

# 가스크로마토그래피 질량분석기의 질량 스펙트럼 해상도 개선 알고리즘

## Algorithm to Improve Mass Spectral Resolution of Gas Chromatography Mass Spectrometer

최 훈\*  
 (Hun Choi)

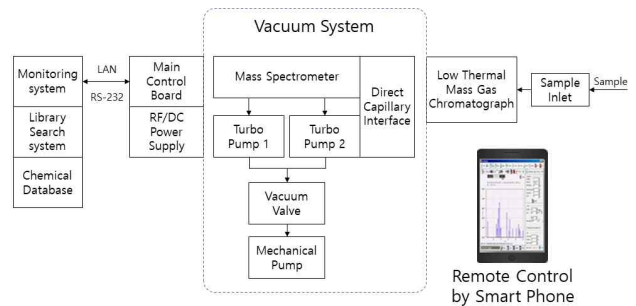
**Abstract** - This paper proposes methods for improving mass spectral resolution for a gas chromatograph mass spectrometer. The slope signs of the 1st and 2nd fitting functions for the ion signal block of each mass index are obtained, and the unnecessary element signals in the ion signal block are removed. The spectrum can be obtained by obtaining the second-order fitting function of the reconstructed ion signal block using only the effective ion signals. In addition, the resolution of the mass spectrum can be improved by correcting the error caused by the shift of the spectral peak position. To verify the performance of the proposed methods, computer simulations were performed using the actual ion signals obtained from the GC-MS system under development. Simulation results show that the proposed method is valid.

**Key Words** : GC-MS, Mass spectrum, Curve fitting, Linear fitting, Peak position error

### 1. 서 론

가스크로마토그래피 질량분석기(Gas Chromatography Mass Spectrometer; GC-MS)는 가스상태 물질의 조성성분을 분석하는 측정장비로서 현재 화학분석 연구에서 없어서는 안 될 필수 분석 기기이다. 유기물을 분리하여 분석할 수 있는 가스크로마토그래프에 물질을 이온화하여 질량별로 분석할 수 있는 질량분석기(Mass Spectrometer)를 연결함으로써 유기물의 미량 분석과 정성, 정량분석이 가능하다[1,2]. 따라서 대도시 및 공단 지역의 다이옥신 등 휘발성 유기화합물(VOCs)의 분석, 식품에서의 잔류 농약의 분석, 음용수 중의 내분비계 장애물질과 여러 환경오염물질의 분석 등 다양한 분야에 적용 가능하다. GC-MS는 산업체, 대학, 연구소, 환경오염 측정 실험실, 그리고 식품검사 실험실 등 여러 곳에서 사용되지만 현재 전량 수입에 의존하고 있다. 최근 산업의 고도화와 환경오염의 규제 등으로 GC-MS의 수요가 증가함에 따라 국산화 개발이 요구됨에 따라 한국표준과학연구원의 원천기술을 바탕으로 (주)코어밸런스에서 국산화 개발을 시도하고 있다. 현재 개발 중인 GC-MS는 소형화 및 경량화를 목표로 자체 개발한 LTM (Low Thermal Mass) GC[3]의 적용을 통해 기존 제품에 비해 크기를 크게 줄였다.

그림 1은 현재 개발 중인 가스크로마토그래피 질량분석시스템의 구성도이다. GC-MS 개발에서 요구되는 핵심요소기술은 휘발성 유기화합물의 분리를 위한 가스크로마토그래프(GC), 가스 상



**그림 1** 개발 중인 가스크로마토그래피 질량분석기 구성도  
**Fig. 1** Configuration of gas chromatography mass spectrometer under development

태의 질량분리를 위한 질량필터(mass filter), 이온원 발생 및 이온 검출 등 하드웨어 기술과 장비의 전체적인 제어를 위한 펌웨어(Firmware) 및 고해상도 질량 스펙트럼을 위한 검출된 이온신호의 데이터 품질 개선을 위한 잡음제거, 피크위치오차 보정 기술 등 신호처리기술을 포함한 소프트웨어 기술로 구분될 수 있다 [4, 5]. 특히, GC-MS의 질량분석기 용 전자 증폭 검출기는 진공 품질을 모니터링하고 저압 가스에서 미세한 불순물을 쉽게 감지하기 위해 배경잡음의 간섭 없이 sub-ppm 검출 능력으로  $10^{-14}$  수준까지의 낮은 레벨의 미세신호를 측정할 수 있어야 한다. 그러나 측정된 데이터는 이온화기(ionizer)를 비롯하여 일부 장치들 위한 서로 다른 전원에서 발생하는 전력 잡음 및 전자 증폭 검출기에 추가되는 잡음과 같은 다양한 부가잡음에 의해 오염된다. 이러한 부가잡음은 분석 대상이 되는 휘발성 화합물의 질량 스펙트럼의 피크위치오차를 유발하므로 원자 또는 분자의

\* Corresponding Author : Dept. of Electronic Engineering, Dongeui University, Korea.

E-mail: hchoi@deu.ac.kr

Received : May 2, 2018; Accepted : August 13, 2018

주 피크(major peak) 검출능을 저하시킨다. 또한 높은 피크값을 갖는 스펙트럼은 인접한 스펙트럼과의 연결되는 현상으로 질량지수별 스펙트럼을 분리하는 분해능(resolution)을 저하시킨다. 따라서 질량분석기를 개발하는데 있어 부가잡음 감소 및 정확한 피크 위치 검출, 스펙트럼간 분리는 핵심 기술이다. 그러나 아날로그 장치(전원 공급 장치, 검출기, 프리 앰프 등)에서 발생하는 다양한 잡음이 필연적으로 추가되기 때문에 측정된 미세신호로부터 이러한 잡음의 완전한 제거는 매우 어렵다[5-7].

본 논문에서는 가스크로마토그래피 질량분석기의 질량 스펙트럼 해상도를 개선 알고리즘을 제안한다. 질량분석기 개발을 위해 확보해야할 여러 핵심요소기술 중 신호처리를 포함한 소프트웨어 기술은 제조사의 고유자산으로 문헌, 논문 등을 통해 공개되어 있지 않다. 따라서 기존 상용화 장비의 결과를 벤치마킹(benchmarking)하여 설정한 개발장비의 목표 스펙을 만족하도록 개발함으로써 상용화에 필요한 국산 원천기술을 확보하였다. 제안한 방법의 성능은 실제 개발 중인 장비로 취득한 이온신호를 입력신호로 사용한 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 검증하였다.

### 2. GC-MS의 질량 스펙트럼

그림 2는 대표적인 온실가스의 하나인 육플루오린화황(SF6)의 질량지수  $k = 40\sim 80$  범위에 대해 검출기로부터 측정된 이온신호를 ADC(샘플링율  $L$ )에 의해 디지털 신호로 변환한 질량 스펙트럼으로 각각의 스펙트럼은 질량지수별  $L+1$ 개의 이온신호로 구성된다. 그림 2에서  $k = 41\sim 44, 51\sim 57, 67\sim 75, 77$ 은 정상적인 이온신호 스펙트럼이 나타나는 질량지수이며 나머지는 잡음 신호이다. 그림 3(a)는 그림 2의 SF6 질량 스펙트럼에서 인접 질량지수와 분리되지 않은 스펙트럼이 포함된 구간이며, 그림 3(b)는 피크의 위치가 이동된 질량 스펙트럼이 포함된 구간이다. 그림 3(a)에서 주변 이온신호에 비해 피크가 비교적 큰  $k = 44$ 의 스펙

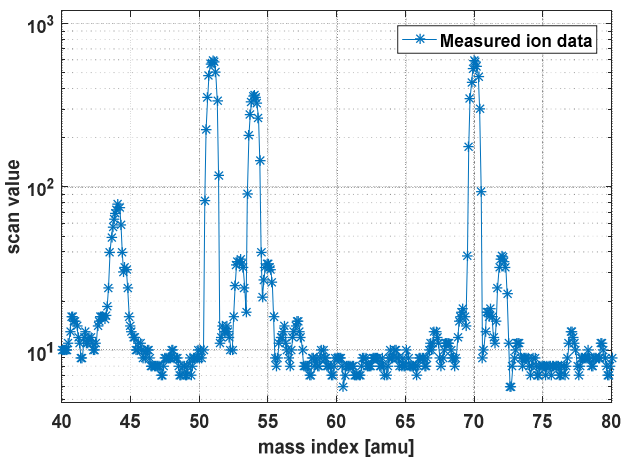


그림 2 육플루오린화황 가스의 질량 스펙트럼 (질량지수  $k = 40\sim 80$ )

Fig. 2 Mass spectrum of hexafluorine sulfur hexafluoride gas (mass index  $k = 40\sim 80$ )

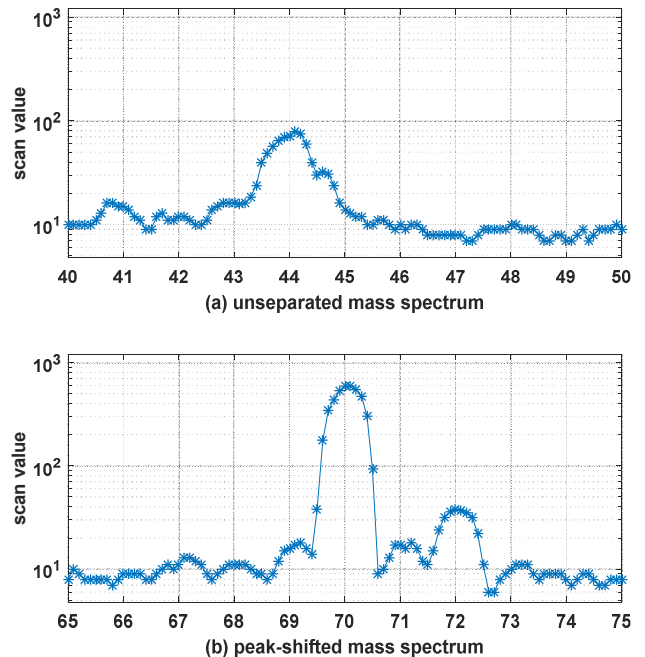


그림 3 (a) 인접 스펙트럼과 분리되지 않은 질량 스펙트럼과 (b) 피크 위치가 이동된 질량 스펙트럼

Fig. 3 (a) Mass spectrums which are not separated from adjacent spectrum (b) mass spectrum in which the peak position is shifted

트럼과 인접한  $k = 43$ 의 스펙트럼은 서로 분리되지 않아 구분이 어렵다. 또한 그림 3(b)에서  $k = 73, 74$ 와 같이 스펙트럼의 피크의 위치가 이동하면 해당 질량지수의 측정 결과의 정확도를 떨어뜨리고 해상도의 저하를 가져온다. 이와 같이 분리되지 않은 스펙트럼과 피크 위치의 이동은 표준 질량 스펙트럼 라이브러리의 비교를 통한 측정 대상 화합물 종류의 자동 분석능의 저하를 가져온다.

### 3. 질량 스펙트럼의 해상도 개선 알고리즘

질량 스펙트럼의 분해능 개선을 위해 수집된 이온신호를 질량지수별 신호블록으로 분할 후 커브피팅 기반의 스펙트럼 분리와 피크위치오차를 보정한다. 먼저  $L+1$ 개의 이온신호로 구성되는 질량지수별 신호블록은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\mathbf{x}_k = [x(kL - L/2 + 1), x(kL - L/2 + 2), \dots, x(kL + L/2 + 1)]^T \quad (1)$$

여기서  $\mathbf{x}_k$ 는  $L+1$ 개의 이온신호 샘플들로 이루어지는  $k$ 번째 질량지수에 해당하는 신호블록이며,  $x(n)$ 은  $n$ 번째 이온신호,  $L$ 은 샘플링 율이다.

식 (1)의 신호블록이 잡음이 아닌 정상적인 이온신호들로 이루어져 있다면 그림 3 (b)의  $k = 70$ 의 스펙트럼과 같이 위로 볼록

한 2차 곡선의 형태를 갖게 된다. 따라서 이상적인 이온신호로 구성되는 신호블록에 대한 2차 커브피팅 결과인 2차 곡선은 음의 기울기를 갖게 된다. 반면 잡음 신호블록의 경우는 0 또는 양의 기울기를 갖는다. 따라서 신호블록에 대한 2차 커브피팅을 통해 잡음신호와 이온신호로 구성되는 스펙트럼의 판별이 가능하다. 그러나 그림 4에서와 같이 실제 측정된 신호블록에서는 정상적인 이온신호블록임에도 불구하고 인접 스펙트럼과 분리되지 않거나 피크 위치 이동에 의한 영향으로 2차 피팅 커브는 0 또는 양의 기울기를 갖게 되어 잡음으로 처리될 수 있다. 그러므로 잡음과 정상적인 이온신호 스펙트럼의 구별을 위해 신호블록 내 유효신호의 선택적 분리가 필요하다. 이를 위해 식 (1)의  $L+1$  길이의 신호블록을 중앙의 신호  $x(kL+1)$ 을 포함한 왼쪽  $L/2+1$ 개 신호로 이루어지는 좌측 서브블록, 중앙 신호를 중심으로 좌우  $L/5$  개씩 총  $L/2$ 개 신호로 이루어지는 중앙 서브블록, 중앙 신호를 포함한 오른쪽  $L/2+1$ 개 신호로 구성되는 우측 서브블록으로 나눈다. 분할 된 각각의 서브블록을 식 (2)~식 (4)와 같이 표현할 수 있다.

$$sL_k = [x(kL-L/2+1), x(kL+1), \dots, x(kL+1)]^T \quad (2)$$

$$sR_k = [x(kL+1), x(kL+2), \dots, x(kL+L/2+1)]^T \quad (3)$$

$$sC_k = [x(kL-L/5+1), \dots, x(kL), x(kL+1), x(kL+2), \dots, x(kL+L/5)]^T \quad (4)$$

정상적인 이온신호의 경우, 위의 질량지수에 해당하는 중앙신호  $x(kL+1)$ 을 기준으로 한 좌우측 서브블록은 각각 선형 근사 직선(linear approximated straight line)의 기울기가 양(positive)과 음(negative)의 기울기를 갖게 된다. 또한 중앙 서브블록은 인

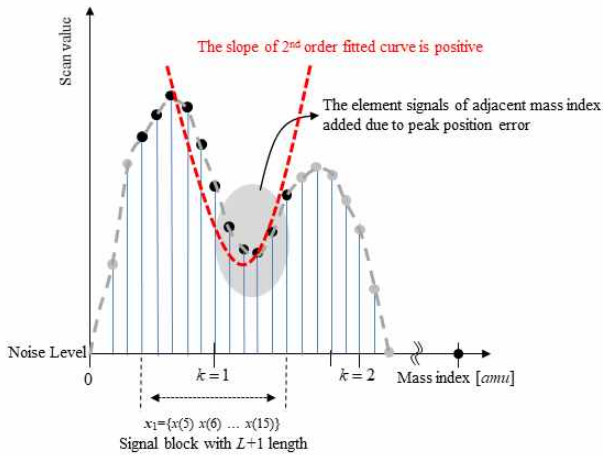


그림 4 인접 스펙트럼과 분리되지 않거나 피크 위치의 이동으로 피팅 곡선이 양의 기울기를 갖는 질량 스펙트럼

Fig. 4 Mass spectrum in which the fitting curve has a positive slope without being separated from the adjacent spectrum or due to the shift of the peak position

접 스펙트럼과 분리되지 않을 경우 양 또는 음의 기울기를 갖는다. 따라서 각 서브블록의 선형 근사의 결과인 직선의 기울기로부터 신호블록의 요소신호들이 지속적으로 증가 또는 감소하는지 판별할 수 있다.

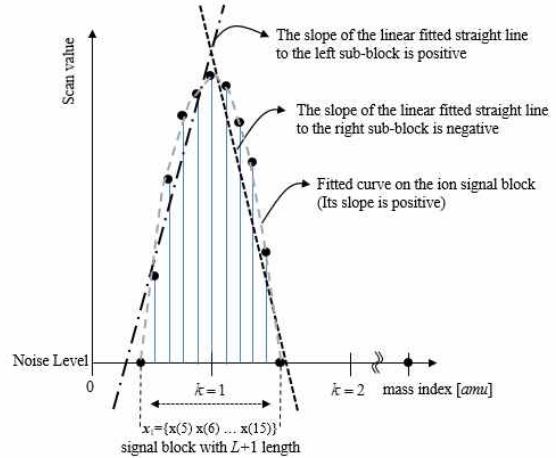


그림 5 정상적인 이온신호블록에 대한 2차 피팅 곡선의 기울기와 좌우측 서브블록에 대한 선형 근사 직선의 기울기

Fig. 5 The slope of the second order fitted curve for the normal ion signal block and the slope of the linear fitted line for the left/right sub-blocks

이러한 요소 신호들의 지속적 증가 또는 감소를 확인하는 이유는 그림 4에서 볼 수 있듯이 잡음 또는 잡음은 아니지만 판정하고자 하는 질량지수에 해당하지 않은 인접 질량지수에 해당하는 신호들이 신호블록 내로 이동(shift)되어 유입되었을 때 발생하는 2차 피팅기반 스펙트럼 판별 오류를 줄이기 위함이다. 식 (1)~식 (4)와 정상적인 이온신호블록이 갖는 그림 5의 특성을 이용하여 식 (1)의 신호블록에서 유효한 요소신호를 부분적으로 선택한 후 잡음과 스펙트럼의 판별을 수행한다. 검출된 이온신호의 신호대 잡음비(SNR)가 크거나 피크 위치 이동에 의한 오차가 작은 경우 수집 데이터 품질이 양호하기 때문에 식 (1)의 신호블록에 대한 2차 피팅 곡선의 기울기만을 이용하여도 잡음과 정상적인 스펙트럼 판별이 가능하다. 그러나 수집된 데이터의 품질이 나쁜 경우를 위해 다음과 같이 보다 효과적인 판별 기준을 적용할 필요가 있다. 좌우측 서브블록에 대한 2차 피팅 곡선의 기울기를  $slopQ(sL_k)$ 과  $slopQ(sR_k)$ 라 하면 신호블록의 특성은 다음과 같이 구분할 수 있다.

$$ch1: (slopQ(sL_k) < 0) \ \& \ (slopQ(sR_k) < 0) \quad (5)$$

$$ch2: \begin{cases} (a) \ (slopQ(sL_k) \geq 0) \ \& \ (slopQ(sR_k) < 0) \\ (b) \ (slopQ(sL_k) < 0) \ \& \ (slopQ(sR_k) \geq 0) \end{cases} \quad (6)$$

$$ch3: (slopQ(sL_k) \geq 0) \ \& \ (slopQ(sR_k) \geq 0) \quad (7)$$

식 (5)는 식 (1)의 신호블록 내 인접 스펙트럼에 해당하는 무

호 요소신호가 적게 유입된 경우, 식 (6)은 서브블록 내 인접 스펙트럼에 해당하는 무효 요소 신호가 다수 유입된 경우, 그리고 식 (7)은 신호블록이 잡음으로 이루어져 있거나 또는 피크 위치 이동 및 인접 스펙트럼과 분리되지 않은 정도가 큰 경우를 의미한다. 각 경우에 대해 추가적으로 각 서브블록에 대한 선형 근사 직선의 기울기를 3개의 조건으로 나눈다. 먼저 각 질량지수 k에 해당하는 식 (2)~식 (4)의 서브블록에 대한 선형 근사 직선의 기울기를  $slopL(sLk)$ ,  $slopL(sRk)$ , 그리고  $slopL(sCk)$ 라 정의하자. 각 서브블록을 구성하는 요소신호의 특성을 다음과 같이 구분할 수 있다.

$$cd1 : (slopL(sL_k) < 0) \& (slopL(sC_k) < 0) \& (slopL(sR_k) < 0) \quad (8)$$

$$cd2 : (slopL(sL_k) > 0) \& (slopL(sC_k) > 0) \& (slopL(sR_k) > 0) \quad (9)$$

$$cd3 : (slopL(sL_k) > 0) \& (slopL(sR_k) < 0) \quad (10)$$

$$cd4 : (slopL(sL_k) \approx 0) \& (slopL(sR_k) < 0) \quad (11)$$

$$cd5 : (slopL(sL_k) < 0) \& (slopL(sR_k) \approx 0) \quad (12)$$

$$cd7 : otherwise \quad (13)$$

식 (8)은 신호블록의 요소신호들은 지속적으로 감소, 식 (9)는 요소신호들은 지속적으로 증가함을 의미하며, 식 (10)은 정상적인 이온신호가 가질 수 있는 조건이다. 식 (11)과 식 (12)은 좌측 또는 우측의 한쪽 서브블록의 요소신호들이 모두 매우 작고 비슷한 값을 갖는 잡음일 경우이거나, 신호블록 길이의 1/2에 해당하는 피크 위치 이동이 발생한 경우로 볼수 있다. 식 (8)과 식 (9)의 조건을 만족하는 상황에서 각 신원아호블록의 요소신호(샘플신호)가 연속적으로 증가 또는 감소하는 샘플 수가  $N_{cnt}$  이상 이면 신호블록을 구성하는 요소신호 중 일부신호는 무효신호로 간주하여 제거된다. 이와 같은 신호블록의 조정을 수행함에 있어 신호블록 내 유입된 무효신호의 정도에 따라 제거되는 요소 샘플 수는 다르며 다음과 같이 신호블록은 재구성된다. 식 (14)에서 신호블록의 조정을 위한 사용한 조건 case1~case7은 표 1

표 1 신호블록의 무효 요소신호 제거를 위한 조건

Table 1 Condition for eliminating the invalid element signal of the signal block

Cases	Logical conditions
case1	(ch1 == 1) & (cd3 == 1)
case2	(ch1 == 1) & ((cd1 == 1)    (cd2 == 1))
case3	(ch2(a) == 1) & ((cd1 == 1)    (cd2 == 1))
case4	(ch2(b) == 1) & ((cd1 == 1)    (cd2 == 1))
case5	(ch3 == 1) & ((cd1 == 1)    (cd2 == 1))
case6	(ch2 (a) == 1) & (cd4 == 1)
case7	(ch2 (b) == 1) & (cd5 == 1)
otherwise	otherwise

에 정리했다.

$$x_k = \begin{cases} \left[ x(kL - \frac{L}{2} + 1), x(kL - \frac{L}{2} + 2), \dots, x(kL + \frac{L}{2} + 1) \right]^T & \text{for case1} \\ \left[ x(kL - \frac{L}{2} + 2), x(kL - \frac{L}{2} + 3), \dots, x(kL + \frac{L}{2}) \right]^T & \text{for case2} \\ \left[ x(kL - \frac{L}{2} + 3), x(kL - \frac{L}{2} + 4), \dots, x(kL + \frac{L}{2} + 1) \right]^T & \text{for case3} \\ \left[ x(kL - \frac{L}{2} + 1), x(kL - \frac{L}{2} + 2), \dots, x(kL + \frac{L}{2} - 1) \right]^T & \text{for case4} \\ \left[ x(kL - \frac{L}{2} + 3), x(kL - \frac{L}{2} + 4), \dots, x(kL + \frac{L}{2} - 1) \right]^T & \text{for case5} \\ \left[ x(kL + 1), \dots, x(kL + \frac{L}{2} + 1) \right]^T & \text{for case6} \\ \left[ x(kL - \frac{L}{2} + 1), \dots, x(kL + 1) \right]^T & \text{for case7} \\ \text{noises} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (14)$$

식 (14)와 같이 서브블록에 대한 2차 커브피팅 및 선형 근사를 통한 무효 요소신호들을 제거하여 유효 신호블록을 재구성함으로써 해당 질량지수의 질량 스펙트럼을 구할 수 있다. 그러나 여전히 피크 위치의 이동에 의한 오차가 존재하므로 피크위치오차의 보정이 필요하다. 질량지수 k에 해당하는 식 (14)의 유효 신호블록에 대한 2차 피팅 커브의 최대값과 그의 샘플신호(sample signal index)는 해당 신호블록의 피크 값과 위치를 의미한다. 즉, 피팅 곡선 최대값의 샘플신호 인덱스가  $k + \Delta k$ 라면 해당 신호블록의 피크위치오차는  $err\_pos = \Delta k$ 로 우측으로 피크의 위치가 이동된 것이므로 왼쪽으로  $\Delta k$ 만큼의 보정을 통해 정확한 피크 위치를 갖는 질량 스펙트럼을 얻을 수 있다. 만약  $err\_pos$ 가 신호블록의 길이를 결정하는 샘플링 율(L)의  $\beta\%$ 보다 클 경우 해당 신호블록은 잡음신호로 처리된다. 또한 정상적인 질량 스펙트럼으로 판정된 신호블록의 피크 위치 보정 시 우측 또는 좌측의 인접 스펙트럼 신호블록의 양쪽 끝 요소신호들은 최대  $L \cdot \beta\%$ 가 블록신호에 추가된다.

#### 4. 컴퓨터 시뮬레이션

제안한 GC-MS의 질량스펙트럼 해상도 개선방법의 성능 평가를 위해 컴퓨터 시뮬레이션을 수행하였다. 입력신호는 그림 2의 개발 중인 GC-MS 시스템의 진공 챔버에 대표적 온실가스 중 하나인 육플루오린화(SF6)가스를 주입하고 취득한 실제 수집 신호를 사용하여. GC-MS 시스템으로부터 측정된 아날로그 신호를 디지털 신호로 변환하기 위해 사용한 샘플링 율은  $L = 10$  [sample/amu]이다. 그림 6은 실험에 사용한 입력신호이다.

그림 7은 인접 스펙트럼과 분리되지 않은 경우에 대해 제안한 방법의 스펙트럼 분리 효과를 보이고 있다. 그림 7(a)는 질량지수  $k = 43$ 에 해당하는 신호블록을 나타내고 있다. 해당 스펙트럼은 인접 질량지수  $k = 44$ 의 스펙트럼과 연결되어 있어 구분이 어렵다. 그림 7(b)는 신호블록의 좌우측 서브블록에 대한 2차 피팅 곡선을 나타내고 있다. 좌측 서브블록에 대한 피팅 곡선은 음의 기울기를 가지며, 우측 서브블록은 양의 기울기를 갖는다. 또한

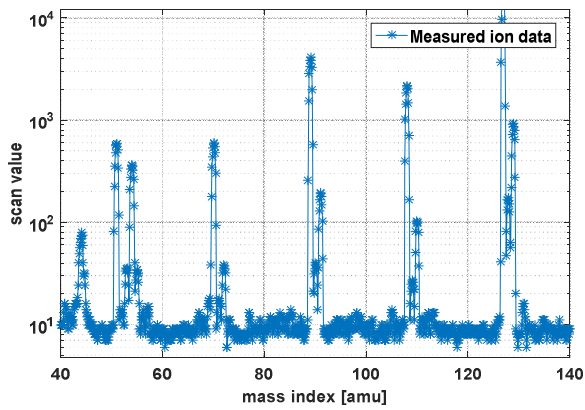


그림 6 입력으로 사용한 육플루오린화황(SF6) 가스의 이온신호 (질량지수 k = 40~140)  
 Fig. 6 Ion signals of hexafluorine sulfur hexafluoride(SF6) gas used input (mass index k = 40~140)

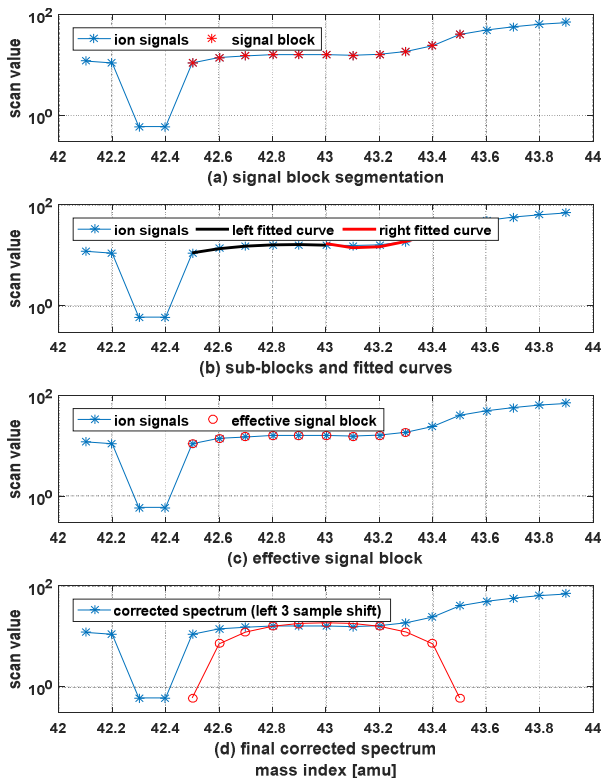


그림 7 질량지수 k = 43에서의 제안한 방법의 스펙트럼 분리 효과 (a) 신호블록 분할 (b) 좌우측 서브블록에 대한 2차 피팅 곡선 (c) 재구성된 유효 신호블록 (d) 피크 위치가 보정된 질량 스펙트럼  
 Fig. 7 Spectral separation effect of the proposed methods at mass index k = 43 (a) signal block segmentation (b) 2nd fitted curves for left and right sub-blocks (c) reconstructed valid signal block (d) mass spectrum in which the peak position error is corrected

좌우측 및 중앙 서브블록의 선형 근사 직선의 기울기는 좌측이 9.14, 우측이 42.21, 중앙이 1.00이며, 신호블록 내 연속적으로 증가 또는 감소하는 샘플 수는 3개 이상이다. 따라서 표 1의 case4에 해당하므로 식 (14)를 사용하여 우측 2개의 샘플이 제거되어 그림 7(c)와 같은 유효 신호블록으로 재구성된다. 그림 7(d)는 최종 스펙트럼으로 유효 신호블록에 대한 2차 피팅을 통해 좌측으로 3개 샘플만큼 피크위치오차가 보정된 결과이다.

그림 8은 제안한 방법에 의해 피크위치오차의 보정 효과를 보이고 있다. 그림 7(a)는 질량지수 k = 85에 해당하는 신호블록을 나타내고 있다. 인접 스펙트럼과 연결되어 있지 않으나 우측으로 피크 위치가 이동되었음을 알 수 있다. 그림 7(b)는 신호블록의 좌우측 서브블록에 대한 2차 피팅 곡선을 나타내고 있다. 좌우측 서브블록에 대한 피팅 곡선은 모두 음의 기울기를 갖는다. 또한 좌우측 및 중앙 서브블록의 선형 근사 직선의 기울기는 좌측이 11.20, 우측이 0.29, 중앙이 26.80이며, 신호블록 내 연속적으로 증가 또는 감소하는 샘플 수는 3개 이상이다. 따라서 표

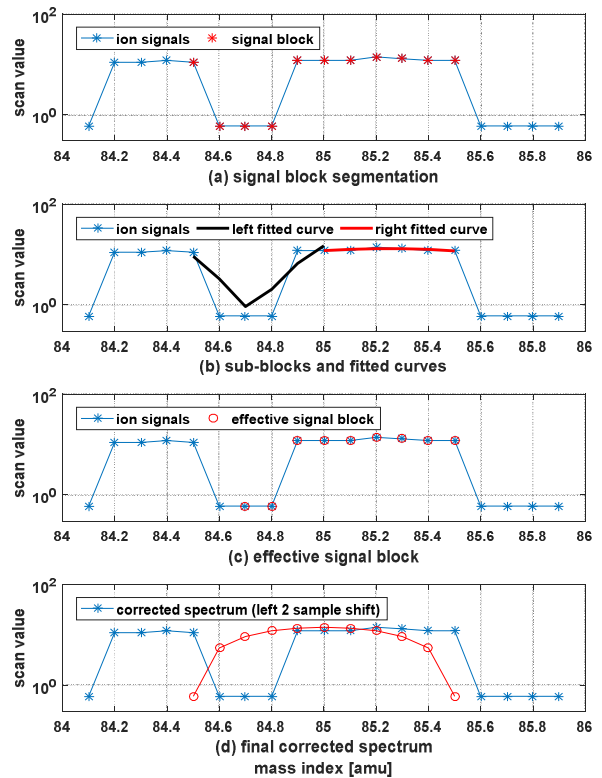


그림 8 질량지수 k = 85에서의 제안한 방법의 피크위치오차 보정 효과 (a) 신호블록 분할 (b) 좌우측 서브블록에 대한 2차 피팅 곡선 (c) 재구성된 유효 신호블록 (d) 피크 위치가 보정된 질량 스펙트럼  
 Fig. 8 Peak position error correction effect of the proposed methods at mass index k = 85 (a) signal block segmentation (b) 2nd fitted curves for left and right sub-blocks (c) valid signal block (d) mass spectrum in which the peak position error is corrected



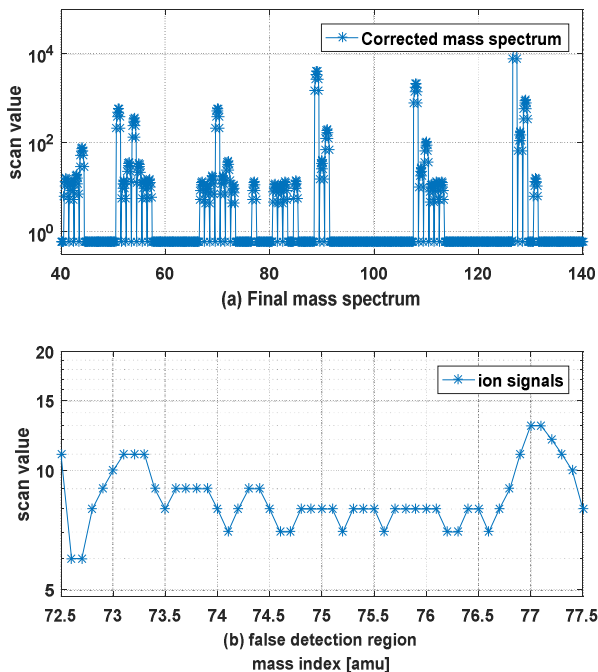


그림 9 제안한 방법에 의해 질량 스펙트럼의 해상도 개선 결과 (a) 최종 개선된 질량 스펙트럼 (b) 오검출된 영역의 이온신호

Fig. 9 The resolution improvement of the mass spectrum by the proposed methods (a) final mass spectrum (b) the ion signals of the false detection region

1의 case3에 해당하므로 식 (14)를 사용하여 좌측 2개의 샘플이 제거되어 그림 7(c)와 같은 유효 신호블록으로 재구성된다. 그림 7(d)는 유효 신호블록에 대한 2차 피팅을 통해 좌측으로 2샘플 만큼 피크위치오차를 보정한 스펙트럼이다.

그림 9는 제안한 알고리즘을 통해 그림 6의 입력 신호인 SF6 질량 스펙트럼의 해상도가 개선된 결과를 보이고 있다. 그림 9(a)에서 대부분의 질량지수에서의 스펙트럼은 효과적으로 분리, 검출되었으며 피크위치오차가 보정되어 스펙트럼 해상도는 개선되었다. 그러나 SF6 가스는 질량지수  $k = 74, 75$ 에서 스펙트럼이 존재해야 하나 잡음으로 처리되었다. 그림 9(b)로부터  $k = 74, 75$  영역의 측정된 이온신호는 인접 잡음( $k = 76$ ) 수준과 비교했을 때 유사한 수준으로 잡음과 구분이 어려움을 알 수 있다. 이러한 검출 오류는 알고리즘 개선에 앞서 검출기의 성능 개선을 통한 해결이 필요하다.

#### 4. 결 론

GC-MS 시스템의 질량 스펙트럼의 해상도 개선을 위한 방법을 제안하였다. 수집된 이온신호를 질량지수별 신호블록으로 분할하고 이 신호블록에 대한 1차 및 2차 피팅 결과 함수의 기울

기 부호를 사용하여 유효신호로만 구성된 신호블록을 구성한다. 재구성된 신호블록에 대한 2차 피팅 곡선을 통해 잡음과 구분되는 스펙트럼을 찾고 이 스펙트럼의 피크위치오차를 보정함으로써 유효한 질량 스펙트럼을 얻을 수 있다. 제안한 방법을 통해 얻은 질량 스펙트럼은 인접 스펙트럼과 명확히 분리되며, 스펙트럼의 피크 위치가 정확히 질량 지수에 위치하므로 표준 라이브러리와 비교를 통해 입력가스로 주입된 유기화합물의 효과적 분석이 가능하다.

#### 감사의 글

이 연구는 2018년도 산업통상자원부 및 산업기술평가기관 리원(KEIT) 연구비 지원에 의한 연구임(10062311).

#### References

- [1] A. Luedemann, K. Strassburg, A. Erban and J. Kopka, "Tag Finder for the quantitative analysis of gas chromatography-mass spectrometry(GC-MS)-based metabolite profiling experiments", *Journal of Bioinformatics*, Vol. 24(5), pp. 732-737, March 2008.
- [2] H. S. Lee, S. H. Lee, E. J. Kim, C. H. Jeong and H. B. Pyo, "Simultaneous Analysis of Antimicrobial Three Straight Chain 1,2-alkanediols in Cosmetics by Gas Chromatography", *Journal of the Society of Cosmetic Scientists of Korea*, pp. 366 - 376, 1994.
- [3] J. Luong, R. Gras, R. Mustacich and H. Cortes, "Low Thermal Mass Gas Chromatography: Principles and Applications", *Journal of Chromatographic Science*, Vol. 44(5), pp. 253-261, May 2008.
- [4] S. Sujithra, P. Sreelatha, and S.E. Lawrence, "Development of control algorithm for quadrupole mass spectrometer using LabVIEW", in *Proceedings of the 2014 International Conference on Electronics and Communication Systems*, pp. 1-5, 2014.
- [5] C. J. Park, "Operating Principle of Residual Gas Analyzer", *Journal of the Korean Vacuum Society*, Vol. 17, No.4, pp. 262-269, July 2008.
- [6] H. Choi and I. Lee, "Additive Noise Reduction Algorithm for Mass Spectrum Analyzer", *Journal of the Korea Institute of Information and Communication Engineering*, Vol. 22, No. 1, pp. 1-9, Jan. 2018.
- [7] A. V. Oppenheim and R. W. Schaffer, *Discrete-Time Signal Processing*, 2nd ed. New Jersey, Prentice-Hall, 1999.

---

저 자 소 개



**최 훈 (Hun Choi)**

1996년 충북대학교 전자공학과 졸업  
2001년 동 대학원 전자공학과 석사  
2006년 동 대학원 전자공학과 박사  
1995년~1998년 LG반도체  
2006년~2008년 한국표준과학연구원  
Post-Doc.  
2008년 3월~현재 동의대학교 전자공학과  
부교수  
Tel : 051-890-1673