았던 물질은 18종이 검출되었다. 그중 일부를 살펴보면, 미국에서 규제되고 있는 물질인 클로르피리포스(chlorpyrifos)의 대사체인 3,5,6-Trichloro-2-pyridinol(TCPy)가 대부분의 소변 시료에서 검출되었고, 신규 프탈레이트 대체제의 대사체도 검출되었다. 과제는 SNTS 분석을 통해 확인된 물질은 검출 빈도, 유해성 등을 파악하여 향후 국민환경보건 기초조사의 물질

확대에 과학적 단서를 제공할 수 있다고 언급하였다. 또한, 여러 건강지표와 연결된 데이터 해석이나 노출원 확인에도 도움을 줄 것이라고 명시하였다. 이를 위해 환경 유해화학물질에서 SNTS 분석을 수행할 수 있는 적절한 데이터베이스 구축이 필요하며 식별된 물질의 우선순위 선정을 위한 유해성 및 노출 정보의 수집이 필요할 것이다.

표 4-3 추정·비표적 분석 수행으로 제안된 모니터링 물질

구분	검출 물질	제안 매체 및 대상물질	
유기인계 난연제	Triethyl phosphate (TMP)	소변	Diethyl phosphate(DMP; TMP 대사체)
	Tri-n-butyl phosphate (TBP)	소변	Dibutyl Phosphate(DNBP; TBP 대사체)
	Tris(2-chloroisopropyl) phosphate (TCPP)	소변	Bis(1-chloro-2-propyl) phosphate(BCIPP; TCPP 대사체)
	Tris(2-ethylhexyl) phosphate(TEHP)	소변	Bis(2-ethylhexyl) phosphate(BEHP; TEHP 대사체)
프탈레이트 대체제	Tris(2-ethylhexyl) trimellitate (TOTM or TEHTM)	소변	Di(2-ethylhexyl) trimellitate(DEHTM; TEHTM 대사체) 또는 Mono(2-ethylhexyl) trimellitate(MEHTM; TEHTM 대사체)
	1,2-Cyclohexane dicarboxylic acid diisononyl ester (DINCH)	소변	Cyclohexane-1,2-dicarboxylate-mono-(7-hydroxy-4-methyl)octyl ester (OH-MINCH; DINCH 대사체) 또는/그리고 Mono-carboxy-isononylcyclohexane-1,2-dicarboxylate (cx-MINCH; DINCH 대사체)
	Di-2-ethylhexyl terephthalate(DEHTP)	소변	Mono-2-ethyl-hydroxyhexylterephthalate (5OH-MEHTP; DEHTP 대사체)
유기염소계 농약류	<i>p,p'</i> -DDE	혈액	<i>p,p'</i> -DDE
	HCB	혈액	HCB
유기인계 살충제	O,O-Diethyl-O-3,5,6-trichloropyridin-2-yl phosphorothioate (Chlorpyrifos)	소변	3,5,6-Trichloro-2-pyridinol(TCPy; Chlorpyrifos 대사체)

자료: 국립환경과학원(2019), p.314를 바탕으로 저자 작성.

3) 수용체 중심 생체시료 suspected-target screening을 통한 일회용 생리대 환경 유해요인 파악 연구

본 과제는 추정 분석을 수행하여 생리대 내 미지의 화학물질을 포함한 유해화학물질 함유 가능성을 포괄적으로 파악하고 여성의 화학물질 노출과 질환, 생식 건강과의 관련을 확인하고자 하였다.¹⁰³⁾ 우선 추정 분석을 위한 검출 예상 물질 후보군을 설정하고, HRMS 분석법을

103) 과학기술정보통신부(2020c).

확립하여 주요 노출 물질을 찾고자 하였다. 이러한 시도는 기존의 표적 분석과 건강 영향 연구와 차별성을 지니고 물질을 광범위하게 파악할 수 있는 측면에서 큰 장점이 있다.

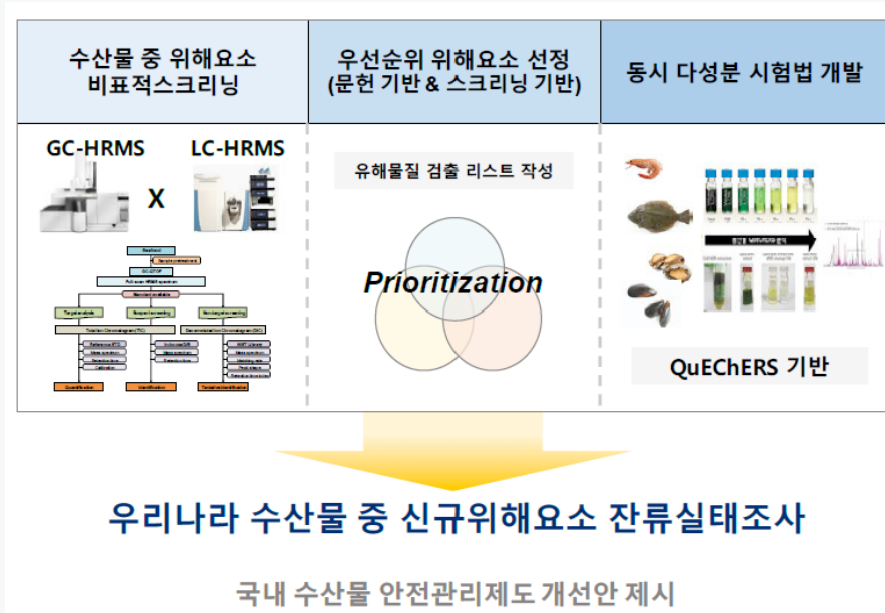
4) 수산물 중 신규 위해요소 시험법 개발 및 잔류실태 조사

수산물 중 신규 위해요소 시험법 개발 및 잔류실태 조사¹⁰⁴⁾ 과제는 우리나라 양식수산물에 비의도적으로 오염된 신규 위해요소를 파악하고, 물질을 분석하기 위한 표준분석법을 확립하며 양식수산물 잔류실태조사를 수행하여 안전관리 방안을 제안하는 것이 목적이다(그림 4-7 참조). SNTS 분석을 위한 기기는 GC-QTOF-MS와 LC-Orbitrap-MS를 활용하였으며, 추정 분석 목록을 구축하고 기기 분석 절차를 개발하였다. 개발된 절차를 우리나라 해수 및 담수 양식 수산물 29건에 적용하여 농약 22종, 의약품 7종, 환경오염물질 12종의 검출을 확인하였다. 이 중에서 농약 21종과 의약품 4종은 수산물 잔류허용기준으로 관리되고 있지 않아 신규 위해요소로 선정하였다. 결과적으로 SNTS 분석 결과를 바탕으로 수산물 잔류허용기준으로 관리되지 않는 농약 21종과 의약품 4종을 신규유해요소로 선정하였고, 분석 결과를 통해 국내 신규 위해요소 안전관리제도의 개선안을 제시하였다. 과제에서는 신규 위해요소 파악을 위한 SNTS의 활용에 관해 아래와 같이 언급하였다.

본 연구개발과제를 통해 확립된 수산물 중 신규 위해요소 확인을 위한 추정/비표적 분석은 과학적 기법에 근거한 최신 분석기법이다. 기존에 운용되고 있는 표적 분석 기법으로는 파악하지 못했던 신규 위해요소를 파악할 수 있다는 장점을 가지고 있어 실제 수산물 섭취를 통해서 노출될 수 있는 신규 위해요소를 선제적으로 관리할 수 있다. ... 이러한 장점을 기반으로 추정 스크리닝 분석 시에 구축된 데이터베이스를 견고하게 관리/확대한다면 다양한 플랫폼에서 적용하기 수월할 것으로 판단되며, 현재 국가적으로 수행되고 있는 잔류실태조사와 더불어 추정/비표적 분석을 함께 적용한다면 수산물 안전관리를 위협하는 다양한 신규 위해요소에 대한 현황을 파악 하는 것이 더욱 수월할 것으로 판단된다(식품의약품안전평가원, 2021, p.479).

따라서, SNTS의 도입은 기존 표적 분석기법의 한계를 보완할 수 있으며 위해요소를 선제적으로 관리할 수 있는 효과적인 도구임이 확인되었고, SNTS 분석기법 도입과 데이터의 축적을 통해 다양한 분야에서 위해요소 안전관리가 개선되는 효과를 기대할 수 있다.

104) 식품의약품안전평가원(2021).



자료: 식품의약품안전평가원(2021), p.8.

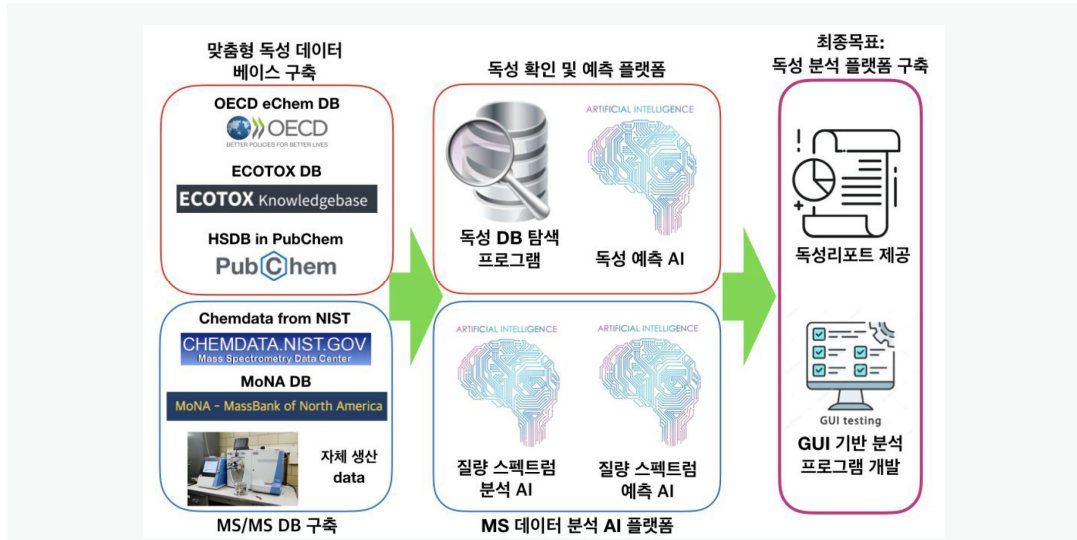
그림 4-7 SNTS를 활용한 수산물 중 위해요소 우선순위 설정기법

라. 영향 평가

1) 초고분해능질량분석법을 응용한 추정/비표적 분석 및 미지 독성 혼합물질 분석기술 개발

본 과제는 혼합 화합물 내 존재하는 미지 화합물을 SNTS 분석을 통해 규명하고, 이를 EDA와 접목하여 혼합물 속 미지 독성물질을 탐색하는 기법을 개발하는 내용의 과제이며, 이를 통해 생활화학제품 유해성 평가 플랫폼을 표준화하고 가이드라인을 제시하고자 하였다(그림 4-8 참조).¹⁰⁵⁾ 과제는 SNTS와 관련하여 질량분석 및 독성 데이터베이스를 개발하고, 이 데이터베이스를 기반으로 독성 및 질량분석 스펙트럼을 예측하는 기계학습 기법을 발전시켜, SNTS와 EDA가 포함된 분석 플랫폼 GUI 소프트웨어를 구축하고자 하였다. 연차보고서를 통해 확인할 수 있는 내용으로 SNTS 분석을 통해 살균 소독제에서 벤잘코늄 화합물을 검출하였고, 이는 모든 제품에서 확인되었다. SNTS와 EDA가 결합된 플랫폼 구축을 통해 추후 생활화학제품의 미지 화학물질에 의한 잠재적 피해에 대한 선제적 관리가 가능하며, 이는 사회안전망 확보를 가능하게 할 것이라고 언급하였다.

105) 한국환경산업기술원(2021).



자료: 한국환경산업기술원(2021), p.13.

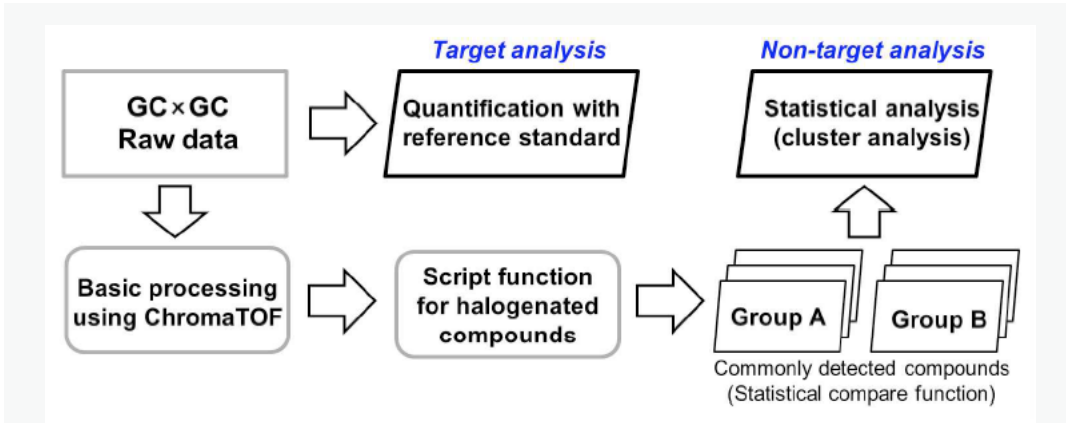
그림 4-8 SNTS와 EDA의 접목을 통한 독성 분석 플랫폼 구축 개요

마. 포렌식

1) 미세먼지 오염원 추적을 위한 비표적 잔류성유기오염물질의 환경수사기법 개발

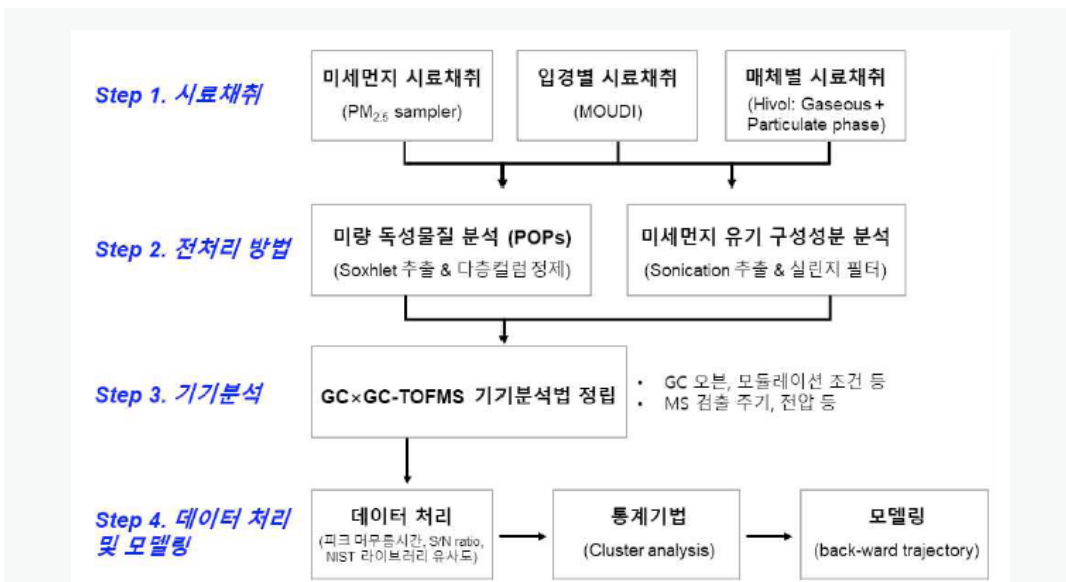
과제는 미세먼지의 오염원 추적을 위하여 비표적 분석기법을 이용한 대기 중 잔류성유기오염물질의 환경 수사기법을 개발하는 목적으로 수행되었다.¹⁰⁶⁾ 대기 시료를 고농도 미세먼지가 유입되는 고농도 기간과 낮은 미세먼지 농도를 보이는 저농도 기간으로 나누어 수집하였고, GC-GC-TOF-MS를 활용하여 분석하였다. 비표적 분석을 위해 우선 대기 시료의 전처리법을 확립하고, 신뢰성을 검토하였다. 이후 기기 소프트웨어인 ChromaTOF의 자동물질확인(Automated peak finding) 기능을 이용하여 SNTS의 적용성을 검토하였으며, 프로그램에서 제공되는 통계 비교 분석을 이용하여 군집 분석 등을 수행하였다(그림 4-9 참조). 이후 수집된 대기 시료를 분석하여, 비표적 분석을 수행하고, 할로젠 원소인 염소와 브롬을 검출하였다. 모니터링 기간별로 모든 시료에서 동시에 검출된 총 248개의 물질을 확인하였고, 이 중 장거리 이동 파악에 사용할 지시자를 선정하였다. 지시자를 이용하여 오염원 파악을 위한 모델링을 수행하였고, 잠재적 오염원을 제시하였다(그림 4-10 참조).

106) 과학기술정보통신부(2020a).



자료: 과학기술정보통신부(2020a), p.8.

그림 4-9 미세먼지 오염원 추적을 위한 표적, 비표적 분석 워크플로



자료: 과학기술정보통신부(2020a), p.12.

그림 4-10 미세먼지 오염원 추적을 위해 개발·적용된 환경 수사기법 모식도

바. 모니터링

1) 수질자동측정기법 개발 및 개선연구-LC/HRMS를 이용한 낙동강 중류 유기화합물질 온라인 분석법 개발

과제는 낙동강 수계에 극미량으로 존재하는 미규제 유해화학물질을 탐색할 수 있는 분석 체계와 정도관리 방안을 마련하여 유해화학물질 관리 정책을 수립하는 데 과학적 근거를 제공하는 것을 목적으로 수행되었다.¹⁰⁷⁾ SNTS 분석을 위해 LC-Orbitrap-MS를 활용하였고 Compound Discoverer 2.1을 이용하여 데이터 분석을 수행하였다. 얻어진 질량 스펙트럼을

온라인 질량 라이브러리, 기기 제공 라이브러리와 비교하여 물질을 확인하였다. 개발된 SNTS 절차를 통해 하천수 시료를 분석하였고, 1차적으로 124종의 물질을 확인하였다. 최종 확인된 물질의 정보를 제시하지는 않았으나, 이러한 물질은 향후 추가적인 연구를 통해 장기 모니터링 대상 항목으로 추가될 예정이다. 이러한 접근을 통해 미규제 유해화학물질 관리 정책에 기초 자료가 제공될 수 있다고 명시하였다.

2) 신종오염물질 지표물질 선정/평가를 통한 신종오염물질 처리 효율 평가에 관한 연구

과제는 공공하수처리시설의 유입수와 방류수 중 존재하는 미량오염물질의 현황을 제시하고 발생 특성을 파악하며 향후 관리 방안 및 체계 마련을 위한 근거를 제시하고자 하였다.¹⁰⁷⁾ 이를 위해 우리나라가 하수처리장으로 유입되는 신종 유기오염물질과 이를 대표할 수 있는 지표 화합물질을 선정하고 이를 토대로 새로운 물관리 정책 및 기술적 대응 전략이 필요하다고 명시하며, 미지의 미량 유기오염물질을 지속해서 분석하고 지표 오염물질을 발굴하며 적절한 처리 공정을 설계해야 한다고 언급하였다. 과제는 미량오염물질 탐색을 위한 분석 방법적 접근으로 Q-TOF, Orbitrap을 이용한 SNTS의 활용법을 소개하며 분석기술 개요 및 분석 기법 최적화 기법 등을 상세히 제시하였다. 또한 독성학적 접근법으로 EDA를 제시하였다. 결론적으로 독성학적 분석을 기반으로 시료를 선택하여 SNTS를 적용하였을 때 하수처리 공정에서의 비의도적 처리 부산물을 확인할 수 있다고 제안하였다.

의심 스크리닝 또는 비표적 스크리닝에 기반한 화학분석과 독성시험의 연계를 이용하여, 탐색물질의 범위를 단순화함으로써, 탐색물질의 결과를 지속적으로 구축할 수 있는 기반을 마련함으로써, 사회적, 정책적 이슈 및 사고에 대응할 수 있는 분석 데이터베이스의 구축(김현욱, 2021, p.74).

결론적으로 과제는 미지의 미량오염물질에 대한 지속적 분석을 수행하여 지표 오염물질을 발굴하고 적절한 처리 공정을 설계하는 것의 중요성을 강조하였다.

107) 국립환경과학원(2018c).

108) 김현욱(2021).

제 5 장

국내 유해화학물질 모니터링 체계

1. 국내 유해화학물질 모니터링 체계 조사

1. 국내 유해화학물질 모니터링 체계 조사

우리나라에서는 정기적으로 유해화학물질 모니터링을 수행하고 있다. 모니터링은 다양한 법적 근거에 따라 시행되며 환경 매체 및 인체에서 조사되고 있다. 추정, 비표적 분석의 도입을 검토하기 위해 현존하는 국내 모니터링 체계와 법적 근거, 주기, 대상 물질, 목적 등을 조사하였다.

가. 생체모니터링

1) 국민환경보건 기초조사

가) 배경

국민환경보건 기초조사(KoNEHS: Korean National Environmental Health Survey)는 「환경보건법」 제14조에 따라 시행되는 법정 조사이다(표 5-1 참조). KoNEHS의 목적은 국민의 환경오염물질 노출 수준, 원인, 경로의 현황 파악으로, 전체 국민의 대표성을 고려하여 전국에서 만 3세 이상 어린이, 청소년, 성인을 대상으로 생체시료를 수집하고, 주요 환경성 유해화학물질을 분석하여 노출의 잠재적 영향 요인을 밝히는 것이다. 조사 결과는 국가 환경보건 정책 수립을 위한 기초자료로 활용된다. KoNEHS는 3년 주기로 조사를 수행하고 있으며, 2009년 1기 조사(2009~2011년)를 시작으로, 2023년 5기 조사가 마무리되었고, 2024년 6월, 약 5,700명의 국민을 대상(성인 3,750명, 어린이·청소년 1,980명)으로 6기 조사(2024~2026년)에 착수하였다.

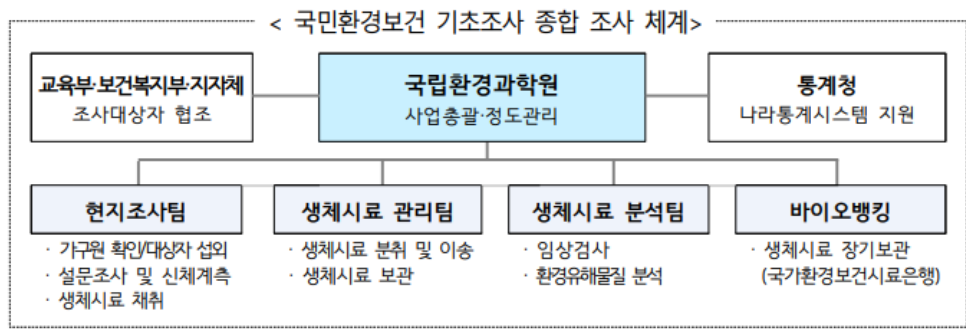
표 5-1 「환경보건법」의 국민환경보건 기초조사 관련 조항

조항	내용
제14조 (국민환경보건 기초조사 등)	<p>① 환경부장관은 3년마다 환경유해인자의 생체 내 농도, 환경유해인자로 인한 건강피해 현황, 환경성질환 및 그 밖에 환경유해인자에 대한 적절한 시책 마련과 조치가 필요한 질환의 발생 현황 등 국민환경보건에 관한 기초조사를 하여야 하며, 필요하면 관계 중앙행정기관의 장과 공동조사를 할 수 있다.</p> <p>② 환경부장관은 제1항에 따른 기초조사 결과 다음 각 호의 어느 하나에 해당하는 경우에는 원인규명 등을 위한 정밀조사를 실시하여야 한다.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 특정 인구집단이나 특정 지역에서 환경유해인자의 생체 내 농도가 제9조제2항제5호에 따른 기준보다 높은 경우 2. 환경유해인자로 인한 건강피해가 큰 경우 3. 환경성질환이 어느 지역에 많이 발생한 경우 <p>③ 환경부장관은 제2항에 따른 정밀조사를 할 때에 사업장의 작업환경 요인, 식품 섭취 등 관계 행정기관의 소관 사항과 관련성이 있다고 의심되는 경우에는 조사하기 전에 관계 행정기관의 장과 미리 협의하여야 하며 필요하면 공동조사를 하여야 한다.</p> <p>④ 환경부장관은 제1항 또는 제2항에 따른 기초조사나 정밀조사를 위하여 필요한 경우에는 관계 기관의 장에게 다음 각 호의 자료의 제출을 요청할 수 있다. 이 경우 자료의 제출을 요청받은 관계 기관의 장은 특별한 사유가 없으면 이에 따라야 한다.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 「국민건강보험법」 제41조에 따른 요양급여 및 같은 법 제52조에 따른 건강검진에 관한 자료 2. 「암관리법」 제14조에 따른 암등록통계사업 및 같은 법 제15조에 따른 암정보사업에 관한 자료 3. 「통계법」 제3조제4호에 따른 통계자료 중 직업, 질병 및 사인(死因) 등에 관한 자료 4. 「학교보건법」 제7조의3에 따른 건강검사기록에 관한 자료 5. 「고용보험법」 제15조에 따른 근로자의 피보험자격 취득 및 상실 등에 관한 자료 6. 「산업재해보상보험법」 제36조에 따른 보험급여 수급에 관한 자료 7. 「의료급여법」 제7조에 따른 의료급여에 관한 자료 8. 그 밖에 환경부장관이 기초조사나 정밀조사를 위하여 필요하다고 인정하는 자료 <p>⑤ 기초조사와 정밀조사의 방법·절차, 그 밖에 필요한 사항은 환경부령으로 정한다.</p>

자료: 국가법령정보센터, “환경보건법”.

나) 조사 체계 및 내용

KoNEHS는 국립환경과학원의 총괄로 추진되며, 현지 조사(설문조사 및 시료 채취), 생체시료 관리(보관), 생체시료 분석(임상 및 환경유해물질 분석), 국가환경보건시료은행(장기 보관)의 네 개 팀으로 구성된다(그림 5-1 참조). 조사 방법은 사회, 경제, 인구학적 특성 파악을 위한 가구와 개인 대상 설문조사, 조사 대상의 신체 계측 및 임상 검사, 생체시료 수집과 노출 수준 확인을 위한 유해화학물질 분석으로 구성되어 있다(표 5-2 참조). 유해화학물질 분석을 위해 KoNEHS에서 수집되는 생체시료는 소변과 혈액 시료로, 소변이 모든 대상자에게서 수집되는 반면 혈액은 청소년과 성인 그룹에서만 채취된다.



자료: 환경부 보도자료(2024.6.11), p.3.

그림 5-1 국민환경보건 기초조사 추진체계

표 5-2 국민환경보건 기초조사 조사 내용

구분	세부 항목	
	생체시료 수집	혈액
	소변	전 연령
설문조사	인구·사회경제적 특성, 거주지 특성, 실내환경, 식생활, 교통 및 이동수단, 생활습관, 건강보조제 및 의약품 사용, 알레르기 조사, 신체발달, 여성력 등	
신체계측	키, 몸무게, 허리둘레	
임상검사	혈액학 검사, 일반화학 검사, 혈장단백 검사, 지질 검사 등	
유해물질 분석	혈액 및 소변시료 이용 환경유해물질 농도 분석	

자료: 환경부 보도자료(2024.6.11), p.4를 바탕으로 저자 작성.

다) 유해화학물질 모니터링

KoNEHS의 물질 선정은 국민의 생활과 관련성이 높은 물질, 사회적 이슈에 포함되는 물질, 분석 인프라가 구축된 물질, 국내 화학물질 유통량 등을 고려하여 노출 가능성이 높으면서 인체 유해성이 우려되는 물질을 고려하며,¹⁰⁹⁾ 유해화학물질 모니터링 전문가의 의견을 청취하여 최종 결정한다.

KoNEHS를 통해 조사되는 유해화학물질 종류는 중금속류, 환경성 페놀류, 프탈레이트 대사체, 농약류, 휘발성유기화합물 대사체, 잔류성유기오염물질¹¹⁰⁾ 그룹으로 구분된다. 조사되는 물질의 수는 1기(18종)에서 2기(21종), 3기(26종), 4기(33종), 5기(64종)로 계속해서 늘어났으며, 가장 최근인 2024년 6월 착수한 국민환경보건 기초조사 6기의 경우 71종의 물질을 모니터링 대상 물질로 선정하여, 그 수가 대폭 확대되었다(표 5-3 참조). 특히 5기 조사부터는 대상

109) 환경부 보도자료(2021.8.13), p.6.

110) 국제협약인 스톡홀름협약에 의해 관리 및 규제되고 있는 물질로, 잔류성, 생물 농축성, 독성, 장거리 이동성의 4가지 특징을 가지는 물질(그룹)을 총칭함.

물질 그룹 중 잔류성유기오염물질 수를 확연히 늘리면서(5기에서 잔류성유기오염물질 25종을 새로 추가, 6기에서 37종으로 확대), 국제적 우려가 있는 물질의 상세한 모니터링이 수행 되도록 하였다.

표 5-3 국민환경보건 기초조사 기수별 모니터링 대상 유해화학물질

그룹	유해물질명	1기	2기	3기	4기	5기	6기
중금속류	납	●	●	●	●	●	●
	망간	●	×	×	×	●	●
	수은	●	●	●	●	●	●
	카드뮴	●	●	●	●	●	●
	비스	●	×	×	×	×	×
	크롬	×	×	×	×	●	●
	몰리브덴	×	×	×	×	●	●
	니켈	×	×	×	×	●	●
	안티모니	×	×	×	×	●	●
	바나듐	×	×	×	×	●	●
환경성 페놀류	비스페놀 A	●	●	●	●	●	●
	비스페놀 S	×	×	●	●	●	●
	비스페놀 F	×	×	●	●	●	●
	트리클로산	×	●	●	●	●	●
	벤조페논-3	×	×	×	×	●	●
	메틸 파라벤	×	×	●	●	●	●
	에틸 파라벤	×	×	●	●	●	●
	프로필 파라벤	×	×	●	●	●	●
부틸 파라벤	×	×	×	●	●	●	
프탈레이트 대사체	모노(2-에틸-5-하이드록시헥실) 프탈레이트(MEHHP)	●	●	●	●	●	●
	모노(2-에틸-5-옥소헥실) 프탈레이트(MEOHP)	●	●	●	●	●	●
	모노(2-에틸-5-카르복시헥실) 프탈레이트(MECP)	×	●	●	●	●	●
	모노부틸 프탈레이트(MnBP)	●	●	●	●	●	●
	모노벤질 프탈레이트(MBzP)	×	●	●	●	●	●
	모노(2,6-메틸-6-카르복시헥실) 프탈레이트	×	×	●	●	×	×
	모노(2,7-메틸-7-카르복시헥실) 프탈레이트	×	×	●	●	×	×
	모노(3-카르복시프로필) 프탈레이트(MCPP)	×	×	●	●	●	●
	모노에틸 프탈레이트(MEP)	×	×	×	×	●	●
모노메틸 프탈레이트(MMP)	×	×	×	×	●	●	
다환방향족 탄화수소 대사체	1-하이드록시피렌	●	●	●	●	●	●
	2-나프톨	●	●	●	●	●	●
	1-하이드록시페난트렌	×	●	●	●	●	●
	2-하이드록시플루오렌	×	●	●	●	●	●
휘발성 유기화합물 대사체	t,t-뮤콘산	●	●	●	●	●	●
	히푸린산	●	●	×	×	×	×
	벤질머캅토산	×	×	●	●	●	●
	페닐글리옥살산	●	●	×	×	×	×
	메틸히푸린산	●	●	×	×	×	×
만델산	●	●	×	×	×	×	
피레스로이드 농약류	3-페녹시벤조인산	●	●	●	●	●	●
환경성 담배연기	코티닌	●	●	●	●	●	●

표 5-3의 계속

그룹	유해물질명	1기	2기	3기	4기	5기	6기
과불화 화합물	과불화옥탄산(PFOA)	×	×	×	●	●	●
	과불화옥탄술폰산(PFOS)	×	×	×	●	●	●
	과불화헥산술폰산(PFHxS)	×	×	×	●	●	●
	과불화데칸산(PFDeA)	×	×	×	●	●	●
	과불화녹살산(PFNA)	×	×	×	●	●	●
	과불화부탄술폰산(PFBS)	×	×	×	×	×	●
	과불화도데칸산(PFDoA)	×	×	×	×	×	●
	과불화헵탄산(PFHpA)	×	×	×	×	×	●
	N-메틸-퍼플루오로옥탄 설펜아미도 아세트산(MeFOSAA)	×	×	×	×	×	●
	과불화운데칸산(PFUnDA)	×	×	×	×	×	●
	과불화펜탄산(PFPeA)	×	×	×	×	×	●
	과불화헥산산(PFHxA)	×	×	×	×	×	●
폴리염화비 페닐(PCBs)	CBs 28 ^b , 52 ^{a,b} , 56 ^{a,b} , 74 ^{a,b} , 101 ^{a,b} , 105 ^{a,b} , 118 ^{a,b} , 123 ^a , 126 ^{a,b} , 138 ^{a,b} , 153 ^{a,b} , 156 ^b , 157 ^{a,b} , 167 ^{a,b} , 180 ^{a,b} , 187 ^{a,b} , 189 ^b)	×	×	×	×	a	b
유기염소계 살충제	<i>p,p'</i> -DDT/DDE ^{a,b} , Hexachlorobenzene ^a , β -, γ -HCH ^{a,b} ,	×	×	×	×	a	b
브롬화난연 제(PBDEs)	BDEs 28 ^a , 47 ^{a,b} , 99 ^{a,b} , 100 ^{a,b} , 153 ^{a,b} , 154 ^{a,b}	×	×	×	×	a	b

주: ●는 모니터링 대상 물질, ×는 모니터링 비대상 물질, a는 5기 대상 물질, b는 6기 대상 물질을 의미함.
자료: 환경부 보도자료(2021.8.13, p.3, 2024.6.11, p.7); 환경보건종합정보시스템, “국민환경보건 기초 조사”, 검색일: 2024.5.13.

2) 어린이환경보건 출생코호트

가) 배경

어린이환경보건 출생코호트(Ko-CHENS: Korean Children’s Environmental Health Study)는 어린이 환경성 질환 원인 규명과 예방관리를 목적으로 수행되었다. 이를 위해 2015년부터 2035년까지 대규모 코호트의 태아기부터 청소년기까지 추적조사를 수행하며 그 결과를 통해 환경유해인자의 노출과 질환과의 인과관계를 밝힌다. 코챌스에서 제시한 유해화학물질 및 대기오염 노출과 상관이 있을 것으로 예측되는 질환은 알레르기(아토피, 천식, 알레르기 비염 등), 대사성(비만, 당뇨 등), 신경행동장애(주의력결핍과잉행동장애, 자폐증) 등이다.¹¹¹⁾ 이와 관련하여 5개 분야(임신 및 출산, 성장발육 및 내분비계, 신경인지 발달, 사회성 및 정서발달, 알레르기), 39개의 가설을 설정하였다. 가설의 상세한 내용은 국립환경과학원(2020)에서 확인할 수 있다.¹¹²⁾

코챌스 수행 결과를 통해 우선 관리 대상 환경유해인자 목록 작성을 위한 기초자료 확보,

111) 환경부(2017), p.12.

112) 국립환경과학원(2020), pp.254-351.

주요 건강 영향과 환경유해인자 간 노출 평가, 성장 단계별 건강 보호 가이드라인 및 환경 유해인자별 권고 기준을 마련하여 궁극적으로 과학적 근거가 뒷받침되는 전 생애 환경보건 평가 및 관리체계를 구축하고자 하였다.

나) 조사 체계 및 내용

코첸스에서는 코호트 형태를 질병 발생률 산정을 위한 대규모 코호트와 발병원인 규명을 위한 상세 코호트의 2가지로 나누어 조사를 수행하였다. 대규모 코호트는 2015년부터 5년간 총 7만 명을 우선적으로 모집하여(총 모집인원: 95,000명) 임신 중 1회 설문조사와 생체 시료 채취, 그리고 주기적인 영유아 설문조사를 추적하고, 상세 코호트는 5천 명의 임신부를 모집하여 임신 전후기의 생체 시료 수집, 설문조사, 환경측정을 시행하고 영유아기부터 청소년기까지 정기적 생체시료 분석과 신체 발달, 신경 인지발달 검사, 설문조사 및 구체적인 추적조사를 실행한다.

다) 유해화학물질 모니터링

코첸스의 유해화학물질 모니터링을 위한 생체시료의 수집은 대규모 코호트와 상세 코호트로 나누어 다르게 이루어진다(표 5-4 참조). 대규모 코호트의 경우, 대상 산모 모집 시, 당시의 혈액과 소변 시료를 채취하여 유해화학물질 모니터링을 수행한다. 상세 코호트의 경우, 모체가 임신 20주 미만(임신 초기), 임신 30주 이상(임신 말기)일 때의 혈액과 소변 시료를 채취하고, 출생 시 제대혈, 그리고 자녀의 경우 24개월(3세)부터 7세까지 연 1회, 그리고 초등학교(1학년, 4학년), 중학교, 고등학교 재학 동안 생체 시료를 채취한다.

표 5-4 코첸스 시료 수집 개요

구분	대규모 코호트(9.5만 명)	상세 코호트(5천 명)
추진절차	① 임신부 설문조사 및 생체시료(혈액, 소변) 채취 (임신 중 1회-6.5만 명) ② 출생아 환경설문 조사 실시(총 9차) ③ 보건복지부(건강보험공단) 건강검진자료 연계 추적(7만 명 및 전수) - 출생 및 영유아건강검진(1~7세) 자료 ④ 교육청 학생검진자료 연계 추적 - (초등) 1학년, 4학년 검진자료 - (중등) 1학년 검진자료	① 설문조사 및 생체시료(혈액, 소변) 채취 (생체시료-임신 중 2회) ② 출생 시 제대혈 확보 ③ 영유아, 학동기 이전 주기적 생체시료 채취 - 3세(24개월)부터 7세까지 1회/1년 ④ 초등 2회(1·4학년) 생체시료 채취 ⑤ 중등 1학년 생체시료 채취 ⑥ 고등 1학년 생체시료 채취
환경측정	환경모델링	임신 중 1회, 3세 이전 1회 측정

자료: 환경부(2017), p.13.

코첸스 시료에서 측정되는 유해화학물질의 종류를 살펴보았다(표 5-5 참조). 중금속류, 환경성 페놀류, 프탈레이트 대사체 등 총 19개 물질이 임신 중 수집된 산모의 생체 시료와 제대혈에서

분석된다. 이후 수집되는 시료와 관련해서는 분석 대상 물질 목록과 관련된 정보를 찾아볼 수 없었으나, 과제의 정책적 활용 방안을 고도화하기 위한 연구¹¹³⁾와 자료분석 및 추적 도구를 고도화하기 위한 연구¹¹⁴⁾가 최근까지 수행되었다. 국립환경과학원(2020)에서는 코챌스의 향후 추진 전략 관련 아래와 같은 내용을 언급하였다.

“국립환경과학원에서 독립적으로 진행하고 있는 국민환경보건 기초조사와 연계를 통한 전방위적 물질-사람-지역 조사-감시체계 마련이다. 국민환경보건 기초조사와 코챌스 사업은 사업의 범위, 대상, 그리고 목표가 서로 다르기에 상호 보완적인 역할이 가능하다. 따라서 국민환경보건 기초조사는 가설 제시(hypothesis-generation)의 역할을, 그리고 코챌스는 가설 검증(hypothesis-test)의 역할을 통해 시너지 효과를 가져올 수 있다. 일례로 국민환경보건 기초조사에서 진행한 비표적 물질 스크리닝(non-target screening) 결과 특정 유해물질이 조사대상 어린이 또는 청소년 집단에서 높게 측정된 경우, 코챌스 상세 코호트에서 노출 정도를 세부적으로 확인하거나, 노출에 따른 건강영향을 추정할 수 있다(국립환경과학원, 2020, p.190).”

코챌스에서 원인을 규명하고자 하는 환경성 질환은 다양한 화학물질과 관련되어 있을 가능성이 높고, 실제 노출은 혼합물의 형태이기 때문에 많은 화학물질을 동시에 확인해야 하지만, 코챌스에서 다루고 있는 화학물질의 수는 19종으로 국민환경보건 기초조사(71종)에 비해서 매우 제한적이다. 이러한 한계점은 추후 환경성 질환과 화학물질 노출의 관련성을 밝힐 때 연관성을 제한하는 결과를 가져올 수 있다. 따라서 SNTS를 모니터링 도구로 도입하게 된다면 현재의 한계점을 극복, 코챌스 시료의 활용 방안도 고도화될 것으로 기대된다.

113) 국립환경과학원(2020).

114) 국립환경과학원(2021, 2022c).

표 5-5 코챠스 생체모니터링 물질 목록

매체	종류	화학물질명
혈액	중금속류	납
		수은
		카드뮴
소변	환경성 페놀류	비스페놀 A
		비스페놀 F
		비스페놀 S
		트리클로산
		메틸파라벤
		에틸파라벤
		프로필파라벤
	프탈레이트 대사체	모노(2-에틸-5-하이드록시헥실) 프탈레이트(MEHP)
		모노(2-에틸-5-옥소헥실) 프탈레이트(MEOHP)
		모노(2-에틸-5-카르복시펜틸) 프탈레이트(MECP)
		모노부틸 프탈레이트(MnBP)
		모노벤질 프탈레이트(MBzP)
		모노(카르복시옥틸) 프탈레이트(MCOP)
		모노(카르복시프로필) 프탈레이트(MCPP)
모노(카르복시노닐) 프탈레이트(MCNP)		
환경성 담배연기	코티닌	

자료: 환경부(2017), pp.122-178을 바탕으로 저자 작성.

3) 유해물질 인체노출 안전조사

가) 배경

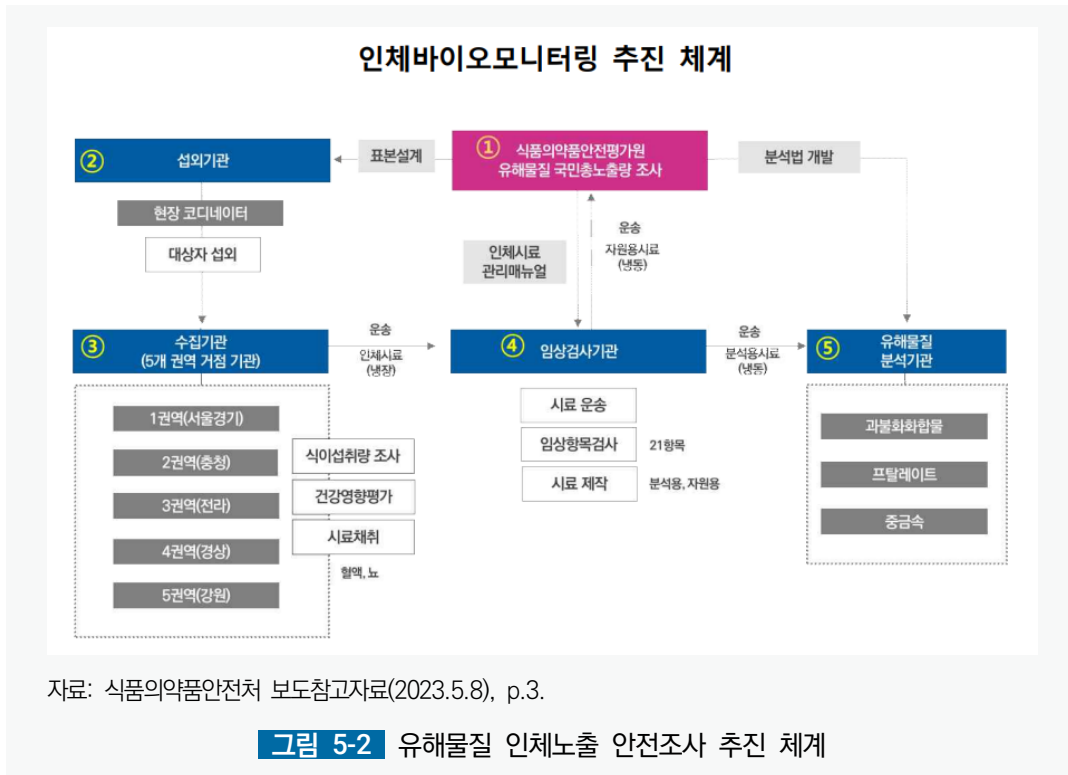
식품의약품안전처 식품의약품안전평가원은 2023년부터 2025년까지 3년간 국민 5,000명을 대상으로 일상생활에서 섭취하거나 사용하는 인체적용제품으로부터 노출될 수 있는 유해물질의 노출수준과 위해성을 평가하는 ‘유해물질 인체노출 안전조사’에 착수하였다.¹¹⁵⁾ 조사의 목적은 유해물질의 총 노출수준과 위해성을 사용자 중심으로 평가하여 유해물질 저감을 위한 정책 추진에 활용하기 위함이다.

나) 조사 체계 및 내용

조사 대상은 3세부터 79세의 국민 5,000명으로, 자치단체, 성, 연령의 표본 배분 기준에 따라 선정된다. 수집되는 시료는 혈액과 소변으로, 유해물질 농도 분석과 혈액 질환, 간기능 등의 24종의 임상검사를 시행한다. 또한 유해물질의 노출원, 노출경로에 대한 심층분석을 위해 조사 대상자의 직업, 연령, 주거환경, 식습관, 화장품 사용 빈도 등의 내용을 포함한

115) 식품의약품안전처 보도참고자료(2023.5.8), p.1.

설문조사를 실시한다. 또한, 이전에 평가가 이루어지지 않았던 프탈레이트 가소제, 과불화 화합물에 대한 인체노출 위해성 평가를 확대 실시하고 조사 결과를 통해 생애주기별 유해물질 통합 위해성 평가를 수행한다. 추진 체계는 <그림 5-2>와 같다.



다) 유해화학물질 모니터링

유해물질 인체노출 안전조사에서는 총 40종의 유해화학물질을 혈액과 소변에서 분석한다. 대상자 중 10세 이상의 국민에게서만 혈액 시료를 수집하고, 이하의 국민에게서는 소변 시료만 수집한다(표 5-6 참조). 대상물질 목록을 참고하였을 때, 국민환경보건 기초조사에 포함되지 않은 분석물질이 다수 포함되어 있어 새로운 유해화학물질의 국민 노출 수준 파악에 유용 하리라 판단된다. 또한 본 조사에서 수행되는 시료는 향후 SNTS를 활용하여 더 많은 유해 물질의 분석을 수행할 수 있으므로 적절한 방식에 따라 저장되어야 하며, 메타데이터도 잘 보관되어야 한다. 본 조사의 취지는 정확한 노출량을 추정하여 위해성을 평가하는 것이지만, 추후 관심대상 화학물질 등을 선정할 때 STNS가 유용하게 활용될 수 있을 것이다.

표 5-6 유해물질 인체노출 안전조사 분석 대상 물질 목록

그룹	물질명		매질	~10세	11~18세	19세~
중금속류	납, 카드뮴, 니켈, 무기비소, 크롬, 알루미늄, 수은		혈액/소변	●/×	●/●	●/●
프탈레이트계 가소제	원물질	대사체	소변	●	●	●
	BBP	MBzP, MnBP				
	DBP	MBP, MiBP, MHBP				
	DEHP	MEHHP, MEHP, MEOHP, 2cx-MMHP, MECPP				
	DEP	MEP				
	DMP	MMP				
	DnOP	MCPP, MnOP, MCHpP				
	DiNP	MiNP, MHNP, MCiNP, MCOP, MONP				
	DiDP	MCNP, MiDP, cx-MiDP, OH-MiDP, oxo-MiDP				
	DiBP	MiBP, MHiBP				
대체 가소제	DEHA	MEHA, 5OH-MEHA, 5oxo-MEHA	소변	●	●	●
	DEHTP	MEHTP, 5cx-MEPTP, 5OH-MEHTP				
	DINCH	MINCH, oxo-MINCH, OH-MINCH, CHDA, cx-MINCH, trans-cx-MINCH				
	TOTM	4-MEHTM, 2-MEHTM, 1-MEHTM, 2,4-DEHTM, 1,2-DEHTM, 1,4-DEHTM				
과불화화합물	PFOA, PFOS, PFHxS, PFDA, PFNA, PFBA, PFPeA, PFHxA, PFHpA, PFUnDA, PFDoDA, PFTrDA, PFTeDA, PFBS, PFHpS, PFDS, FOSA, N-MeFOSAA, N-EtFOSAA, F-53B		혈액	×	●	●

주: ●, ×는 시료 채취 여부를 나타냄.
 자료: 식품의약품안전처 보도참고자료(2023.5.8), p.4.

나. 환경 모니터링

1) 잔류성오염물질 측정망

가) 배경

잔류성오염물질 측정망은 「잔류성오염물질관리법」 제11조에 근거하여 2008년 1월부터 수행되고 있는 모니터링 사업이다(표 5-7 참조). 여기서 잔류성오염물질은 잔류성유기오염물질에 관한 스톡홀름협약 및 수은에 관한 미나마타 협약에서 규정하고 있는 물질을 의미한다. 측정망 사업 수행 목적은 전국의 대기·물·토양·하천퇴적물·생물의 잔류성오염물질 오염실태의 파악이다. 이와 관련, 환경부는 측정망 설치·운영 계획수립 및 평가단 운영 등 측정망 운영을 총괄하며, 국립환경과학원은 잔류성오염물질 측정망 설치, 운영계획의 정도보증 시행지침에 따라 분석자료 검증, 인증표준물질 분석과 교차실험 등의 정도관리를 수행한다. 한국환경공단은 전국의 잔류성오염물질 분포를 측정, 보고서를 작성하고 있다. 측정망의 설치 및 운영과 관련된 상세 내용은 환경부 고시 '잔류성오염물질 측정망 설치·운영계획'에 제시되어 있다.

나) 조사 체계 및 내용

잔류성유기오염물질 측정망에서는 스톡홀름협약 부속서 A, B, C에 규정된 잔류성유기오염물질과 그 밖에 조사가 필요한 잔류성유기오염물질을 분석한다. 측정망은 일반 측정망과 집중 측정망으로 구분되어 일반 측정망의 경우 국가의 전반적인 잔류성유기오염물질 오염실태 및 오염 추세를 파악하며, 집중 측정망의 경우 일반 측정망 운영 결과 특정 물질로 인한 오염이 우려될 때, 물질별 배출특성 및 오염영향 조사가 필요한 경우, 장거리 이동성 평가가 필요한 경우 운영된다.

표 5-7 「잔류성오염물질 관리법」의 잔류성오염물질 측정망 관련 조항

조항	내용
제11조 (측정망의 설치·운영)	<p>① 환경부장관은 전국의 대기·물·토양·하천퇴적물·생물의 잔류성오염물질 오염실태를 파악하기 위하여 잔류성오염물질 측정망(이하 “측정망”이라 한다)을 설치하고 오염도를 측정하여야 한다. <개정 2016.1.27></p> <p>② 시·도지사 및 시장·군수·구청장(자치구의 구청장을 말한다. 이하 같다)은 관할 구역 안의 잔류성오염물질 오염실태를 파악하기 위하여 측정망을 설치하고 오염도를 측정할 수 있다. <개정 2016.1.27></p> <p>③ 환경부장관은 제1항의 규정에 따른 측정망의 위치·구역·측정항목·측정시기 및 측정횟수 등을 구체적으로 밝힌 측정망 설치계획을 수립하여 고시하여야 한다.</p> <p>④ 제3항의 규정은 제2항의 규정에 따라 시·도지사 또는 시장·군수·구청장이 측정망을 설치하는 경우에 관하여 이를 준용한다.</p> <p>⑤ 환경부장관은 제2항의 규정에 따라 시·도지사 또는 시장·군수·구청장이 측정망을 설치·운영하는 경우에는 예산의 범위 안에서 재정적·기술적 지원을 할 수 있다.</p>

자료: 국가법령정보센터, “잔류성오염물질 관리법”.

다) 유해화학물질 모니터링

참조할 수 있는 가장 최근 자료인 2022년 잔류성오염물질 측정망 운영결과 보고서를 살펴보면, 환경대기 38개 지점(연 2회), 토양 61개 지점(연 1회), 수질 및 퇴적물 각 36개 지점(연 1회) 등 전국 171개 지점에 대해 209회의 시료 채취와 분석이 이루어졌다(그림 5-3 참조).¹¹⁶⁾ 총 21종의 잔류성유기오염물질이 분석 대상 물질이었으며, 이 중 7개의 물질은 예비항목으로 신규 스톡홀름협약 등재 예상 물질¹¹⁷⁾을 대상으로 모니터링을 수행하고 있다(표 5-8 참조). 잔류성오염물질 측정망은 우리나라 대부분 지역에서의 다양한 환경 매체를 포괄하고 있어 국가의 전체적인 모니터링을 하기에 매우 적합한 시료이다. 측정망에서는 다양한 잔류성유기오염물질을 분석하고 있으나, 아직 포함되지 않은 신규 유해화학물질이 다수 존재할 가능성이 매우 높아 추정, 비표적 분석을 도입하여 측정해 볼 필요가 있다.

116) 환경부(2023), p.42, p.45, p.49.

117) 예비항목은 스톡홀름협약 등재가 예상되는 물질로 잔류성유기오염물질 중 국내 분포 현황에 대한 사전 조사가 필요한 물질을 뜻한다. PFHxS는 2022년 스톡홀름협약에 등재되었다.

- 대기 측정망
- 토양 측정망
- 수질, 퇴적물 측정망



자료: 환경부(2023), p.42, p.45, p.49.

그림 5-3 잔류성오염물질 측정망 정점도

표 5-8 잔류성오염물질 측정망 측정항목(수는 제외)

구분	대기	토양	수질	퇴적물
지점수	38	61	36	36
조사횟수	연 2회	연 1회	연 1회	연 1회
조사시기	겨울, 여름	봄	봄	봄

조사항목

- **공정부산물(5종)**
다이옥신/퓨란(PCDD/DF) 17종, 다이옥신유사 폴리클로리네이티드비페닐¹⁾(dl-PCBs) 12종, 인디케이터 폴리클로리네이티드비페닐a(indicator-PCBs) 7종, 펜타클로로벤젠 (PeCB),²⁾ 헥사클로로벤젠(HCB)²⁾
- **유기염소계 농약류(5종)**
DDTs(p,p-DDT, DDE, DDD, o,p-DDT, DDE, DDD 6종의 합), 알파-헥사클로로사이클로헥산(α -HCH), 베타-헥사클로로사이클로헥산(β -HCH), 린덴(γ -HCH), 엔도설판(α -Endosulfan, β -Endosulfan, Endosulfan sulfate의 합)
- **산업용물질(4종)**
테트라브로모다이페닐 에터와 펜타브로모다이페닐 에터(Tetra-/Penta-BDEs) 10종, 헥사브로모다이페닐 에터와 헵타브로모다이페닐 에터(Hexa-/Hepta-BDEs) 7종, 과불화옥탄설폰산(PFOS), 과불화옥탄산(PFOA)
- **예비 항목(7종)³⁾**
데카브로모다이페닐 에터(Deca-BDE), 과불화부탄산(PFBA), 과불화헥산산(PFHxA), 과불화노난산(PFNA), 과불화데칸산(PFDA), 과불화부탄설폰산(PFBS), 과불화헥산설폰산(PFHxS)

주: 1) 산업용 물질에도 포함.
 2) 유기염소계 농약류에도 포함.
 3) 스톡홀름협약 신규 등재물질 중 국내 현황조사를 위한 운영기간(3년)이 종료되는 예비항목.
 자료: 환경부(2023), p.34를 참조하여 저자 작성.

2) 해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사

가) 배경

해양수산부에서 수행하는 ‘해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사’ 사업은 해양생태계의 효율적인 관리와 보전을 위한 진단을 하여 정책적 대응전략 수립에 필요한 국가 해양환경 자료 생산을 하는 목적을 지닌 사업이다. 본 사업은 「해양환경관리법」 제39조에 근거하여 수행되며(표 5-9 참조), 상세 내용은 동법 시행규칙 24조에 제시되어 있다(표 5-10 참조). 「해양환경관리법」에 따르면 본 사업은 해양환경공단에서 수행되며, 정점은 해양환경측정망을 활용하도록 제시되어 있다.

표 5-9 「해양환경관리법」의 해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사 관련 조항

조항	내용
제39조 (잔류성오염물질의 조사 등)	<p>① 해양수산부장은 잔류성오염물질의 오염실태 및 진행상황 등에 대하여 해양수산부령으로 정하는 바에 따라 측정·조사하여야 한다. 이 경우 해양수산부장은 그 측정·조사결과 해양환경의 관리에 문제가 있다고 인정되는 경우 해당 잔류성오염물질의 사용금지 및 사용제한 요청 등 해양수산부령으로 정하는 조치를 하여야 한다.</p> <p>② 해양수산부장은 제1항의 규정에 따라 측정·조사를 하는 경우에는 대통령령이 정하는 바에 따라 관계 행정기관에 대하여 필요한 자료의 제출을 요청할 수 있다. 이 경우 관계 행정기관의 장은 특별한 사정이 없는 한 이에 따라야 한다.</p> <p>③ 해양수산부장은 제1항에 따른 측정·조사에 있어 정확성과 통일성을 도모하기 위하여 잔류성오염물질의 공정시험기준을 정하여 고시하여야 한다. 이 경우 고시된 공정시험기준은 제10조에 따른 해양환경공정시험기준으로 본다.</p>

자료: 국가법령정보센터, “해양환경관리법”.

표 5-10 「해양환경관리법 시행규칙」 내 해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사 관련 조항

조항	내용
제24조 (잔류성오염물질의 측정·조사)	<p>① 해양환경공단의 이사장은 법 제39조제1항 전단에 따라 제5조에 따른 해양환경 측정망을 활용하여 매년 잔류성오염물질의 오염도를 측정·조사하여야 한다.</p> <p>② 제1항에 따른 측정·조사의 항목 및 방법, 측정망의 위치·구역, 측정·조사 절차, 그 밖의 필요한 사항은 해양수산부장이 정하여야 한다.</p> <p>③ 해양수산부장은 제1항에 따른 측정·조사결과 다음 각 호의 어느 하나에 해당하는 경우에는 법 제39조제1항 후단에 따라 관계 중앙행정기관의 장 및 지방자치단체의 장과 공동으로 오염저감대책을 수립하거나 배출원 조사를 하여야 하며, 관계 중앙행정기관의 장에게 필요한 조치를 요청할 수 있다.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 잔류성오염물질의 연평균 오염도가 2년 이상 해양수산부장이 정하여 고시하는 해양퇴적물 관리목표를 초과하는 경우 2. 「잔류성유기오염물질 관리법」 제2조제2호에 따른 배출시설의 고장·파손, 그 밖의 사고가 발생하여 잔류성오염물질이 「연안관리법」 제2조제1호에 따른 연안에 배출된 경우 3. 「잔류성유기오염물질 관리법」 제16조에 따른 사용중지명령 및 폐쇄명령이 내려진 배출시설이 법 제15조제1항에 따른 환경관리해역 또는 「연안관리법」 제2조제1호에 따른 연안에 위치하는 경우

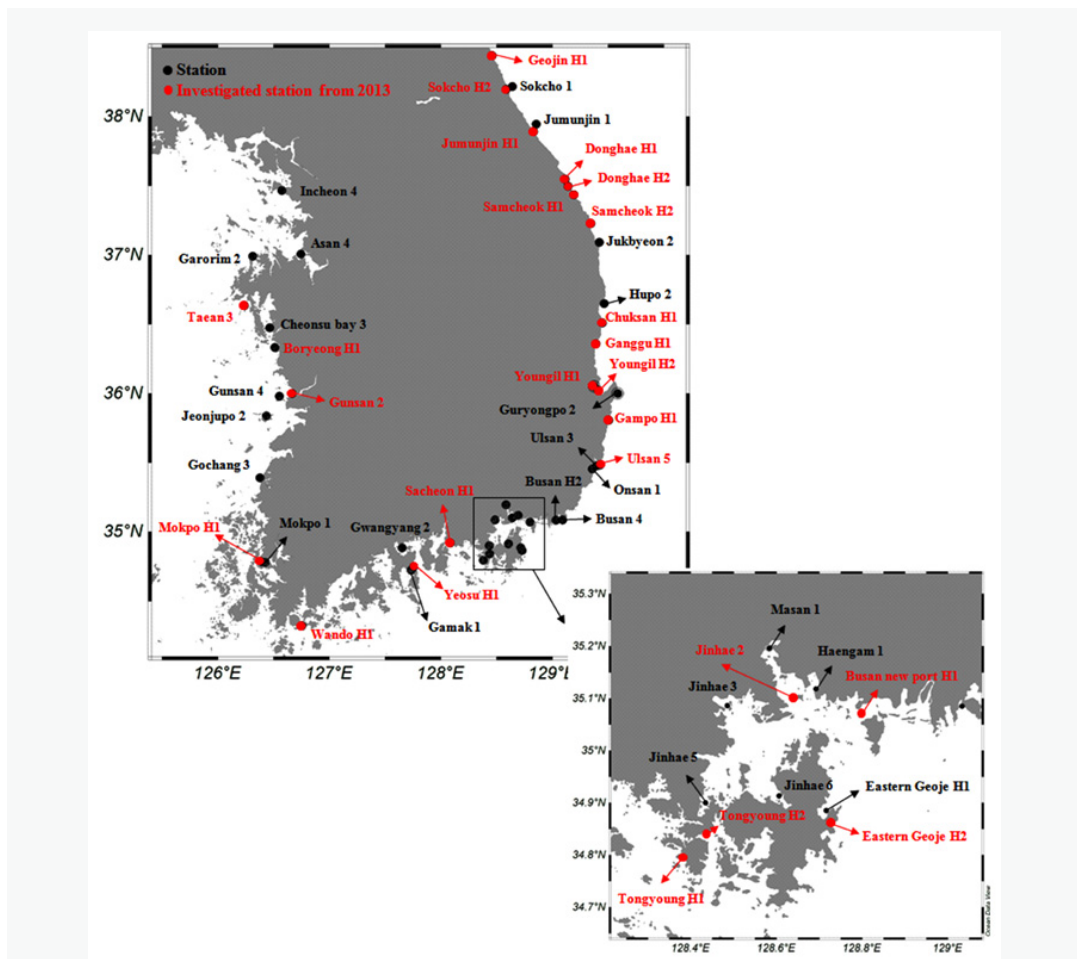
자료: 국가법령정보센터, “해양환경관리법 시행규칙”.

나) 조사 체계 및 내용

해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사는 해양환경측정망 정점을 활용하며, 전국 연안 50개 정점에서 해수, 해저 퇴적물, 해양생물에 대해 연 1회 수행하고 있다.

다) 유해화학물질 모니터링

공식적 자료를 통해 참고할 수 있는 자료를 확인할 수는 없었지만, 원종호 외(2019, p.146)에서는 해수에서는 과불화화합물, 해양생물과 퇴적물에서는 다이옥신/퓨란류를 비롯한 17개 항목에 대해 오염 실태가 조사되고 있다고 명시하였다. 따라서 다수의 잔류성유기오염물질이 모니터링되고 있으며 이를 위해 정기적으로 시료 수집이 이루어짐을 알 수 있다.



자료: 원종호 외(2019), p.145.

그림 5-4 해양생태계 내 잔류성유기오염물질 조사 정점도

3) 물환경측정망

가) 배경

물환경측정망은 하천이나 호소 등의 공공수역 내 수질현황과 추세파악 및 주요 환경정책의 효과 분석과 정책수립을 위한 기초자료를 확보하기 위한 목적으로 운영된다. 법적 근거는 「환경정책기본법」 제22조(표 5-11 참조), 「물환경보전법」 제9조(표 5-12 참조) 및 동법 시행령 제28조(수질 오염경보), 시행규칙 제22조(국립환경과학원장 등이 설치·운영하는 측정망의 종류 등), 제23조(시·도지사 등이 설치·운영하는 측정망의 종류 등), 제24조(측정망 설치계획의 내용·고시 등) 등이다.¹¹⁸⁾

물환경측정망의 종류는 수질 측정망, 총량 측정망, 자동 측정망, 퇴적물 측정망, 방사성물질 측정망, 생물 측정망, 비점오염물질 측정망이 있으며, 이 중 자동 측정망, 방사성물질 측정망, 생물 측정망은 측정 목적을 가지고 이행되거나 SNTS 적용과 관련성이 낮으므로 검토에서 제외하였다.

표 5-11 「환경정책기본법」 내 물환경측정망 관련 조항

조항	내용
제22조 (환경상태의 조사·평가 등)	① 국가 및 지방자치단체는 다음 각 호의 사항을 상시 조사·평가하여야 한다. 1. 자연환경 및 생활환경 현황 2. 환경오염 및 환경훼손 실태 3. 환경오염원 및 환경훼손 요인 4. 기후변화 등 환경의 질 변화 5. 그 밖에 국가환경종합계획 등의 수립·시행에 필요한 사항 ② 국가 및 지방자치단체는 제1항에 따른 조사·평가를 적정하게 시행하기 위한 연구·감사·측정·시험 및 분석체제를 유지하여야 한다. ③ 제1항에 따른 조사·평가와 제2항에 따른 연구·감사·측정·시험 및 분석체제에 필요한 사항은 대통령령으로 정한다.

자료: 국가법령정보센터, “환경정책기본법”.

표 5-12 「물환경보전법」 내 물환경측정망 관련 조항

조항	내용
제9조 (수질의 상시측정 등)	① 환경부장관은 하천·호소, 그 밖에 환경부령으로 정하는 공공수역(이하 “하천·호소등”이라 한다)의 전국적인 수질 현황을 파악하기 위하여 측정망(測定網)을 설치하여 수질오염도(水質汚染度)를 상시측정하여야 하며, 수질오염물질의 지정 및 수질의 관리 등을 위한 조사를 전국적으로 하여야 한다. ③ 시·도지사, 「지방자치법」 제198조에 따른 인구 50만 이상 대도시(이하 “대도시”라 한다)의 장 또는 수면관리자는 관할구역의 수질 현황을 파악하기 위하여 측정망을 설치하여 수질오염도를 상시측정하거나, 수질의 관리를 위한 조사를 할 수 있다. 이 경우 그 상시측정 또는 조사 결과를 환경부장관에게 보고하여야 한다. ④ 제1항 및 제3항에 따른 상시측정, 조사 및 보고에 필요한 사항은 환경부령으로 정한다.

자료: 국가법령정보센터, “물환경보전법”.

118) 환경부(2024), p.3.

표 5-13 물환경측정망 측정 주기 및 조사항목(일부)

구분		주기	조사항목	
수질 측정망	일반 지점	하천/도시관류	4회/연 분기별 Cd, CN, Pb, Cr ⁶⁺ , As, Hg, Sb, ABS	
		산단 하천	12회/연(매월)	Cd, CN, Pb, Cr ⁶⁺ , As, Hg, Cu, Zn, Cr, Ni, Ba, Se, F, Sb, ABS, 색도, 총질소, 총인, 페놀류, 노말핵산추출물질, 용해성 망간, 용해성 철, 총 대장균군수
			1회/연(11월)	TCE, PCE, 사염화탄소, 1,2-디클로로에탄, 디클로로메탄, 벤젠, 클로로포름, 1,4-다이옥세인
			1회/연(7월)	PCB, 유기인
			1회/연(10월)	디에틸헥실프탈레이트(DEHP)
		호소	4회/연 분기별 Cd, CN, Pb, Cr ⁶⁺ , As, Hg, Sb, ABS	
	농업 용수	1회/연 Cd, CN, Pb, Cr ⁶⁺ , As, Hg, Cu, Cl-		
	중권역 대표 지점	하천	4회/연 분기별	Cd, CN, Pb, Cr ⁶⁺ , As, Hg, Sb, ABS
			2회/연(3월, 9월)	TCE, PCE, 사염화탄소, 1,2-디클로로에탄, 디클로로메탄, 벤젠, 클로로포름, 1,4-다이옥세인, 포름알데히드, 헥사클로로벤젠
			1회/연(7월)	PCB, 유기인
			1회/연(10월)	디에틸헥실프탈레이트(DEHP)
		호소	4회/연 분기별 Cd, CN, Pb, Cr ⁶⁺ , As, Hg, Sb, ABS	
	주요 지점	하천, 호소	12회/연(매월) ¹⁾ 4회/연(분기별) ²⁾	Cd, CN, Pb, Cr ⁶⁺ , As, Hg, Sb, ABS
			2회/연(3월, 9월) ¹⁾²⁾	TCE, PCE, 사염화탄소, 1,2-디클로로에탄, 디클로로메탄, 벤젠, 클로로포름, 1,4-다이옥세인, 포름알데히드, 헥사클로로벤젠
			1회/연(7월) ¹⁾²⁾	PCB, 유기인
		보 구간	12회/연(매월)	Cd, CN, Pb, Cr ⁶⁺ , As, Hg, Sb, ABS
퇴적물 측정망	하천	1회/반기(상반기: 3~6월, 하반기: 9~11월)	Pb, Zn, Cu, Cr, Ni, As, Cd, Hg, Al, Li	
	호소/보	1회/반기(상반기: 3~6월)	퇴적물 하천 조사항목 외에 투명도, PCBs(10동족체), PAHs(16종), DDTs(6종), VOCs(12종)	

주: 1) 하천.

2) 호소: PAHs(다환방향족탄화수소); VOC(휘발성유기화합물).

자료: 환경부(2024), pp.14-17을 바탕으로 저자 작성.

4) 먹는물 수질감시항목 운영

가) 배경

먹는물 수질감시항목은 「수도법」 제26조의 제4항(표 5-14 참조)에 따라 수도를 통하여 음용을 목적으로 공급되는 물에는 건강에 해로운 영향을 미칠 수 있는 물질이 포함되지 않아야 한다는 것에 근거한다. 동법 제4항 제2조에 따르면 환경부 장관은 수질기준 설정을 위하여 원수·정수 중 미량유해물질 등 감시가 필요한 항목을 먹는물 감시항목으로 지정할 수 있다고 명시되어 있다.

표 5-14 「수도법」 내 먹는물 수질기준 관련 조항

조항	내용
제26조 (수질기준)	<p>① 수도를 통하여 음용을 목적으로 공급되는 물에는 다음 각 호의 어느 하나에 해당하는 물질이 포함되어서는 아니 된다. <개정 2020.5.26></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 병원성 미생물에 오염되었거나 오염될 우려가 있는 물질 2. 건강에 해로운 영향을 미칠 수 있는 무기물질 또는 유기물질 3. 심미적(審美的) 영향을 미칠 수 있는 물질 4. 그 밖에 건강에 해로운 영향을 미칠 수 있는 물질 <p>② 제1항에 따른 수질기준에 관하여 필요한 사항은 환경부령으로 정한다.</p> <p>③ 환경부장관은 제2항의 수질기준의 설정 등을 위하여 원수·정수 중의 미량(微量) 유해물질 등 감시가 필요한 항목을 먹는물 감시항목으로 지정할 수 있다. 이 경우 먹는물 감시항목의 지정대상·지정절차, 먹는물 감시항목별 감시기준 및 검사 주기 등에 관한 세부 사항은 환경부장관이 정하여 고시한다. <신설 2013.12.30></p>

자료: 국가법령정보센터, “수도법”.

나) 조사 체계 및 내용

‘먹는물 수질감시항목 운영 등에 관한 고시’에 따르면 국립환경과학원은 상수원수, 정수, 샘물, 먹는샘물, 염지하수, 먹는염지하수에서 미량유해물질 함유실태 조사결과와 국내·외에서 문제가 제기되는 물질에 대한 검출 빈도 및 위해도를 검토하고, 지속적으로 감시가 필요한 물질을 감시항목으로 지정하도록 환경부 장관에 요청하여야 한다. 또한 감시항목 지정을 환경부장관에게 요청하는 때에는 감시예정물질의 검출빈도·검출농도·검사주기·감시기준·검사 대상·시행시기와 함께 그 물질에 대한 WHO 및 미국 등 선진국의 수질기준 등이 포함되어야 한다. ‘먹는물 수질감시항목 운영 등에 관한 고시’의 [별표 1]에 따르면 물질에 따라 검사 주기가 다르기는 하나 분기별 1회(3, 6, 9, 12월) 또는 연 1회(7월부터 9월 기간 중)로 모니터링을 수행하고 있다. 상수원수, 정수, 먹는샘물에 대한 수질감시항목이 운영되고 있는데, 이 중에서 정수에 관해서는 유해영향 유기물질 모니터링을 수행하고 있으며 검사 대상은 시설용량 50,000톤/일인 정수장이다. 하지만 고시 제5조에 따라 국립환경과학원장은 감시기준에 대해 3년마다 국제적 추세 및 현실여건의 변화를 검토하여 재설정 조치가 필요할 시 환경부 장관에게 보고하여야 한다.

다) 유해화학물질 모니터링

‘먹는물 수질감시항목 운영 등에 관한 고시’의 [별표 1]에 제시된 매체 중, 유해영향유기물질은 정수에서 모니터링된다. 총 17종이 포함되어 있으며(표 5-15 참조), 모니터링의 결과로 수질기준이 설정된다. 앞서 보고서 제4장에서 검토된 국내 SNTS 연구 중 수돗물 중 미규제 미량유해물질 관리방안 연구에서는 현재 6단계 사업(2022-2026년)을 추진 중이며 유해물질

68항목의 조사와 더불어 미규제 유해화학물질의 효과적 모니터링을 위해 SNTS를 적용하였다.

2024년 11월 개최된 2024 서울워터심포지엄에서 배포된 발표 자료¹¹⁹⁾에 따르면, 먹는물 내 유해물질 관리와 관련하여 향후 과불화화합물 관리와 신종유해물질 탐색기법 개선 연구가 수행될 것으로 명시되어 있으며, 이는 먹는물 수질감시를 위한 SNTS 기법의 적극적인 활용 가능성이 있다고 판단된다.

표 5-15 먹는물 수질감시항목 운영 등에 관한 고시, [별표 1] 중 유해영향 유기물질 목록

(단위: $\mu\text{g/L}$)

항 목	구 분	한국 감시 기준	국외 기준/권고기준				검사주기				시행 연도	
			WHO	미국	일본	호주	1회 /월	1회 /분기	1회 /반기	1회 /연		
계	31 항목											
유해 영향 유기 물질	Vinyl Chloride	2	0.3	2	2 ¹⁾	0.3				●	1998	
	Styrene	20	20	100	20 ¹⁾	30				●	1998	
	Chloroethane	미설정	-	-	-	-		●			2001	
	Bromoform	100	100	80 ⁴⁾	90	-		●			2011	
	Chlorophenol	200	-	-	-	300				●	1998	
	2,4-Dichlorophenol	150	-	-	-	200				●	1998	
	Pentachlorophenol	9	9	1	-	10				●	1998	
	2,4,6-Trichlorophenol	15	200	-	-	20				●	1998	
	Di-2(ethylhexyl)phthalate	80	8	6	100 ²⁾	10				●	2002	
	Di-2(ethylhexyl)adipate	400	-	400	-	-				●	2002	
	Benzo(a)pyrene	0.7	0.7	0.2	-	0.01				●	1998	
	Microcystin-LR	1	1	-	0.8 ¹⁾	1.3 ³⁾	1회/반기~3회/주					2013
	2,4-D	30	30	70	-	30				●	1998	
	Alachlor	20	20	2	-	-				●	1998	
	PFOS(Perfluorooctane sulfonate)	0.07 (개별, 합계)	-	0.07 ^f (개별, 합계)	- ¹⁾	0.07 ^f		●				2018
	PFOA(Perfluorooctanoic acid)		-	합계)	- ¹⁾	0.56 ^f		●				2018
	PFHxS(Perfluorohexane sulfonic acid)	0.48	-	-	-	0.07 ^f		●				2018

주: 1) 요 검토향목.

2) 수질관리목표설정항목.

3) Microcystins(총량).

4) THMs(chloroform, bromodichloromethane, dibromochloromethane, bromoform 합).

5) 건강권고치.

자료: 국가법령정보센터, “먹는물 수질감시항목 운영 등에 관한 고시”, [별표 1].

119) 최인철(2024), p.15.

다. 국가환경시료은행

1) 설립배경 및 목적

국가환경시료은행은 국립환경과학원이 구축한 환경 시료 저장소로 2009년 준공되었다. 국가환경시료은행의 설치 근거는 「환경정책기본법」 제22조의 2에 명시되어 있으며(표 5-16 참조), 설치 및 운영과 관련된 상세 내용은 「환경정책기본법 시행령」 제10조의 2에 명시되어 있다(표 5-17 참조). 국가환경시료은행의 설립 목적은 과거와 현재의 환경시료를 대상으로 추이를 분석하여 미래의 오염 경향을 예측할 수 있는 기반을 제공하는 것이다. 따라서 관련 시료의 확보, 저장, 활용과 관련된 연구, 기술 개발 사업 등을 수행하고 있다.

국가환경시료은행에서는 환경시료의 범위를 「환경정책기본법 시행령」에 제시된 4개의 법률 「환경정책기본법」, 「잔류성물질법」, 「환경보건법」, 「가습기살균제피해구제법」에서 확보하는 생물, 대기, 물, 토양, 퇴적물 또는 인체유래물로 정하였다(그림 5-6 참조).¹²⁰⁾ 국가환경시료은행 운영규정 개정(안)에 따르면 환경시료은행은 오염시료를 오염상태 모니터링 및 평가 등의 목적으로 분양하고 있다(표 5-18 참조).

이후 국가 유해화학물질 모니터링을 통해 지속적으로 수집되는 인체 시료 보관의 필요성에 따라 국가환경보건시료은행이 증축되었다. 국가환경보건시료은행은 국립환경과학원이 구축한 인체 유래물 시료 연구시설로, 약 250만 점의 생체시료를 초저온 상태로 보관할 수 있는 시료 저장실이 설치되어 있어, 체내 유해물질 노출확인 및 건강영향 규명 등의 목적으로 수집된 인체유래물 시료, 혈액, 소변이 통합 관리되도록 한다. 예를 들어, 국민환경보건 기초 조사와 어린이환경보건 출생코호트 사업을 통해 약 10만 명으로부터 수집된 100만여 점의 시료가 국가환경보건시료은행을 통해 체계적으로 저장된다. 이를 통해 시료가 환경보건 연구에 활용될 수 있도록 한다.¹²¹⁾ 국가환경보건시료은행은 국립환경과학원 국가환경보건시료은행 운영규정¹²²⁾에 따라 운영된다. 송상환 외(2023)에서는 장기간 저장된 조사 참여자의 생체시료 분석을 통해 과거에 파악하기 어려웠거나 최근 이슈가 되는 환경유해인자의 노출평가가 가능해질 것이라고 언급하였다. 하지만, 현재의 한계점은 환경보건시료은행에 축적된 정보가 연구자에게 제공될 때, 이를 위한 연구윤리 검토와 개인정보 보호 대책이 마련되어있지 않다는 것으로, 더 나은 분석기술 도입을 통한 잠재적 건강영향 유해물질 파악을 위하여 향후 방안이 마련되어야 할 것이다.

120) 환경부 보도자료(2023.7.3), p.3.

121) 환경부 보도자료(2023.3.27), pp.1-5.

122) 국가법령정보센터, “국립환경과학원 국가환경보건시료은행 운영규정”, 검색일: 2024.6.17.

표 5-16 「환경정책기본법」의 국가환경시료은행 관련 조항

조항	내용
제22조의2 (국가환경시료 은행의 설치·운영 등)	<p>① 환경부장관은 환경오염과 환경훼손의 상태를 조사·평가하기 위하여 대통령령으로 정하는 시료(이하 “환경시료”라 한다)를 확보·저장·활용할 수 있다.</p> <p>② 환경부장관은 환경시료의 확보·저장·활용 등을 위하여 환경부에 국가환경시료은행(이하 “환경시료은행”이라 한다)을 둘 수 있다.</p> <p>③ 환경시료은행은 다음 각 호의 업무를 수행한다.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 환경시료의 확보·저장·활용 2. 환경시료 정보시스템 구축 및 운영 3. 환경시료의 안정적 저장 및 관리에 필요한 기술지원 및 인력양성 4. 국내외 환경시료 관련 기관과의 협력 5. 그 밖에 환경시료의 확보·저장·활용을 증진하기 위하여 대통령령으로 정하는 사업 <p>④ 그 밖에 환경시료은행의 설치·운영 등에 관하여 필요한 사항은 대통령령으로 정한다.</p>

자료: 국가법령정보센터, “환경정책기본법”.

표 5-17 「환경정책기본법 시행령」의 국가환경시료은행 관련 조항



조항	내용
제10조의2 (국가환경시료 은행의 설치·운영 등)	<p>① 법 제22조의2제1항에서 “대통령령으로 정하는 시료”란 다음 각 호의 목적으로 수집 또는 채취하는 생물, 대기, 물, 토양, 퇴적물 또는 인체조직·세포·혈액·체액 등의 인체유래물을 말한다.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 법 제22조제1항 각 호의 사항에 대한 상시 조사·평가 및 같은 조 제2항에 따른 연구·감시·측정·시험 및 분석체제 유지 2. 「잔류성오염물질 관리법」 제11조에 따른 잔류성오염물질 오염도 측정 3. 「환경보건법」 제14조에 따른 국민환경보건에 관한 기초조사 4. 「환경보건법」 제15조 또는 제17조에 따른 환경유해인자가 건강에 미치는 영향에 대한 조사·평가 5. 「가습기살균제 피해구제를 위한 특별법」 제40조제4항제1호에 따른 가습기살균제 피해자 등에 대한 건강모니터링 및 같은 항 제3호에 따른 가습기살균제와 독성 화학물질이 건강에 미치는 영향에 대한 조사·연구 6. 그 밖에 환경부장관이 필요하다고 인정하여 고시하는 사항 <p>② 법 제22조의2제3항제5호에서 “대통령령으로 정하는 사업”이란 다음 각 호의 사업을 말한다.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 법 제22조의2제1항에 따른 시료(이하 “환경시료”라 한다)의 확보·저장·활용 관련 연구 및 기술개발사업 2. 환경시료를 활용하는 연구기관간의 협력 기반 조성 지원사업 3. 환경시료에 대한 분석·평가 결과 및 관련 정보의 제공사업 4. 그 밖에 환경시료의 확보·저장·활용을 증진하기 위하여 환경부장관이 필요하다고 인정하는 사업 <p>③ 환경부장관은 법 제22조의2제2항에 따른 국가환경시료은행(이하 “환경시료은행”이라 한다)을 국립환경과학원에 둔다.</p>

자료: 국가법령정보센터, “환경정책기본법 시행령”.

<동식물 시료 저장(예시)>

원 시료		분쇄시료
수목	조류 알, 잉어 살, 이매패류 연체	
 대형 (3.5 L) (재질-스텐레스)	 소형 (200 mL) (재질-스텐레스)	 바이알 (20 mL) (재질-유리)
	갯이갈매기 집비둘기 잉어 홍합	

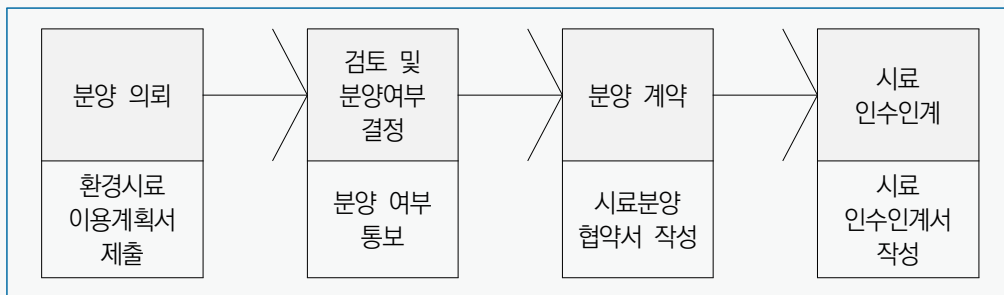
<인체 시료 저장(예시)>

전혈·혈청 시료	소변 시료
 ·바이알(1 mL)	 ·코니컬 튜브(10 mL) ·바이알 (1 mL)

자료: 환경부 보도자료(2023.7.3), p.5.

그림 5-6 국가환경시료은행 환경, 인체시료 저장 예시

표 5-18 국가환경시료은행 환경시료 분양 절차



자료: 국가법령정보센터, “국립환경과학원 국가환경시료은행 운영규정 개정(안)”, 검색일: 2024.8.12.

2) 저장 시료의 추정, 비표적 분석 활용

국가환경시료은행, 국가환경보건시료은행에 저장된 시료는 환경오염 예방 및 저감 대책 마련에 활용되며, 예를 들어 유해화학물질의 과거 환경 중 오염도 파악과 인체 건강 영향에 대한 장기 추적조사에 활용될 수 있다. 또한 신규 규제 유해화학물질(예: 잔류성유기오염물질)에 대한 과거 미규제 시기의 환경오염 실태를 저장 시료를 통해 파악하고, 규제 정책의 효과성을 평가할 수 있다. 또한 환경오염 노출과 건강 영향에 대한 장기적 추적조사에 활용될 수 있다.¹²³⁾

이외에도 선진국에서 활용된 시료은행의 활용 사례를 참고하면, 급작스런 환경 사고 시, 시료를 수집하여 향후 환경 정화 작업의 평가나 오염 원인, 피해상황을 밝히기 위해 활용하거나(환경 오염사고 모니터링), 표준환경시료의 제작에도 활용될 수 있다.¹²⁴⁾ 이렇게 저장되어 온 시료는 당시의 환경 오염 현황을 잘 반영하므로, SNTS를 이용한 회고분석 등에 활용될 수 있다.

123) 환경부 보도자료(2023.7.3), p.7.

124) 이종천, 김명진(2012), pp.160-180.

제 6 장

추정·비표적 분석 정책적 활용 기반 구축을 위한 동향 분석

1. SNTS 정책적 활용 기반 구축을 위한 동향 분석
2. 국내 SNTS 기술 발전 현황 파악
3. SNTS 표준 가이드라인 개발
4. SNTS 확인 물질의 신뢰도에 따른 정책 결정
5. 추정적 정량(Semi-quantification) 기법
6. 추정 분석 목록 및 HRMS 데이터베이스 구축
7. 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입 사례
8. 기타 NTS 활용 사례
9. 시사점

1. SNTS 정책적 활용 기반 구축을 위한 동향 분석

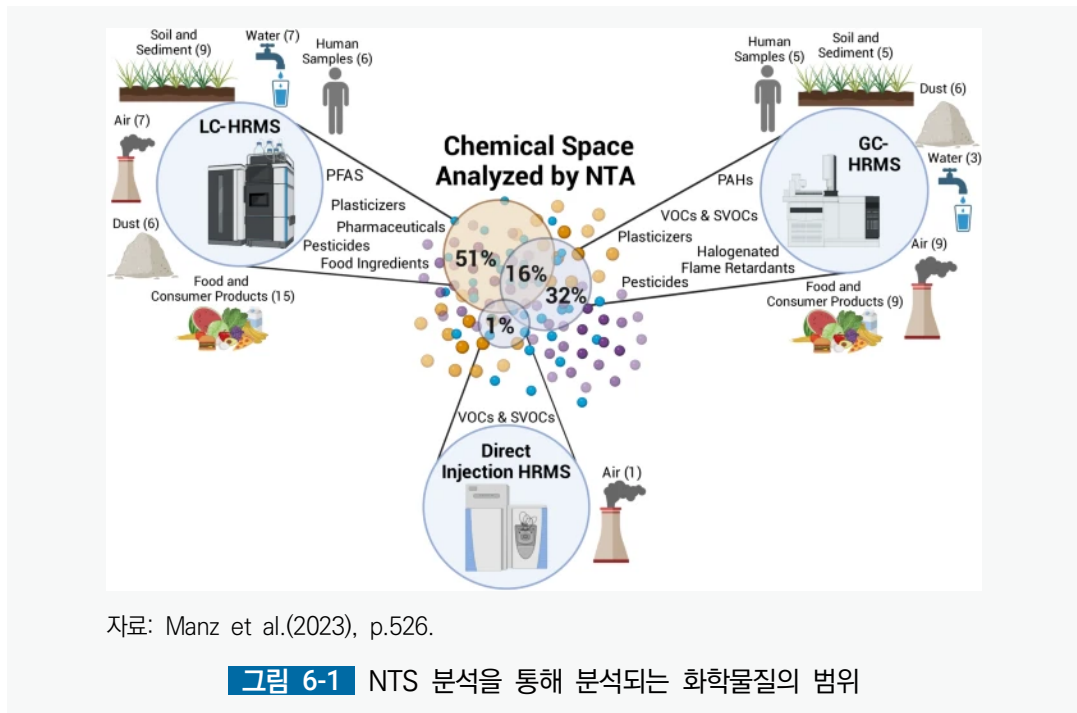
SNTS의 국내 유해화학물질 체계 도입을 위해서는 국내 SNTS 기술 발전 현황, SNTS 도입을 위해 선행되어야 하는 업무 등 다양한 요소에 관한 고려가 필요하다. 제6장에서는 유해화학물질 체계 내 SNTS 도입을 위해 고려되거나 구축되어야 하는 사항을 정리하고 국내외 동향을 파악하였다.

2. 국내 SNTS 기술 발전 현황 파악

국내 유해화학물질 모니터링 체계에 SNTS를 도입하기 위해서 첫 번째로 수행되어야 할 것은 국내 SNTS 기술적 발전 수준을 파악하는 것이다. SNTS는 고성능의 기기 활용 및 분석 기술과 복잡한 데이터 처리 절차가 요구되므로, 모니터링 체계 도입 초기에는 SNTS 연구 경험이 있는 연구자의 참여와 결과 분석 및 활용에 대한 전문가의 참여가 필수적이기 때문이다.

국내 자료 분석에 앞서 전 세계에서 현재까지 발표된 SNTS 연구의 기술적 발전 정도 및 활용 내용을 요약하여 살펴보았다.¹²⁵⁾ 문헌에서 조사된 총 76개의 연구 중 약 51%는

LC-HRMS로 분석을 수행하였고, 32% 정도는 GC-HRMS를 활용하였으며, 약 16%는 두 기기를 모두 사용하였다. 검토된 대부분의 연구에서 추정 분석을 비표적 분석보다 많이 수행하였다. LC-HRMS로 수행된 연구에서는 21개의 논문이 추정 분석을, 15개의 논문이 비표적 분석을 수행하였고, 15개는 추정·비표적 분석기법을 모두 사용하였다. 추정·비표적 분석기법을 모두 사용한 연구는 데이터 분석을 위해 기기회사인 Thermo에서 제공하는 Compound Discoverer를 주로 활용하였고, 기타 연구들도 기기회사에서 제공하는 소프트웨어(예: Agilent MassHunter)를 활용하여 데이터 분석을 수행하였다. 7개의 연구는 오픈소스 소프트웨어를 활용하였다. 이를 통해 SNTS가 전 세계적으로 환경, 인체, 식품, 먼지 시료 등 다양한 매체에 적용되어 왔음을 확인하였으며, 활용하는 기기의 종류에 따라 분석되는 물질 또는 물질 그룹이 달라지기 때문에, 사전에 특정하는 매체와 화학물질의 특성을 고려하여 기기 선정이 필요하다는 것이 확인되었다(그림 6-1 참조).



국내 기술 발전 현황을 살펴보기 위해 보고서 제4장에서 검토되었던 국내 수행 SNTS 과제를 기술 측면에서 검토하였다(표 6-1 참조). 현재까지 우리나라에서는 2018년부터 국립환경과학원을 포함한 다수의 연구팀이 환경 매체와 인체에서 신규 유해물질 발견을 위한 SNTS를 적용해 온 바가 있고, 보고서 작성 시점에도 배출 포렌식(예: 해양산업시설 배출 HNS¹²⁶) 비표적 스크리닝 과제) 등 SNTS의 기타 응용 연구가 활발히 수행되고 있다.

125) Manz et al.(2023).

126) Hazardous and Noxious Substances(HNS).

목록화된 과제 중에서 상세한 기기 및 데이터 처리 정보를 확인할 수 있는 과제 11개를 추려 활용된 SNTS 기법을 검토하였다. 총 8개의 과제가 LC 기반의 Orbitrap 또는 TOF를 활용하였고, 그중 3개의 과제는 LC-HRMS와 GC-HRMS를 모두 적용하였다. 2개의 과제는 GC-HRMS로 분석하거나 GC×GC-TOF-MS를 활용하였다. 데이터 분석은 확인된 모든 과제에서 기기회사에서 제공하는 소프트웨어(예: TraceFinder, Mass Profiler Professional, Compound Discoverer 등)를 통해 수행되었다. 추정 분석은 과제 대부분에서 수행되었고, 일부에서는 비표적 분석도 함께 수행되었다. 물질 확인을 위한 라이브러리는, 분석되는 매체와 관심 물질에 따라 과제 내에서 직접 작성한 사례, NIST와 같은 상업용 라이브러리 활용과 함께 실험실 내에서 직접 구축한 in house 라이브러리를 활용한 사례가 있었다. SNTS가 적용되었던 매체는 환경 시료(대기, 정수장 원수, 강, 하천, 퇴적물), 인체 시료 및 화학제품까지 매우 다양했다.

수행되었던 과제의 결과 활용에 대해 검토하였다. 대부분 과제에서 당시 모니터링되고 있지 않지만, 모니터링이 필요한 신규 물질을 목록화하였고, 확인된 물질 중 일부를 상세 검토 물질로 제안하였다. 특히 주목할 만한 결과로는 ‘국가 환경보건 바이오뱅크 구축 및 운영 로드맵 마련’ 과제에서 국민환경기초조사에서 수집된 혈청과 소변 시료를 풀링하여 SNTS를 적용한 연구로, 혈액 시료에서 유기인계 물질, 계면활성제 등을 확인되었고, 소변 시료에서 기초조사 모니터링 대상 물질이 아닌 물질을 18개 확인, 우선순위 검토 대상 물질을 선정할 사례가 있었다.

국내 SNTS의 활용은 모니터링 대상 물질의 확대로 국한되는 것이 아니라, 현재 가장 주목받고 있는 유해화학물질 그룹인 과불화화합물의 환경 중 거동 파악, 수산물 SNTS 적용을 통한 섭취를 통한 노출 물질 평가, 독성혼합물질 독성기반 물질 탐색, 미세먼지 오염원 추적, 바이오마커 탐색 등 매우 다양한 분야에 적용되었다(제4장 참조).

이처럼 여러 선행연구를 통해 우리나라의 SNTS 연구의 경험이 축적되고 있고, 광범위한 응용 분야로 확장되고 있음을 확인할 수 있다. 특히 국가 유해화학물질 모니터링(국민환경보건 기초조사, 잔류성 오염물질 측정망, 물환경 측정망 등)을 수행하는 국립환경과학원에서도 고분해능질량분석기를 보유하고 있고, 이를 활용하기 위한 SNTS 과제 수행 경험이 있음이 확인되었다. 기존 수행된 과제의 검토를 통해 전문가와의 충분한 논의를 기반으로 SNTS의 활용성을 높이는 논의를 진행할 수 있을 것으로 판단되었다.

표 6-1 국내 추정·비표적 분석 수행 과제 활용 기기 및 데이터 분석 기법

구분	과제명	수행기관	활용 기기	데이터 분석	라이브러리	적용 매체
1	고분해능 질량분석기를 활용한 미지오염물질 다중검색기법 연구	국립환경과학원	LC-Orbitrap-MS Thermo (Q ExactivePlus)	Xcaliber, TraceFinder 4.1	in house (1,527개 물질)	대기, 정수장 원수
2	신규·미지 유해화학물질 분석을 위한 LC-HRMS 기반 추정 및 비표적 분석기법 개발	창원대학교	LC-HRMS (기기명 부재)	-	과제에서 새로 구축	하수처리장 방류수, 강, 하천, 제방
3	표적/비표적 분석기법 활용 미확인(Unknown) 미량오염물질 측정 및 분석 기술 개발	광주과학기술원	LC-Orbitrap-MS Thermo (Q ExactivePlus)	Compound Discoverer 2.0(추정), enviMass v4.3.(비표적)	inclusion list 작성	상수, 하천수, 방류수
4	내분비계장애물질(EDCs) 통합 위해성평가 및 모델 개발	서울대학교/서울과학기술대학교	GC-QTOF-MS (기기명 부재)	Deconvolution	in house, NIST	인체 시료(조직)
6	미관리 수질오염물질 탐색체계 구축	창원대학교	GC-QTOF-MS Agilent(7200B)	-	-	강물, 퇴적물
			LC-Orbitrap-MS Thermo (Q ExactivePlus),	-	-	
8	수돗물 중 미규제 미량유해물질 관리방안 연구	국립환경과학원	LC-Orbitrap-MS (기기명 부재)	TraceFinder	-	하천수
9	국가 환경보건 바이오뱅크 구축 및 운영 로드맵 마련	서울대학교	GC-QTOF-MS Agilent(7200B)	Deconvolution+Mass Profiler Professional	in house, NIST	인체(혈청)
			LC-TOF-MS Waters (SYNAPT G2)	UNIFI®(추정), Progenesis Q1®, EZinfo® 2.0(비표적)	Exposome-Explorer, Toxin and Toxin Target, 미국·캐나다·한국 국가 바이오모니터링 사업 대상 물질, 내분비계 장애물질 대체제 (1,958개 물질)	인체(소변)

표 6-1의 계속

구분	과제명	수행기관	활용 기기	데이터 분석	라이브리리	적용 매체
12	수산물 중 신규 위해요소 시험법 개발 및 잔류실태 조사	한양대학교 /창원대학교	GC-QTOF-MS Agilent(7200B) LC-Orbitrap-MS Thermo (Q ExactivePlus)	Deconvolution -	in house, NIST 잔류허용기준이 설정되어 있는 농약 및 동물용 의약품, 일본에서 관리하는 농약 및 동물용 의약품, 기존 수행 수산물 위해요소 검출 자료(800여 종)	어류
14	최고분해능질량분석법을 응용한 추정/비표적 분석 및 미지 독성 혼합물질 분석기술 개발	경북대학교	UPLC-FTICR-MS. 2D-LC-cyclic ion-mobility mass spectrometer	자체개발 소프트웨어 (EDA 워크플로 GUI)	PubChem, Ecotox, ECHA, MSDS, OASIS, ECETOX, Japan MoE, EFSA 등 (약 8,000종)	생활화학제품
19	미세먼지 오염원 추적에 위한 비표적 잔류성유기오염물질의 환경수사기법 개발	UNIST	GC×GC-TOF-MS (7기법 부재)	ChromaTOF	NIST	대기
26	수질자동측정기법 개발 및 개선연구 -LC/HRMS를 이용한 낙동강 중류 유기화합물질 온라인 분석법 개발(I)	국립환경 과학원	LC-Orbitrap-MS Thermo (Q ExactivePlus)	Compound Discoverer 2.1	-	하천수

주: 제4장의 <표 4-1>에 제시된 구분에 따라 번호를 붙였음.
자료: 저자 작성.

3. SNTS 표준 가이드라인 개발

SNTS를 정책적인 용도로 활용하기 위해서는 일관성 있는 분석 과정을 통해 결과를 얻어야 하며, 이를 위해서는 분석법 표준화 작업이 필수적이다. SNTS의 표준화는 SNTS를 응용 및 활용하고자 하는 연구자 집단(예: NORMAN, US EPA 등)에서 끊임없이 논의되어 온 주제이다. NORMAN은 DSFP를 활용하여 결과를 통일성 있게 공유하고자 하였고, US EPA 또한 SRT, NTA Web-app 등을 통해 결과 공유를 통일성 있게 활용할 수 있는 방안을 논의하였다(제3장 참조). 현재까지 독일, 네덜란드, NORMAN 네트워크에서 SNTS 가이드라인을 발간하였고, 국내 가이드라인 개발에 참고하기 위해 각 가이드라인의 주요 내용을 살펴보았다.

가. 독일의 물 분석용 NTS 가이드라인

독일의 Water Chemistry Society의 비표적 분석 전문가 위원회가 2019년 발간한 ‘물 분석에서 LC-ESI-HRMS를 이용한 NTS의 활용’¹²⁷⁾ 가이드라인은 NTS 측정 기술, 분석, 데이터 해석에 필요한 전제 조건과 요구사항을 정의한다. 따라서 가이드라인은 NTS 분석 시, 참고할 수 있는 여러 자료를 제공하며, 가이드라인의 목적은 <표 6-2>와 같이 구성된다. 특히 SNTS에서 중요한 부분 중 하나인 기기 선택에 있어 분해능의 기준, 질량 측정 정확도의 기준 등을 제시함으로써, 활용 기기 선택 및 기준 설정에 도움을 줄 수 있다.

앞서 강조하였듯, SNTS로부터 도출된 결과를 활용할 때, 가장 중요한 부분 중 하나는 물질의 신뢰도 확인이다. 본 가이드라인에서도 <그림 6-2>와 같이 신뢰도 확인 기준을 정리하고 있는데, 예를 들어 화학물질의 질량 값만 일치된다면 카테고리 4a로, 질량 값과 머무름 시간, 또는 질량 값과 *in silico*로 예측된 질량 쪼개짐 패턴이 일치하는 경우는 카테고리 3a 또는 3b로, 질량 값, 질량 쪼개짐 패턴과 데이터베이스의 자료가 일치될 때는 카테고리 2로, 마지막으로 표준물질을 통해 확인되는 물질은 카테고리 1로 구분하는 방식이다. 검출된 물질의 신뢰도(카테고리)에 따라 향후 정책적 접근의 차이가 필요한데, 예를 들어, 물질 확인의 신뢰도에 따라 지속적인 모니터링이 필요한 물질이 될 수 있고 또는 즉각적인 행동이 필요한 물질이 될 수 있다. 가이드라인에서는 분류 카테고리를 포함한 일반적인 SNTS 워크플로를 <그림 6-3>과 같이 제시하였으며, 워크플로의 단계와 확인되는 정보의 수준에 따라 물질 확인 신뢰도가 어떻게 달라지는지도 함께 표현하였다.

NORMAN, US EPA에서 수행된 바와 같이, 본 가이드라인에서도 독일 내 SNTS 협동 연구를 수행하였다(표 6-3 참조). 협동 연구는 총 16개의 기관이 참여하였고, 수행 결과는 가이드

127) Water Chemistry Society(2019).

라인에 상세히 정리되어 있다. 주요 내용을 살펴보면, 각 기관으로부터 취합된 정보에 따라 총 3개의 워크플로가 정리되었으며 모든 워크플로에서 임의로 주입된 표준물질이 잘 검출되는 경향을 보였다. 또한 협동 연구에서 적용된 워크플로의 차이에 의해 검출되는 물질이 크게 영향을 받지 않는다는 것이 확인되어, 참여 기관 간 일관된 물질 확인이 가능하다는 것을 파악할 수 있었다. 독일에서 개발된 가이드라인은 우리나라에서의 SNTS 가이드라인 개발 시 좋은 참고 자료가 될 수 있다.

표 6-2 독일 물 분석용 NTS 가이드라인 목차

제목	내용
1. 소개	
2. 범위	
3. 용어와 약어	
4. 기본 절차	(1) 비표적 분석 (2) 추정 분석
5. 배경(Blanks)의 처리	(1) 시료 배경 처리(Sample Blanks) (2) 시스템 배경 처리(System Blanks) (3) 배경 측정(Blank measurements)
6. 시료 수집	(1) 일반 정보 (2) 시료 수집에서의 품질 관리 (3) 시료명과 시료설명
7. 시약(Reagents)	(1) 일반 정보 (2) 용리제(Eluents) (3) 질량분석기 작동 기체 (4) 표준 물질 (5) 내부 표준 물질 (6) 용매 준비
8. 기기(Devices)	(1) 일반 정보 (2) 시료 바이알(Sample glass vials) (3) 고성능액체크로마토그래프(HPLC) (4) 질량 분석기
9. 실행(Implementation)	(1) 시료 전처리 (2) 크로마토그래피 (3) 질량분석기
10. 평가(Evaluation)	(1) 측정 데이터 (2) 결과 해석
11. 결과 보고	
12. 실험실 간 비교 검증 (Collaborative trial)	(1) 참여자 (2) 실행 (3) 결과

자료: Water Chemistry Society(2019), pp.3-4를 바탕으로 저자 작성.

Presentation of results and processing of features (signals) from HRMS screening

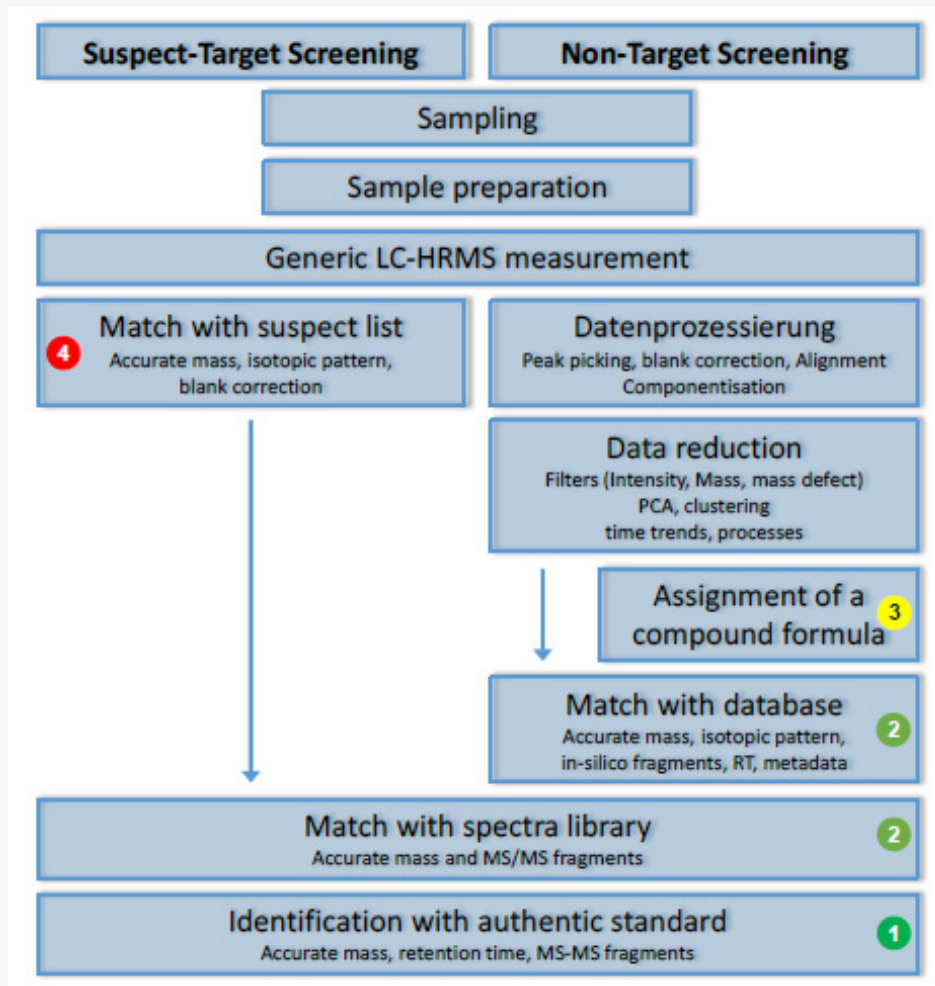
Customer log		Processor log		Reference data				
Signal*	Statement	Signal*	Statement	Accurate mass	RT (RTI)	MS2 database	MS2 reference	MS2 Insilico
Cat. 1	Identified substance	Category 1	Confirmed substance / structure	✓	✓	✓	✓	✓
Cat. 2	Probable substance	Category 2***	Probable substance/ structure	✓	!	✓	✗	!
Cat. 3	Suggested compound from chemical formula	Category 3a	Possible structure, information of metadata	✓	!	✗	✗	✓
		Category 3b	Possible compound	✓	✓	✗	✗	✗
Cat. 4	Signal of a compound	Category 4a**	Chemical formula	✓	✗	✗	✗	✗
		Category 4b	Feature (signal)	✗	✗	✗	✗	✗

* A signal is characterised by the accurate mass, the retention time and the abundance.
 ** A sum formula can be stated when at least two isotopes and/or adducts can be identified in the signals.
 *** Confirmation by a reference standard is required.

Legend:
 ✗ not present
 ! can be present
 ✓ must be present

자료: Water Chemistry Society(2019), p.29.

그림 6-2 독일 가이드라인 내 SNTS 검출 물질 신뢰도 구분 기준



주: 제시된 숫자는 물질 확인 신뢰도 카테고리 의미함.

자료: Water Chemistry Society(2019), p.73.

그림 6-3 독일 가이드라인 제시 SNTS workflow의 예와 물질 확인 신뢰도

표 6-3 독일에서 수행된 SNTS 협동 연구 구성

구분	검증팀 A	검증팀 B
참여자	<ul style="list-style-type: none"> 참여자 18(최종 dataset 15개) 기기회사: Agilent, SCIEX, ThermoFisher, Waters 	<ul style="list-style-type: none"> 참여자 21(최종 dataset 18개) 기기회사: Agilent, Bruker, ThermoFisher, Waters
시료	<ul style="list-style-type: none"> 배경 시료와 methanolic 표준 용액 	<ul style="list-style-type: none"> 표준물질이 주입된 4개의 강물 시료 24개의 물질이 포함되어 있음(물질은 참여자에게 알리지 않음)
제공	<ul style="list-style-type: none"> 주입 용량 고정 알려진 물질의 문헌적 질량 쪼개짐 패턴 정보 	<ul style="list-style-type: none"> 추정/비표적 분석(개발된 workflow) 추정 분석 물질 목록(대략 200개 물질) 머무름 시간 지표용 표준 물질
분석	<ul style="list-style-type: none"> LC-HRMS를 이용한 알려진 물질의 (추정) 표적 스크리닝 분석법은 참여자가 개발 	<ul style="list-style-type: none"> 추정 분석 또는 비표적 분석의 구축된 워크플로
업무	<ul style="list-style-type: none"> 표준 용액은 10배씩 희석 검출 한계 결정을 위한 측정 질량 쪼개짐 패턴을 문헌과 비교 검출한계에서는 3회 측정 	<ul style="list-style-type: none"> 주입된 물질의 확인 화학물질 구조의 입증 확인인 근거(데이터베이스, 표준물질) 확인인 신뢰도의 카테고리화
데이터 기록	<ul style="list-style-type: none"> 적용된 분석법 전구체(Precursor) 질량 검출 한계 	

자료: Water Chemistry Society(2019), p.33.

나. 네덜란드의 물 분석용 NTS 가이드라인

네덜란드의 ‘크로마토그래피와 질량분석기를 이용한 물 내 유기물질의 비표적 분석 가이드라인 (NTA 8033:2021)’¹²⁸⁾은 2022년, 네덜란드의 국가 표준을 개발 및 관리하고 촉진하는 왕립 네덜란드 표준화 연구소 재단(NEN: Stichting Koninklijk Nederlands Normalisatie Instituut)¹²⁹⁾을 통해 발간되었다. 가이드라인은 비표적 분석 워킹그룹을 통해 개발되었고, SNTS를 수행 및 검증할 때의 조건 및 항목과 관련된 내용을 포함한다.

독일의 가이드라인과 마찬가지로, 본 가이드라인에서도 분석 기기의 선택성, 데이터 분석을 위한 소프트웨어의 선택 등에 관한 지침을 담고 있으며, 추가로 네덜란드 가이드라인에서는 머무름 시간 지표(Retention time index) 사용을 권고하며, 물질을 더 정밀하게 분리하여 확인할 수 있는 Ion mobility¹³⁰⁾와 같은 기술도 소개하였다(표 6-4 참조).

가이드라인에서는 검출된 물질의 신뢰도 결정법으로 제2장에서 소개된 Schymanski 레벨의

128) NEN, “Guideline for Non-Target Screening of Organic Compounds in Water with Chromatography and Mass Spectrometry”, 검색일: 2024.8.16.

129) NEN, “About NEN”, 검색일: 2024.8.16.

130) 이온의 크기와 형태에 따른 이동도 차이를 이용하여 분석을 수행하는 기술.

사용을 권고하고 있으며, 물질 신뢰도 확인을 위해 필요한 정보 가이드라인을 제시하였다(표 6-5 참조). 네덜란드 가이드라인에 제시된 신뢰도 확인 틀은 기본적으로 독일과 유사하지만, 확인된 물질에 대해 머무름 시간 지표 등의 더 다양한 정보를 요청한다. 이외에도 네덜란드 가이드라인은 다양한 SNTS 분석에 관한 다양하고 실질적인 정보를 제공하고 있어 우리나라 SNTS 분석 가이드라인에 좋은 참고자료가 될 것이다. 네덜란드의 SNTS 가이드라인은 현재 NEN 웹사이트에서 유료로 제공되고 있다.

표 6-4 네덜란드 물 분석용 NTS 가이드라인 목차

제목	내용
1. 범위	
2. 기준 참조(Normative references)	
3. 용어와 정의	
4. 원리	
5. 시약과 첨가제	(1) 시약과 유리 실험기구 (2) 내부 표준 물질 (3) 표준 물질(Reference compounds)
6. 장비와 소프트웨어	(1) 장비 (2) 소프트웨어
7. 가이드라인	(1) 시료 수집 (2) 시료 전처리 (3) 크로마토그래피 (4) 질량 분석기 (5) 추가적인 물질확인 기술
8. 수행 과정	(1) 예시 (2) 시료 수집 (3) 시료 전처리 (4) 분석 (5) 데이터 처리 (6) 확인(Identification) (7) 정량
9. 품질 확인	(1) 일반 (2) 실험 과정 배경 시료(Procedural blank) (3) 내부 표준 물질 (4) 수행(Performance) 표준 물질의 주입
10. 보고	(1) 분석 방법 정보 (2) 결과 (3) 면책 조항(Disclaimers)
11. 검증	(1) 일반 (2) 범위와 수행 과정 (3) 내부표준물질 (4) 알고 있는 물질의 Set (5) 일차적 통제(First-line control)
부록	Schymanski* 물질 신뢰도 단계에 대한 설명

주: *Schymanski et al.(2014), p.2098에 제시된 SNTS에서 가장 범용적으로 사용되는 신뢰도 확인 수준을 칭함.

자료: NEN, "Guideline for Non-Target Screening of Organic Compounds in Water with Chromatography and Mass Spectrometry", 검색일: 2024.8.16을 바탕으로 저자 작성.

표 6-5 신뢰도 수준의 확인을 위해 필요한 데이터 종류

수준	물질 확인 신뢰도	(정확한) 질량 ⁴⁾	머무름 시간 (지표)	쪼개짐 패턴 정보	머무름 시간 (지표) 참조	쪼개짐 패턴 참조	쪼개짐 패턴 <i>in silico</i>
1	확정된 구조	●	●	●	● ¹⁾	●	▲
2a	모호하지 않은 구조	●	●	●	●	●	▲
2b	가능성 있는 구조	●	●	●	▲	●	▲
3	초기 구조	●	●	●	▲	▲ ²⁾	▲ ²⁾
4	모호하지 않은 분자식	● ³⁾	●	X	X	X	X
5	관심 대상	●	●	X	X	X	X

주: ●: 활용가능해야 함. ▲: 활용할 수 있음. X: 활용 불가.

1) 구조를 확정하기 위해서 표준물질이 추정 물질과 같은 측정법에 의해 적어도 한 번 측정되어야 함.

2) 적어도 둘 중 하나가 활용 가능해야 함.

3) 정확한 질량 필요; 4) 활용 가능한 정확한 질량 정보는 모두 사용되어야 함.

자료: NEN, "Guideline for Non-Target Screening of Organic Compounds in Water with Chromatography and Mass Spectrometry", 검색일: 2024.8.16을 참조하여 저자 작성.

다. NORMAN 네트워크의 NTS 가이드라인

Hollender et al.(2023)은 NORMAN 네트워크와 함께 2023년 환경 모니터링을 위한 SNTS 가이드라인을 발표하였다. 가이드라인의 목적은 과학, 상업, 정부 연구소에서의 효과적인 NTS 도입과 관리자, 규제 기관, 위해 평가자의 결과 이해 및 수용을 위한 NTS의 통합이다. 가이드라인은 높은 수준의 NTS 수행을 위한 지침을 제공하며, NTS 기술의 가능성과 도전 과제에 대한 인식을 높이고자 하였다.

NORMAN의 가이드라인은 시료 수집부터 전처리, 기기분석, 데이터 해석까지의 SNTS의 전 단계를 다루고 있다. 시료 수집과 전처리에서는 물, 대기, 먼지, 생물과 인체 시료, 수동 시료 수집의 내용을 포함하며, 기기분석은 LC와 GC로 나뉘어 물질 분리(Separation) 방법의 선택, 질량분석기 이온화 방법의 선택, 질량분석기의 분석 인자 세팅 등으로 구성되어 있다. 데이터 전처리와 우선순위 부분에서는, 실제 물질 확인을 위한 데이터의 필터링, NTS 내 물질 우선 순위화 과정, 추정 분석 목록의 개발이 기술되어 있으며, 물질 확인과 확정 과정에서는 확인의 신뢰도(표 6-6 참조), 질량 스펙트럼 검색, 후보 구조 검색과 선택, 머무름 시간의 예측, 그리고 다양한 오픈소스 소프트웨어의 소개와 알고리즘을 소개한다. 마지막으로 SNTS를 통해 확인된 물질의 정량과 추정적 정량 기법, NTS 분석법의 정도관리와 결과 보고(reporting) 과정을 다루고 있다. 본 보고서에서는 기술적인 부분을 제외하고, 실제 규제자와

정책 결정자에게 관련성이 높은 결과 보고 부분에 대해 살펴보았다.

NTS 결과를 소통하는 것은 NTS로 도출된 결과의 질과 검증을 평가하는 것이 어렵기 때문에 난제로 인식된다. NTS 커뮤니티는 데이터의 결과를 소통하는 것과 더불어 가능한 많은 메타 데이터를 포함한 연구 디자인, 기기분석 조건, 사용된 정도관리 요소와 같은 항목이 기술되어야 한다고 명시하였다. NORMAN 네트워크에서 제시하고 있는 결과 보고 양식의 상세한 내용을 <표 6-7>에 정리하였다. 주요 내용으로는 연구 디자인에 포함되는 대략적인 대상 화학물질의 범위, 시료의 수집 및 처리, 기기분석에 대한 자세한 정보를 기술하도록 하였으며, 가장 중요한 부분 중 하나인 데이터 처리, 워크플로의 알고리즘과 물질 신뢰도 의사결정도 등도 포함되도록 하였다. 또한 추후 여러 NTS 데이터가 저장되고 통합될 때 필요한 공공 데이터 저장소 저장 정보도 공유되도록 하였다. NORMAN 가이드라인의 검토를 통해 우리나라에서의 SNTS 도입 시, 필요한 기술적인 내용 및 결과 보고에 포함될 항목을 파악하였다.

표 6-6 NORMAN 네트워크의 NTS의 신뢰도 결정법과 추가 의견

물질 확인 신뢰도	최소 요구사항	추가 설명 및 의견
레벨1: 표준물질로 확인 물질 구조 확인	모분자, 질량 스펙트럼, 머무름 시간, 표준 물질	물질의 검출 강도가 낮다면, MS와 머무름 시간, 표준물질로 충분함
레벨 2a: 스펙트럼 라이브러리와 예측 구조가 일치	모분자, 질량 스펙트럼, 라이브러리카 문헌의 질량 스펙트럼	높은 일치도와 충분한 스펙트럼 일치 필요
레벨 2b: 진단적 근거로 구조 예측	모분자, 질량 스펙트럼, 실험적 데이터나 문맥	매우 드문 케이스, 종종 모분자와 대사체의 관계에서 나타남
레벨 3: 대략적 후보물질	모분자, 질량 스펙트럼, 실험적 데이터나 문맥	대부분의 물질이 레벨 3에 머물. 연구 특정된 sublevel을 정의하면 보고에 효율적임.
레벨 4: 명확한 분자 구조	모분자의 동위원소나 adduct (질량 스펙트럼이 있다면 효율적)	많은 기기회사의 소프트웨어는 명확한 분자구조를 보고함
레벨 5: 관심 분자의 정확한 분자 질량 일치	모분자	'관심'은 우선순위가 된 질량을 의미함

주: 신뢰도 결정의 기본 틀은 Schymanski et al.(2014)을 따름.
 자료: Hollender et al.(2023), p.32를 바탕으로 저자 작성.

표 6-7 NORMAN 가이드라인에서 제시하는 NTS 연구 보고 포함 내용 제안 예시

Reporting 내용
• 연구 디자인은 범위, 목적, 가정을 포함하며 가능하다면 방법론을 적용할 때 고려된 화학물질의 범위를 포함
• 시료의 정보와 전처리는 연구 정점과 시료 수집 방법 및 장비, 저장, 추출법, 정제법 등을 포함
• 정도관리 시료에 대한 설명(Blank 시료의 종류, 풀링 시료, 표준물질)
• 시료 분석 순서, 배치 등에 대한 설명
• 플랫폼에 대한 설명과 사용된 조건, 예를 들어 크로마토그래프, 컬럼, 주입 용량, 이동상, 그라디언트, 질량분석기, 이온화 방법, 시료 분석 모드 등
• 응용된 소프트웨어와 워크플로 세팅(예: 알고리즘, 배경 peak 처리) 등 데이터 처리에 대한 상세한 설명, 워크플로 결정 diagrams 등
• 통계분석에 대한 설명 및 활용된 소프트웨어 설명
• 물질의 신뢰수준 결정에 대한 세부 설명(워크플로의 단계, cutoff 기준 등을 결정트리 형태로 제시)
• 활용된 소프트웨어(Scoring 알고리즘)와 라이브러리, 질량 오차, 머무름 시간 기준도 보고되어야 함
• 확인된 물질의 정량 또는 추정적 정량 값이 결정될 수 있고 불확실성이 보고되어야 함
• 데이터 수집, 처리와 분석에서 품질관리에 대한 설명이 필요함.
• 시스템 적합성 결과, 유지관리 일정과 활용된 내부표준물질의 머무름 시간과 질량 정확도도 포함
• 공공 데이터 저장소의 접근 번호와 정보가 포함되어야 함(예: NORMAN의 DSFP)

자료: Hollender et al.(2023), p.46을 바탕으로 저자 작성.

4. SNTS 확인 물질의 신뢰도에 따른 정책 결정

물질을 신뢰도에 따른 레벨로 구분하게 되면, 이후 신뢰도 레벨에 따른 정책적 결정에 대한 논의가 진행된다. 이때에는 물질의 신뢰도뿐만 아니라, 검출 빈도와 독성 값 등 화학물질에 관한 가능한 모든 정보가 고려된다. 예를 들어, 제3장에서 검토된 NORMAN 네트워크의 추정 분석을 포함한 우선순위 설정 알고리즘을 적용하면, 물질이 충분한 분석 역량을 갖춘 상태에서 분석되었고, 검출이 빈번할 때 물질의 우선순위가 올라가게 되며, 이때 독성값이 존재하고 물질의 검출 농도가 기존에 알려진 유사 화학물질의 기준치를 넘게 된다면 고려 대상의 우선순위가 더 상승하게 된다.

Schymanski 레벨(그림 2-5 참조)을 참고할 때, 레벨 1의 경우에는 표준물질이 존재하기 때문에 표적 분석이 가능한 경우로, 정량분석이 가능하다. 따라서 레벨 1의 경우는 SNTS를 통해 새롭게 확인되는 물질보다는 이미 정보가 알려진 물질의 경우가 많다. 따라서 SNTS로 확인되는 물질이 레벨 2a, 2b 또는 3인 경우에 추가적인 검토가 필요한 신규 물질로 고려되며, 표준물질 합성, 독성 평가, 더 넓은 범위 및 대상에서의 모니터링 수행, 노출 및 위해성 평가 등의 향후 조치를 하게 된다.

앞서 제3장에서 살펴본 여러 국가의 사례에서는 NTS로 확인된 물질의 신뢰도에 대한 검토가

있었지만, 이후 정책적 활용에 관한 사례는 확인이 어려웠다. 예를 들어, 오스트리아 환경청에서는 물질 확인의 등급을 1a, 1b, 2a, 2b, 3, 4로 나누었으며, 모분자 질량 오차, 머무름 시간 오차, 질량 스펙트럼 질량 오차를 확인하여 등급을 나누었다. 덴마크 환경청에서는 SNTS 워크플로에 따른 신뢰도 의사결정도를 만들어 검토 우선순위가 된 Feature에 대하여 질량 정보만 있다면 레벨 5, 화학물질 구조만 확인된다면 레벨 4를 부여하도록 하였다. 이후 질량 스펙트럼 일치 정도를 통해 스펙트럼 일치 점수가 낮다면 레벨 3, 일치 점수가 높다면 구조의 신뢰성을 파악하게 된다. 이후 만약 표준물질이 없다면 레벨 2로, 표준물질이 있고 질량 스펙트럼이 일치한다면 레벨 1로 분류하였다. 이처럼 분류와 관련된 정보는 잘 정리되어 있으나, 신뢰도에 따른 정책적 결정에 대한 정리가 필요하다고 판단된다.

따라서 우리나라에서도 SNTS로 확인된 신규 유해화학물질의 신뢰도가 결정될 때, 이후 어떠한 정책적인 결정을 내릴지에 대한 검토가 필요하다.

5. 추정적 정량(Semi-quantification) 기법

SNTS를 통해 확인된 물질은 정성만 가능하고 표준물질이 없는 경우가 대다수이기 때문에 물질의 농도 파악, 나아가 환경 및 인체 기준치 설정 등의 목적으로 추정적 정량 기법에 관한 논의가 지속되고 있다. 하지만 기기분석에서 이온화의 효율이 화학물질의 특성이나 사용되는 이동상에 따라서 달라지기 때문에 도전과제로 여겨진다. 정책적 활용을 위한 농도 기반 소통의 중요성을 생각할 때, 기술에 대한 검토가 필요하다.

현재 추정적 정량을 위한 두 가지 방법이 주로 논의되고 있는데, 첫 번째는 Surrogate standard 기반의 접근법이다. 이 방법은 구조적으로 유사하거나 비슷한 시간에 용출되는 이미 알려진 물질의 표준물질을 이용하여 검량선을 설정하고 농도를 예측하는 것이다. 특히 머무름 시간 기반의 농도 예측은 구조가 파악되지 않은 물질에도 적용이 가능하다. 이 경우는 다양한 표준물질이 필요하다는 단점이 있다. 또 다른 접근법은 이온화 효율성 예측 알고리즘을 이용하여 이온화 효율에 영향을 미치는 모든 요소를 함께 고려하는 것이다. 이온화 효율성에 영향을 미치는 요소는 매우 다양하지만, 알고리즘을 통해 함께 고려될 수 있다.

추정적 정량법은 한 가지 접근법 아니라 화학물질의 유사성 분석, 머무름 시간 지표 등 다른 요소가 함께 고려될 때 더 정교해질 수 있다. SNTS 결과로 확인된 물질에 추정적 정량 기법을 적용할 시, 정량 결과의 신뢰성 또한 소통되어야 한다. 현재 국내 SNTS 도입에 관한 연구는 초기 단계이지만, 향후 SNTS를 통한 결과 활용 시에는 고려되어야 하므로, SNTS 기법의 활용과 함께 추정적 정량법에 대한 논의가 병행되어야 한다.

6. 추정 분석 목록 및 HRMS 데이터베이스 구축

가. 추정 분석용 목록 구축

적절한 물질 정보 데이터베이스의 선택과 활용은 추정 분석 수행에 필수적이다. 제3장에서 언급하였듯, NORMAN 네트워크는 2015년부터 SLE 이니셔티브를 통하여 추정 분석 목록을 지속해서 수집 및 공유하고 있다. NORMAN의 추정 분석 리스트를 주제별로 분류하면 규제, 약품, 독소, PFAS, Transformation Products, 물, 농약, 플라스틱, 계면활성제 등으로 구분되며 이 중 규제 관련 리스트가 16개로 가장 높은 숫자를 차지하고 있다.¹³¹⁾ 이처럼 NORMAN 네트워크의 SLE 활동은 중앙화된 추정 분석 리스트의 공유 공간을 제공함으로써 환경, 인체 모니터링을 수행하는 과학자 커뮤니티에 크게 기여하고 있다. NORMAN의 추정 분석 리스트는 US EPA도 화학물질 데이터베이스인 CompTox Dashboard 내 약 500개의 목록을 제공하고 있고 이 중 일부는 NORMAN에서 제공하는 추정 분석 목록이다. 이처럼 추정 분석 목록의 공유를 통해 연구자 또는 기관이 모니터링을 수행할 때 같은 리스트를 적용하고 결과를 통합적으로 활용할 수 있도록 기대할 수 있다.

표 6-8 NORMAN 추정 분석 목록 SUSDAT에 물질별로 포함된 정보(예)

항목	설명
Norman_SusDat_ID	NS00000364
Name	Perfluorobutanoic acid
CAS_RN	CAS_RN: 375-22-4
SMILES	O=C(O)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F
StdInChI	InChI=1S/C4HF7O2/c5-2(6,1(12)13)3(7,8)4(9,10)11/h(H,12,13)
StdInChIKey	YPJUNDFVDDCYIH-UHFFFAOYSA-N
Molecular_Formula	C4H1F7O2
Monoiso_Mass	213.986477
Pred_RTI_Positive_ESI	237.21
Pred_RTI_Negative_ESI	167.2
Daphnia_toxicity	3.39
LC50_48_hr_ug/L	86774.1
logKow_EPISuite	2.14
Koc_min_predicted(L/kg)	88.8749
Koc_max_predicted(L/kg)	88.8749

자료: 저자 작성.

131) Mohammed Taha et al.(2022), p.13.

나. HRMS Database 구축

HRMS를 이용한 SNTS 데이터 내에 포함되는 정보의 종류는 매우 다양하며 활용성은 무궁무진하다. 예를 들어 현재는 문제가 되지 않지만 향후 잠재적 우려물질이 발견되었을 때, 그 오염을 시료 수집이나 전처리와 같은 장시간의 준비 과정 없이 HRMS 데이터를 통한 회고적 분석을 통해 파악할 수 있다. 또한 오염이 언제부터 시작되었는지, 어떻게 형태가 변화하였는지, 어느 정도 영향을 미쳤는지도 가늠할 수 있다.

이와 관련, NORMAN 네트워크에서는 NormaNEWS라는 회고적 분석 플랫폼을 운영하고 있고(제3장 참조), 이 플랫폼은 여러 연구그룹의 공동 작업으로 새로운 유해화학물질이 확인되었을 때 넓은 범위의 스크리닝을 비용 및 시간 효과적으로 확인할 수 있도록 한다. NormaNEWS에 적용되었던 물질은 NORMAN 추정 분석 리스트에서 제공되어 다른 연구진도 쉽게 활용할 수 있도록 정리되어 있다. 또한 NORMAN의 DSFP는 HRMS 데이터와 메타 데이터를 함께 업로드하도록 구성되어 있고, 데이터 파일은 기 설정된 워크플로를 통해 분석되어 통합된 포맷으로 저장된다. 이는 디지털화된 데이터의 저장을 가능하게 하고 결과적으로 SNTS 결과를 일관성 있게 통합적으로 파악할 수 있게 한다. US EPA에서도 NTA WebApp을 개발 중이며, 이 또한 HRMS 데이터베이스를 만들기 위함이다. 네덜란드에서도 HRMS 파일 저장을 위한 플랫폼을 개발 중이며, 이는 DSFP를 벤치마킹하였다.

따라서 국내에서도 HRMS 데이터베이스를 어떤 방식으로(예: 중앙화, 모니터링 수행기관 내) 구축할 것인가에 대한 논의가 필요하다.

7. 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입 사례

유해화학물질 모니터링 체계에 NTS 도입은 다수의 국가에서 논의되고 있는 주제이나, 실제 도입되기에는 앞서 언급된 여러 논의가 선행되어야 한다. 또한 SNTS는 물질의 농도 파악이 어려우므로, 실제 모니터링 체계 도입은 현재 진행되고 있는 표적 분석과 상호보완적으로 병행되어야 한다. 따라서 SNTS의 활용 사례를 검토하고 이를 통해 우리나라의 모니터링 체계 내 SNTS 도입 방안을 검토하였다.

가. 벨기에 플랑드르의 NTS 활용사례: 인체 바이오모니터링

벨기에 플랑드르 정부에서는 플랑드르 지역 거주자에게 어떤 종류의 환경 오염물질이 얼마나 노출되는지를 조사하기 위한 환경보건 연구(FLEHS: FLEMish Environmental and Health Studies)를 수행하고 있다. 이 프로그램은 인체 바이오모니터링을 사업으로, 혈액, 소변,

머리카락 시료를 분석하여 환경오염물질과 오염물질의 노출로 인한 잠재적인 건강 영향 사이의 연결고리를 밝히고 시간 경향, 지역에 따른 차이, 취약 집단 등에 대한 조사를 하는 것이 목적이며 결과를 통해 환경보건 정책에 기여하고자 한다.¹³²⁾ FLEHS는 2002년 시작되어 4년 주기로 수행되며, 2022년에 5번째 모니터링이 시작되었다. FLEHS는 주기별로 목표를 가지고 대상 집단을 다르게 선정하는데(그림 6-4 참조), 4기에서는 청소년을 대상으로 인체 바이오모니터링이 수행되었다.

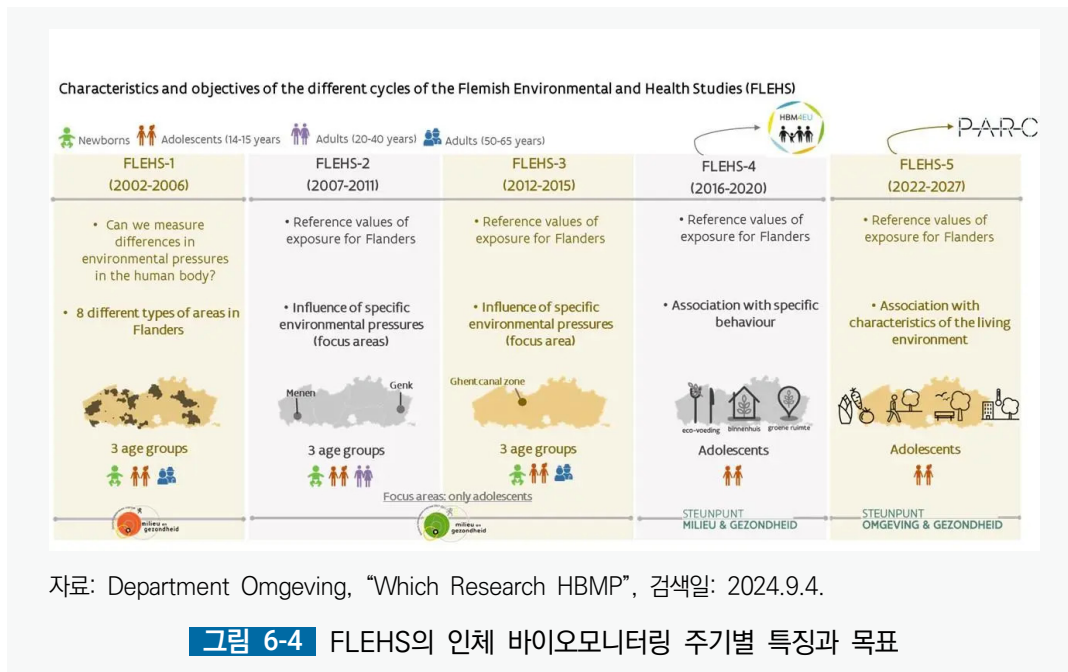
Buekers, J. et al.(2021)은 FLEHS에서 측정된 소변 결과를 통해 다양한 유해화학물질 노출의 양을 통합하여 총 Exposure Load(EL)를 계산하고자 하였다. EL은 개인이 특정 화학물질에 노출되었을 때, 기존에 정의된 농도의 역치값¹³³⁾보다 높게 노출되면 1점을 부여하고 그렇지 않은 경우에 0점을 부여하여 그 값을 더하였다. EL 계산에 포함된 물질그룹은 다환방향족탄화수소, 벤젠, 중금속, 농약, 잔류성유기오염물질, 유기인계난연제, 과불화화합물, 비스페놀류, 프탈레이트류 등 45개의 물질이 포함되어 있다.

Roggeman et al.(2022)에서는 이전 논문에서 계산된 EL을 바탕으로 낮은 EL과 높은 EL 그룹으로 나누어 83명의 개인을 선정하였고, 수집되었던 소변 시료에 추정 분석을 적용하였다. 추정 분석 리스트에는 약 12,500개의 chemicals of emerging concern과 알려진 또는 예측되는 대사체가 포함되었다. 그 결과, 63개의 물질이 신뢰도 수준 3 이상으로 확인되었으며, 이들 대부분은 현재 바이오모니터링 체계에 포함되지 않은 물질이었다. 또한 여성 그룹에서는 EL이 높은 그룹에서 더 많은 물질이 검출되는 경향을 보였고, 이를 통해 특정 물질그룹에 노출이 되는 집단은 모니터링되고 있지 않은 물질도 노출되는 경향이 있다는 것이 잠재적으로 확인되었다.

벨기에에서 수행된 Exposure Load 기반의 SNTS 대상 집단 선정은 실제 측정 데이터에 기반하므로, 명확한 근거가 설정되어 있어 우리나라에서 도입되기에 적합한 방식이라고 판단된다. 따라서 활용 가능성이 점검될 필요가 있다.

132) Department Omgeving, “Which research HBMP”, 검색일: 2024.9.4.

133) Buekers et al.(2021)에서 EL 계산을 위한 역치값은 측정된 각 유해화학물질 농도의 50 percentile과 90 percentile을 사용함.



8. 기타 NTS 활용 사례

가. 뉴저지주의 NTS 활용 사례: 오염원 추적

2006년 US EPA와 8개의 PFAS 제조 회사가 자발적으로 시행했던 PFOA Stewardship Program¹³⁴⁾의 일환으로 뉴저지주의 환경 보호 부서(NJDEP: New Jersey Department of Environmental Protection)에서는 주요 PFAS 생산 회사인 Solvay와 Dupont(현재는 Chemours)가 위치한 지역에서 토양 시료를 수집하였다.¹³⁵⁾ 수집된 시료는 조지아에 위치한 US EPA로 보내졌다. 시료는 LC-QTOF-MS로 분석되었고, NTS 기법을 이용한 데이터 분석을 통해 과거에 Solvay에서 사용했던 물질인 Cl-PFPECA(Chloroperfluoropolyether carboxylate)의 동족체 10종이 발견되었다. 물질 확인의 신뢰도는 레벨 2b(진단을 통해 구조가 추정됨), 레벨 3(잠정적 후보)로 구분되었지만, 다양한 동족체의 확인에 비추어봤을 때, 물질 확인의 신뢰도가 높다고 판단되었다. Cl-PFPECA의 확인 이후, 일상적 모니터링에 확인된 물질을 추가하여 더 넓은 지역의 토양 시료를 분석했을 때, 광범위한 오염이 있었음을 확인하였다. 또한 이탈리아에 위치한 Solvay 인근의 강물을 분석하였을 때, 같은 물질을 확인하여 물질 확인의 신뢰도가 제고되었다. 이 물질은 산업 오염원으로부터 대기를 통해 이동한 것으로 판단되었다. 따라서 CL-PFPECA의 이동성, 분해가능성 등을 고려하였을 때, 지하수, 표층수,

134) PFOA 또는 탄소사슬 8개 PFAS의 전구체 및 이와 관련 있는 긴 사슬의 homologs의 방출 및 제품 함유를 2015년까지 자발적으로 제거하기로 한 프로그램.

135) Washington et al.(2020), pp.1103-1107.

인체 등 다양한 매체에서의 노출 정도 파악과 독성 정보 파악이 필요함이 제안되었다. 이러한 보고는 NTS가 기존에 알려지지 않았던 화학물질을 발견할 수 있고, 이를 통해 산업 오염원을 추적할 수 있는 활용성이 높다는 것을 보여준 사례이다.

나. 청주 북이면 소각시설 주변 지역 환경오염물질 비표적 분석 연구¹³⁶⁾

환경부는 청주 북이면에 위치한 소각시설에서 발생하는 오염물질로 인한 환경 오염 및 주민 건강 영향에 대한 조사 청원에 따라, 조사를 추진 중이다. 주요 조사 내용 중 하나는 폐기물 소각 과정에서 발생하는 유해 물질 중 기존 조사 항목 외의 유해 물질로 인한 건강 피해 가능성을 파악하는 것이고, 이를 성취하고자 비표적 분석이 적용되었다. 비표적 분석은 소각장 배출구를 대상으로 기존 조사 항목이 아닌 검출 물질을 확인하고 정량 분석하는 것을 목표로 한다. 또한 환경 대기, 토양, 침적먼지 등 환경 매체에도 비표적 분석을 적용하여 건강 위해 가능성이 있는 물질을 파악한다. 조사에서는 비표적 분석을 포함한 여러 방면의 연구 및 검토를 통해 환경관리와 건강영향조사 개선 등의 제도 발전을 위한 환경보건 관리 방안을 제시하고자 하였다. 과제가 최근 수행되었고 보고서가 공개되지 않아 자세한 내용은 파악이 어려웠으나, 국내에서도 건강영향평가 수행 시, 대상 유해화학물질이 아닌 물질로부터의 영향 파악을 위해 비표적 분석의 도입을 시도하였고, 이는 향후 비표적 분석의 적극적인 활용의 토대가 될 자료라고 판단된다.

9. 시사점

국내 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입 방안 제안에 앞서 우선되어야 할 사항에 대한 동향을 살펴보고, 실제 필요한 사항을 목록화하였다(표 6-9 참조). 검토된 내용을 바탕으로 우선순위를 설정하였으며, 우선순위에 포함된 내용을 제7장에서 국내 SNTS 도입 방안과 연계하여 상세하게 검토하였다.

136) 환경부, “「청주 북이면 소각시설 주변지역 환경오염물질 비표적 분석 연구」 입찰 공고”, 검색일: 2024.10.8.

표 6-9 SNTS 도입을 위한 기반 검토 사항, 결과 및 우선순위

검토 사항	검토 결과	우선순위
국내 SNTS 기술 발전 현황	<ul style="list-style-type: none"> SNTS 연구진의 기술은 충분히 발전되어 왔으며, 신규 유해화학물질 탐색을 포함한 여러 응용분야에 적용가능한 수준임. 	제외
SNTS 표준 가이드라인 개발	<ul style="list-style-type: none"> 독일, 네덜란드, NORMAN의 사례를 볼 때, 우리나라도 이를 참고하여 범용적으로 활용될 가이드라인 개발이 이른 시간 내 가능하리라 판단됨. 	높음
SNTS 확인 물질의 신뢰도에 따른 정책 결정	<ul style="list-style-type: none"> 다양한 기관 및 국가에서 신뢰도 결정 사항은 제시하였지만, 신뢰도 결과에 따른 정책적 결정 사항에 대한 논의는 확인되지 않음. 모니터링 체계 내 도입을 위해서는 활용방안 마련이 중요함. 	높음
추정적 정량 기법	<ul style="list-style-type: none"> 국외 다수의 연구진이 추정적 정량 기법에 대해 논의 및 검토 중인 것으로 확인됨. 국내에서도 기법의 발전 동향을 파악하여 적용하는 방안이 논의될 필요가 있음. 	낮음
국내 추정 분석 목록 및 HRMS 데이터베이스 구축	<ul style="list-style-type: none"> 국내 추정 분석 목록이 다양한 과제를 통해 정리되어 왔으나, 공유되고 있지는 않음. 공유 체계기반이 마련된다면 더 다양한 매체에 광범위하게 적용될 수 있을 것으로 판단됨. HRMS 데이터베이스는 향후 우려물질에 대한 회고분석을 위해 구축이 반드시 필요함 	높음
유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입 사례	<ul style="list-style-type: none"> 인체 모니터링 사례 1건을 확인하였으며 이는 우리나라에도 적용이 가능하다고 판단되므로 검토할 필요가 있음. 	중간
기타 SNTS 활용 사례	<ul style="list-style-type: none"> 오염원 추적, 건강영향평가에도 SNTS가 활용되어왔으므로 SNTS 활용 기반이 구축된다면 다양한 분야로 확대 적용될 수 있을 것으로 판단됨. 	낮음

자료: 저자 작성.

제 7 장

국내 추정·비표적 분석법 도입 방안 및 중장기 로드맵

1. 국내 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입을 위한 선행 작업
2. 국내 유해화학물질 체계 내 SNTS 도입(안)
3. 국내 유해화학물질 체계 내 SNTS 도입을 통한 고도화 로드맵

1. 국내 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입을 위한 선행 작업

국내 유해화학물질 모니터링 체계에 SNTS 도입을 위해 선행되어야 할 사항을 아래와 같이 정리하여 제안하였다. 제안된 내용으로는 SNTS 표준 분석법의 개발, 추정 분석 목록 마련, HRMS 데이터베이스 구축 제안, 전문가 협의체 구축 방안, 물질 확인 신뢰도 수준에 따른 정책 결정 방안 등이 포함되었다.

가. 범용적 스크리닝이 가능한 SNTS 표준 분석법의 개발

SNTS 도입을 위해 우선 수행되어야 할 사항은 모니터링 체계에 범용적으로 적용될 일반적인 SNTS 가이드라인 마련이다. 분석 지침은 전처리, 기기분석, 정도관리, 보고서의 양식 등이 포함되어 마련되어야 하며, 이를 통해 통일성 있는 결과의 수집 및 활용이 가능하게 될 것이다.

제6장에서 살펴보았던 독일, 네덜란드, NORMAN 네트워크의 가이드라인을 검토 및 분석하여 우리나라에서 SNTS 가이드라인 개발에 필요한 항목을 <표 7-1>에 정리하였다. 목차는 총 10개의 항목을 포함한다. 목차에 제시한 항목별로 필요한 상세 내용을 제시하였는데, 이는 필요에 따라 개발 논의 단계에서 가감될 수 있다. 목차에 제시된 내용 중 물질 확인 및 신뢰도 결정, 정도관리, 결과 평가 및 보고의 일관성과 통일성 부분은 분석 시거나 분석자에 따라 발생할 수 있는 오차를 최소화할 수 있는 최소한의 방법이므로 실무적인 부분이 잘 고려되어 정리되어야 한다. 결과 보고 양식은 부록에 제시된 US EPA의 Study Reporting

Tool과 <표 6-7>에 제시된 NORMAN 가이드라인에서 제안된 보고 양식을 참고하여 실무자와의 논의를 통해 개발될 수 있다.

표 7-1 범용 SNTS 가이드라인 목차 및 내용(안)

목차	내용
SNTS 개요	SNTS 개념, 원리, SNTS 일반적 수행 절차 등 소개
용어와 정의	용어 설명, 일반적 정의, 약어 소개
시료 수집과 전처리	매체별 표준 시료 수집법 제시 및 SNTS 분석을 위한 주의사항 명시
장비와 소프트웨어	크로마토그래프(LC, GC), 질량분석기(TOF, Orbitrap)의 SNTS 분석을 위한 최소한의 선택 기준 제시(분해능, 질량 오차 등)
데이터 처리	소프트웨어 선택, Blank 처리 등 데이터 전처리법, 통계분석 등
물질 확인 및 신뢰도 결정	신뢰도 결정법 제시(물질 레벨 확인 기준값 제시)
정도관리	내부, 외부 표준물질 정보, Blank, 재현성, 민감도, 기기 검량선, 데이터 처리 기법(알고리즘), 워크플로 등
추정적 정량 기법	정량 기법 선택법 및 적용법 제시
결과 평가	결과 평가 요소를 상세하게 제시
결과 보고	결과를 보고할 수 있는 상세 양식 제시

자료: 저자 작성.

나. 유해화학물질 모니터링 체계의 목적에 따른 추정 분석 목록 마련 및 공유

제4장에서 기술하였듯, 국내에서 다양한 SNTS 관련 과제가 수행되었고, 다양한 추정 분석 목록이 목적에 따라 마련되었지만, 추정 분석 목록의 공유 등에 관한 논의는 부재하다. 유해화학물질 모니터링에 추정 분석을 적용하기 위해서는 목록의 지속적인 관리 및 공유와 업데이트가 필요하다. 또한 화학물질 관리 측면에서도 관리 물질을 중요도에 따라 그룹화하여 추정 분석 목록에 더하면, 환경이나 인체 모니터링을 수행하는 과학자 또는 정부 기관이 유용하게 활용할 수 있다.

제5장에 소개된 국내 유해화학물질 모니터링 체계를 살펴보면, 체계별로 모니터링 매체가 다르고, 이에 따라 화학물질의 분포 및 분배도 달라지기 때문에 매체별 또는 모니터링 체계별로 적합한 추정 분석 목록을 마련하고 관리하는 것이 필요하다. 추정 분석 목록은 국가에서 관리되는 모니터링 체계에 적용되므로 반드시 공유가 필요하지 않을 수 있지만, NORMAN 네트워크를 통해 개발된 추정 분석 목록의 양식을 참고하여 필요 또는 불필요한 정보를 관리한다면, 향후 목록의 업데이트 및 지속적 관리 또는 필요에 따른 공유에 유용할 것이다.

국내 범용 추정 분석 리스트 개발 시 참고를 위해 NORMAN의 대표 추정 분석 목록이 포함하고 있는 내용을 상세 정리하였다(표 7-2 참조). 여기에는 총 항목인 72개 중 일부만 취사선택하여 나타내었다. 국내에서도 유사한 형식으로 파일(.csv 또는 .xlsx)이 저장된다면 연구자 또는 정부기관이 통합적으로 활용할 수 있을 것으로 기대된다.

추정 분석 목록에는 많은 정보가 포함되어 있을수록 결과의 신속한 활용이 가능하므로, 생산량, 배출량, 용도, 유해성, 기준치 존재 여부, 고유의 물리화학적 정보, 분석과 관련된 정보 등이 다양하게 포함될수록 유용하다. 예를 들어, 경제협력개발기구(OECD: Organization for Economic Co-operation and Development)에서 발표한 과불화화합물 추정 분석 리스트 (S25)¹³⁷⁾는, 자료 수집 방법, 구조 정보, 활용, 국가별 규제 현황 등의 다양한 정보를 포함하고 있어, 추정 분석을 통해 특정 물질이 확인될 시에 중요도 파악 및 물질 관리에 관한 정책적 결정에 도움이 될 수 있다.

표 7-2 NORMAN 추정 분석 목록 SUSDAT에 물질별로 포함된 정보(일부)

항목	설명
Norman_SusDat_ID	NORMAN 아이디
Name (Dashboard, ChemSpider, IUPAC)	화학물질명 (각각 다른 이름으로 표현하는 경우가 있어 함께 기술)
Synonyms_ChemSpider	약어
CAS_RN(Registry Number) (Dashboard, PubChem, etc.)	CAS 등록 번호 (각각 다른 이름으로 표현하는 경우가 있어 함께 기술)
SMILES	화학 구조를 텍스트 문자열로 표현하는 방식 (Simplified Molecular Input Line Entry System)
StdInChI	IUPAC이 개발한 시스템으로, 화학물질을 유일하게 식별하고 데이터베이스에서 검색할 수 있음(Standard IUPAC International Chemical Identifier)
StdInChIKey	InChI의 해시 형태로 화학물질의 구조를 고유한 짧은 문자열로 표현한 것(InChI의 간단한 표현법)
Molecular_Formula	분자 구조
Monoiso_Mass	분자에서 가장 가벼운 동위원소들만으로 이루어진 원자들의 질량
Pred_RTI_[Positive, Negative]_ESI	전자분무이온화 조건에서 예측 머무름 시간
Toxicity information	독성 정보(Daphnia_toxicity, LC50_48_hr_ug/L 등 약 10종류의 독성정보가 포함되어 있음)
logKow_EPISuite	예측 물-옥탄올 분배계수
Koc_[min, max]_predicted(L/kg)	예측 유기탄소-물 분배계수

자료: 저자 작성.

다. HRMS 데이터베이스 구축

제6장에 자세히 언급하였듯, HRMS로 분석된 데이터는 매우 다양한 물질의 정보를 포함하고 있다. 그러므로 SNTS 분석을 수행할 때 필요에 따라 정보가 필터링 되지만, 선택되지 않은 정보도 유용한 경우가 많다. 따라서 국내 유해화학물질 모니터링 체계에서 SNTS를 도입할 시, HRMS 데이터베이스를 구축하여 HRMS 데이터를 일괄적으로 저장한다면 향후 우려물질로 대두되는 물질에 대해 비용·시간 효과적인 분석을 수행하기에 유용하다. 예를 들어, 저장되

137) NORMAN, "NORMAN Suspect List Exchange", 검색일: 2024.5.20.

었던 시료를 새로 분석하기 때문에 시간이 오래 걸리는 방식 대신, 데이터베이스에 저장된 HRMS 데이터를 이용한 회고분석을 수행할 수 있고, 이를 통해 물질의 유무, 오염 시기 및 지역 확인을 빠르게 확인할 수 있다.

이러한 데이터 중앙 저장화의 필요성에 따라 NORMAN과 US EPA에서는 각각 DSFP와 NTS WebApp을 통해 SNTS 연구자가 데이터를 웹에 업로드할 수 있도록 하고 내부 개발된 워크플로를 통해 일정한 양식으로 저장될 수 있도록 하였다.

국내에서의 HRMS 데이터베이스 구축의 필요성이 나타난 사례도 있다. 국내 보도 자료에 따르면, 낙동강에 위치한 왜관수질측정센터는 수계 내 미량오염물질 정밀 모니터링을 위해 LC-HRMS를 통한 비표적 분석을 수행하고 있으며, 이를 강 하류에 위치한 매리수질측정센터와 연계 운영하고 있다.¹³⁸⁾ 측정센터에서는 주 1회, 24시간 composite 샘플을 활용하여 추정 분석을 수행하고 있으며, 검출되는 내용을 환경부에 주기적으로 보고하고 있다. 이렇게 측정되는 HRMS 데이터는 향후 활용을 위해 지정된 중앙기관에서 일관성 있고 지속되게 저장될 필요가 있다.

국내 HRMS 데이터베이스 개발 및 운영을 위해서는 저장할 수 있는 플랫폼, 메타데이터 양식, 통일된 결과 보고 양식 등이 마련되어야 한다. 예를 들어, DSFP에 업로드된 유럽 내 먼지 시료(European dust) 분석 자료를 살펴보면(표 3-3 참조), 시료, 기기 정보, 기기 설정, 파일 등 다양한 정보를 함께 업로드하도록 되어있으며, 이는 우리나라 HRMS 데이터베이스 개발 시 참고될 수 있는 양식이다. US EPA의 WebApp이 상용화되면, 활용할 수 있는 자료가 더 확대될 것이라 생각된다. SNTS의 유해화학물질 모니터링 체계 도입에 앞서 국내에서도 HRMS 데이터베이스를 구축하고 가능하면 데이터를 통합적으로 저장할 수 있는 도구를 개발 또는 벤치마킹한다면 향후 활용성이 매우 높을 것으로 생각된다.

라. 신뢰도에 따른 정책적 결정 방안 제안

유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS를 적용하여 새로운 물질이 확인될 시, 그 물질은 개발될 가이드라인의 기준에 의해 신뢰도가 결정되게 되고, 이후 어떤 방식으로 조치할지 결정되게 된다. 따라서 일반적인 신뢰 레벨 결정을 위해 확인되는 사항과 더불어 이후 정책적 조치 방안에 대한 의견을 제안하였다(표 7-3 참조). 우선 신뢰도 레벨이 데이터 기반으로 결정되면, 기타 정보를 수집하게 된다. 예를 들어 레벨 1의 경우에는 표준물질이 있고, 이후 독성 영향이나 검출 빈도를 확인하게 되며, 정보를 취합하여 모니터링이 필요하다고 판단되는 물질일 시, 대상 체계에 모니터링 물질로 포함될 수 있다. 레벨 2의 경우, 라이브러리에서 관련 정보를

138) 환경부 보도자료(2024.5.23), pp.3-5.

찾을 수 있거나(레벨 2a), 부재할 수 있지만(레벨 2b), 레벨 1로 결정된 물질보다는 덜 알려진 물질일 가능성이 높으므로, 검출 빈도와 유해성을 일부 파악한 다음, 필요에 의해 표준물질을 합성하여 독성 영향을 판단해야 한다. 이러한 과정을 거치는 동안은 물질을 우선관찰대상물질로 구분하여 조사하는 것을 제안한다. 레벨 3의 경우, 레벨 2의 경우와 단계가 유사하나, 물질 확인의 신뢰도가 다소 낮을 수 있으므로 검출과 검출된 질량 정보의 일관성을 파악 후 레벨 2와 유사한 과정을 거쳐 우선관리대상물질로 구분하는 것을 제안한다. 마지막으로 레벨 4의 경우 확인된 정보가 매우 제한적이나, 물질이 빈번하게 검출되어 상세 검토가 필요하다고 판단될 경우, 신규 관심물질로 지정하고, 추이를 살펴보는 것을 제안한다.

표 7-3 신뢰도 레벨에 따른 모니터링 관련 조치 결정(안)

신뢰 레벨	필수 확인 사항	확인 사항(체크리스트)		조치
레벨 1	확인된 물질과 매칭되는 물질의 표준물질과의 질량값, 동위원소 패턴 RT, 질량 스펙트럼 일치	<ul style="list-style-type: none"> • 독성 영향 확인 • 검출 빈도 확인 • 정량값(농도) 확인 		[모니터링에 포함] ▶ 모니터링 물질로 포함 또는 관리 대상 물질로 목록화
레벨 2a	확인된 물질과 매칭되는 물질의 질량 스펙트럼 라이브러리 일치	<ul style="list-style-type: none"> • 검출 빈도 확인 • 추정적 정량 수행 및 유사 물질 기준치와 비교 	<ul style="list-style-type: none"> • 표준물질 합성 • 독성 영향 확인 	[우선관찰대상물질] ▶ 상세 검토 이후, 모니터링 물질로 포함 또는 관리 대상 물질로 목록화
레벨 2b	매칭된 물질의 비교 가능한 질량 스펙트럼이 라이브러리에 부재하지만, (1) 기존 발표된 연구의 실험 결과와 질량 스펙트럼이 일치하는 경우; (2) 확인된 물질의 질량 스펙트럼을 통해 구조 분석 수행. 특정한 진단적 질량 스펙트럼이 존재하는 경우			
레벨 3	매칭된 물질 구조의 일부가 확인된 물질의 질량 스펙트럼으로 확인됨	<ul style="list-style-type: none"> • 검출 빈도 확인 • 추정적 정량 수행 및 유사 물질 기준치와 비교 	<ul style="list-style-type: none"> • 표준물질 합성 • 독성 영향 확인 	[우선관리대상물질] ▶ 상세 검토 이후 모니터링 물질로 포함 또는 관리 대상 물질로 목록화
레벨 4	매칭된 물질과 확인된 물질의 질량이 작은 오차(< 5ppm)로 확인되며, 동위원소 패턴 일치	[신규 관심물질] ▶ 낮은 우선순위로 지속적 정보 수집 및 검토 예정 물질로 포함		
레벨 5	모니터링 대상으로 고려하지 않음			

자료: 저자 작성.

마. SNTS 협의체 구축

앞서 언급된 여러 가지 선행사항들이 진행되려면 전문적 지식을 지닌 전문가 협의체의 도움이 필수적이다. 독일과 네덜란드의 가이드라인 개발 또한 전문가 워킹그룹을 통해 개발된 바가 있듯이, 우리나라에서도 SNTS 관련 가이드라인 개발 등의 기틀을 구축해 나갈 때, 기술적 또는 경험적 조언을 제공할 전문가 그룹이 형성되어야 한다.

전문가 그룹은 국내 SNTS 전문가가 반드시 포함되어야 하며, 유해화학물질 측정 및 모니터링, 화학물질 관리, 모니터링 전문가 및 정책 결정자가 참여했을 때 가장 효과적인 아웃풋을 낼 수 있다고 생각된다. 따라서 협의체 구축 참여 기관으로 한국 잔류성유기오염물질 포럼, K-Water, 한국환경공단, 해양환경공단, 국립환경과학원, 환경부 화학물질정책과의 실무자가 참여하여 협의체를 구성할 것을 제안한다. 또한 보고서 제4장에 정리된 국내 SNTS 수행 과제 내 연구진 목록을 통해 실제 SNTS를 수행한 전문가의 목록화가 가능할 것이다. 이렇게 구성될 전문가 협의체를 통해 지속적인 기술적, 정책적 자문이 수행되어 국내 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입이 더 효율적으로 전개될 것이다. 나아가 SNTS의 여러 활용 분야(예: 바이오 마커 탐색, 오염원 추적, EDA와의 결합 등) 내 응용 및 발전이 더 활성화될 수 있다고 기대된다.

표 7-4 SNTS 협의체 구성을 위한 연관 기관 및 부서 목록화

구분	조직	담당부서	설명
유해화학물질, 측정, 모니터링, SNTS	한국 잔류성유기오염물질 포럼 (Korea Persistent Organic Pollutants Forum)	-	2010년 발족된 다양한 분야의 유해화학물질 전문가의 국내 네트워크로, 고도화된 측정 및 모니터링 기술과 SNTS 경험자로 구성되어 있음
측정 및 모니터링	K-Water	환경에너지본부 물환경관리처	수질분석, 환경조사, 첨단기술, 분석기술, 물안전감시의 담당 부서
	한국환경공단	POPs 측정망부, POPs 배출원조사부 등 관리 매체별 다양한 부서 존재	잔류성오염물질측정망, 대기환경측정망, 수질자동측정망 등 운영
	해양환경공단	해양환경조사연구원 해양수질처	해양환경 측정망 관련 매체별 잔류성유기오염물질 분석 수행 등
측정, 모니터링 체계 및 정책	국립환경과학원	환경건강연구부 환경보건연구과 물환경연구부 물환경공학연구과 환경기반연구부 상하수도연구과, 환경측정분석센터	국민환경보건 기초조사, 어린이환경보건출생코호트, 물환경측정망, 퇴적물측정망, 먹는물 미규제 미량오염물질 조사, 측정 정도관리, 공정시험기준, 국제표준 등
정책 결정자	환경부	화학물질정책과	주요 정책 결정 및 수립

자료: 저자 작성.

바. 기타 SNTS 관련 업무 제안

1) SNTS 실험실 간 검증연구 수행

NORMAN 네트워크, US EPA 및 독일의 가이드라인은 SNTS 검증 협동 연구를 통해 실험실 간 나타날 수 있는 차이를 분석하였다. 특히 각각 다른 실험실 조건에서 같은 물질을 성공적으로 확인할 수 있는지에 대한 기술적 수준을 확인함으로써 각 연구진이 상대적 검증을 받도록 하였다. 우리나라에서의 유해화학물질 모니터링 체계는 각 다른 기관에서 수행되기 때문에, 이러한 검증 작업을 거쳐 상대적 신뢰도를 확인하는 과정이 필요할 것이다. 또한 외주 분석이 수행되는 경우, 분석기관 간 분석의 수준이 사전에 검증을 통해 확인될 필요가 있다. 이러한 협동 연구를 통해 국내 SNTS 분석 기술의 공유를 통한 진보를 기대할 수 있을 것이다.

2) SNTS 오픈소스 워크플로 개발

앞서 제6장에서 검토된 국외, 국내 SNTS 적용 사례에서는 대부분의 연구진이 기기회사의 소프트웨어를 활용하여 데이터 분석을 수행하는 것을 확인할 수 있었다. 하지만 각 데이터 분석 소프트웨어가 제공하는 물질 검증 및 통계 알고리즘은 다르다. 따라서 전 세계적인 SNTS 연구의 추세는 오픈소스 소프트웨어를 활용하는 것이고, 데이터 분석 소프트웨어에 구조 예측, 질량 스펙트럼 해석 등 다양한 알고리즘을 결합하여 사용자로 하여금 SNTS 분석이 더 쉽고 더 많은 정보에 접근할 수 있도록 하고 있다. 따라서 국내에도 추후 오픈소스 워크플로가 개발되어 각 체계에 동일하게 적용될 수 있다면 결과 활용 등의 신뢰도가 높아질 것이다. 또한 HRMS 데이터베이스 구축 시, 통일된 결과 분석이 가능할 것이다.

3) SNTS를 활용한 화학물질 우선순위 설정기법 개발

제7장에서는 신뢰도에 따른 정책적 결정 방안 제안에 관한 내용을 다루며 SNTS 결과로 화학물질 모니터링의 우선순위가 어떻게 정해질지에 대해 언급한 바 있다. 이를 수정 및 보완하여 기존에 활용되는 표적 분석 기반 우선순위 설정기법과 융합할 수 있다면 더 많은 화학물질을 포괄할 수 있어 화학물질의 선제적 관리에 도움이 될 것이다.

2. 국내 유해화학물질 체계 내 SNTS 도입(안)

국내 대표적인 유해화학물질 모니터링 체계는 제5장에 정리된 바와 같이 3개의 인체 내 유해화학물질 조사 체계와 먹는물을 포함한 4개의 환경 내 유해화학물질 조사 체계가 있다. 또한 나열된 유해화학물질 모니터링 체계에서 수집되는 시료와 추가적으로 시료를 수집하고 있는 국가 환경보건시료은행이 있다. 이러한 체계 내 SNTS의 융합을 고려할 때, 우선시되어야 할 고려 사항은 어떤 기준으로 대상 시료를 선택하여 적용할 것인지에 관한 결정이다. 현재 모니터링 체계에서 수집되는 시료의 수가 많기 때문에(기초조사의 경우 약 6,000명 대상), 모든 시료에 SNTS를 적용하는 것은 시간과 비용 측면에서 어렵기 때문이다.

본 보고서를 통해 우선 제안하고 싶은 것은, 유해화학물질 모니터링 체계의 SNTS 도입을 추정·비표적 분석 모두가 아닌 추정 분석을 적용하는 것을 목표로 접근하는 것이다. 비표적 분석은 추정 분석에 비해 데이터 분석이 매우 복잡하기 때문에, 추정 분석을 우선 활용하고 비표적 분석은 선택적으로 적용한다면 초반 접근성을 높이는 데 도움이 될 것이다.

이러한 제안을 기반으로 제5장에 제시된 모니터링 체계별로 SNTS를 도입할 수 있는 안을 <표 7-5>, <표 7-6>에 제안하였다. 인체와 환경 시료는 그 특성이 다르므로, 구분해서 표를 제시하였다.

가. 인체 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입 제안

인체 유해화학물질 모니터링 체계의 경우, SNTS 적용을 위해 기본적으로 노출농도가 높은 집단을 선택하는 방법을 제안한다. 앞서 소개된 플랑드르 지방의 대상 선정 방식과 동일한 접근으로, 표적 분석으로 분석된 대상 개별 농도를 파악하여 높은 Exposure Load를 보이는 집단을 일부 선정하여 SNTS를 적용할 수 있다. Exposure Load 기반의 선정 방식 외의 다른 선정 근거도 SNTS 대상 집단 추출의 근거가 될 수 있다. 예를 들어 측정된 유해화학물질의 농도 분포 패턴이 다른 대상에 비해 독특하거나(특정 물질이 매우 높거나), 설문조사를 기반으로 특정 지역에 거주하는 등의 특이 사항이 고려될 수 있다. 또한 분석 난이도를 고려했을 때, 소변이 혈액에 비해 방해 물질이 적어 분석 절차가 간소할 수 있으므로 소변을 먼저 적용하는 방안도 제안한다. SNTS 기술이 어느 정도 보편화가 되었을 때, 활용할 수 있는 또 하나의 방법은 현재 모니터링 대상 물질의 대체재, 이성질체, 동족체 등을 함께 포함하는 것이다. 따라서 실제 모니터링 대상 물질과 관련 있는, 즉 영향이 유사할 만한 물질의 존재 유무를 파악할 수 있을 것이다.

국민환경보건 기초조사의 경우 모니터링이 3년 주기로 실행되고 분석되기 때문에, 한 기수의 분석이 끝나면 데이터를 총체적으로 살펴보고 Exposure Load를 계산한 후, 그 값에 따라

상위 10~15%를 선정하여 시료를 풀링하거나 개별 분석하는 것을 제안한다. 다른 모니터링 체계도 표적분석 결과를 활용하여 높은 노출농도를 보이는 개인을 선정하여 SNTS를 적용하면 과학적 근거 기반의 대상 선정이 이루어질 수 있다. 또한 설문조사 기반, 독특한 농도 패턴 기반 등의 결정도 가능하다.

어린이 환경보건 출생코호트 체계에서는 상세 모니터링 대상 집단인 5,000명을 1차 대상 집단으로 선정하는 것이 적합해 보이며, 앞서 정리된 국민환경보건 기초조사와 같은 방식의 접근법을 제안한다.

유해물질 인체노출 안전조사의 경우, 활용 목적이 통합 위해성 평가 수행으로 분명하지만, 시료의 가치를 생각했을 때, 향후 SNTS 적용을 고려해 볼 수 있다. 예를 들어 위해성 평가 대상 유해화학물질의 대체재 등을 함께 스크리닝하여 복합적 노출을 고려하는 등의 방식을 제안한다.

제안된 사항 중, Exposure Load 개념의 실제 적용 가능성을 판단하기 위하여 국민환경보건 기초조사(2018~2020년) 4기를 대상으로 SNTS 적용 집단 추출을 수행하였다. 4기는 원시 자료가 공개된 조사 중 가장 최근에 수행되었고, 혈액과 소변에서 총 34개 유해물질(바이오마커)을 분석하여, 역대 가장 많은 유해물질을 대상으로 수행되어 Exposure Load 기반의 대상자 추출에 적합하다고 판단되었다.

표 7-5 인체 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입(안)

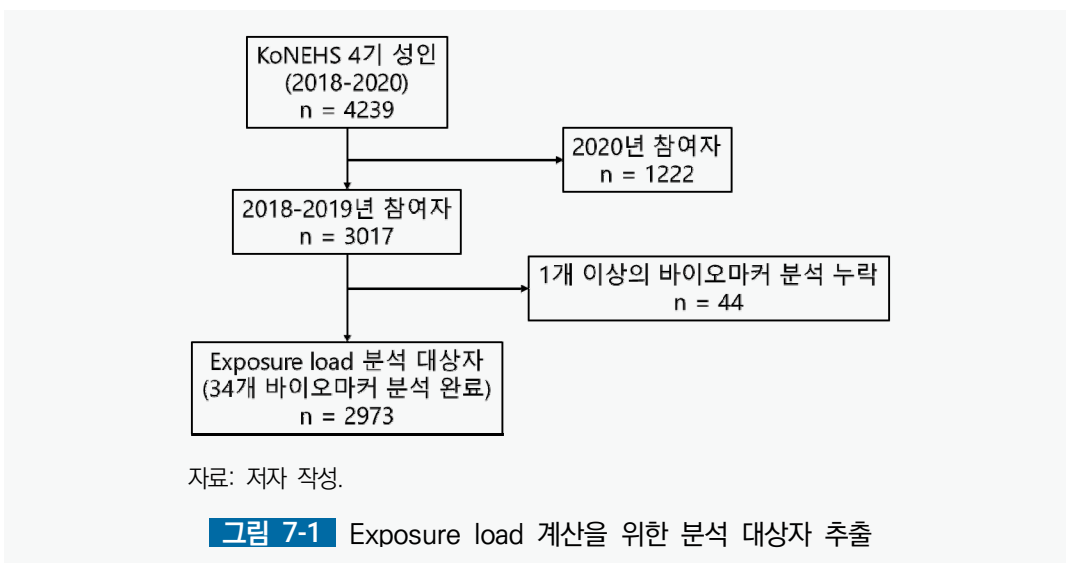
체계	조사 주기	조사 시료	시료 수	추정 분석 적용(안)
국민환경보건 기초조사 (국립환경과학원)	1회/3년	소변(모든 대상자) 혈액(청소년, 성인)	약 6,000명	<ul style="list-style-type: none"> 3년 주기의 분석이 끝난 이후, Exposure Load 계산하여 10~15% 시료 선정 시료를 풀링해서 활용 설문조사 결과에 따라 집단 선정 가능 분석 난이도 고려, 소변에 우선 적용될 수 있음 현재 분석 대상물질의 관련 물질 통합 스크리닝
어린이 환경보건 출생코호트 (국립환경과학원)	일반 산모 모집 시	소변(산모) - 일반 혈액(산모) - 일반	약 70,000명	<ul style="list-style-type: none"> 적용하지 않음
	상세 임신 초기/말기(산모) 24개월~7세 연 1회, 초등 1, 4학년, 중학생, 고등학생(자녀)	소변, 혈액, 제대혈	약 5,000명	<ul style="list-style-type: none"> 일반 분석물질 분석 후, Exposure Load를 계산하여 10~20% 시료 선정 시료를 풀링해서 활용 설문조사 결과에 따라 집단 선정 가능 연속적으로 수집된 시료에 적용 가능 분석 난이도 고려, 소변에 우선 적용될 수 있음
유해물질 인체노출 안전조사(식약처)	3년간(2023~2025년)	소변(모든 대상자) 혈액(10세 이상)	약 5,000명	<ul style="list-style-type: none"> 대상 물질과 목적이 이미 정해져 있으나, 위와 마찬가지로 EL 기반 SNTS 분석 대상 선정 가능 위해성평가 대상물질의 대체제, homologue 등을 선정해서 추가 분석 가능

자료: 저자 작성.

1) 국민환경보건 기초조사에서의 SNTS 적용(안)

가) 분석 대상자 추출

국민환경보건 기초조사 4기 조사 중 2020년은 코로나19로 인해 혈액 시료 수집이 이루어지지 않았다. 소변과 혈액에서의 분석자료를 모두 활용하기 위하여 전체 성인 참여자(4,239명) 2020년 참여자(1,222명)를 제외한 2018~2019년 참여자(3,017명)를 대상으로 하였다. 이들 중에서 1개 이상의 바이오마커에서 분석 결과가 누락된 44명을 제외하여 최종적으로 2,973명을 대상으로 Exposure load 분석을 수행하였다(그림 7-1 참조).



나) Exposure load 계산 방법

Exposure load 계산은 Buekers et al.(2021)에서 제시된 방법을 기반으로 하되, 국민환경보건 기초조사에서 측정된 유해물질의 특성을 반영하여 일부 수정하였다.

- 바이오마커 선정: 34개의 바이오마커는 모두 60% 이상의 검출률을 보여(표 7-6 참조), 모든 바이오마커를 대상으로 exposure load를 계산하였다.
- 소변 묶기 보정: 소변 바이오마커 농도는 소변 중 크레아티닌 농도로 보정하여 활용하였다.
- Exposure Load 점수 부여: 아래 설명된 두 사례를 제외한 나머지 바이오마커에 대해서는 0 또는 1을 적용하여 Exposure Load를 계산하였다. Exposure load - P50(EL-P50)의 계산에서는 각 바이오마커에 대해 중위수 미만일 경우 0점, 중위수 이상일 경우 1점을 부여하였다. 유사하게 Exposure Load - P90(EL-P90)을 계산할 때는 각 바이오마커에 대해 90백분위수 미만일 경우 0점, 90백분위수 이상일 경우 1점을 부여하였다.
- DEHP 대사체에 대한 예외 적용: 디에틸헥실프탈레이트(DEHP)의 대사체인 모노-2-에틸-5-하이드록시헥실 프탈레이트(MEHHP), 모노-2-에틸-5-옥소헥실 프탈레이트(MEOHP), 모노-2-에틸-5-카르복시헥실 프탈레이트(MECP)는 모두 DEHP 노출을 반영하는

바이오마커이다. 따라서 세 대사체의 몰농도를 합산하여 DEHP 노출 변수로 계산한 후, 이 변수를 이용하여 Exposure Load 점수를 부여하였다.

- 수은에 대한 예외 적용: 수은은 혈액과 소변에서 각각 측정되었으며, 두 바이오마커가 모두 수은의 노출을 반영한다. 따라서 각 바이오마커에 대해서 0.5의 가중치를 적용하여, 수은 노출의 총 기여도가 다른 물질과 동일하도록 보정하였다.
- 최종적으로 총 34개의 바이오마커를 이용하여 31개 유해물질의 노출에 대한 exposure load를 계산하였고, Exposure Load의 이론적인 최솟값은 0이고 최댓값은 31이다.

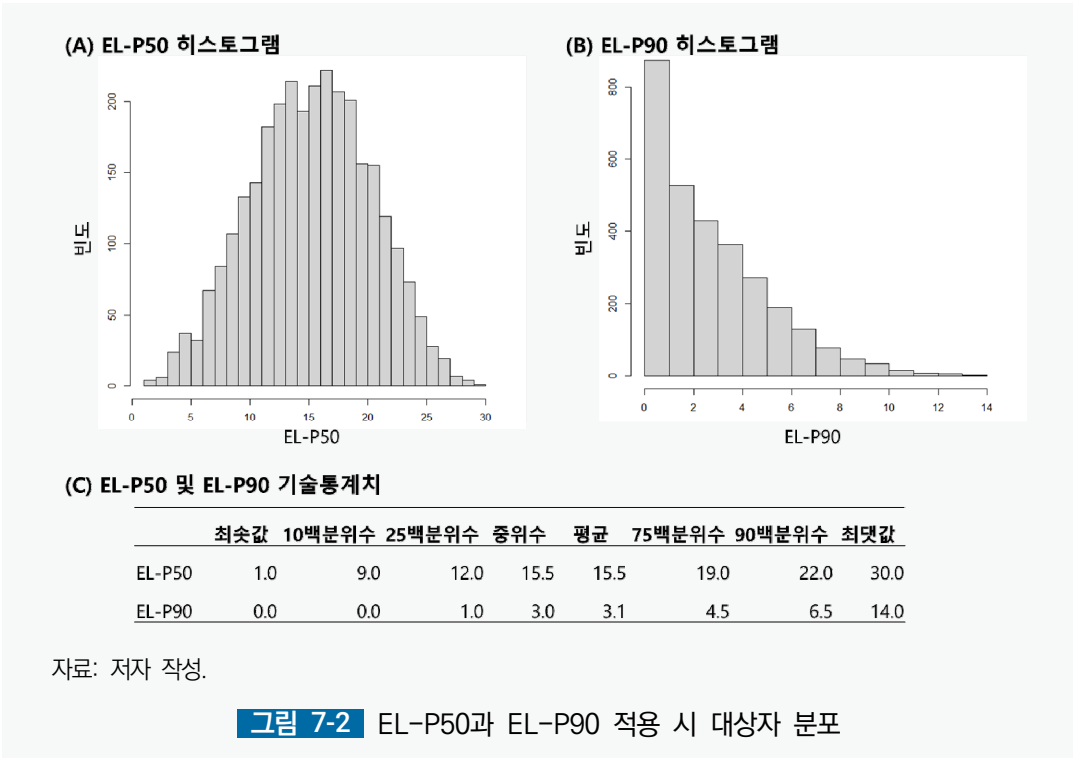
표 7-6 국민환경보건 기초조사 4기 측정 바이오마커 및 검출률

구분	변수명	바이오마커명	검출률(%)	비고
중금속	BPb	혈액 중 납	100	
	BHg	혈액 중 수은	100	수은 바이오마커, 가중치 0.5배
	Uhg	소변 중 수은	98	
	Ucd	소변 중 카드뮴	97	
PAHs	OHP	소변 중 1-하이드록시피렌	74	
	NAP	소변 중 2-나프톨	99	
	OHFlu	소변 중 2-하이드록시플루오렌	90	
	OHPhе	소변 중 1-하이드록시페난트렌	61	
프탈레이트류	MEHHP	소변 중 모노-2-에틸-5-하이드록시헥실 프탈레이트	99	DEHP 대사체, 물농도 합 적용
	MEOHP	소변 중 모노-2-에틸-5-옥소헥실 프탈레이트	99	
	MECPP	소변 중 모노-2-에틸-5-카르복시펜틸 프탈레이트	99	
	MnBP	소변 중 모노부틸 프탈레이트	97	
	MBzP	소변 중 모노벤질 프탈레이트	95	
	MCPP	소변 중 모노-3-카르복시프로필 프탈레이트	92	
	MEP	소변 중 모노 에틸	92	
	MMP	소변 중 모노 메틸	98	
	환경성 페놀류	BPA	소변 중 비스페놀 A	
BPF		소변 중 비스페놀 F	91	
BPS		소변 중 비스페놀 S	86	
TCS		소변 중 트리클로산	83	
MP		소변 중 메틸 파라벤	95	
EP		소변 중 에틸 파라벤	99	
PP		소변 중 프로필 파라벤	73	
BP		소변 중 부틸 파라벤	99	
BP_3		소변 중 벤조페논-3	77	
담배 노출 마커	COT	소변 중 코티닌	96	
VOCs	tt_MA	소변 중 t,t-뮤콘산	99	
	BMA	소변 중 벤질머캅투르산	99	
과불화화합물	PFOA	혈청 중 과불화옥탄산	100	
	PFOS	혈청 중 과불화옥탄술폰산	100	
	PFHxS	혈청 중 과불화헥산술폰산	99	
	PFNA	혈청 중 과불화녹살산	100	
	PFDeA	혈청 중 과불화데칸산	100	
농약류	PBA	소변 중 3-페녹시벤조익산	99	

자료: 저자 작성.

다) Exposure load 기준 값에 따른 분포

국민환경보건 기초조사 자료를 활용하여 Exposure Load를 계산한 결과, 중위수(P50)를 기준으로 계산한 EL-P50은 정규분포에 가까운 분포를 보인 반면에, 90 백분위수를 기준으로 계산한 EL-P90은 오른쪽으로 치우쳐진 분포를 보였다(그림 7-2 참조). EL-P50의 최솟값과 최댓값은 각각 1과 30이었고, 평균은 15.5로 나타났다. EL-P90의 최솟값과 최댓값은 각각 0과 14였고, 평균은 3.1로 나타났다.



라) 대상자 특성에 따른 exposure load 차이

대상자 특성에 따라 Exposure Load의 평균을 구하여 비교한 결과, EL-P50과 EL-P90 모두 여성이 남성에 비해 높은 값을 보였고, 연령이 증가할수록, 교육 수준이 낮아질수록 EL-P50과 EL-P90이 높았다(표 7-7 참조). 현재 흡연을 하는 경우 상대적으로 EL-P50과 EL-P90이 높았지만, 음주 경험에 대해서는 그렇지 않았다.

표 7-7 대상자 특성에 따른 Exposure Load 평균값

특성	대상 자수	가중 퍼센티 지(%)	EL-P50		EL-P90		
			평균	(95% 신뢰구간)	평균	(95% 신뢰구간)	
성별	남성	1,294	50	13.4	(12.9, 13.9)	2.44	(2.24, 2.64)
	여성	1,679	50	15.4	(15, 15.9)	3.09	(2.87, 3.31)
연령	19~39세	626	35	10.8	(10.3, 11.4)	1.67	(1.49, 1.85)
	40~60세	1,230	39	15.2	(14.7, 15.7)	2.85	(2.69, 3.01)
	60세 이상	1,117	26	18.2	(17.6, 18.8)	4.13	(3.84, 4.42)
교육 수준	고졸 미만	786	19	18.3	(17.8, 18.8)	4.25	(3.88, 4.62)
	고졸 이상, 4년제 대학 졸업 미만	1,331	48	14	(-44.8, 72.8)	2.57	(2.35, 2.79)
	4년제 대학 졸업	814	33	12.7	(12.2, 13.2)	2.14	(1.96, 2.32)
	설문 누락	42	-	-	-	-	-
흡연	비흡연	1,915	63	14.4	(13.8, 14.9)	2.66	(2.46, 2.86)
	과거 흡연	595	18	14.5	(13.9, 15.1)	2.59	(2.3, 2.88)
	현재 흡연	463	19	14.6	(13.9, 15.3)	3.28	(2.89, 3.67)
음주 경험	경험 없음	633	20	15.4	(14.6, 16.1)	3.17	(2.9, 3.44)
	현재 주 1회 미만	1,287	42	13.9	(13.3, 14.4)	2.59	(2.37, 2.81)
	현재 주 1회 이상	1,053	39	14.5	(14, 15.1)	2.75	(2.53, 2.97)
BMI	23kg/m ² 미만	858	30	13.9	(13.3, 14.5)	2.7	(2.46, 2.94)
	23~<25kg/m ²	713	24	14.8	(14.3, 15.3)	2.79	(2.59, 2.99)
	25kg/m ² 이상	1,402	46	14.6	(14, 15.1)	2.8	(2.55, 3.05)
신체활동	안 함	1,582	54	13.8	(13.3, 14.3)	2.6	(2.38, 2.82)
	땀 나지 않을 정도의 운동	210	6.5	15.5	(14.3, 16.6)	3.07	(2.7, 3.44)
	땀이 날 정도의 운동	1,181	40	15.1	(14.5, 15.7)	2.95	(2.73, 3.17)

자료: 저자 작성.

마) SNTS 대상자 선정 및 수행 체계 제안

국민환경보건 기초조사의 대상자에서 Exposure Load를 기준으로 SNTS 대상자를 선정하고, 선정된 대상자에게 채취하여 보관 중인 소변 또는 혈액 시료를 혼합(Pooling)하여 SNTS를 수행하는 체계를 제안하고자 한다.

두 가지 Exposure Load 척도는 계산 과정이 유사하지만, EL-P50은 개별 유해물질의 평균 노출 수준을 기준으로 계산하였고, EL-P90은 개별 유해물질의 고농도 노출 수준을 기준으로 계산하였다는 점에서 차이가 있다. 따라서 EL-P50이 높다는 것은 대상자가 유해물질에 전반적으로 평균보다 높은 수준으로 노출되었음을 의미하고, EL-P90이 높다는 것은 고농도로 노출된 유해물질의 수가 많음을 의미한다. 두 척도는 서로 다른 노출 특성을 반영하므로, 다양한 노출 특성을 가진 대상자를 선정하기 위해서는 두 가지 척도를 모두 고려할 필요가 있다. SNTS 대상자를 아래와 같은 단계로 선정하는 것을 제안한다.

(1) 최소 자원 확보 시: 고노출군을 아래와 같이 정의하여 각 집단에서 추출한 시료를 상황에 맞게 풀링하여 SNTS를 수행한다.

- 고노출군: EL-P50과 EL-P90이 모두 90백분위수 이상인 경우

(2) 추가 자원 확보 시: 특성이 다른 저노출군과 고노출군을 추가하여 다양한 특성을 가진 집단에 대해 SNTS를 수행한다.

- EL-P50 저노출군: EL-P50이 10백분위수 이하, EL-P90은 10백분위수 초과

- EL-P90 저노출군: EL-P90이 10백분위수 이하, EL-P50은 10백분위수 초과

- EL-P50 고노출군: EL-P50이 90백분위수 이상, EL-P90은 10백분위수 미만

- EL-P90 고노출군: EL-P90이 90백분위수 이상, EL-P50은 10백분위수 미만

표 7-8 Exposure Load를 이용한 SNTS 대상자 선정 방안(숫자는 대상자 수를 의미)

구분		EL-P50 기준 분류		
		≤9.0 (10백분위수 이하)	9.1~21.9	≥22.0 (90백분위수 이상)
EL-P90 기준 분류	≤0.0 (10백분위수 이하)	146 (저노출군)	215 (EL-P90 저노출군)	0
	0.1~6.4	221 (EL-P50 저노출군)	1875	164 (EL-P50 고노출군)
	≥6.5 (90백분위수 이상)	1	197 (EL-P90 고노출군)	154 (고노출군)

자료: 저자 작성.

나. 환경 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입 제안

환경 시료의 경우, 오염원으로 예측되는 지역(산단 등)이 가까운 지역 또는 과거의 자료를 분석하여 농도가 높거나 특이했던 지점을 선정하고, 추정 분석을 수행하는 방법이 가장 보편적이고 합리적이라고 생각된다. 또한 추정 분석의 결과에 따라 지역의 정밀 분석을 수행할 수 있다. 예를 들어 잔류성오염물질 측정망에서는 집중 측정망에 우선 적용할 수 있고, 해양 생태계 내 잔류성유기오염물질 조사의 경우, 울산, 아산 등 공업지역이 밀집된 지역을 선정하여 적용할 수 있다. 같은 접근법으로 물환경 측정망은 산단 하천과 호소 퇴적물에 적용할 수 있다. 다양한 매체가 수집되는 측정망의 경우, 물 시료 또는 (물 시료가 해수인 경우) 퇴적물 시료에 SNTS를 우선적으로 적용하는 것이 시료 분석의 난이도 측면에서 용이할 것이다. 먹는물 수질감시의 경우에는 이미 추정 분석이 적용되는 것으로 알려져 있으므로, 주요 정점을 추가 선정하여 SNTS를 적용할 수 있다.

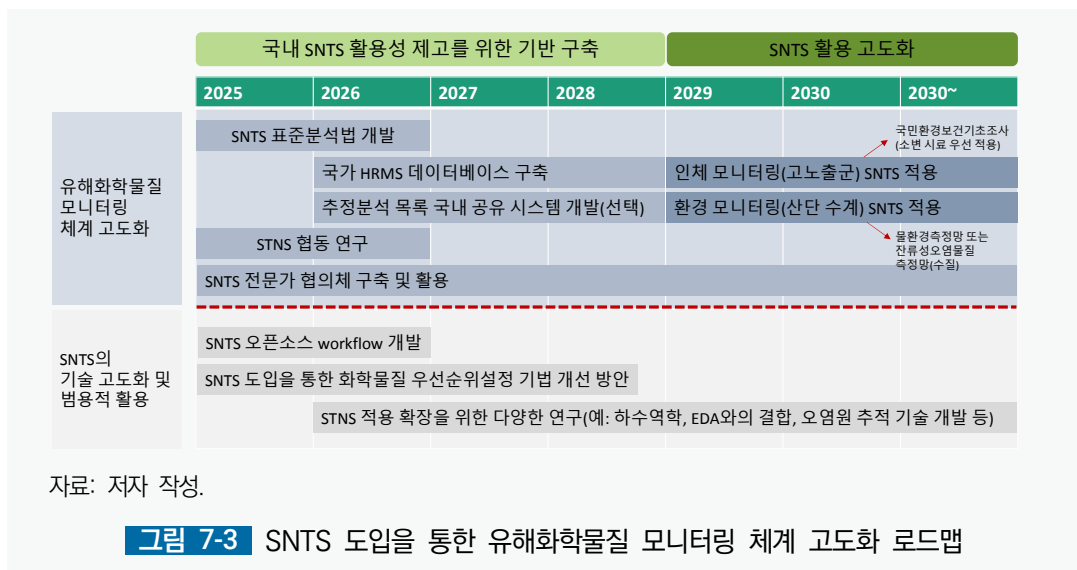
표 7-9 환경 유해화학물질 모니터링 체계 SNTS 도입(안)

체계	조사 주기	조사 시료	시료 수	추정분석 적용(안)
잔류성오염물질 측정망	대기: 연 2회(겨울, 여름) 토양, 수질, 퇴적물: 연 1회(봄)	대기, 토양, 수질, 퇴적물	각 38, 61, 36, 36 정점	<ul style="list-style-type: none"> 과거 농도 자료와 정점 위치를 분석하여 우려 지역 선정 총 정점 수의 10% 정점에 추정 분석 적용 분석 난이도 고려, 물에 우선 적용될 수 있음
해양생태계 내 잔류성유기오염 물질조사	연 1회	해수, 해저 퇴적물, 해양생물	각 50 정점에서 수집	<ul style="list-style-type: none"> 과거 농도 자료와 정점 위치를 분석하여 우려 지역 선정 분석 난이도 고려, 퇴적물에 우선 적용될 수 있음
물환경측정망	일반 하천/도서관류: 연 4회 산단하천: 물질마다 다름, 연 1~12회 호소: 연 4회 농업 용수: 연 1회 중권역대표지점 하천: 물질마다 다름, 연 1~4회 주요 지점 하천, 호소: 물질마다 다름, 연 1~12회	물 퇴적물	수질측정망 하천: 691 (주요 지점: 64개소) 호소: 201 농업용수: 955 도서관류: 37 산단하천: 69	<ul style="list-style-type: none"> 산단하천, 주요 지점 등 정점별로 모니터링되는 물질을 파악하여 모니터링 항목이 겹치는 정점 분석, 연 1회 적용 산단하천 연 1회 적용(같은 공단의 여러 지점은 풀링) 측정망 분석 결과 중 특이측값을 나타내는 정점 포함 고려 분석 난이도 고려, 물에 우선 적용될 수 있음
	퇴적물 하천, 호소, 보: 연 2회	상수원수, 정수, 샘물, 먹는샘물 등	퇴적물 측정망 하천: 180, 호소: 147	<ul style="list-style-type: none"> 산단정점과 겹치거나 유사한 정점 파악 필요, 이후 정점 수 결정 퇴적물 연 1회 적용
먹는물 수질감시	물질에 따라 다름, 분기별 1회 또는 연 1회		정점 정보 파악되지 않음	<ul style="list-style-type: none"> 추정 분석을 활용하여, 물질 우선순위를 설정하고 있음 산단지역 근처 또는 더 많은 주민에게 용수공급이 되는 지역 위주로 우선 접근

자료: 저자 작성.

3. 국내 유해화학물질 체계 내 SNTS 도입을 통한 고도화 로드맵

앞서 제안된 사항을 기반으로 SNTS 도입을 통한 유해화학물질 모니터링 체계 고도화 중장기 로드맵을 마련하였다. 가장 먼저 필요하다고 판단되는 내용은 전문가 협의체의 구축이며, 이와 함께 표준분석법을 개발하는 것을 제안한다. SNTS 도입 기반 구축에 약 4년이 필요하다고 판단되며, 이러한 과정 중에서 유해화학물질 모니터링을 수행하는 실무자와의 논의가 지속되어야 한다고 생각된다. 기반 구축이 완료된 후 지속되어 온 논의를 기반으로 인체와 환경 모니터링에 SNTS를 적용할 수 있을 것이다. 우선 적용이 가능하다고 생각되는 체계는 인체 매체의 경우 국민환경보건 기초조사의 소변시료이며, 환경매체의 경우 물환경 측정망 또는 잔류성오염물질측정망의 수매체이다. SNTS의 기술 고도화 및 범용적 활용은 우선순위로 고려되는 않으나, 궁극적으로 모니터링 체계 고도화를 위해 활용될 수 있으며 SNTS 활용의 범위를 넓힐 수 있어 함께 나타내었다. 로드맵의 이행을 통해 우리나라 유해화학물질 모니터링 체계가 가지고 있는 한계와 사각지대를 보완하고 이를 통해 국민과 환경보호에 기여할 수 있을 것이다.



제 8 장

결론 및 향후 과제

1. 결론
2. 향후 과제 제안

1. 결론

본 연구에서는 국내 유해화학물질 모니터링 체계를 고도화하고자 추정·비표적 분석(SNTS: Suspect and Non-target Screening) 기법의 도입 방안을 다각적으로 검토하고 중장기 로드맵을 제안하였다.

국내외 기술 발전 및 정책적 활용 동향을 검토하여 국내 SNTS 도입 기반 구축을 위해 필요한 사항을 목록화하였다. SNTS 표준 분석법의 개발, 추정 분석 목록 공유 시스템 개발, HRMS 데이터베이스 구축 및 유해화학물질 전문가 및 다양한 이해관계자를 포함한 전문가 협의체의 설립을 우선순위 과제로 제시하였다. 이러한 과정을 통해 SNTS 기법을 국내 유해화학물질 모니터링 체계에 적용하기 위한 기반이 마련될 것이다. 이후 단계로 국민환경보건 기초조사(인체)와 물환경 측정망 또는 잔류성유기오염물질 측정망(환경 매체)에 SNTS 기법을 우선 적용하는 것을 제안하였다. 이를 통해 도입의 초기 효과를 검증할 수 있을 것이다. 마지막으로, SNTS 도입 기반 구축에서 기술 고도화 및 정책 적용에 이르기까지의 단계를 포함한 로드맵을 제시했다. 이를 통해 현 유해화학물질 모니터링 체계를 개선 및 보완하고, 나아가 전반적인 화학물질 관리체계의 패러다임 전환을 도모할 수 있을 것이다.

본 연구 결과는 기존의 모니터링 체계를 보완하는 혁신적인 접근법으로, 국내 유해화학물질 관리의 사각지대를 줄이는 데 중요한 기여를 할 것으로 기대된다. SNTS 기법의 도입 및 확산은 과학적 기반의 정책 결정을 지원하고, 궁극적으로 국민과 환경의 안전을 강화하는 데 핵심적인 역할을 할 것이다.

2. 향후 과제 제안

국내 유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS의 도입을 위한 향후 과제를 아래와 같이 제안한다.
 기반 구축을 위한 과제는 세세하게 분할되어 수행되기보다는, 전문 지식을 가진 연구진이
 팀을 이루어 큰 목적을 가지고 상호협력하여 수행하는 것이 더 효율적이라고 판단된다. 따라서
 상위 과제로 ‘국내 SNTS 활용 기반 구축 연구’를 제안하여 다양한 기반 구축을 위한 6개의
 세부 과제가 포함되도록 하였다. 또한 SNTS 기술의 고도화와 활용 확장을 위하여 오픈소스
 워크플로 개발, 우선순위 선정기법 고도화를 제안하였다. 특히 오픈소스 워크플로의 개발은
 일관성 있는 데이터의 추출이 가능하며 다양한 분야로의 SNTS 응용을 가능하게 할 것이라
 기대한다. 마지막으로 ‘유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입 방안 제안 연구’는 SNTS의
 각 유해화학물질 체계 내 도입이 논의될 때, 실무적으로 고려해야 하는 여러 사항과 어려움
 등을 반영하여 도입 방식 및 절차가 상세하게 논의될 필요가 있다고 판단되어 제안하였다.

본 보고서에서는 큰 틀의 향후 과제를 제안하였지만, 이는 필요에 따라 수정 및 보완되어
 적용이 가능하며 과제를 통해 국내 SNTS 기술의 고도화 및 모니터링 체계의 현 사각지대
 보완, 나아가 선진화된 화학물질 관리를 수행할 수 있기를 기대한다.

표 8-1 SNTS 도입 기반 구축 및 활용을 위한 향후 과제 제안

과제 제목	세부 과업 내용
국내 SNTS 활용 기반 구축 연구	SNTS 표준분석법 개발
	추정분석 목록 표준화 및 공유 체계 개발
	HRMS 데이터베이스 구축
	전문가 협의체 및 거버넌스 구축
	SNTS 협동 검증 연구 수행
	SNTS 추정적 정량 기법 개발
SNTS 오픈소스 워크플로 개발 연구	오픈소스 데이터 구축을 통해 일관성 있는 알고리즘 적용을 목적으로 함
SNTS 도입을 통한 화학물질 우선순위 선정기법 고도화 연구	현 우선순위 설정 체계에 SNTS를 함께 고려함으로써 우선순위 관리대상 화학물질 선정, 모니터링 대상 화학물질 선정 등에 활용
유해화학물질 모니터링 체계 내 SNTS 도입 방안 제안 연구	각 유해화학물질 모니터링 체계에 어떤 방식의 시료 선정이 적합하며, SNTS 결과의 활용 방안에 대한 연구

자료: 저자 작성.

참고문헌

[국내문헌]

- 과학기술정보통신부(2020a), 「미세먼지 오염원 추적을 위한 비표적 잔류성유기오염물질의 환경수사 기법 개발」, p.8, p.12.
- 과학기술정보통신부(2020b), 「신규·미지 유해화학물질 분석을 위한 LC-HRMS 기반 추정 및 비표적 분석기법 개발」, p.2.
- 과학기술정보통신부(2020c), 「수용체 중심 생체시료 suspected-target screening을 통한 일회용 생리대 환경유해요인 파악 연구」.
- 국립환경과학원(2018a), 「고분해능 질량분석기를 활용한 미지오염물질 다중검색기법 연구(I)」, p.23.
- 국립환경과학원(2018b), 「수돗물 중 미규제 미량유해물질 관리방안 연구」.
- 국립환경과학원(2018c), 「수질자동측정기법 개발 및 개선연구 -LC/HRMS를 이용한 낙동강 중류 유기화합물질 온라인 분석법 개발(I)」.
- 국립환경과학원(2019), 「국가 환경보건 바이오뱅크 구축 및 운영 로드맵 마련」. p.43, p.47, p.314.
- 국립환경과학원(2020), 「어린이 환경보건 출생코호트 연구 고도화 및 로드맵 마련」, p.190, pp.254-351.
- 국립환경과학원(2021), 「어린이 환경보건 출생코호트 자료분석 및 추적조사 도구 고도화(I)」.
- 국립환경과학원(2022a), 「수계 내 미규제 미량오염물질 모니터링 및 관리기준 개선 연구」, p.15.
- 국립환경과학원(2022b), 「미관리 수질오염물질 탐색체계 구축」.
- 국립환경과학원(2022c), 「어린이 환경보건 출생코호트 자료분석 및 추적조사 도구 고도화(II)」.
- 김현욱(2021), 「신종오염물질 지표물질 선정/평가를 통한 신종오염물질 처리 효율 평가에 관한 연구」, 국회의원 김성원, p.74.
- 송상환 외(2023), “국가환경시료은행 현황 및 코호트연구에서의 활용”, 「(사)환경독성보건학회 2023 추계학술대회」, 환경독성보건학회, p.22.
- 식품의약품안전평가원(2021), 「수산물 중 신규 위해요소 시험법 개발 및 잔류실태 조사」, p.8.

p.479.

- 원종호 외(2019), “해양생태계 내 잔류성오염물질 조사 현황 및 발전 방향”, 「한국해양환경·에너지 학회지」, 22(3), pp.142-150.
- 이종천, 김명진(2012), “선진국 환경시료은행의 특성 분석을 통한 국가환경시료은행의 발전방안”, 「자원환경지질」, 대한자원환경지질학회, 45(2), pp.169-180.
- 질병관리청(2023), 「2023 만성질환 현황과 이슈」, p.3.
- 최인철(2024), “먹는물 신중유해물질 관리현황 및 도전과제”, 「2024 서울워터심포지엄」, 11월 4일, 서울: 서울특별시, 서울물연구원, (사)환경독성보건학회, p.15.
- 화학물질안전원(2022), 「2021년도 화학물질 배출량 조사결과」, p.38.
- 한국환경산업기술원(2021), 「초고분해능질량분석법을 응용한 추정/비표적 분석 및 미지 독성 혼합 물질 분석기술 개발」, p.13.
- 한국환경산업기술원(2022), 「표적/비표적 분석기법 활용 미확인(Unknown) 미량오염물질 측정 및 분석 기술 개발」, p.50, p.82.
- 환경부(2017), 「어린이 환경보건 출생코호트 연구(II)」, pp.12-13, p.122-178.
- 환경부(2019), 「내분비계장애물질(EDCs) 통합 위해성평가 및 모델 개발」, p.406.
- 환경부(2020), 「제2차 화학물질의 평가 등에 관한 기본계획」, p.2.
- 환경부(2021), 「2018년도 화학물질 통계조사결과」, p.2.
- 환경부(2023), 「2022년도 잔류성유기오염물질 측정망 운영결과 보고서」, p.34, p.42, p.45, p.49.
- 환경부(2024), 「물환경측정망 설치·운영 계획」, pp.3-17.
- Juliane Hollender(2022), “The Swiss Monitoring Framework for Emerging Contaminants in Surface and Ground Water Using Target, Suspect and Non-Target Screening”, 「2022 세계 물의 날 기념 국제 심포지엄」, 3월 22일, 서울: 국립환경과학원, p.26.

[국외문헌]

- Alygizakis, N. A. et al.(2018), “Exploring the Potential of a Global Emerging Contaminant Early Warning Network through the Use of Retrospective Suspect Screening with High-Resolution Mass Spectrometry”, *Environmental Science and Technology*, 52(9), pp.5135-5144.
- Alygizakis, N. A. et al.(2019), “NORMAN Digital Sample Freezing Platform: A European Virtual Platform to Exchange Liquid Chromatography High Resolution-Mass Spectrometry Data and Screen Suspects in “Digitally Frozen” Environmental Samples”, *Trends in Analytical Chemistry*, Vol.115, pp.129-137.
- Alygizakis, N. et al.(2023), “Towards a Harmonized Identification Scoring System in LC-HRMS/MS Based Non-Target Screening (NTS) of Emerging Contaminants”, *Trends in Analytical Chemistry*, 159(9), p.116944.

- Been, F. et al.(2018), “Mining the Chemical Information on Urban Wastewater: Monitoring Human Exposure to Phosphorus Flame Retardants and Plasticizers”, *Environmental Science & Technology*, 52(2), pp.6996-7005.
- Brack, W. et al.(2016), “Effect-Directed Analysis Supporting Monitoring of Aquatic Environments-an In-Depth Overview”, *Science of the Total Environment*, Vol.544, pp.1073-1118.
- Buekers, J. et al.(2021), “Combined Chemical Exposure Using Exposure Loads on Human Biomonitoring Data of the 4th Flemish Environment and Health Study (FLEHS-4)”, *International Journal of Hygiene and Environmental Health*, Vol.238, p.113849.
- Bundesministerium(2022), *Projektphase I-zeitgemäßer Umgang mit Abwassereinleitungen aus Industrieclustern in kommunale Kläranlagen zum Schutz von Mensch und Umwelt*, pp.1-191.
- Charbonnet, J. A. et al.(2022), “Communicating Confidence of Per- and Polyfluoroalkyl Substance Identification via High-Resolution Mass Spectrometry”, *Environmental Science & Technology Letters*, 9(6), pp.473-481.
- Du, P. et al.(2018), “Estimating Population Exposure to Phthalate Esters in Major Chinese Cities through Wastewater-Based Epidemiology”, *Science of The Total Environment*, Vol.643, pp.1602-1609.
- Dulio, V. et al.(2018), “Emerging Pollutants in the Eu: 10 Years of Norman in Support of Environmental Policies and Regulations”, *Environmental Science Europe*, Vol.30: 5, pp.1-13.
- Dulio, V. et al.(2024), “Beyond Target Chemicals: Updating the Norman Prioritisation Scheme to Support the Eu Chemical Strategy with Semi-Quantitative Suspect/Non-Target Screening Data”, *Environmental Sciences Europe*, Vol.36: 113, pp.1-22.
- European Environment Agency: EEA(2020), *The European Environment-State and Outlook 2020*, p.239.
- Escher, B. I. et al.(2018), “Effect-Based Trigger Values for *in Vitro* and *in Vivo* Bioassays Performed on Surface Water Extracts Supporting the Environmental Quality Standards (EqS) of the European Water Framework Directive”, *Science of the Total Environment*, Vol.628-629, pp.748-765.
- Escher, B. I. et al.(2020), “Tracking Complex Mixtures of Chemicals in Our Changing Environment”, *Science*, Vol.367, pp.388-392.
- González-Mariño, I. et al.(2021), “Assessing Population Exposure to Phthalate Plasticizers in Thirteen Spanish Cities through the Analysis of Wastewater”, *Journal of Hazardous Materials*, Vol.401, p.123272.

Hollender, J. et al.(2019), “High Resolution Mass Spectrometry-Based Non-Target Screening Can Support Regulatory Environmental Monitoring and Chemicals Management”, *Environmental Sciences Europe*, 31(1): 42, pp.1-11.

Hollender, J. et al.(2023), “NORMAN Guidance on Suspect and Non-Target Screening in Environmental Monitoring”, *Environmental Sciences Europe*, Vol.35: 75, pp.1-61.

Hong, S. et al.(2023), “Effect-Directed Analysis Combined with Nontarget Screening to Identify Unmonitored Toxic Substances in the Environment”, *Environmental Science Technology*, 57(48), pp.19148-19155.

Jeong, Y. et al.(2022), “Occurrence and Contamination Profile of Legacy and Emerging Per-and polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Belgian Wastewater Using Target, Suspect and Non-Target Screening Approaches”, *Journal of Hazardous Materials*, Vol.437, p.129378.

Jungclaus, G. A. et al.(1978), “Organic-Compounds in an Industrial Wastewater-Case-Study of Their Environmental-Impact”, *Environmental Science and Technology*, 12(1), pp.88-96.

Kasprzyk-Hordern, B. et al.(2021), “Estimation of Community-Wide Multi-Chemical Exposure via Water-Based Chemical Mining: Key Research Gaps Drawn from a Comprehensive Multi-Biomarker Multi-City Dataset”, *Environment International*, Vol.147, p.106331.

Kasprzyk-Hordern, B. et al.(2023), “Wastewater-Based Epidemiology for the Assessment of Population Exposure to Chemicals: The Need for Integration with Human Biomonitoring for Global One Health Actions”, *Journal of Hazardous Materials*, Vol.450, p.131009.

KWR(2023), *Inpassen van Suspect en Non-Target Screening in Bestaande Meetnetten*, KWR Water Research Institute, pp.1-12.

Lopardo, L. et al.(2019), “Estimation of Community-Wide Exposure to Bisphenol A via Water Fingerprinting”, *Environment International*, Vol.125, pp.1-8.

Manz, K. E. et al.(2023), “Non-Targeted Analysis (NTA) and Suspect Screening Analysis (SSA): A Review of Examining the Chemical Exposome”, *Journal of Exposure Science & Environmental Epidemiology*, 33(4), pp.524-536.

McCord, J. P. et al.(2022), “Quantitative Non-Targeted Analysis: Bridging the Gap between Contaminant Discovery and Risk Characterization”, *Environment International*, Vol.158, p.107011.

Mohammed Taha, H. et al.(2022), “The NORMAN Suspect List Exchange (NORMAN-SLE): Facilitating European and Worldwide Collaboration on Suspect Screening in High

- Resolution Mass Spectrometry”, *Environmental Sciences Europe*, Vol.33: 104, pp.1-26.
- Newton, S. R. et al.(2018), “Suspect Screening and Non-Targeted Analysis of Drinking Water Using Point-of-Use Filters”, *Environmental Pollution*, Vol.234, pp.297-306.
- O'Brien, J. W. et al.(2015), “Wastewater Analysis of Census Day Samples to Investigate per Capita Input of Organophosphorus Flame Retardants and Plasticizers into Wastewater”, *Chemosphere*, Vol.138, pp.328-334.
- Peter, K. T. et al.(2021), “Nontargeted Analysis Study Reporting Tool: A Framework to Improve Research Transparency and Reproducibility”, *Analytical Chemistry*, 93(41), pp.13870-13879.
- Phillips, K. A. et al.(2018), “Suspect Screening Analysis of Chemicals in Consumer Products”, *Environmental Science and Technology*, 52(5), pp.3125-3135.
- Pourchet, M. et al.(2020), “Suspect and Non-Targeted Screening of Chemicals of Emerging Concern for Human Biomonitoring, Environmental Health Studies and Support to Risk Assessments: From Promises to Challenges and Harmonisation Issues”, *Environmental International*, Vol.139, p.105545.
- Roggeman, M. et al.(2022), “Comprehensive Suspect Screening for the Identification of Contaminants of Emerging Concern in Urine of Flemish Adolescents by Liquid Chromatography High-Resolution Mass Spectrometry”, *Environmental Research*, Vol.214, p.114105.
- Rousis, N. I. et al.(2017), “Wastewater-Based Epidemiology to Assess Pan-European Pesticide Exposure”, *Water Research*, Vol.121, pp.270-279.
- Rousis, N. I. et al.(2020), “Assessment of Human Exposure to Selected Pesticides in Norway by Wastewater Analysis”, *Science of The Total Environment*, Vol.723, p.138132.
- Rousis, N. I. et al.(2021), “Wastewater-Based Epidemiology as a Novel Tool to Evaluate Human Exposure to Pesticides: Triazines and Organophosphates as Case Studies”, *Science of The Total Environment*, Vol.793, p.148618.
- Schymanski, E. et al.(2014), “Identifying Small Molecules via High Resolution Mass Spectrometry: Communicating Confidence”, *Environmental Science and Technology*, 48(4), pp.2097-2098.
- Sheldon, L. S. et al.(1978), “Organic-Compounds in Delaware River”, *Environmental Science and Technology*, 12(10), pp.1188-1194.
- Singer, A. C. et al.(2023), “A World of Wastewater-Based Epidemiology”, *Nature Water*, Vol.1, pp.408-415.
- Sjerps, R. M. A. et al.(2016), “Data-Driven Prioritization of Chemicals for Various Water

Types Using Suspect Screening LC-HRMS”, *Water Research*, Vol.93, pp.254-264.

Sobus, J. R.(2018), “Integrating Tools for Non-Targeted Analysis Research and Chemical Safety Evaluations at the Us Epa”, *Journal of Exposure Science & Environmental Epidemiology*, Vol.28, pp.411-426.

Taha, H. M. et al.(2022), “The NORMAN Suspect List Exchange (NORMAN-SLE): Facilitating European and Worldwide Collaboration on Suspect Screening in High Resolution Mass Spectrometry”, *Environmental Sciences Europe*, Vol.34: 104, pp.1-26.

Tang, S. et al.(2020a), “Urinary Concentrations of Bisphenols in the Australian Population and Their Association with the per Capita Mass Loads in Wastewater”, *Environmental Science and Technology*, 54(16), pp.10141-10148.

Tang, S. et al.(2020b), “Concentrations of Phthalate Metabolites in Australian Urine Samples and Their Contribution to the per Capita Loads in Wastewater”, *Environmental International*, Vol.137, p.105534.

Ulrich, E. M.(2019), “EPA’s Non-Targeted Analysis Collaborative Trial (Entact): Genesis, Design, and Initial Findings”, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 411(4), pp.853-866.

Vogel, E. J. et al.(2024), “Target and Nontarget Screening to Support Capacity Scaling for Substance Use Assessment through a Statewide Wastewater Surveillance Network in New York”, *Environmental Science and Technology*, 58(19), pp.8518-8530.

Washington, J. W. et al.(2020), “Nontargeted Mass-Spectral Detection of Chloroperfluoropolyether Carboxylates in New Jersey Soils”, *Science*, 368(6495), pp.1103-1107.

Water Chemistry Society(2019), *Use of Non-Target Screening by Means of LC-ESI-HRMS in Water Analysis*, Gesellschaft Deutscher Chemiker, pp.1-45.

[온라인 자료]

국가과학기술지식정보서비스(NTIS), <https://www.ntis.go.kr/ThMain.do>, 검색일: 2024.6.20.

국가법령정보센터, “국립환경과학원 국가환경보전시료은행 운영규정”, [https://www.law.go.kr/행정규칙/국립환경과학원_국가환경보전시료은행_운영규정/\(863,20231124\)](https://www.law.go.kr/행정규칙/국립환경과학원_국가환경보전시료은행_운영규정/(863,20231124)), 검색일: 2024.6.17.

국가법령정보센터, “먹는물 수질감시항목 운영 등에 관한 고시”, [https://www.law.go.kr/행정규칙/먹는물_수질감시항목_운영_등에_관한_고시/\(2022-3,20220105\)](https://www.law.go.kr/행정규칙/먹는물_수질감시항목_운영_등에_관한_고시/(2022-3,20220105)), 검색일: 2024.11.13.

국가법령정보센터, “물환경보전법”, <https://www.law.go.kr/법령/물환경보전법>, 검색일: 2024.6.18.

국가법령정보센터, “수도법”, <https://www.law.go.kr/법령/수도법>, 검색일: 2024.10.18.

국가법령정보센터, “잔류성오염물질 관리법”, https://www.law.go.kr/법령/잔류성오염물질_관리법, 검색일: 2024.6.18.

국가법령정보센터, “해양환경관리법”, <https://www.law.go.kr/법령/해양환경관리법>, 검색일: 2024.6.18.

국가법령정보센터, “해양환경관리법 시행규칙”, <https://www.law.go.kr/법령/해양환경관리법시행규칙>, 검색일: 2024.6.18.

국가법령정보센터, “환경보건법”, [https://www.law.go.kr/법령/환경보건법/\(11619,20130101\)](https://www.law.go.kr/법령/환경보건법/(11619,20130101)), 검색일: 2024.6.13.

국가법령정보센터, “환경정책기본법”, <https://www.law.go.kr/법령/환경정책기본법>, 검색일: 2024.6.18.

국가법령정보센터, “환경정책기본법 시행령”, <https://www.law.go.kr/법령/환경정책기본법시행령>, 검색일: 2024.6.18.

국립환경과학원, “국립환경과학원 국가환경시료은행 운영규정 개정(안)”, https://dlib.nier.go.kr/NIER/cop/bbs/selectNoLoginBoardArticle.do?menuNo=13001&bbsId=BBSMSTR_000000000031&nttId=32891&Command=READ, 검색일: 2024.8.12.

국립환경과학원, “제안요청서-미관리 수질오염물질 탐색체계구축(2024)”, <https://www.ntis.go.kr/rndgate/eg/un/ra/view.do?roRndUid=1170539>, 검색일: 2024.8.7.

식품의약품안전처 보도참고자료(2023.5.8), “사용자 중심의 유해물질 인체노출 안전조사 본격 착수”, pp.1-4, <https://eiec.kdi.re.kr/policy/materialView.do?num=238366&pg=&pp=20&topic=P>, 검색일: 2024.8.12.

정책연구관리시스템(PRISM), <https://www.prism.go.kr/homepage/>, 검색일: 2024.6.20.

정책정보포털(POINT), <https://policy.nl.go.kr/>, 검색일: 2024.6.20.

환경보건종합정보시스템, “국민환경보건 기초조사”, <https://www.ehtis.or.kr/cmnn/sym/mnu/mpm/62002000/htmlMenuView.do>, 검색일: 2024.5.13.

환경부, “「청주 북이면 소각시설 주변지역 환경오염물질 비표적 분석 연구」 입찰 공고”, <https://www.me.go.kr/home/web/board/read.do?menuId=&boardId=1561070&boardMasterId=39>, 검색일: 2024.10.8.

환경부 보도자료(2021.8.13), “5기 국민환경보건 기초조사...64종 유해물질 농도조사”, p.3, p.6, <https://eiec.kdi.re.kr/policy/materialView.do?num=217087&topic=>, 검색일: 2024.6.22.

환경부 보도자료(2023.3.27), “국가환경보건시료은행 개소로 환경보건연구 도약 기반 마련”, pp.1-5, <https://eiec.kdi.re.kr/policy/materialView.do?num=236822&topic=P&pp=20&datecount=&recommend=&pg=>, 검색일: 2024.6.22.

환경부 보도자료(2023.7.3), “국가환경시료은행 관리체계 구축... 환경정책 기본법 시행령 개정”, p.3, p.5, p.7, <https://eiec.kdi.re.kr/policy/materialView.do?num=240400&pg=&pp=20&topic=C>, 검색일: 2024.6.22.

환경부 보도자료(2024.5.23), “낙동강 미량오염물질 114종 조사, 안전한 먹는물 생산에 우려 없는

수준”, pp.3-5, <https://eiec.kdi.re.kr/policy/materialView.do?num=251770&pg=&p p=&topic=P>, 검색일: 2024.8.28.

환경부 보도자료(2024.6.11), “제 6기 국민환경보건 기초조사 실시... 국민 체내 71종 유해물질 농도 조사”, pp.3-4, p.7, <https://kcg.korea.kr/briefing/pressReleaseView.do?newsId=156634913&pWise=sub&pWiseSub=J2>, 검색일: 2024.9.29.

Alygizakis, N. and J. Slobodnik(2018), “S32 | REACH2017 | >68,600 REACH Chemicals (NORMAN-SLE-S32.0.1.5) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/records/6850171>, 검색일: 2024.5.20.

BP4NTA, “About”, <https://nontargetedanalysis.org/about/>, 검색일: 2024.5.29.

BP4NTA, “NTA Study Reporting Tool(SRT)”, <https://nontargetedanalysis.org/srt/>, 검색일: 2024.5.29.

CAS, “CAS Databases”, <https://www.cas.org/support/documentation/cas-databases>, 검색일: 2024.3.22.

Cefic(2023), “Profile”, <https://cefic.org/a-pillar-of-the-european-economy/facts-and-figures-of-the-european-chemical-industry/profile/#h-world-chemical-sales-by-comparaison-top-10-countries>, 검색일: 2024.4.24.

Department Omgeving, “Which research HBMP”, <https://omgeving.vlaanderen.be/nl/which-research-hbmp>, 검색일: 2024.9.4.

DSFP, “Digital Sample Freezing Platform”, <https://dsfp.norman-data.eu/>, 검색일: 2024.9.9.

DSFP, “European Dust”, <https://dsfp.norman-data.eu/dataset/0e768057-6883-4157-b09b-3da019c47431>, 검색일: 2024.9.10.

Dulio, V. and R. Aalizadeh(2017), “S16 | FRENCHLIST | French Monitoring List (NORMAN-SLE-S16.0.1.0) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/records/2624325>, 검색일: 2024.5.20.

Eawag, “Portrait”, <https://www.eawag.ch/en/about-us/portrait/>, 검색일: 2024.5.17.

Eawag, “Searching for Unknown Substances”, https://www.eawag.ch/fileadmin/Domain1/Abteilungen/uchem/analytik/pdf/Eawag_News_73__Searching_for_unknown_substances.pdf, 검색일: 2024.3.22.

Eawag, “Suspect and Non-Target Screening of Organic Micropollutants in Swiss Ground waters”, <https://www.eawag.ch/en/departement/uchem/projects/suspect-and-non-target-screening-of-organic-micropollutants-in-swiss-groundwaters/>, 검색일: 2024.6.12.

Eawag, “Target- and Non-Target Screening of Organic Pollutants at the International Monitoring Station of the River Rhine at Basel”, <https://www.eawag.ch/en/departement/uchem/projects/target-and-non-target-screening-of-organic-pollutants-o>

- f-the-rhine-at-basel/, 검색일: 2024.6.12.
- EC, “Emerging Issues and the Role of the SCHEER Position Paper (2018)”, https://health.ec.europa.eu/document/download/d77a2d8f-6c55-49d7-a682-de1fffce3cf4_en?filename=scheer_s_001.pdf, 검색일: 2024.6.12.
- ECHA(2019), “S47 | ECHAPLASTICS | A list from the Plastic Additives Initiative Mapping Exercise by ECHA (NORMAN-SLE-S47.0.1.0) [Data set]. Zenodo”, <https://zenodo.org/records/2658140>, 검색일: 2024.5.20.
- Environment Institute, “Company Profile”, <https://www.ei.sk/company.php>, 검색일: 2024.5.17.
- EUR-Lex(2015), “Commission Implementing Decision (EU) 2015/495: Establishing a Watch List of Substances for Union-Wide Monitoring in the Field of Water Policy Pursuant to Directive 2008/105/EC of the European Parliament and of the Council”, https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=uriserv%3AOJ.L_.2015.078.01.004.0.01.ENG, 검색일: 2020.5.22.
- Fischer, S.(2023), “S17 | KEMIMARKET | KEMI Market List (NORMAN-SLE-S17.0.1.8) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/records/8052664>, 검색일: 2024.5.20.
- HBM4EU, “Emerging Chemicals Screened in Human Samples”, https://www.hbm4eu.eu/wp-content/uploads/2019/04/HBM4EU_Indicator_8.1_emerging_chemicals_screening_September2020.pdf, 검색일: 2024.6.12.
- HBM4EU, “Policy Brief-Emerging Chemicals”, https://www.hbm4eu.eu/wp-content/uploads/2022/07/HBM4EU_Policy-Brief-Emerging-Chemicals.pdf, 검색일: 2024.6.12.
- HSAC, “Recommendations for a Prioritisation and Early Warning System (PEWS) on Chemicals in the Environment”, https://assets.publishing.service.gov.uk/government/uploads/system/uploads/attachment_data/file/992489/HSAC-recommendations-for-the-prioritisation-and-early-warning-system.pdf, 검색일: 2024.6.5.
- ICPR, “Background”, <https://www.iksr.org/en/iksr/rhein-2040/rhine-project-non-target-screening/background>, 검색일: 2024.6.10.
- ICPR, “Participants and Structure of the Project”, <https://www.iksr.org/de/iksr/rhein-2040/rhine-project-non-target-screening/participants-and-structure-of-the-project>, 검색일: 2024.6.10.
- ICPR, “Pilot Project on Non-Target Screening”, <https://www.iksr.org/en/iksr/rhein-2040/rhine-project-non-target-screening>, 검색일: 2024.6.10.
- LCSB, “Oveview”, <https://www.uni.lu/lcsb-en/>, 검색일: 2024.5.17.
- Meijer, J. et al.(2020), “S71 | CECScreen | HBM4EU CECScreen: Screening List for Chemicals of Emerging Concern Plus Metadata and Predicted Phase 1 Metabolites

(NORMAN-SLE-S71.0.1.1) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/records/3957497>, 검색일: 2024.6.12.

Ministry of Denmark-Environmental Protection Agency, “Non-Targeted and Suspect Screening of Sewage Sludge(HITLIST4)”, <https://www2.mst.dk/Udgiv/publications/2022/09/978-87-7038-445-2.pdf>, 검색일: 2024.6.5.

National and Kapodistrian University of Athens, “About us”, https://en.uoa.gr/about_us/, 검색일: 2024.5.17.

NEN, “About NEN”, <https://www.nen.nl/en/about-nen>, 검색일: 2024.8.16.

NEN, “Guideline for Non-Target Screening of Organic Compounds in Water with Chromatography And Mass Spectrometry”, <https://www.nen.nl/en/nta-8033-2021-en-288681>” 검색일: 2024.8.16.

Neveu, V. et al.(2019), “S34 | EXPOSOMEXPL | Biomarkers from Exposome Explorer (NORMAN-SLE-S34.0.1.0) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/records/2653032>, 검색일: 2024.5.20.

NILU, “About NILU”, <https://nilu.com/about-nilu/>, 검색일: 2024.5.17.

NIVA, “About Us”, <https://www.niva.no/en/about>, 검색일: 2024.5.17.

NORMAN, “Welcome to the NORMAN Network”, <https://www.normandata.eu/>, 검색일: 2024.5.17.

NORMAN, “Cross-Working Group Activity NTS”, <https://www.normandata.eu/?q=node/252>, 검색일: 2024.5.17.

NORMAN, “NORMAN Suspect List Exchange”, <https://www.norman-network.com/?q=suspect-list-exchange>, 검색일: 2024.5.20.

NORMAN, “NORMAN SLE”, <https://www.norman-network.com/nds/SLE/>, 검색일: 2024.5.20.

NORMAN, “NORMAN Workshop on NTS for Regulators”, <https://www.norman-network.com/?q=node/324>, 검색일: 2024.5.23.

NORMAN, “NORMAN Workshop on NTS for Regulators-Programme”, https://www.norman-network.com/sites/default/files/files/Events/2018/Workshop_Brussels/Norman%20NTS%20Workshop%20Brussels_25Oct2018_Programme_NRW_full_0928.pdf, 검색일: 2024.5.23.

NORMAN Network et al.(2024), “S0 | SUSDAT | Merged NORMAN Suspect List: SusDat (NORMAN-SLE-S0.0.5.1) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/records/10510477>, 검색일: 2024.5.20.

Oltmanns, J. et al.(2019), “S54 | EFSAPRI | European Food Safety Authority Priority Substances (NORMAN-SLE-S54-0.1.0) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/rec>

- ords/3248994#.XRM7Z-szapo, 검색일: 2024.5.20.
- PARC, “Additional Deliverable AD4.5”, https://www.eu-parc.eu/sites/default/files/2023-11/PARC_AD4.5.pdf, 검색일: 2024.6.13.
- PARC, “What We Do”, <https://www.eu-parc.eu/what-we-do>, 검색일: 2024.6.12.
- Rijkswaterstaat, “Non-Target Screening (NTS) bij Rijkswaterstaat - werkzaamheden 2023”, <https://open.rijkswaterstaat.nl/open-overheid/onderzoeksrapporten/@260778/non-target-screening-nts-rijkswaterstaat/#highlight=NTS>, 검색일: 2024.6.12.
- Rudel, H.(2018), “S28 | EUBIOCIDES | Biocides from the NORMAN Priority List (NORMAN-SLE-S28.0.1.1) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/records/3542001>, 검색일: 2024.5.20.
- Sims, K.(2022), “Chemicals of Concern: A Prioritisation and Early Warning System for England”, p.1, <https://zenodo.org/records/7790935>, 검색일: 2024.6.5.
- ThermoFisher, “대사체학을 위한 HRMS 질량분석법”, <https://www.thermofisher.com/kr/ko/home/industrial/mass-spectrometry/mass-spectrometry-learning-center/mass-spectrometry-applications-area/metabolomics-mass-spectrometry/overview-mass-spectrometry-metabolomics/hram-mass-spectrometry-metabolomics.html>, 검색일: 2024.5.17.
- Trier, X. and D. Lunderberg(2015), “S9 | PFASTRIER | PFAS Suspect List: Fluorinated Substances (NORMAN-SLE-S9.0.1.2) [Data set]”, *Zenodo*, <https://zenodo.org/records/6348860>, 검색일: 2024.5.20.
- UBA, “Ad-Hoc Assessment for Water Monitoring of the Future”, https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/3521/dokumente/short_description_water_monitoring_of_the_future.pdf, 검색일: 2024.6.10.
- UBA, “NTS Portal”, <https://www.umweltbundesamt.de/en/gewasserbeobachtung-der-zukunft-nts-portal>, 검색일: 2024.6.10.
- UBA, “Organisation”, <https://www.umweltbundesamt.at/en/aboutus/en-organisation>, 검색일: 2024.6.3.
- UFZ, “Our vision”, <https://www.ufz.de/index.php?en=34258>, 검색일: 2024.5.17.
- US EPA, “Cross-Laboratory Comparison of Non-Targeted Analysis Method Performance Using Complex Synthetic Mixtures”, https://epa.figshare.com/articles/presentation/Cross-Laboratory_Comparison_of_Non-Targeted_Analysis_Method_Performance_using_Complex_Synthetic_Mixtures/22294456, 검색일: 2024.5.29.
- US EPA, “EPA’s Non-Targeted Analysis Research Program: Building Tools to Enable Rapid Exposure Surveillance”, https://epa.figshare.com/articles/presentation/EPA_s_Non-Targeted_Analysis_Research_Program_Building_Tools_to_Enable_Rapid_Exp

osure_Surveillance/11356397, 검색일: 2024.5.29.

US EPA, “EPA’s Non-Targeted Analysis WebApp: A Web-Based Software Tool for Production-Level NTA”, https://epa.figshare.com/articles/presentation/EPA_s_Non-Targeted_Analysis_WebApp_A_web-based_software_tool_for_production-level_NTA/25438639, 검색일: 2024.5.29.

US EPA, “Genesis and Study Design for EPA’s Non-Targeted Analysis Collaborative Trial (ENTACT)”, https://www.epa.gov/sites/default/files/2018-06/documents/comptox_cop_6-28-18.pdf, 검색일: 2024.5.29.

US EPA, “Non-Targeted Analysis Research”, <https://www.epa.gov/chemical-research/non-targeted-analysis-research>, 검색일: 2024.5.29.

부록

I. Study Reporting Tool(SRT) – US EPA

I. Study Reporting Tool(SRT) – US EPA

[사용 전 안내 사항]

목적: SRT는 비표적 분석 연구자와 검토자의 NTS 연구 보고 품질을 평가하기 위해 개발되었다. 산출된 점수는 현재 NTS가 활용되고 있는 환경, 식품, Exposome, 대사체학 분야의 주요 연구 측면을 바탕으로 보고 내용의 완전성과 투명성을 평가한다. SRT는 연구나 결과 데이터 자체의 품질을 평가하는 것이 아니다.

SRT 사용의 주목적은 연구자가 연구의 세부 정보를 상세하게 제공하여 방법의 세부사항을 이해하고 분석을 재현하며, 연구 간 비교를 가능하게 하고, 연구의 설계 선택이 결과에 미치는 영향을 평가할 수 있도록 하는 데 있다.

SRT의 두 가지 보조적인 사용을 권장한다.

- (1) 연구 설계 지침으로의 활용: 보고해야 할 사항을 고려함으로써 NTS의 필수적 요소를 연구 설계에 통합할 수 있도록 한다.
- (2) 관련 참조 자료 및 자원으로 접근: BP4NTA 웹사이트와 SRT 내부 활성 링크를 통해 참조 자료와 리소스에 접근할 수 있다.

주의사항 및 지침: 보고해야 할 예시 정보에 있는 모든 항목이 모든 연구에 필수적인 것은 아니며, 환경학이나 대사체학 등 연구 분야의 차이와 독성물질의 발견, 생물학적 분석 등 연구 목표의 차이에 따라 달라질 수 있다. 연구자와 검토자는 전문성과 판단력을 활용하여 특정 연구에 해당하는 항목과 언급되지 않은 추가 세부사항이 보고에 중요한지를 판단해야 한다. 특정 하위 카테고리는 해당 연구와 관련이 없을 수 있으며(NA 선택 가능), 전체적인 보고 품질과 완전성에서 덜 중요할 수 있다. 이러한 측면을 평가할 때, 연구 유형 및 목표와 하위 카테고리 간 개념적 연계성을 고려할 것을 권장한다. 검토자는 저자나 연구자가 우려 사항을 해결할 수 있도록 이유를 포함한 평가도 권장된다.

점수 체계: NA=해당 없음, 3(파란색)=최고 점수, 0(빨간색)=최저점수

상세 점수 설명표는 'www.nontargetedanalysis.org/srt/#srt-score-table'에서 확인할 수 있으며, 요약 내용이 표에 제공된다.

부록 표 1 SRT 상세 내용

구분	카테고리	하위 카테고리	보고 정보의 예	점수	점수 근거	
방법	연구 디자인	목적과 범위	<ul style="list-style-type: none"> 연구 목표와 가설 SNTS의 활용과 관련된 연구의 범위 접근 방식의 예상 화학물질 또는 대사체의 범위와 잠재적 한계 			
		시료 정보와 전처리	<ul style="list-style-type: none"> 시료 수집/반복, 취급/저장, 전처리, 추출, 정제 방법(및 관련 품질관리) 의도된 시료의 사용 목적(예: 분석법 개발, 물질 확인 등) Blank의 개발 및 의도된 사용 목적 			
		QC Spikes와 시료	<ul style="list-style-type: none"> QC Spike/시료의 개발(예: 동위원소 치환 표준물질, 일반 표준물질 spikes, 매트릭스 pools) QC Spike/시료의 의도된 사용 목적(예: 기기 성능 모니터링, 데이터 정규화, 신호 반응의 범위 평가 등) 및 관련된 계산 또는 시각화(예: Spiked QC 화합물의 질량 오차, 시간에 따른 신호 반응 그래프 등) 			
	데이터 수집	분석 절차	<ul style="list-style-type: none"> 시료 무작위화 및 반복된 주입 사용(예: 기술적/분석적 반복, 현장/실험실 생물학적 반복) 데이터 분석 순서 내 blank와 정도관리 시료 포함 여부 단일 분석 배치와 다중 분석 배치에 대한 정보 			
		크로마토그래프	<ul style="list-style-type: none"> 참고: 크로마토그래프는 질량 분석 전에 사용되는 모든 온라인 분리 기술을 포함 			
		질량분석기	<ul style="list-style-type: none"> 기기 사양 분석법 설정(예: 컬럼/기드컬럼, 이동상, 그라디언트, 주입 기술 등) 기기 사양 기기 보정(Calibration) 또는 튜닝 절차 분석법 설정(예: 극성, 분해능, data-dependent, data-independent 등 분석 parameters) 			
	데이터 처리와 분석	데이터 처리	데이터 처리	<ul style="list-style-type: none"> 파일 변환 정보(예: 오픈소스 양식, centroiding) 사용된 소프트웨어 프로그램 위크플로 단계(peak 추출, 머무름 시간 보정, alignment, gap filling)와 설정 Feature 검출 임계값(예: 반복 검출 기준, 최소 높이, 면적 또는 Signal to noise ratio, blank에서의 발생과 빈도와의 비교) 데이터 보정 또는 정규화 방법(예: peak 면적/높이 정규화 또는 scaling, blank 차감) 		

부록 표 1의 계속

구분	카테고리	하위 카테고리	보고 정보의 예	점수	점수 근거
방법	데이터 처리와 분석	통계 및 chemometric(화학적 데이터)	<ul style="list-style-type: none"> • 사용된 소프트웨어 프로그램/package 및 분석이 적용된 시료/시료 그룹 • 기본 통계분석 방법의 목표(예: 데이터 요약, 변동성 평가, 가설 검증, 이상치 식별), 유형(예: Wilcoxon 순위 합 검증, 카이제곱 검증, 분산비 평가, Spearman/Pearson 상관성 평가), 가정, 설정/임계값 • Chemometric 분석 방법의 목표(예: feature 우선순위화, 시료의 비교와 분류, features 간 연관성 평가), 유형(예: differential 분석, 주성분 분석, 계층적 군집화, 차원 축소, 대사 경로 분석), 가정, 설정/임계값 		
		Annotation과 물질 확인(Identification)	<ul style="list-style-type: none"> • 사용된 소프트웨어 프로그램(또는 manual annotation/물질 확인)에 대한 설명 • 사용된 라이브러리와 데이터베이스(화학물질 범위, 분해능, 메타데이터 포함 여부, in-house 데이터베이스 정보) • 워크플로 단계(예: 화학구조 지정, 의심 물질 스크리닝, MS/MS 스펙트럼 해석 또는 라이브러리 매칭) • 워크플로의 방법과 설정(예: 화학구조 예측 모델, 점수 부여 알고리즘, 질량오차/머무름 시간 허용치, 허용된 매칭 점수) 		
결론	데이터 아웃	통계 및 chemometric(화학적 데이터)	<p>기본 통계 결과(예: 조정된 p-value, 표준 편차, 검정 통계량)</p> <ul style="list-style-type: none"> • Chemometric 분석 결과(예: 보고된 feature/시료의 분류와 그룹화, 이상치 제거, 관찰된 데이터 경향, 대사 경로 분석) • 시각화/plots(예: 벤다이어그램, heatmaps, 군집화 dendrograms, volcano plots, box plots, 네트워크 다이어그램, 주성분분석과 loading plots, 분자 네트워크 다이어그램) • 새로운 통계 지표, 알고리즘, 패키지 또는 스크립트 		
		물질 확인과 신뢰도 레벨	<ul style="list-style-type: none"> • 보고된 물질 확인법과 연관된 신뢰도 수준(예: Schymanski 레벨에서 설명된 수준) • Annotation/물질 확인을 위한 지원 데이터(예: 구조 매칭 점수, 세부 동위원소 패턴, 머무름 시간 매칭, MS/MS 매칭 점수, MS/MS 스펙트럼 출처) • 낮은 신뢰도 feature의 식별(표준으로 확인되지 않은)의 경우 제안된 잠재적 구조와 기타 annotated 데이터 • 추정적 정량 또는 정량 데이터 • 추출된 MS/MS 스펙트럼(예: 라이브러리, 데이터베이스 또는 온라인 저장소) 		

부록 표 1의 계속			
구분	카테고리	하위 카테고리	보고 정보의 예
결론	데이터 처리와 분석 품질관리	데이터 수집 및 품질관리	<ul style="list-style-type: none"> • 품질: 시료 전처리와 데이터 수집을 위한 정도관리 프로토콜 준수 여부 • 한계: 시료 전처리, 크로마토그래프, 질량분석기와 같은 방법이 관찰된 화학물질 범위에 미치는 잠재적 영향 설명 • 정확도: 보고된 크로마토그래프와 질량 분석의 정확도 • 정밀도: 관찰된 머무름 시간, 전구체 질량 오차, 농도(abundance)의 변동성
		데이터 처리 및 품질관리	<ul style="list-style-type: none"> • 품질: 데이터 처리 및 분석 워크플로에서 QC 확인과 필터링 단계의 결과 • 한계: 데이터 처리 및 후속 분석 방법이 관찰된 화학물질의 범위와 검출 또는 식별 한계에 미치는 영향 • 정확도: 알려진 물질 또는 분류가 알려진 시료에 대한 성능 지표(True Positive Rate, False Positive Rate 등) • 정밀도: 알려진 물질 또는 분류가 알려진 시료에 대한 성능 지표의 재현성/반복성 • False Discovery Rate, F1 점수 등의 계산
			점수
			점수 근거

Advancing the Korean Chemical Monitoring System by Introducing Suspect and Non-Target Screening Methods

Jeong, Yunsun et al.

1. Major Issues in the Current National Chemical Monitoring System

As the global production and use of chemicals continue to grow, the potential for environmental release and human exposure to hazardous chemicals also increases. However, the current national chemical monitoring system, which relies on target analysis for pre-selected chemicals, has significant limitations in terms of the range of chemicals to be monitored. This approach leaves substantial gaps in chemical management. These gaps might prevent the system from achieving its primary goal: protecting public health and the environment. This issue was highlighted by a series of incidents, such as the detection of perfluorinated compounds in the Daegu water treatment plant in 2018, which caused significant public anxiety and widespread social unrest. Such events underscore the urgent need for a new methodology to complement and enhance the existing system.

2. Suspect and Non-Target Screening (SNTS)

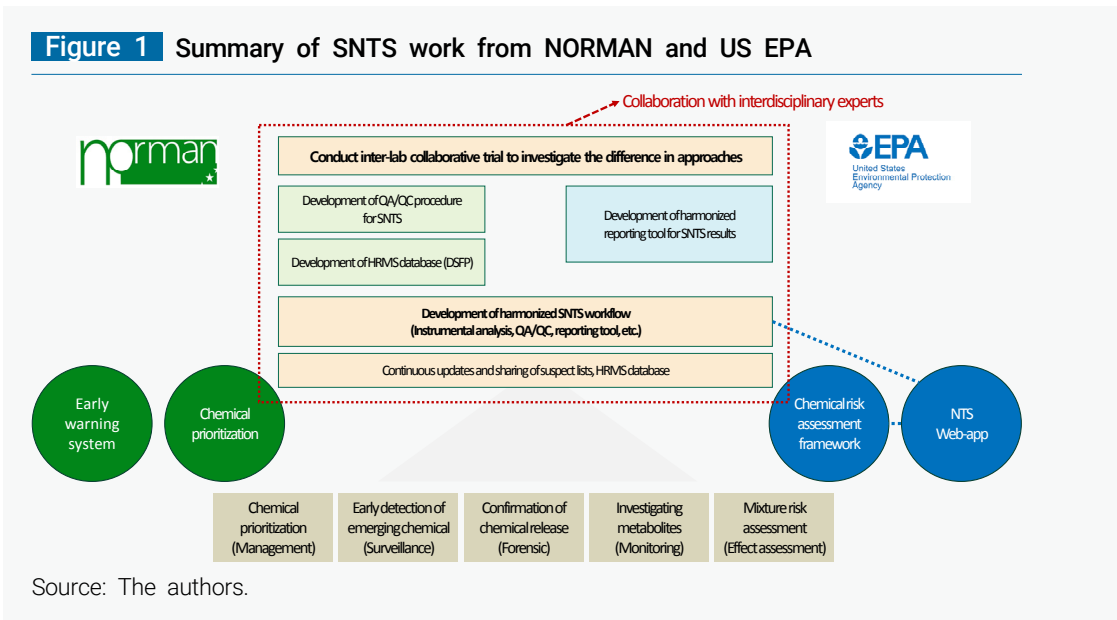
The SNTS method utilizes advanced analytical instruments with high resolution to perform large-scale screening and data analysis of chemicals. This approach enables the identification of previously unknown hazardous substances of concern. By transcending the limitations of traditional targeted analysis, SNTS offers a more comprehensive and exploratory framework for detecting new and emerging chemical threats in the environment and human.

2.1. International Trends in the Development of SNTS

The development of SNTS is led by the NORMAN Network in Europe and the U.S. Environmental Protection Agency (US EPA). Key activities undertaken by these organizations include (1) Conducting inter-laboratory validation experiments for SNTS technologies; (2) Developing quality control tools for accurate and reliable analysis; (3) Establishing standardized workflows to ensure consistent and harmonized data production; (4) Exchanging suspect screening databases and related resources.

In addition to these efforts, countries such as the United Kingdom, Austria, Denmark, Germany, and Switzerland are also actively working on the application of SNTS. Furthermore, major European research initiatives, such as the Human Biomonitoring for Europe (HBM4EU) and the Partnership for the Assessment of Risks from Chemicals (PARC), are advancing SNTS-related research to enhance chemical monitoring and risk assessment capabilities across Europe.

Figure 1 Summary of SNTS work from NORMAN and US EPA



2.2. Domestic Trends in the Development of SNTS

Since 2018, a total of 27 SNTS-related projects have been conducted in South Korea, categorized into six areas based on their specific applications. The development of SNTS analytical techniques has been pursued by national institutions responsible for chemical monitoring, such as the National Institute of Environmental Research (NIER), and has extended into various fields, broadening its scope of application. Among researches, a notable example is the study on the "Establishment and Operation Roadmap for the National Environmental Health Biobank," where SNTS was applied to national monitoring samples. This study successfully identified hazardous chemicals of concern that were not part of the existing monitoring targets. These results demonstrate the potential of integrating SNTS into the national monitoring system, validating its effectiveness in enhancing chemical surveillance capabilities.

Table 1 Status of Domestic SNTS-Related Projects

SNTS Application Categories	Number of completed/ongoing projects
Development of Analytical Methods	3
Chemical Management	4
Monitoring Hazardous Chemical Exposure	6
Toxicological and Health Impact Assessments	5
Chemical Exposure Forensics	4
Advancing Monitoring Systems	5

Source: The authors.

3. Establishing a Policy Foundation for the Domestic Application of SNTS

3.1. Development of Guidelines for SNTS Method

The establishment of a SNTS guideline is crucial for ensuring consistent and reliable analyses in the domestic context. A proposed draft guideline has been presented, incorporating the necessary elements to achieve this objective. The draft consists of 10 sections, with detailed content outlined for each section. These sections may be adjusted or refined during the development and discussion stages, as needed.

Table 2 Draft Table of Contents and Details for a General SNTS Guideline

Table of Contents	Contents
Overview of SNTS	Introduction to the Concept, Principles, and General Procedures of SNTS
Terminology and Definitions	Explanation of Terms, General Definitions, and Abbreviations
Sample Collection and Pretreatment	Standard Sample Collection Methods by Matrix and Precautions
Instruments and Software	Minimum Selection Criteria for Chromatographs (LC, GC) and Mass Spectrometers (TOF, Orbitrap) for SNTS Analysis (e.g., Resolution, Mass Accuracy, etc.)
Data Processing	Data Preprocessing Methods Including Software Selection, Blank Correction, and Statistical Analysis
Compound Identification and Confidence Level Determination	Presentation of Confidence Level Determination Methods (Criteria for Confidence Level Identification)
Quality Assurance/Quality Control	Information on Internal and External Standards, Blanks, Reproducibility, Sensitivity, Instrument Calibration, Data Processing Algorithms, and Workflow Management

Table 2 (continued)

Table of Contents	Contents
Semi-quantification Methods	Guidelines for Selecting and Applying Quantification Methods
Result Evaluation	Detailed Description of Result Evaluation Factors
Result Reporting	Provision of Detailed Templates for Reporting Results

Source: The authors.

3.2. Development of a Suspect Screening List, Exchanging System, and HRMS Database

The suspect list becomes more effective and facilitates quicker application of results when it includes comprehensive information. Key data points such as production volume, emission levels, usage, toxicity, existence of regulatory thresholds, unique physicochemical properties, and analytical information should be incorporated to maximize its utility. The suspect list should be designed using widely accepted formats to facilitate its expansion and exchange. A foundational structure should be established, allowing for further customization as needed.

The HRMS (High-Resolution Mass Spectrometry) database should be developed by referencing existing systems such as the DSFP from the NORMAN Network or the NTS Web-App from the US EPA. These references provide a robust foundation for creating a system tailored to domestic needs while maintaining global compatibility and standards.

3.3. Proposal for Policy Decisions Based on Substance Identification Confidence Levels

When new substances are identified through the application of SNTS within the hazardous chemical monitoring system, their confidence levels will be determined based on criteria outlined in the developed guidelines. These confidence levels will serve as the basis for deciding the appropriate course of action for each identified substance. To ensure consistency and effectiveness, general confidence level criteria will be established, detailing the necessary verification parameters. In addition, policy response strategies corresponding to each confidence level have been proposed, providing a framework for how to manage newly identified substances. These strategies will help integrate scientific findings into actionable policies, ensuring timely and effective responses to emerging chemical risks.

Table 3 Proposed Monitoring Actions Based on Confidence Levels

Level	Verification Criteria	Check List		Decision
Level 1	Mass, isotopic pattern, RT, and mass spectrum of the identified chemical match those of the reference standard	<ul style="list-style-type: none"> • Toxicity • Detection Frequency • Concentration 		[List in Monitoring System]
Level 2a	Mass spectrum of the identified chemical matches that of the chemical in the mass spectrum library.	<ul style="list-style-type: none"> • Detection Frequency • Comparison between preexisting criteria with semi-quantified results 	<ul style="list-style-type: none"> • Synthesize reference standard • Toxicity 	[List in Chemicals Under Priority Observation]
Level 2b	If the comparable mass spectrum of the matched chemical is absent in the library: (1) The mass spectrum matches the experimental results of previously published studies; (2) Structural analysis is performed using the mass spectrum of the identified chemical, and a specific diagnostic mass spectrum is present.			
Level 3	A portion of the structure of the matched chemical is confirmed through the mass spectrum of the identified chemical.			[List in Priority chemicals for Management]
Level 4	The mass of the matched and identified chemical is confirmed with a small error (< 5 ppm), and their isotopic patterns match.	[New Chemicals of Interest] Included as substances with low priority, subject to continuous information collection and review.		
Level 5	Not Considered as a Monitoring Compound			

Source: The authors.

3.4. Establishment of an SNTS Expert Advisory Group

The successful implementation of the aforementioned preliminary tasks requires the support of an expert advisory group with extensive professional knowledge. As seen in the development of guidelines in Germany and the Netherlands, which were formulated through expert working groups, the establishment of a similar group in Korea is essential for laying the foundation for SNTS-related guidelines and frameworks. The group should consist of professionals capable of

providing technical and practical advice, including experts in hazardous chemical monitoring, SNTS methodologies, chemical management, and practitioners with hands-on experience in monitoring systems. A comprehensive list of such experts has been compiled to form the advisory group.

4. Strategies for Introducing SNTS and Roadmap

4.1. Proposal for Introducing SNTS into Human Chemical Monitoring Systems

In the hazardous chemical monitoring system for humans, we propose selecting populations with high exposure concentrations for applying SNTS. In addition to exposure concentration-based selection, other criteria may include, such as unique concentration distribution patterns of hazardous chemicals (e.g., exceptionally high levels of specific substances) or particular factors such as residence in specific areas identified through surveys. Considering analytical complexity, urine is suggested as a starting medium for SNTS applications since it contains fewer interfering substances compared to blood, simplifying the analysis procedure. Once SNTS technology becomes more standardized and widely adopted, another proposed approach is to include substitutes, isomers, and homologous of currently monitored substances. This will enable the identification of related substances that may have similar impacts, providing a more comprehensive understanding of the presence and effects of hazardous chemicals.

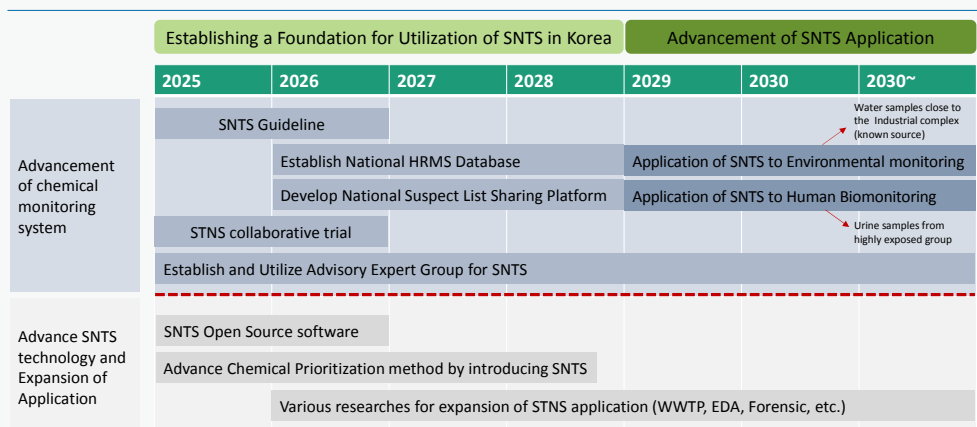
4.2. Proposal for Introducing SNTS into Environmental Chemical Monitoring Systems

For environmental samples, the most practical and reasonable approach is to perform suspect screening in areas predicted to be sources of pollution (e.g., industrial complexes) or locations identified through historical data as having high or unusual concentrations. Based on the results of suspect analysis, detailed investigations of the selected areas can be conducted. In national chemical monitoring systems where various matrices are collected, prioritizing the application of SNTS to water samples or sediment samples (if the water sample is not freshwater) is recommended. This approach is more feasible from the perspective of analytical complexity, making the initial application of SNTS to these media easier and more effective.

5. Proposed Roadmap for Implementing SNTS

Based on the reviewed content, a mid-to-long-term roadmap for the national implementation of SNTS has been proposed. Through the execution of this roadmap, the limitations and blind spots of Korea's hazardous chemical monitoring system can be addressed. This will ultimately contribute to protecting both public health and the environment.

Figure 2 Roadmap for Advancing the Chemical Monitoring System by implementing SNTS



Source: The authors.

6. Conclusion

This study explored various strategies for introducing SNTS to enhance Korea's chemical monitoring system and proposed a mid-to-long-term roadmap. By examining both domestic and international advancements in technology and policy trends, the study identified essential steps for establishing the foundation for SNTS implementation in Korea. Priority tasks were outlined, and practical implementation strategies were suggested. Finally, the roadmap encompasses the entire process from building the foundation for SNTS adoption to technological advancement and policy integration. This approach aims to improve and complement the current chemical monitoring system while driving a paradigm shift in chemical management frameworks. The adoption and expansion of SNTS are expected to make a significant contribution to enhancing the management of hazardous chemicals in Korea. Furthermore, the introduction of SNTS will play a crucial role in supporting evidence-based policy decisions and ultimately ensuring the safety of both the public and the environment.

Keywords Suspect Screening, Non-Target Screening, Emerging Contaminants, Chemical Monitoring, Chemical Management

저자약력

정윤선(연구책임)

한양대학교 환경분석화학 박사
한국환경연구원 부연구위원(현)
yjeong@kei.re.kr

주요 연구실적

- 잔류성유기오염물질 위해관리 강화를 위한 최신 국제동향 분석 (2023)
- 화학안전평가의 동물대체시험법 활성화를 위한 법·제도 개선방안 연구 (2023)

정다운

한국환경연구원 연구위원(현)
dwjung@kei.re.kr

김준태

한국과학기술연구원 선임연구원(현)
jt0102@kist.re.kr

강하병

한양대학교 조교수(현)
habyongkang@hanyang.ac.kr