



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0071864
(43) 공개일자 2022년05월31일

- | | |
|---|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07C 219/32 (2006.01) C07D 405/14 (2006.01)
C09B 15/00 (2006.01) G01N 31/22 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
C07C 219/32 (2013.01)
C07D 405/14 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2021-0067135
(22) 출원일자 2021년05월25일
심사청구일자 2021년05월25일</p> <p>(30) 우선권주장
1020200158634 2020년11월24일 대한민국(KR)</p> | <p>(71) 출원인
울산과학기술원
울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50</p> <p>(72) 발명자
이지석
울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50
오중원
울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50
(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
특허법인 무한</p> |
|---|---|

전체 청구항 수 : 총 14 항

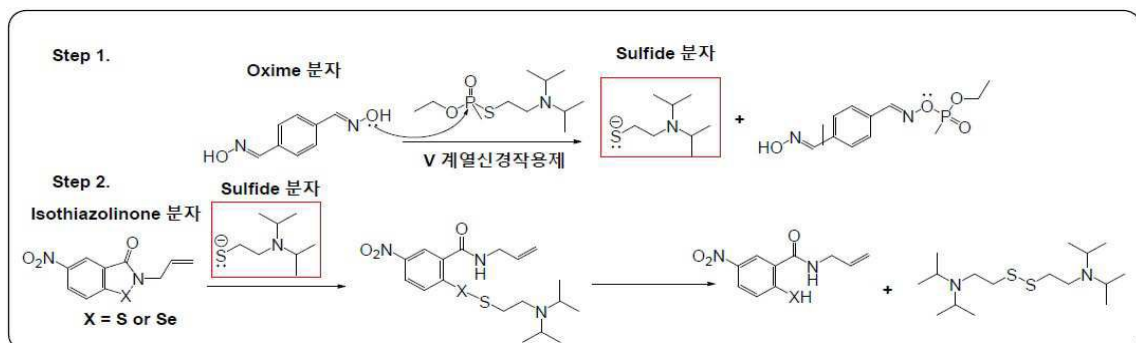
(54) 발명의 명칭 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물 및 V 계열 신경작용제 탐지 센서

(57) 요약

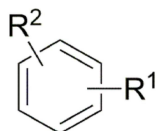
본 발명은 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물 및 V 계열 신경작용제 탐지 센서에 관한 것으로, 본 발명의 일 측면은, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 제1 화합물; 및 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 포함하는, 제2 화합물;을 포함하는, V 계열 신경작용제 탐지용 조성물을 제공한다.

(뒷면에 계속)

대 표 도 - 도1



[화학식 1]

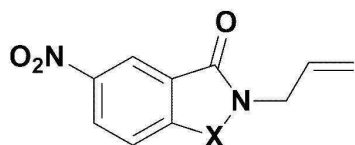


상기 화학식 1에서,

R^1 및 R^2 는, 각각, 수소 또는 $-R-CH=N-OH$ 이고, 이 때 R^1 및 R^2 중 적어도 하나는 $-R-CH=N-OH$ 이고,

상기 R은, 각각, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알케닐기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 3 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기 또는 탄소수 5 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[화학식 2]



상기 화학식 2에서, X는 S 또는 Se이다.

(52) CPC특허분류

C09B 15/00 (2013.01)

G01N 31/22 (2013.01)

(72) 발명자

전인규

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

김도원

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1415170986
과제번호	18-CM-SS-13-MKE
부처명	산업통상자원부
과제관리(전문)기관명	국방과학연구소
연구사업명	민군기술협력(R&D)(산업부)
연구과제명	화학작용제 검출 변색소재 및 섬유패치 개발
기 여 율	1/1
과제수행기관명	울산과학기술원
연구기간	2020.01.01 ~ 2020.12.31

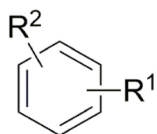
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 제1 화합물; 및
 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 포함하는, 제2 화합물;을 포함하는,
 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물:

[화학식 1]

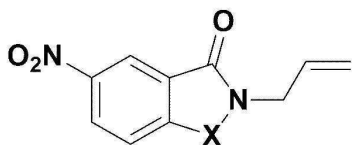


(상기 화학식 1에서,

R¹ 및 R²는, 각각, 수소 또는 -R-CH=N-OH이고, 이 때 R¹ 및 R² 중 적어도 하나는 -R-CH=N-OH이고,

상기 R은, 각각, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알케닐기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 3 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기 또는 탄소수 5 내지 30의 헤테로아릴기임)

[화학식 2]



(상기 화학식 2에서, X는 S 또는 Se임.)

청구항 2

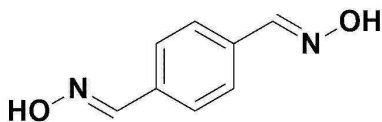
제1항에 있어서,

상기 제1 화합물은,

하기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 것인,

V 계열 신경작용제 탐지용 조성물:

[화학식 3]



청구항 3

제1항에 있어서,

V 계열 신경작용제와 반응 시, 흰색 계열의 색에서 노란색 계열 또는 황갈색 계열의 색으로 색 변화가 나타나는

것인,
V 계열 신경작용제 탐지용 조성물.

청구항 4

제1항에 있어서,
G계열 신경작용제와 반응 시, 색 변화가 나타나지 않는 것인,
V 계열 신경작용제 탐지용 조성물.

청구항 5

제1항에 있어서,
상기 제1 화합물은, V 계열 신경작용제와 반응하여 황화물을 형성하고,
상기 제2 화합물은, 상기 황화물과 반응하여 색 변화를 발생시키는 것인,
V 계열 신경작용제 탐지용 조성물.

청구항 6

제1항에 있어서,
상기 제1 화합물 및 상기 제2 화합물은,
1 : 1 내지 1 : 5의 몰비로 포함되는 것인,
V 계열 신경작용제 탐지용 조성물.

청구항 7

제1항에 있어서,
용매;를 더 포함하고,
상기 용매는, 물, 유기 용매 또는 이 둘;을 포함하는 것인,
V 계열 신경작용제 탐지용 조성물.

청구항 8

제1항에 있어서,
상기 제1 화합물의 농도는, 0.1 mM 내지 1 mM이고,
상기 제2 화합물의 농도는, 0.1 mM 내지 1 mM인 것인,
V 계열 신경작용제 탐지용 조성물.

청구항 9

제1항에 있어서,

V 계열 신경작용제와 반응 시, 20 초 이내에 색변화가 나타나는 것인,
V 계열 신경작용제 탐지용 조성물.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 V 계열 신경작용제는,

VX 작용제(O-ethyl S-(2-diisopropylamino)ethyl methylphosphonothioate), VR 작용제(O-Isobutyl S-2-diethylaminoethyl methylphosphonothiolate), VG 작용제(O,O-Diethyl S-(2-diethylamino)ethyl phosphorothioate), VE 작용제((S)-(ethyl {[2-(diethylamino)ethyl]sulfanyl}(ethyl)phosphinate)) 및 VM 작용제(S-[2-(diethylamino)ethyl] O-ethyl methylphosphonothioate)로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상을 포함하는 것인,

V 계열 신경작용제 탐지용 조성물.

청구항 11

제1항의 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물을 포함하는, 탐지부;를 포함하고,

상기 탐지부의 색변화를 통해 V 계열 신경작용제를 탐지 및 식별하는 것인,

V 계열 신경작용제 탐지 센서.

청구항 12

제11항에 있어서,

G계열 신경작용제에 노출 시, 색변화가 나타나지 않는 것인,

V 계열 신경작용제 탐지 센서.

청구항 13

제11항에 있어서,

상기 V 계열 신경작용제는, 액상, 고상, 기상 및 에어로졸 중 적어도 하나의 형태로 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물과 접촉하는 것인,

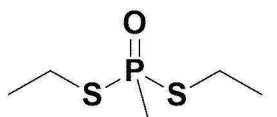
V 계열 신경작용제 탐지 센서.

청구항 14

하기 화학식 4로 표시되는 화합물을 포함하는,

V 계열 신경작용제 모사 물질:

[화학식 4]



발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물 및 V 계열 신경작용제 탐지 센서에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 화학전 작용제는 그 생리학적 효과로 인해 인명의 살상 또는 인간에 심각한 상해를 가하거나 무력하게 만들기 위해 군사 작전용으로 의도된 물질이다. 현대의 화학전 작용제는 신경작용제, 수포발생제, 질식작용제, 혈액작용제 및 무능력화제의 5개 범주로 분류되고 있다.

[0004] 2차 세계대전 중 화학전 작용제는 신경계를 공격하여 빠르게 작용하는 독극물인 “신경작용제”가 집중 개발되었다. 신경작용제는 신경을 통한 기관으로의 메시지 전달 기전을 혼란시키는 인-함유 유기 화학물질로 독성이 높고 제조가 용이하며 인간과 동물에 치명적인 영향을 미치므로, 빠르고 신뢰성 있는 방법을 통해 검출될 필요가 있다.

[0005] 신경작용제는 다시 G-계열 작용제와 V-계열 작용제로 나눌 수 있는데, G-계열 작용제로는 독일에서 개발된 타분(tabun: GA, dimethylphosphoramidocyanidic acid ethyl ester), 사린(sarin: GB, methylphosphonofluoridic acid (1-methylethyl) ester), 소만(soman: GD, methylphosphonofluoridic acid 1,2,2-trimethylpropyl ester), 씨클로헥식 사린(cyclohexyl sarin: GF, methylphosphonofluoridic acid cyclohexyl ester) 등이 대표적이고, V-계열 작용제로는 VX(methylphosphonothioic acid S-[2-[bis(1-methylethyl)amino]ethyl] O-ethyl ester)가 대표적으로 알려져 있다.

[0006] 신경작용제인 유기인 화합물은, 인체의 신경계에 존재하는 아세틸콜린에스터라제 (acetylcholinesterase, AChE)의 활성을 저해함으로써 독성을 유발시킨다. 아세틸콜린에스터라제는 신경세포 시냅스에서 화학적 신호전달 물질인 아세틸콜린 (acetylcholine, ACh)을 콜린 (choline)과 아세트산 (acetic acid)으로 가수분해하는 효소이다. 아세틸콜린에스터라제는 세린(ser 200), 글루탐산(glu 327) 및 히스티딘(his 440)이 세 작용기(catalytic triad)를 형성하는 활성 자리를 가지고 있어 아세틸콜린의 가수분해를 이끈다. 또한 활성 자리를 이루는 홈(gorge) 입구 가장자리에는 주변 음이온 하부자리(peripheral anionic subsite)가 존재하는데, 트립토판(Trp 286), 아스파테이트(Asp 74)가 중요한 역할을 하는 것으로 알려져 있다. 신경작용제의 독성은 아세틸콜린에스터라제의 활성 자리에 존재하는 세린 산소 음이온(serine oxygen anion)이 신경작용제의 인원자(phosphorous atom)를 핵친화성 공격(nucleophilic attack)하여 안정한 P-O 결합을 형성함으로써 아세틸콜린에스터라제를 저해시켜서 나타난다. 아세틸콜린에스터라제의 저해는 시냅스 내에 과도한 양의 아세틸콜린 축적을 야기하여 후-시냅스(post-synapse)의 아세틸콜린에스터라제 수용체(receptor)를 지속적으로 자극하게 된다.

[0007] 현재까지 다수의 신경작용제를 탐지하기 위한 검출법들이 개발되어 왔으나, 느린 응답 속도, 특이성 부족, 제한적인 선택성, 저감도, 실시간 계측의 어려움 등과 같은 한계점이 존재한다. 특히, 종래의 신경작용제 탐지 물질은 G계열 작용제와 V계열 작용제를 구분하여 탐지할 수 없어 선택적으로 신경작용제를 판별하는데 어려움이 있다.

[0008] 전술한 배경기술은 발명자가 본원의 개시 내용을 도출하는 과정에서 보유하거나 습득한 것으로서, 반드시 본 출원 전에 일반 공중에 공개된 공지기술이라고 할 수는 없다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0010] 본 발명은 상술한 문제점을 해결하기 위한 것으로, 본 발명의 목적은, 색변이를 통해 V 계열 신경작용제를 선택적으로 탐지 및 식별할 수 있는, V 계열 신경작용제 탐지용 조성물 및 이를 사용한 V 계열 신경작용제 탐지 센서를 제공하는 것이다.

[0011] 또한, 본 발명의 다른 목적은, V 계열 신경작용제 탐지용 조성물의 효능 연구에 활용할 수 있는, V 계열 신경작

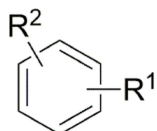
용제 모사 물질을 제공하는 것이다.

[0012] 그러나, 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 이상에서 언급한 것들로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 과제들은 아래의 기재로부터 해당 분야 통상의 기술자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제의 해결 수단

[0014] 본 발명의 일 측면은, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 제1 화합물; 및 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 포함하는, 제2 화합물;을 포함하는, V 계열 신경작용제 탐지용 조성물을 제공한다.

[0015] [화학식 1]



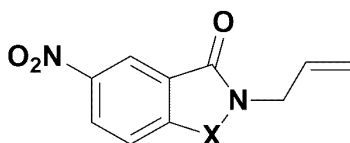
[0016]

[0017] 상기 화학식 1에서,

[0018] R¹ 및 R²는, 각각, 수소 또는 -R-CH=N-OH이고, 이 때 R¹ 및 R² 중 적어도 하나는 -R-CH=N-OH이고,

[0019] 상기 R은, 각각, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알케닐기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 3 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기 또는 탄소수 5 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[0020] [화학식 2]

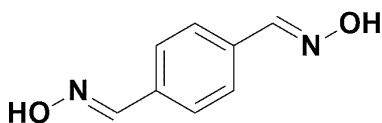


[0021]

[0022] 상기 화학식 2에서, X는 S 또는 Se이다.

[0023] 일 실시형태에 따르면, 상기 제1 화합물은, 하기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0024] [화학식 3]



[0025]

[0026] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, V 계열 신경작용제와 반응 시, 흰색 계열의 색에서 노란색 계열 또는 황갈색 계열의 색으로 색 변화가 나타나는 것일 수 있다.

[0027] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, G계열 신경작용제와 반응 시, 색 변화가 나타나지 않는 것일 수 있다.

[0028] 일 실시형태에 따르면, 상기 제1 화합물은, V 계열 신경작용제와 반응하여 황화물을 형성하고, 상기 제2 화합물은, 상기 황화물과 반응하여 색 변화를 발생시키는 것일 수 있다.

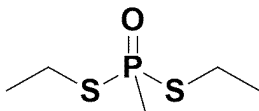
[0029] 일 실시형태에 따르면, 상기 제1 화합물 및 상기 제2 화합물은, 1 : 1 내지 1 : 5의 몰비로 포함되는 것일 수 있다.

[0030] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, 용매;를 더 포함하고, 상기 용매는, 물, 유기 용매 또는 이 둘;을 포함하는 것일 수 있다.

[0031] 일 실시형태에 따르면, 상기 제1 화합물의 농도는, 0.1 mM 내지 1 mM이고, 상기 제2 화합물의 농도는, 0.1 mM 내지 1 mM인 것일 수 있다.

- [0032] 일 실시형태에 따르면, V 계열 신경작용제와 반응 시, 20 초 이내에 색변화가 나타나는 것일 수 있다.
- [0033] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제는, VX 작용제(O-ethyl S-(2-diisopropylamino)ethyl methylphosphonothioate), VR 작용제(O-Isobutyl S-2-diethylaminoethyl methylphosphonothiolate), VG 작용제(O,O-Diethyl S-(2-diethylamino)ethyl phosphorothioate), VE 작용제((S)-(ethyl {[2-(diethylamino)ethyl]sulfanyl})(ethyl)phosphinate)) 및 VM 작용제(S-[2-(diethylamino)ethyl] O-ethyl methylphosphonothioate)로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상을 포함하는 것일 수 있다.
- [0034] 본 발명의 다른 측면은, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물을 포함하는, 탐지부;를 포함하고, 상기 탐지부의 색변화를 통해 V 계열 신경작용제를 탐지 및 식별하는 것인, V 계열 신경작용제 탐지 센서를 제공한다.
- [0035] 일 실시형태에 따르면, G계열 신경작용제에 노출 시, 색변화가 나타나지 않는 것일 수 있다.
- [0036] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제는, 액상, 고상, 기상 및 에어로졸 중 적어도 하나의 형태로 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물과 접촉하는 것일 수 있다.
- [0037] 본 발명의 또 다른 측면은, 하기 화학식 4로 표시되는 화합물을 포함하는, V 계열 신경작용제 모사 물질을 제공한다.

[0038] [화학식 4]



[0039]

발명의 효과

- [0041] 본 발명에 따른 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, V 계열 신경작용제에 노출 시 색상 변화를 일으켜 V 계열 신경작용제를 탐지 및 식별할 수 있는 효과가 있으며, G 계열 신경작용제에 노출 시에는 색상 변화가 발생하지 않아 V 계열 신경작용제를 선택적으로 탐지할 수 있는 효과가 있다.
- [0042] 본 발명에 따른 V 계열 신경작용제 탐지 센서는, V 계열 신경작용제에 노출 시 색상 변화를 육안으로 신속히 확인할 수 있어 V 계열 신경작용제를 빠르고 신뢰성 있게 검출할 수 있으며, G 계열 신경작용제와 구분하여 탐지할 수 있다.
- [0043] 본 발명에 따른 V 계열 신경작용제 모사 물질은, 화학무기금지기구의 화학무기 조약에 따른 분류인 schedule2에 해당하여 연구실 합성이 가능하며, V 계열 신경작용제 관련 연구를 위해 활용될 수 있는 효과가 있다.

도면의 간단한 설명

- [0045] 도 1은, 본 발명의 일 실시형태에 따른 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물과 V 계열 신경작용제의 반응 메커니즘을 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0046] 이하에서, 첨부된 도면을 참조하여 실시예들을 상세하게 설명한다. 그러나, 실시예들에는 다양한 변경이 가해질 수 있어서 특허출원의 권리 범위가 이러한 실시예들에 의해 제한되거나 한정되는 것은 아니다. 실시예들에 대한 모든 변경, 균등물 내지 대체물이 권리 범위에 포함되는 것으로 이해되어야 한다.
- [0047] 실시예에서 사용한 용어는 단지 설명을 목적으로 사용된 것으로, 한정하려는 의도로 해석되어서는 안된다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 명세서에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [0048] 다르게 정의되지 않는 한, 기술적이거나 과학적인 용어를 포함해서 여기서 사용되는 모든 용어들은 실시예가 속

하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가지고 있다. 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 것과 같은 용어들은 관련 기술의 문맥 상 가지는 의미와 일치하는 의미를 가지는 것으로 해석되어야 하며, 본 출원에서 명백하게 정의하지 않는 한, 이상적이거나 과도하게 형식적인 의미로 해석되지 않는다.

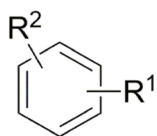
[0049] 또한, 첨부 도면을 참조하여 설명함에 있어, 도면 부호에 관계없이 동일한 구성 요소는 동일한 참조부호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다. 실시예를 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 실시예의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.

[0050] 또한, 실시 예의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되거나 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[0051] 어느 하나의 실시 예에 포함된 구성요소와, 공통적인 기능을 포함하는 구성요소는, 다른 실시 예에서 동일한 명칭을 사용하여 설명하기로 한다. 반대되는 기재가 없는 이상, 어느 하나의 실시 예에 기재한 설명은 다른 실시 예에도 적용될 수 있으며, 중복되는 범위에서 구체적인 설명은 생략하기로 한다.

[0053] 본 발명의 일 측면은, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 제1 화합물; 및 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 포함하는, 제2 화합물;을 포함하는, V 계열 신경작용제 탐지용 조성물을 제공한다.

[0054] [화학식 1]



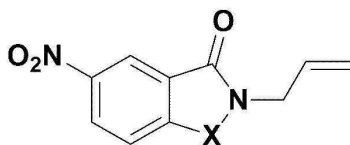
[0055]

[0056] 상기 화학식 1에서,

[0057] R^1 및 R^2 는, 각각, 수소 또는 $-R-CH=N-OH$ 이고, 이 때 R^1 및 R^2 중 적어도 하나는 $-R-CH=N-OH$ 이고,

[0058] 상기 R은, 각각, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알케닐기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 3 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기 또는 탄소수 5 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[0059] [화학식 2]



[0060]

[0061] 상기 화학식 2에서, X는 S 또는 Se이다.

[0063] 상기 화학식 1에서, 알킬기, 알케닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기 및 헤테로아릴기는, 각각, 비치환된 것이거나 치환기를 포함하는 것일 수 있다.

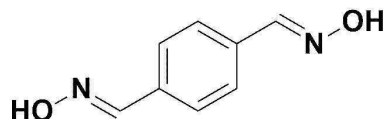
[0064] 또한, 상기 치환기는, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-CN$, $-CH_2CN$, $-NH_2$, $-OH$, $-NHCH_3$, $-OC(O)CF_3$, 탄소수 1 내지 5의 선형 또는 분지형 알킬, 알킬아미노, 아미노알킬, $-OCH_2Ph$, $-NHCO$ -알킬, $-COOH$, $-C(O)Ph$, $-C(O)O$ -알킬, $-C(O)H$, $-C(O)NH_2$ 또는 $-NO_2$ 일 수 있다.

[0065] 일 실시형태에 따르면, 상기 화학식 1에서, R^1 및 R^2 는, 각각, $-R-CH=N-OH$ 이고, 상기 R은, 각각, 탄소수 1 내지

10의 알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알케닐기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 3 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기 또는 탄소수 5 내지 30의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0067] 일 실시형태에 따르면, 상기 제1 화합물은, 하기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0068] [화학식 3]



[0069]

[0070] 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은, 2개의 옥심기를 가져 V 계열 신경작용제와 친핵성 치환반응이 진행되기 용이할 뿐만 아니라, 2 개의 옥심기가 para 위치에 존재하여 옥심기의 친핵성이 강화되어 신속한 반응이 이루어질 수 있다.

[0072] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, V 계열 신경작용제와 반응 시, 흰색 계열의 색에서 노란색 계열 또는 황갈색 계열의 색으로 색 변화가 나타나는 것일 수 있다.

[0073] 상기 색 변화는 육안으로 관측되는 것일 수 있으며, 이를 통해 V 계열 신경작용제를 검출할 수 있다.

[0074] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, G계열 신경작용제와 반응 시, 색 변화가 나타나지 않는 것일 수 있다.

[0075] G 계열 신경작용제는, 사린, 소만, 타분, 사이클로사린 등이 알려져 있는데, 이들 유기인 화합물은 황(S)과 결합하고 있지 않아, 옥심계 화합물과 반응 시 황화물을 형성하지 않는다. 또한, 상기 제1 화합물이 G 계열 신경작용제와 반응하여 1차적으로 형성된 생성물은 상기 제2 화합물과 반응 시 색 변화를 일으키지 않는다.

[0076] 따라서, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, G계열 신경작용제와 반응 시, 색 변화가 나타나지 않으며, V 계열 신경작용제와 G계열 신경작용제를 구분하여 탐지할 수 있다. 즉, 본 발명에 따른 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, V 계열 신경작용제를 선택적으로 탐지할 수 있는 장점을 갖는다.

[0078] 일 실시형태에 따르면, 상기 제1 화합물은, V 계열 신경작용제와 반응하여 황화물을 형성하고, 상기 제2 화합물은, 상기 황화물과 반응하여 색 변화를 발생시키는 것일 수 있다.

[0079] 상기 제1 화합물은, V 계열 신경작용제와 일차적으로 반응하는 화합물로, V계열 신경작용제와 반응 시 황화물을 형성시키는 작용을 한다.

[0080] 상기 제1 화합물은 옥심계 화합물로, 바람직하게는, 디옥심계 화합물일 수 있다.

[0081] 상기 옥심계 화합물은, 옥심기($-CH=N-OH$)를 포함하는 화합물로, V 계열 신경작용제와 친핵성 치환반응을 통해 황화물을 생성시킨다.

[0082] 여기서, 상기 황화물(sulfide)은, 황(S)원소 또는 황(S)이온을 포함하고 있는 유기 화합물을 의미할 수 있다.

[0083] 상기 제2 화합물은, 제1 화합물 및 V 계열 신경작용제와의 반응에 의해 1차적으로 형성된 황화물과 반응하는 화합물로, 기본적으로 조성물 내에서 흰색 계열의 색상을 띠고 있으며, 황화물과 반응 시 노란색 계열의 색으로 색 전이가 일어나는 화합물이다.

[0084] 상기 제2 화합물은, 이소시아졸리논계 화합물 또는 셀레나졸리논계 화합물을 포함할 수 있다.

[0085] 본 발명에 따른 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, 옥심계 화합물을 포함하는 제1 화합물과 이소시아졸리논계 화합물 또는 셀레나졸리논계 화합물을 포함하는 제2 화합물을 동시에 포함하여, V 계열 신경작용제와의 반응에 의해 1차적으로 황화물을 형성시키고 형성된 황화물을 색 변화를 통해 탐지함으로써, 색변화를 통해 V 계열 신경작용제를 탐지 및 식별할 수 있다.

- [0087] 일 실시형태에 따르면, 상기 제1 화합물 및 상기 제2 화합물은, 1 : 1 내지 1 : 5의 몰비로 포함되는 것일 수 있다.
- [0088] 바람직하게는, 상기 제1 화합물 및 상기 제2 화합물은, 1 : 1 내지 1 : 3의 몰비로 포함되는 것일 수 있고, 더욱 바람직하게는, 1 : 1 내지 1 : 2의 몰비로 포함되는 것일 수 있다.
- [0089] 만일, 상기 제1 화합물을 기준으로, 상기 제2 화합물의 몰수가 상기범위 미만일 경우, 색 변화 속도가 저하될 수 있고, 상기 범위를 초과할 경우 상대적으로 제1 화합물의 함량이 낮아짐에 따라 황화물 생성이 느려져 탐지 또는 검출 속도가 저하될 수 있다.
- [0091] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, 용매;를 더 포함하고, 상기 용매는, 물, 유기 용매 또는 이 둘;을 포함하는 것일 수 있다.
- [0092] 상기 유기 용매는, 아세토니트릴, 아세톤 (Acetone), 벤질알콜, 메탄올, 에탄올, 이소프로판올, n-프로판올, n-부탄올, tert-부탄올, 아세토니트릴 (Acetonitrile), 에테르, N-메틸-2-피롤리돈 (NMP, N-methyl-2-pyrrolidone), 디메틸폼아미드 (Dimethylformamide, DMF), 디메틸아세트아미드 (DMAc, dimethylacetamide), 자일렌 (Xylene), 벤젠 (Benzene), 클로로폼 (CHCl₃), 톨루엔 (Toluene), 테트라하이드로퓨란 (THF), 글리세린 (Glycerin), 에틸렌 글리콜 (Ethylene glycol), 디메틸피롤리돈 (Dimethylpyrrolidone), 사이클로헥산 (Hexane) 및 디메틸술폭사이드 (Dimethyl sulphoxide)로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상을 포함할 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.
- [0094] 일 실시형태에 따르면, 상기 제1 화합물의 농도는, 0.1 mM 내지 1 mM이고, 상기 제2 화합물의 농도는, 0.1 mM 내지 1 mM인 것일 수 있다.
- [0095] 만일, 상기 제1 화합물의 농도가 상기 범위 미만일 경우, 생성되는 황화물 몰 수가 낮아져 색상 변화가 일어나지 않는 문제점이 있을 수 있고, 상기 범위를 초과할 경우, 색 변화 속도가 저하될 수 있다는 문제점이 있을 수 있다.
- [0096] 또한, 상기 제2 화합물의 농도가 상기 범위 미만일 경우, 색의 농도가 떨어지면서 반응 후 색상변화를 육안으로 관찰 불가능한 문제점이 있을 수 있고, 상기 범위를 초과할 경우, 색의 농도가 짙어져 초기 색상이 노랑색을 띠면서 반응 후 색상과 구분이 되지 않는 문제점이 있을 수 있다.
- [0098] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, V 계열 신경작용제와 반응 시, 20 초 이내에 색변화가 나타나는 것일 수 있다.
- [0099] 본 발명에 따른 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은, 20 초 이내에 색변화가 감지됨에 따라, V 계열 신경작용제를 신속하게 검출할 수 있는 장점이 있다.
- [0100] 여기서, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물 100 ml를 기준으로, 1 mM 내지 10 mM 농도를 가진 100 ml의 V 계열 신경작용제가 반응하는 것일 수 있다.
- [0102] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제는, VX 작용제(O-ethyl S-(2-diisopropylamino)ethyl methylphosphonothioate), VR 작용제(O-Isobutyl S-2-diethylaminoethyl methylphosphonothiolate), VG 작용제(O,O-Diethyl S-(2-diethylamino)ethyl phosphorothioate), VE 작용제((S)-(ethyl {[2-(diethylamino)ethyl]sulfanyl}(ethyl)phosphinate)) 및 VM 작용제(S-[2-(diethylamino)ethyl] O-ethyl methylphosphonothioate)로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상을 포함하는 것일 수 있다.
- [0103] 상기 V 계열 신경작용제는, 화학식 내 황(S)을 포함하며, 옥심계 화합물과 친핵성 치환 반응을 통해 황화물을 방출하는 것일 수 있다.
- [0105] 본 발명의 다른 측면은, 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물을 포함하는, 탐지부;를 포함하고, 상기 탐지부

의 색변화를 통해 V 계열 신경작용제를 탐지 및 식별하는 것인, V 계열 신경작용제 탐지 센서를 제공한다.

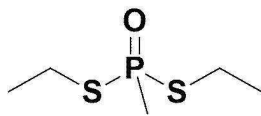
[0106] 일 실시형태에 따르면, G계열 신경작용제에 노출 시, 색변화가 나타나지 않는 것일 수 있다.

[0107] 상기 V 계열 신경작용제 탐지 센서는, V 계열 신경작용제에 노출 시 색상 변화를 육안으로 신속히 확인할 수 있어 V 계열 신경작용제를 빠르고 신뢰성 있게 검출할 수 있으며, G 계열 신경작용제와 구분하여 탐지할 수 있는 특징을 갖는다.

[0109] 일 실시형태에 따르면, 상기 V 계열 신경작용제는, 액상, 고상, 기상 및 에어로졸 중 적어도 하나의 형태로 상기 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물과 접촉하는 것일 수 있다.

[0111] 본 발명의 또 다른 측면은, 하기 화학식 4로 표시되는 화합물을 포함하는, V 계열 신경작용제 모사 물질을 제공한다.

[0112] [화학식 4]



[0114] V 계열 신경작용제 탐지 물질 및 시스템의 선택적인 검출 효능을 증명하기 위해서는 옥심기와 반응하여 황화물을 방출할 수 있는 V 계열 신경작용제 모사 물질이 필요하다.

[0115] 그러나 화학무기금지기구의 화학무기 조약 (한국 1997.4.29 가입)에 따르면, 위험 화학물질을 schedule 1,2,3로 분류하며, schedule1은 이미 화학무기로 사용된 적 있거나 그에 준하는 물질로, 어떤 목적으로든 개발, 생산, 저장, 운송이 금지된다.

[0116] Schedule2는 schedule1에 포함되지 않는 물질 중 화학무기로서도 사용되어질 수 있는 치명적 독성을 가진 물질로, 대량생산이 금지되며 연구목적의 소량 생산만 가능하다.

[0117] Schedule1에 포함되지 않는 물질들 중, 메틸기, 에틸기, 프로필기를 포함하는 유기인 화합물은 schedule2로 분류되나, 그 이상의 탄소수를 가진 알킬기를 포함한 유기인 화합물은 생산이 금지되고 있다. 이에 따라 옥심기와 반응하여 황화물을 생성할 수 있는 기존의 V 계열 신경작용제 유사 물질들은 현재 생산, 구입, 저장, 운송이 불가하다.

[0118] 본 발명에 따른 V 계열 신경작용제 모사 물질은, 화학무기금지기구의 화학무기 조약에 따른 분류인 schedule2에 해당하여 연구실 합성이 가능하며, V 계열 신경작용제 관련 연구를 위해 활용될 수 있는 효과가 있다.

[0119] 특히, V 계열 신경작용제를 선택적으로 탐지하는 물질의 개발에 효과적으로 이용될 수 있다.

[0121] 이하, 실시예 및 비교예에 의하여 본 발명을 더욱 상세히 설명하고자 한다.

[0122] 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것일 뿐, 본 발명의 내용이 하기 실시예에 한정되는 것은 아니다.

[0124] <실시예 1> V 계열 신경작용제 탐지용 조성물

[0125] 옥심계 화합물인 (1E,4E)-테레프탈알데히드 디옥심 ((1E,4E)-terephthalaldehyde dioxime) 및 이소씨아졸리논계 화합물인 2-알릴-5-니트로벤조[d]이소씨아졸-3(2H)-온 (2-allyl-5-nitrobenzo[d]isothiazol-3(2H)-one)을 아세트니트릴 용매에 첨가하여 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물을 제조하였다.

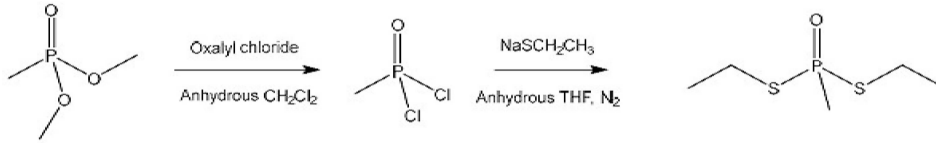
[0126] 이 때, (1E,4E)-테레프탈알데히드 디옥심은 0.1 mM 농도, 2-알릴-5-니트로벤조[d]이소씨아졸-3(2H)-온은 0.1 mM 농도로 혼합하였다.

[0128] <실시예 2> V 계열 신경작용제 모사 물질

[0129] 하기 반응식 1의 방법을 사용하여, V 계열 신경작용제 모사 물질인 S,S'-디에틸메틸포스포노디싸이오에이트(S,S'-diethyl methylphosphonodithioate)를 합성하였다.

[0130] [반응식 1]

[0131]



[0133] <실험예 1> V 계열 신경작용제 탐지용 조성물의 탐지 성능 확인

[0134] 실시예 1의 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물 100 ml에 10 mM 농도의 상기 실시예 2의 V 계열 신경작용제 모사물질이 100 ml를 반응시켜 색변화를 관찰하였다.

[0135] 실시예 1의 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물은 초기 흰색에서 V 계열 신경작용제 모사물질과 반응 후 20 초 이내에 노란색으로 색상이 변화하는 것을 관찰할 수 있었다.

[0137] 도 1은, 본 발명의 일 실시형태에 따른 V 계열 신경작용제 탐지용 조성물과 V 계열 신경작용제의 반응 메커니즘을 나타낸 것이다.

[0138] 도 1을 참조하면, V 계열 신경작용제 탐지용 조성물 내 옥심계 화합물(제1 화합물)이 V 계열 신경작용제와 반응하여 황화물을 형성하고, 형성된 황화물은 이소씨아졸리논(제2 화합물)과 반응하여 색변화를 일으키는 것을 확인할 수 있다.

[0139] 즉, 이소씨아졸리논계 화합물은 흰색의 색상을 띄며, 황화물과 반응하여 노란색의 색 변화를 일으킨다. 따라서, 황화물이 형성되지 않을 경우 색 변화는 발생하지 않으며, 황화물을 형성시키지 않는 G 계열 신경작용제에 노출 시 색 변화가 나타나지 않게된다.

[0141] 이상과 같이 실시예들이 비록 한정된 도면에 의해 설명되었으나, 해당 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 상기를 기초로 다양한 기술적 수정 및 변형을 적용할 수 있다. 예를 들어, 설명된 기술들이 설명된 방법과 다른 순서로 수행되거나, 및/또는 설명된 시스템, 구조, 장치, 회로 등의 구성요소들이 설명된 방법과 다른 형태로 결합 또는 조합되거나, 다른 구성요소 또는 균등물에 의하여 대치되거나 치환되더라도 적절한 결과가 달성될 수 있다.

[0142] 그러므로, 다른 구현들, 다른 실시예들 및 특허청구범위와 균등한 것들도 후술하는 청구범위의 범위에 속한다.

도면

도면1

