Korean Chem. Eng. Res., 64(4), 105175 (2026)
https://doi.org/10.9713/kcer.2026.64.4.105175
PISSN 0304-128X, EISSN 2233-9558

발색반응을 활용하는 현장 신속 분석 방법

김성봉*,† · 정근홍** · 정진영*** · 유하영****

*육군사관학교 화학과
01805 서울 노원구 화랑로 574
**서강대학교 화학과
04107 서울 마포구 백범로 35
***(주)팜클 R&D센터
25244 강원 횡성군 우천면 우천산업단지로 84-45
****상명대학교 생명공학과
03016 서울 종로구 홍지문 2길 20
(2026년 4월 28일 접수, 2026년 7월 15일 수정본 접수, 2026년 7월 29일 채택)

Rapid, On-site Analytical Method Utilizing Colorimetric Reactions

Sungbong Kim*,†, Keunhong Jeong, Jinyoung Chung*** and Hahyoung Yoo****

*Department of Chemistry, Korea Military Academy, 574 Hwarang-ro, Nowon-gu, Seoul, 01805, Korea
**Department of Chemistry, Sogang University, 35 Baekbeom-ro, Mapo-gu, Seoul, 04107, Korea
***R&D Center, Pharmcle Co., Ltd, 84-45 Ucheonsaneopdanji-ro, Hoengseong-gun, Gangwon-do, 25244, Korea
**** Department of Biotechnology, Sangmyung University, 20 Hongjimun 2-gil, Jongro-gu, Seoul, 03016, Korea
(Received 28 April 2026; Received in revised from 15 July 2026; Accepted 29 July 2026)

요 약

신규 개발된 산소계 및 염소계 거품형 제독제에 대한 온도와 제독제 투입량이 분해 성능에 미치는 영향을 반응표면분석법(RSM)을 통해 정량화 하였다. 또한 염소계 거품형 제독제의 실험 결과 반응 속도론(kinetics)을 통해 온도상승에 따른 제독속도 증가를 분석하였다. p-nitrophenol을 이탈기로 가지는 유사 또는 실제 작용제의 경우 제독반응 후에 약 400 nm 파장에서 발색을 하게 되는데, 이는 현장 분석 시 CCD기반의 장치를 통한 신속한 색변화분석을 통해 오염정도 및 제독여부를 시각적 정량적 평가를 가능하게 한다. 색 분석 수행 시 외부 광원에 의한 색 왜곡 문제를 해결하기 위해, 다양한 조명환경에서 발생한 RGB 데이터의 편차를 CIE L*a*b* 색 공간 정규화 알고리즘으로 보정하였다. 이를 통해 다른 광원 조건에서도 시료 고유의 농도 정보가 통계적으로 유효한 범위 내에서 하나의 표준 검량선으로 수렴됨을 확인하였다. 최종적으로 실제 콘크리트 및 CARC 도장 시편을 활용한 실증테스트에서 제독 후 거즈로 회수된 제독 결과와 잔류 유사 작용제 양에 대한 분석을 통해 본 제안이 복잡한 현장 환경에서 효과적인 도구로 쓰일 수 있는 가능성을 확인하였다.

Abstract – This study presents an integrated analytical framework combining colorimetric reactions with optical normalization for the rapid evaluation of decontamination efficiency against chemical agent surrogates (pNPDPP). Using Response Surface Methodology (RSM), we quantified the synergistic effects of temperature and dosage on the performance of novel oxygen-based and chlorine-based foam decontaminants. For chlorine-based foams, kinetic analysis confirmed accelerated degradation as temperatures and decontaminant quantities increased. Specifically, decontaminating pNPDPP triggers a distinct ~400 nm colorimetric response. By utilizing CCD-based field devices, this mechanism enables rapid visual and quantitative assessment of contamination. To address the challenges of light-induced color distortion, RGB data were corrected using a CIE L*a*b* normalization algorithm ensuring sample concentrations converged into a statistically valid master calibration curve despite ambient lighting variances. Field tests on concrete and CARC-coated substrates validated the framework's robustness, demonstrating its potential as a precise tool for decontamination verification within complex field environments.

Key words: Decontamination, Colorimetric reactions, CIE lab, On-site analysis, pNPDPP

† To whom correspondence should be addressed.
E-mail: etendard@kma.ac.kr
This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

1. 서 론

현대 사회에서 화학 사고 및 테러(CBRN: Chemical, Biological, Radiological, and Nuclear)는 국가 안보와 국민의 생명에 직결되는 중대한 위협으로 간주된다. 특히 신경작용제(Nerve agent)를 포함하는 고독성 화학작용제는 극소량의 노출만으로도 치명적인 인명 피해를 야기할 수 있으며, 사고발생 시 신속한 탐지와 정확한 제독 여부 판단은 피해 확산을 방지하기 위한 핵심 요소이다[1-3]. 일반적으로 오염 지역에 대한 정밀 분석은 현장에서 채취한 시료를 실험실로 운송하여 가스 크로마토그래피(GC), 질량 분석기(MS) 등 고가의 정밀 분석 장비를 통해 수행된다. 그러나 이러한 전통적인 방식은 시료 이송 및 전처리 과정에서 막대한 시간이 소요될 뿐 아니라, 긴박한 사고 현장에서 실시간으로 제독 효율을 평가하고 후속조치를 결정하기에는 시의성 측면에서 뚜렷한 한계를 가진다[4-7].

이러한 배경 하에 최근 학계 및 산업계에서는 별도의 전처리 과정 없이 현장에서 즉각적으로 오염물질의 농도를 측정할 수 있는 현장 신속분석 교리에 주목하고 있다[8-10]. 그 중에서도 발색 반응을 활용한 분석법은 별도의 복잡한 광학 장비 없이도 시각적인 변화를 통해 직관적인 정성 평가가 가능하며, 스마트폰이나 CCD 기반의 휴대용 카메라를 활용할 경우 디지털 이미지 분석을 통한 정량적 데이터 도출이 용이하다는 강력한 장점을 지닌다[11-13].

그러나 발색반응을 기반으로 한 현장 분석법이 실험실 수준의 정밀도를 확보하기 위해서는 외부 조명에 따른 색상왜곡 문제를 해결해야한다. 실험실 내 통제된 광원 환경과 달리, 실제 사고현장은 다양한 색 온도와 분광 특성을 가진 광원이 존재한다. CCD센서가 인식하는 RGB 값은 주변 광원의 강도와 파장에 민감하게 반응하기 때문에, 동일한 농도의 시료일지라도 조명 조건에 따라 전혀 다른 결과값으로 도출될 위험이 크다. 이는 현장 분석 결과의 신뢰도를 저하시키는 가장 큰 요인이다[14,15].

따라서 본연구에서는 신규 개발된 산소계 및 염소계 거품형 제독제의 최적 반응 조건을 RSM을 통해 찾고, 다양한 조건의 조명 변동성에 대응하기 위해 여러가지 색온도에 따라 획득한 RBG 값을 CIE Lab 색공간정규화 알고리즘을 통해 보정하는 방법을 제안하였다. 신규개발된 거품형 제독제를 미지농도의 pNPDPP가 묻은 콘크리트 시편을 제독반응에 적용시켰을 때 색공간 정규화 표준 곡선을 이용한 예측 및 잔여 pNPDPP 양을 측정하여 제독제의 우수함과 제안된 색분석 방법의 현장 적용 가능성에 대해 토의 하였다[18].

2. 재료 및 방법

2-1. 시약 및 분석

본 연구에서 사용된 유기인계 유사작용제인 p-nitrophenyl diphenyl phosphate (pNPDPP)는 기보고된 합성 절차에 따라 제조되었다. 상온에서 THF (20 cm^3)를 교반하며 titanium tetrachloride (0.02 cm^3, 0.17 mmol)를 첨가하였다. 이어서 p-nitrophenol (8.5 mmol), triethylamine (1.8 cm^3, 12.75 mmol), THF (10 cm^3), diphenyl chlorophosphate (2.65 cm^3, 12.75 mmol), THF (10 cm^3)를 순차적으로 가하였다. 반응용액을 1시간 동안 교반한 후 증류수(10 cm^3)를 첨가하고, 혼합물을 CH_2Cl_2 (20 cm^3 × 3회)로 추출하였다. 합쳐진 유기층을 $MgSO_4$로 건조 후 여과하였으며, 여액을 감압 농축하여 조생성물을 얻었다. 조생성물은 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다[16]. 합성된 pNPDPP는 ^{1}H NMR 및 UV-Vis spectroscopy를 통해 구조적 특성을 분석하여 표준 유사체로 사용하였다[17]. 반응물인 pNPDPP(흡광 피크 약 285 nm)와 분해생성물인 p-nitrophenol(피크 약 317 nm)은 약 30 nm의 근접한 차이를 보이는데, 고농도 측정 시 중첩을 막기 위해 HEPES 버퍼(pH 8.5)로 반응계의 pH를 조절하여 p-nitrophenolate (피크 약 400 nm)로 편이시켜 측정하였다[18].

2-2. RSM

pNPDPP의 분해 효율 최적화를 위해 온도(A)와 제독제량(B)의 두 가지 독립 변수를 설정하고, 중심합성설계(Central Composite Design, CCD)를 기반으로 총 13회의 실험을 수행하였다(Table 1) 온도는 현장 제독 환경을 모의하여 상온(30 ℃)을 중심점으로 설정하였으며, 변수 변화폭(±1.414)에 따라 최저 15.86 ℃에서 최고 44.14 ℃ 범위를 구성하였다(Table 2). 제독제량은 기초 실험을 통한 포화(Saturation) 지점을 근거로 100 μL (10%)를 중심값으로 지정하고, 최저값이 1 μL가 되도록 설계하였다.

반응 결과(Response, y)는 초기 반응 속도(Initial reaction rate) 비교를 위해 반응 개시 1분 시점(t=1 min)의 농도 변화를 입력값으로 사용하였다. 통계적 모델링은 다음과 같은 2차 다항 회귀 방정식을 사용하여 각 인자의 주효과, 이차항 및 상호작용을 분석하였다.

$$y = \beta_0 + \Sigma \beta_i X_i + \Sigma \beta_i x_i^2 + \Sigma \beta_{ij} X_i X_j$$

2-3. CIE lab 색정규화

발색 반응의 디지털 정량화를 위해 상용 소프트웨어(Adobe Photoshop)를 활용하여 시료 영역의 디지털 이미지로부터 RGB 값을 추출하였다. 외부 광원에 의한 색 왜곡을 보정하기 위해 백색 참조점(White reference)을 기준으로 CIE L*a*b* 값을 산출하였으며, 다음의 수식을 통해 색차(Δ*E*)를 정의하였다.

$$\Delta E^*_{ab} = \sqrt{\left(L^*_n - L^*_0\right)^2 + \left(a^*_n - a^*_0\right)^2 + \left(b^*_n - b^*_0\right)^2}$$

여기서 L_n, a_n, b_n은 각 측정 위치에서의 색 좌표이며, L_0, a_0, b_0은

Table 1. Design of experiments

run	Temp (°C)		Cat Quant (uL)		Response
1	0	30	0	100	0.119
2	0	30	0	100	0.126
3	0	30	0	100	0.108
4	-1.414	15	0	100	0.089
5	0	30	0	100	0.117
6	1	40	1	170	0.122
7	0	30	1.414	200	0.129
8	0	30	-1.414	1	0.004
9	1	40	-1	30	0.043
10	1.414	45	0	100	0.139
11	-1	20	1	170	0.036
12	-1	20	-1	30	0.101
13	0	30	0	100	0.116

Table 2. Coded values and real values

	-1.414	-1	0	1	1.414
Temp	15.86	20	30	40	44.14
Cat Q	1.02	30	100	170	198.98

백색 참조 영역의 좌표값이다. 이를 통해 다양한 조명 환경에서도 농도에 따른 발색 지수(Extracted color index)를 객관화하였다 [19,20].

2-4. 제독후 잔여 유사작용제 분석

실제 시편에서의 제독 성능 검증은 색 분석과 잔량 정량 분석의 두 단계로 수행되었다. 먼저 콘크리트 및 CARC 시편에 5 mM pNPDPP 10 μL를 오염시킨 후, 거품형 제독제 0.5 mL를 적용하였다. 1분 후 거즈를 이용하여 표면 잔류물을 회수하였으며, 스마트폰(Galaxy S21)과 흰색 LED 광원을 사용하여 촬영된 이미지의 노란색 RGB 값을 CIE L*a*b* 알고리즘에 대입하여 미지 농도를 예측하였다.

잔여 작용제의 정량적 확인을 위해, 제독 반응이 끝난 시편을 5 mL의 HEPES 버퍼로 린스하여 수집한 뒤 즉시 1 M $Na_2S_2O_3$ 용액 1 mL를 투입하여 반응을 중단(quencing)시켰다. 린스액의 400 nm 흡광도를 1차 측정하여 '이미 분해된 양'을 파악한 후, 해당 시료에 과량의 강염기(1 M NaOH)를 투입하여 남아있는 모든 pNPDPP를 강제로 분해시키는 후반응(Post-reaction)을 유도하였다. 이후 재측정된 흡광도와 1차 측정값의 차이를 계산하여 시편에 남아있던 미반응 pNPDPP의 양을 도출하였으며, 이를 표준 검정 곡선에 대입하여 최종 잔류량을 정량화하였다.

3. 결과 및 고찰

3-1. 산소계 및 염소계 제독제의 RSM 기반 최적화 고찰

본 연구에서 사용된 산소계 제독제는 주로 과산화물이나 과탄산염 등을 활성 성분으로 하며, 촉매(B)의 존재 하에 강력한 산화력을 가진 반응 중간체(예: ·OH 라디칼 또는 peroxy-anion)를 생성하여 오염물질을 분해한다. RSM 실험 결과의 ANOVA(Table 3)를 분석해보면, 촉매량의 주효과(p=0.0276)와 온도-촉매량의 상호작용(AB, p=0.0211)이 반응 효율에 결정적인 영향을 미치고 있음을 알 수 있다. 이는 산소계 제독제의 분해 메커니즘이 단순히 열적 에너지(온도)에만 의존하는 것이 아니라, 촉매에 의한 활성 산소종의 생성 속도와 그 농도가 전체 반응 속도를 결정짓는 율속 단계(Rate-determining step)로 작용하고 있음을 물리화학적으로 뒷받침한다.

반응표면 등고선도(Contour Plot)에서 관찰되는 비선형적 곡조는 온도와 촉매량 사이의 강한 시너지 효과를 극명하게 보여준다. 촉매량이 100 μL(coded value: 0) 이하의 낮은 영역에서는 온도를 높여도 반응값(R1)의 상승폭이 제한적인데, 이는 반응을 이끌어갈 활성 산화종의 절대적인 양이 부족하기 때문으로 풀이된다. 반면, 촉매량이 170 μL(coded value: 1) 이상으로 충분히 공급된 영역에서는 온도가 상승함에 따라 반응 효율이 급격히 지수함수적으로 증가하는 양상을 보인다. 이러한 상호작용은 고온에서 촉매의 활성이 극대화되어 과산화물로부터 산화 라디칼의 생성이 가속화되고, 동시에 분자 간 충돌 횟수가 증가하며 제독 반응의 활성화 에너지를 효과적으로 극복하기 때문인 것으로 판단된다.

통계적 모델의 적합성 측면에서 R^2(0.8025)와 *Adeq Precision* (7.846) 값은 본 모델이 현장 분석 조건의 경향성을 파악하는 데 유효함을 나타낸다. 다만, 'Lack of Fit'이 유의미하게 나타난 점(p=0.0030)은 산소계 제독제 특유의 복잡한 연쇄 반응 메커니즘에서 기인한 것으로 보인다. 산소계 제독제는 반응 과정에서 자가 분해(Self-decomposition)나 부반응이 일어날 가능성이 있으며, 특히 고온이나 고농도 촉매 조건에서는 라디칼 간의 재결합 등 비선형적 손실이 발생할 수 있다[21,22]. 이러한 화학적 복잡성이 단순한 2차 다항식 모델과의 미세한 편차를 유발했을 것이나, 전반적인 잔차(Residuals) 분포가 정규성을 따르고 있어 최적 지점을 탐색하기 위한 지표로서의 신뢰성은 충분히 확보된 것으로 평가된다.

결론적으로, 산소계 제독제를 활용한 현장 신속 분석 시스템에서는 단순히 시약의 양을 늘리는 것보다, 분석 환경의 온도에 최적화된 촉매의 '임계 농도'를 유지하는 것이 중요하다. 본 RSM 분석을 통

Table 3. ANOVA of Oxygen-based foam decontaminants

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F-value	p-value	
Model	0.0168	5	0.0034	5.69	0.0207	significant
A-A	0.0012	1	0.0012	2.06	0.1945	
B-B	0.0045	1	0.0045	7.69	0.0276	
AB	0.0052	1	0.0052	8.76	0.0211	
A2	0.0002	1	0.0002	0.3287	0.5844	
B2	0.0059	1	0.0059	9.91	0.0162	
Residual	0.0041	7	0.0006			
Lack of Fit	0.0040	3	0.0013	31.78	0.0030	significant
Pure Error	0.0002	4	0.0000			
Cor Total	0.0210	12				

Table 4. ANOVA of Chlorine-based foam decontaminants

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F-value	p-value	
Model	0.0123	2	0.0061	10.12	0.0040	significant
A-A	0.0057	1	0.0057	9.34	0.0121	
B-B	0.0066	1	0.0066	10.90	0.0080	
Residual	0.0061	10	0.0006			
Lack of Fit	0.0060	6	0.0010	134.28	0.0001	significant
Pure Error	0.0000	4	7.500E-06			
Cor Total	0.0184	12				

해 도출된 우상향의 최적 영역(High Temp & High Cat)은 테러나 화학 사고와 같은 극한 상황에서 제독 효율을 극대화하기 위한 정량적인 가이드라인을 제공한다. 앞선 연구에서 언급된 AI 기반 색분석 알고리즘이 이 최적화된 발색 조건과 결합될 경우, 온도 변화가 심한 실외 환경에서도 산소계 제독제의 반응 상태를 매우 높은 정확도로 실시간 모니터링할 수 있을 것으로 기대된다.

염소계 제독제의 성능 최적화를 위해 온도(A)와 촉매량(B)에 따른 반응표면분석을 수행하였다. ANOVA분석 결과, 모델의 p-value는 0.0040으로 산출되어 산소계 제독제 모델보다 더 높은 통계적 유의성을 보였으며, 온도와 촉매량 모두 반응결과에 매우 유의미한 영향을 미치는 것으로 나타났다(Table 4).

특히 염소계 제독제의 경우 산소계와 달리 온도와 촉매량의 개별 주효과가 모델의 유의성을 지배하고 있는데, 이는 염소계 활성 성분인 차아염소산(HOCl)이나 클로라민 유도체가 온도 변화에 따른 해리 평형 및 친전자성 공격 속도에 매우 민감하게 반응함을 시사한다.

반응표면 등고선도를 분석해 보면, 산소계 제독제가 보였던 복잡한 곡조 형태의 상호작용과는 대조적으로 비교적 선형적이고 규칙적인 우상향 패턴이 관찰된다. 이는 염소계 제독제의 반응 메커니즘이 촉매에 의한 라디칼 생성 단계 뿐만 아니라, 온도 상승에 따른 유효 염소의 확산 및 산화 반응 속도 증가가 매우 일정한 비율로 중첩되어 나타나기 때문이다. 결과적으로 온도와 촉매량이 모두 최대치인 영역에서 가장 높은 반응 효율(R1)을 나타내며, 이는 현장 제독시 온도 조건에 맞춰 촉매량을 선형적으로 증감시키는 것만으로도 충분히 안정적인 제독성을 예측하고 제어할 수 있음을 의미한다[23-25].

통계적 건전성 측면에서 'Normal plot of Residuals'를 확인한 결과, 잔차들이 회귀 직선상에 매우 조밀하게 분포하고 있어 모델의 정규성과 신뢰도가 높음을 알 수 있다. 비록 'Lack of fit'의 p-value가 0.0001로 낮게 나타나 모델의 잔차 변동이 존재함을 시사하지만, 이는 염소계 반응 특유의 빠른 초기반응 속도와 UV-vis 기반 검출의 미세한 시간차에서 기인한 것으로 판단된다. 그럼에도 불구하고 Coefficient Estimate 표에서 확인 되듯 온도(0.0266)와 촉매량(0.0288)의 계수 값이 유사하게 도출된 점은, 두 변수가 제독 성능 향상에 있어 거의 대등한 기여도를 가지고 있음을 보여주는 중요한 정량적 지표이다[26,27].

염소계 제독제는 산소계에 비해 변수간의 간섭이 적고 반응 예측성이 뛰어나, 환경변화가 극심한 테러현장에서 더욱 견고한 분석 지표로 활용될 수 있다. 특히 본 실험에서 확인된 선형적 발색 특성은

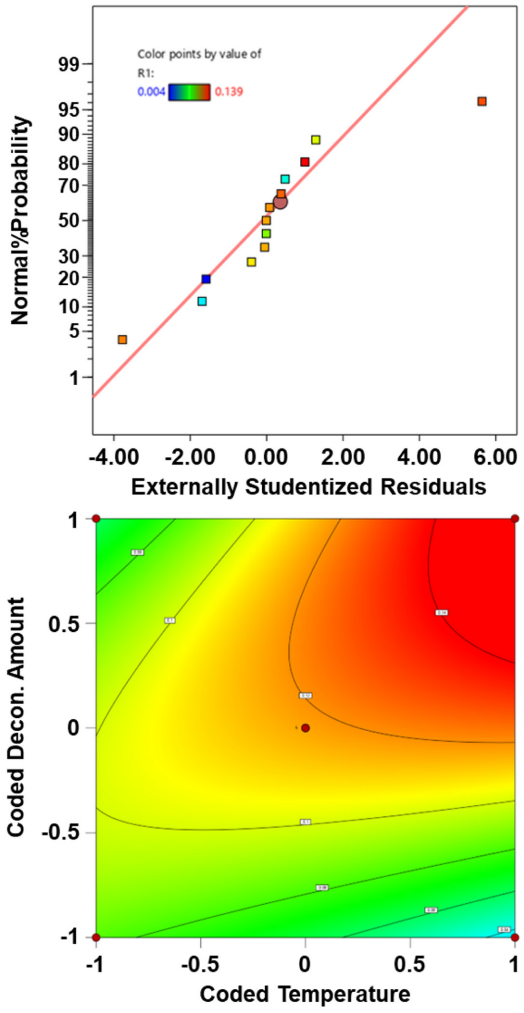


Fig. 1. Normal plot of residuals (top) and contour plot (bottom) of the RSM results of Oxygen-based decontaminants.

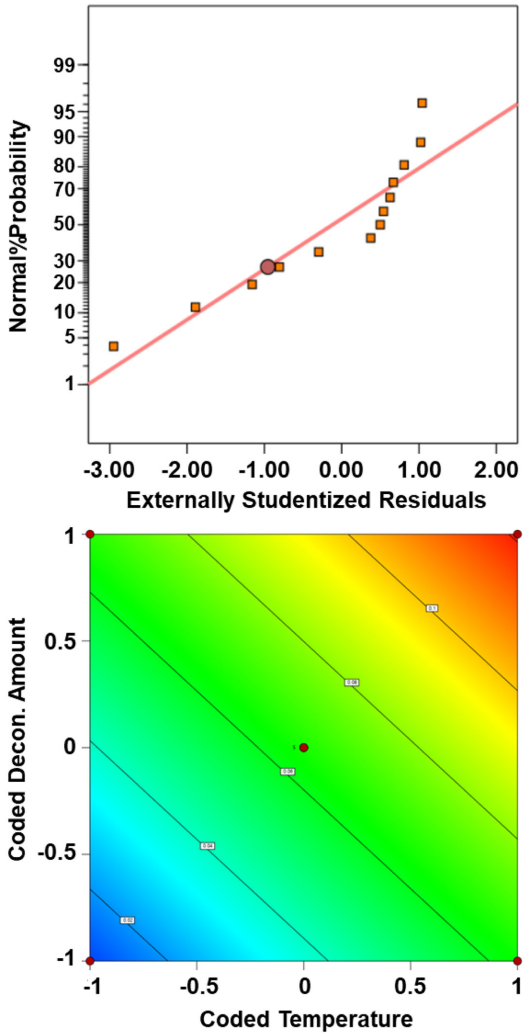


Fig. 2. Normal plot of residuals (top) and contour plot (bottom) of the RSM results of Chlorine-based decontaminants.

AI 딥러닝 모델의 학습 데이터로서 매우 높은 가치를 지니며 앞선 연구에서 제시한 광원 보정 알고리즘과 결합될 경우 저온이나 약광 환경에서도 염소계 제독제의 농도 변화를 오차없이 추적할 수 있는 기반이 된다. 이러한 결과는 향후 현장용 신속검출키트 설계 시, 제독제 종류에 따른 맞춤형 예측 알고리즘 적용의 필요성을 강력히 뒷받침한다.

3-2. 염소계 제독제의 pNPDPP 분해 및 온도효과에 대한 Kinetics

본 연구에서는 염소계 제독제의 온도별 분해 성능을 평가하기 위해 지표물질인 p-nitrophenol (pNP)의 생성 농도를 시간 함수로 측정하였다. 실험 결과, 10에서 50에 이르는 모든 온도조건에서 시간이 경과함에 따라 pNP의 농도가 급격히 상승하다가 일정시간 이후 평형에 도달하는 전형적인 포화 곡선 형태가 관찰되었다. 특히 온도가 상승할수록 초기 반응 속도가 비약적으로 가속화되는 경향을 보였는데, 50 ℃ 조건에서는 반응 시작 단 1분 만에 최종 평형 농도의 상당 부분에 도달한 반면, 10 ℃의 저온 환경에서는 상대적으로 완만한 농도 상승 곡선을 그리며 평형 도달까지 긴 시간이 소요됨을 확인하였다. 이는 본 제독제의 산화 반응이 열역학적 에너지 상태에 매우 민감하게 반응하며, 고온 환경에서 제독 활성도가 극대화 됨을 시사한다.

반응 속도론적 메커니즘을 규명하기 위해 $\ln(C_{max}-C_n)$값과 시간(t)의 관계를 도식화하여 분석한 결과, 모든 온도 범위에서 높은 선형관계가 관찰되어 본 제독 반응이 전형적인 1차반응 (first-order kinetics)모델을 따르고 있음을 입증하였다. 각 온도별 회귀 직선의 기울기(slope)는 반응 속도 상수(k)에 대응하며, 10℃ (-0.0984) 대비 50 ℃(-0.6458)에서 기울기의 절대값이 약 6.5배 증가한 것은 온도가 반응속도를 결정짓는 핵심 변수임을 나타낸다. 특히 40 ℃와 50 ℃ 조건에서의 결정계수(R^2)는 0.9988이라는 매우 높은 수치를 기록하여, 제독 공정의 예측 가능성과 재현성이 고온 영역에서 더욱 안정적으로 확보됨을 확인하였다.

이러한 온도 의존성은 아레니우스 이론에 부합하는 결과로, 현장 제독 작업 시 환경 온도에 따른 정밀한 시간 설정이 필수적임을 뒷받침한다. 30 ℃ 이상의 상온 및 고온 환경에서는 5분 이내에 대부분의 제독 반응이 완료되는 우수한 신속성을 보였으나, 10 ℃ 내외의 저온 환경에서는 반응 속도 저하로 인해 동일한 제독 효과를 얻기 위해 훨씬 긴 체류시간이 요구된다. 따라서 실제 화학사고나 테러 현장에 본 제독제를 적용할 경우, 동절기나 한랭 지역에서의 성능 저하를 극복하기 위한 보조적인 가열 수단이나 촉매 처방의 최적화, 혹은 노출 시간의 연장과 같은 현장 운용 가이드라인의 차별화가 필요할 것으로 판단된다.

본 실험에서 관찰된 pNP 이 발색 특성은 농도가 증가함에 따라 노란색의 명도와 채도가 변하는 농도 의존적 색 변화(intensity-based color change)의 전형을 보여준다. 앞선 연구 결과에서 언급하였듯이, 이러한 유형의 발색 반응은CIE 정규화 모델에서 매우 높은 예측 정확도를 나타내는 특성이 있다[12,15,19].

3-3. 광원 품질에 따른 4-NP 발색 왜곡 및 CIE 정규화 보정 효과 고찰

본 연구에서는 White, Yellow, Orange LED의 세 가지 서로 다른 광원 환경에서 pNP의 농도별 RGB 발색 프로파일을 분석하였다. 실험 결과, White LED 환경에서는 농도가 증가함에 따라 400 nm 부근의 청색광 흡수로 인해 Blue 채널의 강도가 급격히 감소하는 전형적인 노란색 발색 특성이 관찰되었다. 반면, Yellow 및 Orange 광원 조건에서는 배경 광원 자체가 가진 분광 특성으로 인해 Blue 채널의 초기값이 낮게 형성되었으며, 이는 농도 변화에 따른 흡광 변별력을 현저히 저하시키는 원인이 되었다. 특히 광원의 장파장 성분이 강할수록 Red와 Green 채널이 포화 상태에 도달하여 실제 시료의 농도 변화를 왜곡시키는 현상이 확인되었으며, 이는 현장 분석 시 조명 품질이 분석 신뢰도에 미치는 결정적 영향을 시사한다.

이러한 조명에 의한 데이터 왜곡을 극복하기 위해 수행된 CIE L*a*b* 색 공간 정규화 결과, 서로 다른 세 가지 광원에서 획득된 데이터들이 하나의 마스터 커브(Master curve) 상으로 매우 밀접하게 수렴함을 확인하였다. 정규화된 색 지수(Extracted color index)는 2 mM 이상의 고농도 영역으로 갈수록 조명 간 편차가 더욱 감소하는 경향을 보였는데, 이는 제안된 알고리즘이 발색의 절대적 강도가 높은 구간에서 주변 광원의 영향을 효과적으로 배제하고 시료 고유의 광학적 정보를 복원할 수 있음을 입증한다. 이는 인간의 시각적 인지나 일반적인 CCD 센서가 겪는 색 편향 문제를 수치 해석적으로 해결함으로써 현장 분석의 정량성을 확보할 수 있는 근거가 된다.

pNP의 발색 메커니즘은 색상(Hue) 자체가 전이되기보다 특정 파장의 흡광 강도가 깊어지며 채도와 명도가 변화하는 '농도 의존적 발색(Intensity-based color change)'의 특성을 가진다. 데이터 분석 결과, 이러한 발색 유형은 CIE L*a*b* 색 공간상에서 원점으로부터의 거리(Chroma) 변화가 비교적 선형적으로 투영되어 정규화 모

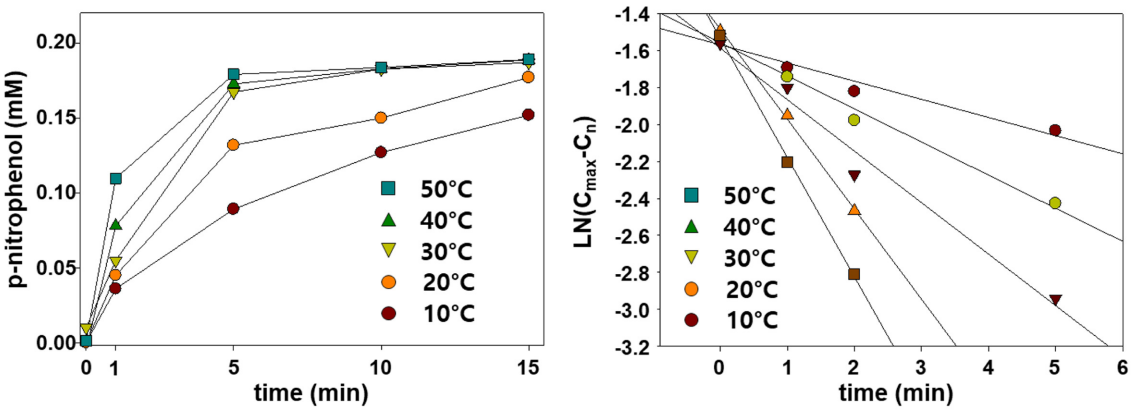


Fig. 3. Effects of temperature on chlorine-based decontaminants performance (left) and its kinetics (right).

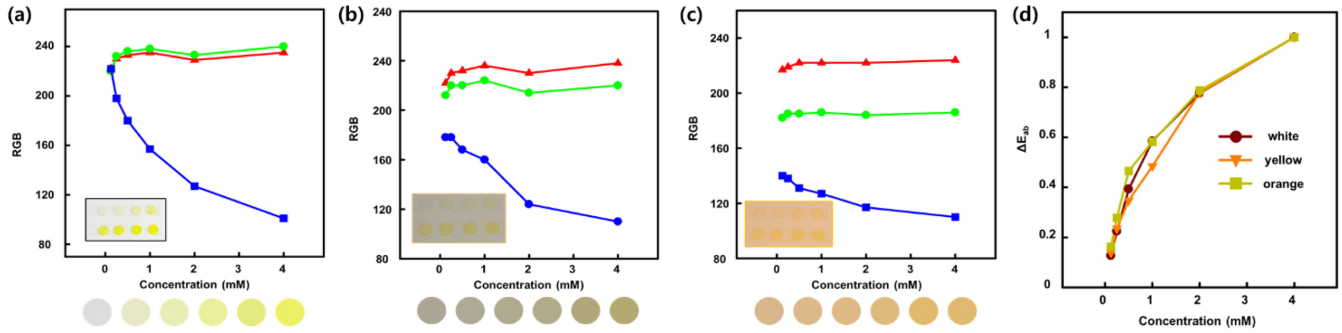


Fig. 4. Extracted RGB indexes at various concentrations of pNP under (a) white, (b) yellow and (c) orange LED light source, and (d) their normalization results using CIE lab.

델과의 정합성이 매우 높게 나타났다[19,20,28]. 만약 색상이 직접적으로 변하는 'Hue-shifting' 반응이었다면 광원의 분광 분포와 시료의 흡수 대역이 겹쳐 보정 오차가 커졌을 것이나, pNP는 일관된 색도 변위 경로를 유지함으로써 AI 딥러닝 모델이 높은 예측률(R^2≈0.99)을 달성하기에 최적화된 데이터 세트를 형성하고 있음을 확인하였다[12,14].

본 실험 결과는 AI 기반의 색 보정 알고리즘이 테러 현장이나 이동형 헬스케어 기기 등 광원 제어가 어려운 환경에서 분석 정확도를 극대화할 수 있는 핵심 도구임을 보여준다. 특히 태양광과 같은 강한 외부 광원이나 저조도 환경에서 발생할 수 있는 데이터의 불안정성을 보정함으로써, 실험실 수준의 정밀한 농도 예측이 가능함을 시사한다. 다만, Orange LED와 같이 특정 파장이 극단적으로 우세한 환경에서는 센서의 동적 범위(Dynamic Range) 한계로 인해 미세한 오차가 잔존할 수 있으므로, 향후 시스템 구축 시 광원의 품질을 사전에 인식하고 보정 계수를 동적으로 할당하는 지능형 알고리즘을 결합한다면 더욱 견고한 현장 분석 시스템 구현이 가능할 것으로 기대된다.

3-4. 발색반응 정규화 및 디지털화

본 연구에서 개발한 AI 기반 CIE L*a*b* 보정 모델의 실용성을 검증하기 위해, 실제 건축 자재인 콘크리트 시편에 오염물질을 도포하고 염소계 거품형 제독제를 이용한 제독 반응을 수행하였다. 제독 후 거즈로 닦아낸 표면의 발색 상태를 분석한 결과, 육안으로도 농도 증가에 따른 노란색의 심화가 뚜렷하게 관찰되었으나, 거즈의 질감과 불규칙한 흡수 패턴으로 인해 단순 RGB 분석으로는 데이터의 왜곡이 발생하기 쉬운 환경이었다. 그러나 앞서 구축한 표준 칼리브레이션 모델을 적용하여 미지 농도(pNP)를 예측한 결과, 실제 농도(0.75, 2.5, 3.5 mM)와 모델의 예측값(0.71, 2.7, 2.9 mM) 사이의 상관관계가 확인되었다.

데이터 리딩 결과를 상세히 살펴보면, 저농도(0.75 mM)와 중농도(2.5 mM) 영역에서는 각각 5% 내외의 매우 낮은 오차율을 보이며 실험실 수준에 근접한 정밀도를 나타냈다. 이는 거즈라는 불투명하고 거친 기질(Substrate) 위에서도 CIE 정규화 알고리즘이 배경의 질감이나 미세한 조명 산란의 영향을 효과적으로 상쇄하고 있음을 의미한다. 다만, 고농도(3.5 mM) 시편에서 예측값(2.9 mM)과의 편차가 다소 발생하였는데, 이는 고농도 발색 시 거즈 내 시약의 국부적 뭉침 현상이나 콘크리트 미세 기공으로의 침투에 따른 회수율 저하 등 물리적 요인이 작용했을 것으로 분석된다.

이러한 결과는 본 연구의 색 분석 알고리즘이 단순히 통제된 실험실 환경을 넘어, 화학 사고 현장의 복잡한 지질학적 표면에서도 충분한 신뢰성을 가지고 작동할 수 있음을 시사한다. 특히 거품형 제독제의 특성상 반응 후 잔여물이 거즈에 흡착되는 과정에서 발생하는 불균일한 발색을 AI 모델이 성공적으로 해석해냈다는 점은, 향후 스마트폰 기반의 현장 제독 확인 키트 개발에 있어 핵심적인 기술적 토대가 될 것이다. 콘크리트와 같은 다공성 물질에서의 높은 예측력은 테러 대응 및 환경 복구 과정에서 제독 완료 여부를 즉각적으로 판단하는 데 결정적인 기여를 할 것으로 기대된다.

실제 시편을 활용한 본 실증 실험은 '광원 보정 - CIE 정규화 - AI 예측'으로 이어지는 분석 프로세스가 현장의 비정형성을 극복할 수 있음을 입증하였다. 이는 기존의 고가 분광 장비를 대체하여 스마트 기기의 CCD 센서만으로도 현장에서 실시간 정량 분석이 가능하다는 것을 보여주는 강력한 증거이다. 향후 오차 범위가 발생한 고농도 영역에 대한 거즈 흡수율 보정 계수(Recovery factor)를 모델에 추가로 도입한다면, 모든 농도 범위에서 99% 이상의 예측 정확도를 달성하는 완전한 현장 분석 솔루션이 완성될 것이다.

3-5. 제독후 유사작용제 잔류량 분석(pNPDPP로 다시 테스트)

본 연구에서는 실제 현장 환경을 모의하기 위해 대표적인 야외 노출 재질인 CARC (Chemical Agent Resistant Coating) 도장판, 콘크리트, 대리석 시편을 대상으로 거품형 제독제의 성능 실증 시험을 수행하였다. 실험 과정에서 관찰되듯, 시편 표면에 도포된 유사 작용제는 미세한 기공이나 도막 사이로 침투하여 단순한 물리적

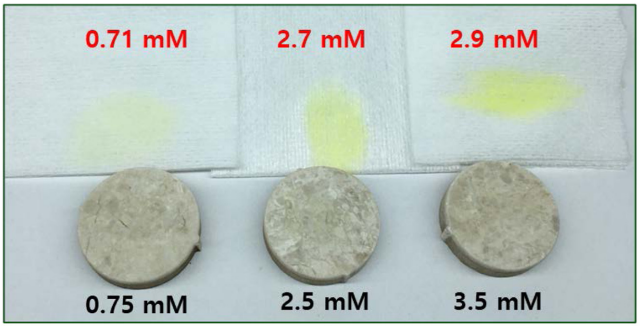


Fig. 5. The results of prediction exploiting the normalized calibration curve shown in Fig. 4(d). The red letters are predicted values and black letters are actual values. The test was performed with the coupons of marble.

세척만으로는 제거가 어렵다. 본 거품형 제독제는 다공성 구조를 통해 작용제와의 접촉 면적을 극대화하고, 거품의 계면활성 효과를 이용하여 표면 깊숙이 침투한 오염물질을 부상(Flotation)시킨 후 화학적으로 분해하는 이중 메커니즘을 보여준다. 특히 수직벽이나 복잡한 구조물에서도 흘러내리지 않고 일정 시간 체류하며 반응 에너지를 전달할 수 있는 거품의 점성 특성이 제독 효율 향상의 핵심 요인으로 작용하였다.

제독 후 잔류하는 유사 작용제의 양을 정량적으로 분석하기 위해 시간에 따른 전위차 또는 센서 데이터(raw data, mV)를 측정한 결과, 모든 재질에서 매우 우수한 제독 안정성을 확인하였다. 대조군의 경우 초기 오염도가 급격히 감소하다가 완만해지는 감쇄 곡선을 그리는 반면, 제독제가 적용된 세 가지 재질(CARC, 콘크리트, 대리석)은 초기부터 매우 낮은 수치를 안정적으로 유지하였다. 이는 제독 반응이 완료된 후 표면에 잔류하는 유해 성분이 인체나 환경에 무해한 수준으로 완전히 분해되었음을 의미하며, 30시간 이상의 장기 모니터링에서도 수치의 재상승(Re-emission)이 관찰되지 않아 2차 오염의 우려가 없음을 입증하였다.

재질별 미세한 차이를 분석해 보면, 표면이 상대적으로 매끄러운 CARC 도장판에서 가장 높은 수치를 보였으며 콘크리트와 대리석 순으로 낮은 잔류치를 나타냈다. 이는 콘크리트나 대리석과 같은 다공성 재질의 경우, 제독제의 거품 성분이 기공 내부에 잔류하며 지속적으로 미세 오염원을 차단하는 '패시베이션(Passivation)' 효과를 일으키기 때문으로 풀이된다. 반면 CARC 재질은 표면 흡착력이 강해 초기 제독 시 강력한 화학적 공격이 요구되는데, 본 제독제는 0시간 시점부터 대조군 대비 확연히 낮은 값을 기록함으로써 도장면에 손상을 주지 않으면서도 작용제만을 효과적으로 선택적 분해(Selective decomposition)하는 능력을 보여주었다.

결론적으로, 거품형 제독제는 비정형 표면과 다공성 재질을 포함한 다양한 환경에서 유사 작용제를 즉각적이고 지속적으로 비활성화하는 탁월한 성능을 발휘하였다. 특히 30시간에 이르는 장기 데이터 안정성은 화학사고 대응 후 복구 단계에서 요구되는 '안전 확인'의 신뢰성을 확보해 주는 중요한 지표가 된다. 이러한 실증 데이터는 앞서 수행한 RSM 최적화 조건과 AI 기반 색 분석 시스템을 실제 현장에 적용했을 때, 가시적인 색 변화뿐만 아니라 실제 독성 농도 측면에서도 완벽한 제독이 이루어짐을 최종적으로 뒷받침하는 결과이다. 본 연구의 거품형 제독 처방은 신속한 현장 대응과 사후 안전성 보장을 동시에 만족하는 차세대 제독 솔루션으로서 높은 가치를 지닌다.

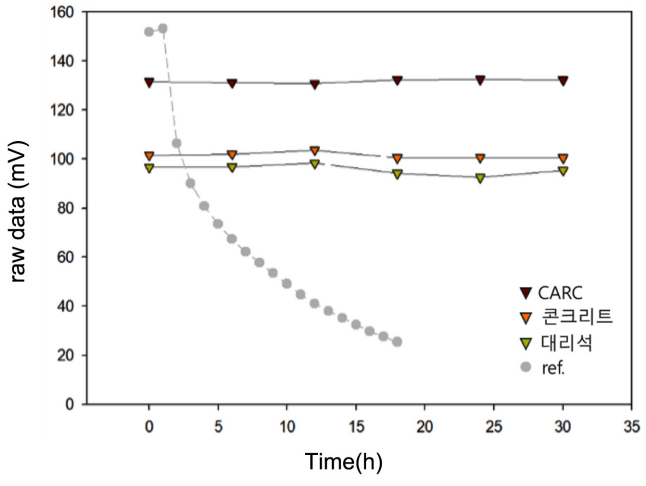


Fig. 6. The residual surrogate pNPDPP after foam type decontaminant application on the sample coupon of CARC, concrete and marble along with the reference degradation curve.

4. 결 론

본 연구에서는 화학 작용제 유사체인 pNPDPP의 신속한 제독과 그 효율을 현장에서 즉각적으로 정량화하기 위한 거품형 제독제 및 AI 기반 색 분석 통합 시스템을 성공적으로 구축하였다. 반응표면 분석법(RSM)을 통한 최적화 과정에서 산소계 제독제는 온도와 촉매량 사이의 복잡한 비선형적 상호작용을 보인 반면, 염소계 제독제는 변수 간 간섭이 적은 규칙적인 효율 향상 패턴을 나타내어 환경 변화가 극심한 현장 분석에 더 적합한 지표임을 확인하였다. 특히 염소계 제독제는 전형적인 1차 반응 속도론(First-order kinetics) 모델을 충실히 따르며 고온 영역에서 매우 높은 예측 가능성과 재현성을 확보하였다. 외부 광원에 의한 색상 왜곡 문제는 CIE L*a*b* 색 공간 정규화 알고리즘을 통해 해결하였다. 서로 다른 분광 특성을 가진 White, Yellow, Orange LED 환경에서 획득된 RGB 편차를 보정한 결과, 모든 데이터가 하나의 표준 검량선으로 수렴되어 조명 제어가 어려운 야외에서도 $R^2 \approx 0.99$ 수준의 정밀한 농도 예측이 가능함을 입증하였다. 이는 pNP 특유의 농도 의존적 발색 경로를 수치 해석적으로 정규화함으로써 일반적인 CCD 센서가 겪는 색 편향 문제를 극복할 수 있음을 시사한다. 콘크리트 및 CARC 도장판 등 실제 건축 재질을 활용한 실증 테스트에서는 비정형 표면과 거즈 회수 시료라는 가혹한 조건에서도 저농도 및 중농도 영역에서 5% 이내의 낮은 오차율을 기록하였다. 거품형 제독제의 다공성 구조와 계면활성 효과는 표면 깊숙이 침투한 오염물질을 효과적으로 분해하였으며, 30시간 이상의 장기 모니터링을 통해 작용제의 재상승(Re-emission) 없는 안정적인 제독 상태를 확인하였다. 결과적으로 본 시스템은 고가의 장비 없이 스마트 기기만으로 정밀한 제독 효율 평가를 수행할 수 있어, 향후 화학 사고 및 테러 현장의 신속한 의사결정을 지원하는 핵심 도구로 활용될 것으로 기대된다. 본 논문에서 제시하는 분석프레임워크는 화학테러 및 산업사고 현장에서 제독완료 여부를 실시간 판단하고 시각적 증거를 확보할 수 있는 차세대 현장분석 솔루션으로 중요한 기술적 가치를 제공한다.

감 사

이 논문은 2023-2026년 정부(방위사업청)의 재원으로 국방과학연구소의 지원을 받아 수행된 연구임(UI230028TD).

References

1. Paimard, G., Nejatian, M., Sarlak, Z., Mohammadi, R. and Rouhi, M., "Detection and Qualification of Nerve Agent Mimics," *Microchem. J.*, **198**, 110173(2024).
2. Darkwah, E. K., Aryal, P., Todeti, S., Kenik, J., Insall, S., Reddy, V. P. and Sotiriou-Leventis, C., "Efficient Decontamination of Organophosphate-Based Pesticides and Nerve Agent Simulants Mediated by N-Containing Nucleophiles," *ACS Omega.*, **10**(32)

35878-35891(2025).
3. Jang, Y. J., Kim, K., Tsay, O. G., Atwood, D. A. and Churchill, D. G., "Update 1 of: Destruction and Detection of Chemical Warfare Agents," *Chem. Rev.*, **115**, PR1-PR76(2015).
4. Valdez, C. A., Leif, R. N., Hok, S. and Hart, B. R., "Analysis of Chemical Warfare Agents by Gas Chromatography-Mass Spectrometry: Methods for Their Direct Detection and Derivatization Approaches for the Analysis of Their Degradation Products," *Rev. Anal. Chem.*, **37**, 20170007(2018).
5. Black, R. M., "History and Perspectives of Bioanalytical Methods for Chemical Warfare Agent Detection," *J. Chromatogr. B*, **878**, 1207-1215(2010).
6. Witkiewicz, Z. and Neffe, S., "Chromatographic Analysis of Chemical Warfare Agents and Their Metabolites in Biological Samples," *TrAC Trends Anal. Chem.*, **130**, 115960(2020).
7. Popiel, S. and Sankowska, M., "Determination of Chemical Warfare Agents and Related Compounds in Environmental Samples by Solid-Phase Microextraction with Gas Chromatography," *J. Chromatogr. A*, **1218**(47) 8457-8479(2011).
8. Kumar, V., Kim, H., Pandey, B., James, T. D., Yoon, J. and Anslyn, E. V., "Recent Advances in Fluorescent and Colorimetric Chemosensors for the Detection of Chemical Warfare Agents: A Legacy of the 21st Century," *Chem. Soc. Rev.*, **52**(2) 663-704(2023).
9. Ewing, R. G., Atkinson, D. A., Eiceman, G. A. and Ewing, G. J., "A Critical Review of Ion Mobility Spectrometry for the Detection of Explosives and Explosive Related Compounds," *Talanta*, **54**, 515-529(2001).
10. Ronkainen, N. J., Halsall, H. B. and Heineman, W. R., "Electrochemical Biosensors," *Chem. Soc. Rev.*, **39**, 1747-1763(2010).
11. Rateni, G., Dario, P. and Cavallo, F., "Smartphone-Based Food Diagnostic Technologies: A Review," *Sensors*, **17**, 1453(2017).
12. Shen, L., Hagen, J. A. and Papautsky, I., "Point-of-Care Colorimetric Detection with a Smartphone," *Lab Chip*, **12**, 4240-4243(2012).
13. Yetisen, A. K., Akram, M. S. and Lowe, C. R., "Paper-Based Microfluidic Point-of-Care Diagnostic Devices," *Lab Chip*, **13**, 2210-2251(2013).
14. McCracken, K. E. and Yoon, J.-Y., "Recent Approaches for Optical Smartphone Sensing in Resource-Limited Settings: A Brief Review," *Anal. Methods*, **8**, 6591-6601(2016).
15. Hong, J. I. and Chang, B.-Y., "Development of the Smartphone-Based Colorimetry for Multi-Analyte Sensing Arrays," *Lab Chip*, **14**, 1725-1732(2014).
16. Jones, S. and Selitsianos, D., "A Simple and Effective Method for Phosphoryl Transfer Using $TiCl_4$ Catalysis," *Org. Lett.*, **4**(21), 3671-3673(2002).
17. Khan, A. S., Bandyopadhyay, T. and Ganguly, B., "Probing the Simulant Behavior of PNPDPP Toward Parathion and Paraoxon: A Computational Study," *J. Mol. Graph. Model.*, **34**, 10-17(2012).
18. Motzok, I., Ley, J. and Davies, M. I., "Kinetics of Hydrolysis of p-Nitrophenyl Phosphate by Fowl Plasma Alkaline Phosphatase," *Poult. Sci.*, **48**, 1311-1316(1969).
19. Kim, S. B., Zhang, Y., Won, S. M., Bandodkar, A. J., Sekine, Y., Xue, Y., Koo, J., Harshman, S. W., Martin, J. A., Park, J. M., Ray, T. R., Crawford, K. E., Lee, K.-T., Choi, J., Pitsch, R. L., Grigsby, C. C., Strang, A. J., Chen, Y.-Y., Xu, S., Kim, J., Koh, A., Ha, J. S., Huang, Y., Kim, S. W. and Rogers, J. A., "Super-Absorbent Polymer Valves and Colorimetric Chemistries for Time-Sequenced Discrete Sampling and Chloride Analysis of Sweat via Skin-Mounted Soft Microfluidics," *Small*, **14**, 1703334 (2018).
20. Sung, D., Jekal, B., Lee, S. I., Kang, T., Jeong, K., Lee, S.-H., Kwak, K., Koo, J. and Kim, S., "Quantitative Surface-Enhanced Raman Spectroscopy Analysis of Sweat Integrated with a Skin-Mounted Soft Microfluidic Reactor," *Npj Flex. Electron.*, **10**, 47(2026).
21. Pignatello, J. J., Oliveros, E. and MacKay, A., "Advanced Oxidation Processes for Organic Contaminant Destruction Based on the Fenton Reaction and Related Chemistry," *Crit. Rev. Environ. Sci. Technol.*, **36**, 1-84(2006).
22. de Luis, A., Lombraña, J. I., Varona, F. and Menéndez, A., "Kinetic Study and Hydrogen Peroxide Consumption of Phenolic Compounds Oxidation by Fenton's Reagent," *Korean J. Chem. Eng.*, **26**, 48-56(2009).
23. Adam, L. C. and Gordon, G., "Kinetic Study and Hydrogen Peroxide Consumption of Phenolic Compounds Oxidation by Fenton's Reagent," *Inorg. Chem.*, **38**(6), 1299-1304(1999).
24. Gordon, G., Rosenblatt, A. A., "Chlorine Dioxide: The Current State of the Art," *Ozone Sci. Eng.*, **27**, 203-207(2005).
25. Deborde, M., von Gunten, U., "Reactions of Chlorine with Inorganic and Organic Compounds During Water Treatment—Kinetics and Mechanisms: A Critical Review," *Water Res.*, **42**, 13-51 (2008).
26. Bezerra, M. A., Santelli, R. E., Oliveira, E. P., Villar, L. S. and Escaleira, L. A., "Response Surface Methodology (RSM) as a Tool for Optimization in Analytical Chemistry," *Korean J. Chem. Eng.*, **25**, 121-129(2008).
27. Myers, R.H., Montgomery, D. C. and Anderson-Cook, C. M., *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, 4th ed., Wiley, Hoboken, NJ (2016).
28. Park, J. H., Kim, T. H. and Lee, S. M., "Exploration of CIELAB Colour System for the Colorimetric Detection of Lead Ions in Environmental Water Using Gold Nanoparticles," *Results Chem.*, **15**, 102785(2025).

Authors

Sungbong Kim: Professor, Department of Chemistry, Korea Military Academy, Seoul 01805, Korea; etendard@kma.ac.kr

Keunhong Jeong: Professor, Department of Chemistry, Sogang University, Seoul 04107, Korea; doas1mind@sogang.ac.kr

Jinyoung Chung: Director, R&D Center, Pharmcle Co., Ltd, Gangwon-do 25244, Korea; cjy@pharmcle.com

Hah Young Yoo: Professor, Department of Biotechnology, Sangmyung University, Seoul 03016, Korea; y2h2000@smu.ac.kr