테라헤르츠 분광/영상을 이용한 식품위해요소의 검출

전향숙* · 최성욱 · 김현정
Hyang sook chun*, Sung wook choi, Hyun jung kim

한국식품연구원 안전성연구단
Food Safety Research Division, Korea Food Research Institute

서 론

우리가 빛이라고 말하는 광파는 1895년 X-ray (10^{20} Hz 이상)를 투시 촬영기에 이용한 이후 그 사용범위가 넓어졌다. 이러한 광파의 발전에 획기적인 역할을 한 것이 1960년대에 빛을 증폭할 수 있는 레이저를 개발한 것이다. 이를 바탕으로 광파는 광통신과 같은 통신기술과 학문적 연구를 위한 도구로 발전되어 왔다. 그러나 이러한 발전에도 불구하고, 그림 1에 나타내었듯이 1970년대 후반까지도 테라헤르츠(THz=10^{12} Hz) 주파수 영역대는 신호원(source) 개발의 어려움 때문에 응용할 수 없는 미지의 세계로 인식되어 테라헤르츠 갭(gap)이라 칭하여 왔다. 최근 들어, 초고속 레이저 및 관련 기술이 신속하게 발전함에 따라 연속해서 조정 가능한 테라헤르츠 전자기파를 생산하는 것이 더 이상 어렵지 않게 되었다. 따라서 테라헤르츠 주파수대를 생물, 의료, 환경, 식품, 농업 등 여러 분야에 응용하려는 시도가 활발하게 이루어지고 있다. 이에 본고에서는 테라헤르츠 분광/영상을 응용한 최신 연구 사례를 살펴봄으로써 식품의 안전을 위협하는 여러 가지 위해요소들을 검출하는데 테라헤르츠 주파수 대역의 응용가능성을 제시해 보고자 하였다.

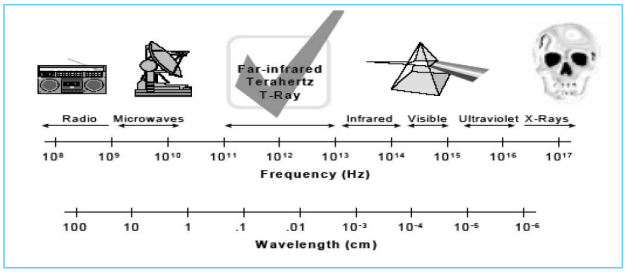

그림 1. 전자기파의 스펙트럼 (출처: 물리학과 첨단기술, 2003)

본 론

1. 테라헤르츠파의 특성, 발생 및 검출

테라헤르츠 대역의 전자기파 스펙트럼은 파장이

*Correspondence to: Hyang Sook Chun
Food Safety Research Division, Korea Food Research Institute, San 516 Bundang-gu, Sungnam-si, Gyeonggi-do 463-746, South Korea
Tel: 82-31-780-9273
Fax: 82-31-709-9876
E-mail: hschun@kfri.re.kr

0.03~3mm이고, 주파수가 0.1~10 테라헤르츠이며, 마이크로웨이브와 적외선 주파수대 사이에 위치한다(그림 1). 테라헤르츠파는 전파의 투과성과 광파의 직진성이라는 양면성을 보유하며, 광자 에너지가 작은 전자파로서, X선이나 자외선, 광파대의 고출력 레이저광 등에 비해 생체물질에 주는 손상이 거의 없다. 또한 파장이 길어서 미세한 구조로 인한 산란의 영향을 잘 받지 않아 테라헤르츠파의 투과 특성을 이용할 수 있는 대상이 많다. 즉, 테라헤르츠파는 세라믹이나 플라스틱 및 종이를 투과하는 성질을 나타낸다. 또한 테라헤르츠파는 원적외선 대역의 맨 아래에 해당하는 주파수 대역을 포괄하기 때문에 테라헤르츠 분광법은 분자 회전(molecular rotation), 비틀림(torsion), 포논 진동(phonon vibration), 분자간 진동(intermolecular vibration)과 같은 원적외선 진동 모드의 특성을 기술하는데 유용하다.(그림 2). 따라서 테라헤르츠 스펙트럼으로 얻어진 특수한 지문 정보로 특정 분자구조를 구명하거나 분석할 수 있다. 특히 결정다형 물질의 경우 중적외선 영역에서는 공유결합에 기인한 유사 스펙트럼밖에 나타나지 않으나 테라헤르츠 스펙트럼에서는 차이를 나타내므로 식별이 가능하다. 대다수 극성분자는 테라헤르츠 전자기파를 강하게 흡수하기 때문에 수분에 매우 민감하며, 인체 피복에 안전한 비이온화 전자파 특성을 나타낸다.

테라헤르츠파의 발생은 광전도 방법(photoconductive method), 광정류 방법(optical rectification), 광혼합(photomixing) 방법 등 방식에 따라 다소 차이가 있으나, 팸토초 레이저가 반도체 광전소자에 입사함으로써 테라헤르츠 전자기 펄스가 발생되고 공기 중에 전파되어 검출기에 도달한다. 테라헤르츠 광이 도달하는 순간에만 동작하는 검출기에는 나누어진 검출펄스가 인도되고, 그 검출된 광펄스에 시간지연을 부여하여서 시간영역파형을 갖게 할 수 있다. 테라헤르츠 전자기파는 속도가 매우 빨라서(또는 주파수가 너무 높아) 오실로스코프와 같은 전기 계측기로는 검출이 불가능하여 광전도 표본추출(photoconductive sampling)이나 전기-광학적 표본 추출법(electro-optic sampling) 등 전기-광학적인 방법을 이용하여 검출하고 있다.

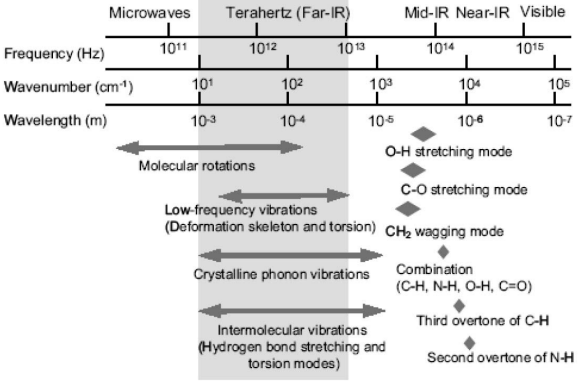

그림 2. 화학물질의 고유 적외선 흡수 주파수
(출처: Analytical Science 2008)

상기 서술한 테라헤르츠파의 발생 및 검출을 분광에 응용할 경우 테라헤르츠 시간영역 분광법(time-domain spectroscopy)에 의해 간단한 투과 및 반사 측정으로부터 진폭과 위상에 관련된 정보가 얻어져 초고속으로 변화하는 현상에 대해 시간영역에서의 관측이 가능하다. 또한 테라헤르츠 전자기파를 물체에 조사하여 투과하거나 반사한 테라헤르츠광의 비행시간(time of flight)과 흡수량을 측정하고 그 데이터를 처리하여 물체의 내부영상을 얻을 수 있다.

2. 식품위해요소 검출에 있어서 테라헤르츠 분광/영상법의 응용

2.1 화학적 위해의 검출

식품의 화학적 물질에 의한 위해는 식품 원료의 생산에서부터 최종 제품의 소비에 이르기까지 어떤 단계의 생산과정에서도 발생할 수 있다. 테라헤르츠 전자기파 분광을 이용하면 기존의 방식과는 다른 방법으로 다양한 분자의 회전에너지(rotation energy)나 진동에너지(vibration energy)에 관련한 주파수 값을 파악하여 화학물질의 검출에 응용할 수 있다.

다양한 식품 위해물질을 검출하는데 테라헤르츠 전자기파 분광법이 응용되었다. 한 예로 테라헤르츠 시간영역 분광 기술을 사용하여 2종류의 농약(imidacloprid와

Mancozeb)을 측정하였다. 0.2~2.0 테라헤르츠 대역에서 흡수율과 굴절율을 측정한 결과, 2 종류의 농약의 고유 흡수 피크가 관찰되었고, 굴절률 역시 현저한 차이를 보였다. Zhang 등은 테라헤르츠 시간영역 분광 기술을 이용하여 유기인계 농약의 분광 스펙트럼을 계산에 의한 결과와, 푸리에 변환적외선분광법(FTIR)과 테라헤르츠 시간영역 분광법에 의해 얻은 실험 결과와 비교하였다. 그 결과, 계산 방법과 실험 결과는 서로 잘 부합되는 것으로 나타났으며, 특히 테라헤르츠 영역의 저주파수에서 나타난 피크는 분자내 및 분자간 상호작용에 해당하는 것으로 해석하였다.

식품 안전에서 진짜와는 다른 물질 특히 품질이 떨어지는 물질을 써서 제품의 품질을 떨어뜨리는 변조(adulteration) 행위가 문제시되고 있다. 한 예로 식물성 기름에 가짜를 섞는 경우가 종종 발생되고 있다. 테라헤르츠 분광을 이용하여 투사 또는 반사 방식으로 식물성 기름 시료의 테라헤르츠 펄스 시영역 파형을 측정함으로써 가짜를 섞은 것을 효과적으로 감별해낼 수 있다고 보고되었다.

뿐만 아니라 테라헤르츠대역은 자외선이나 가시광선 대역보다도 수분에 대해 감도가 높아, 미량의 수분도 그 변화를 파악할 수 있는 특성을 가지고 있어서 이 특성을 식품분석에 이용할 수 있다. Chua 등은 테라헤르츠파의 수분에 대한 정밀도를 이용하여 소맥분에서 수분을 측정하였다. 0.1~2.0 테라헤르츠 범위 내에서 각기 다른 수분 함유량(8%, 12%, 18%)을 측정하고 예측 모델을 구축한 다음 시료의 수분 함량을 측정하였다(그림 3). 이러한 수분특성을 이용하여 의료분야에서는 암과 같은 악성 종양에는 수분이 많이 포함되어 있기 때문에 암조직과 정상 조직의 진단을 시도하고 있다. 현재 피부암 적출 수술 시 살아 있는 암 조직을 그대로 진단해 내기가 어려워 피부에서 잘라낸 후에 진단을 하고 있지만 테라헤르츠 영상을 이용해서 온 사이트에서 진단이 가능할 것으로 기대된다.

이외에도 비타민, 당, 아미노산 등의 성분들이 테라헤르츠 대역에서 고유한 흡수 스펙트럼을 보유하고 있음이 보고되었다. 또한 테라헤르츠 전자기파의 물에 대한 높은 반응성은 물분자 구조체(cluster)와 식품 내 다른 분자나 생체내 분자와의 동적인(dynamics)인 상호작용에 관한 기전(mechanics)을 밝힐 수 있는 도구가 될 것이라고 제안되고 있다. 따라서 향후 테라헤르츠 시간영역 분광 기술이 유해물질을 포함한 다양한 식품분석에 응용될 것이라 생각된다.

테라헤르츠 전자기파 분광학을 이용하면 물질의 상태변화에 따른 여러 가지 현상들을 관측할 수 있다. 특히 물질의 결정형 변화나 결정다형 물질의 경우 중적외선 영역에서는 공유결합에 기인한 유사 스펙트럼밖에 나타나지 않으나 테라헤르츠 스펙트럼에서는 차이를 나타내므로 식별이 가능하다. 수면제 중 하나인 바비탈을 예로 들어보면, 바비탈을 165℃에서 15분 정도 열처리하면 결정형이 변화한다. 결정형이 변화하면 테라헤르츠 영역의 스펙트럼이 크게 바뀌는 것을 확인할 수 있다. 반면 적외선 스펙트럼에서는 열처리 전후의 약한 피크 양상 분석을 통해 가까스로 차이를 확인할 수 있으나 일반적으로 큰 변화는 관찰되지 않으므로, 테라헤르츠 스펙트럼을 결정형 해석에 유효하게 이용할 수 있을 것으로 기대된다(그림 4). 또 다른 예로 Strachan 등은 carbamatazine이나 indomethacin과 같은 약물의 결정형을 테라헤르츠 분광 분석을 통해 정량적으로 분석가능하다고 보고하였다(그림 5). 지금까지 X선 회절이나 핵자기공명분광법(NMR)을 사용해왔던 결정다형의 분석이 테라헤르츠파로도 가능해지면서 해석의 폭이 넓어짐과 동시에 시료 취급이 비교적 간단하고 측정 시간도 단축(전형적인 결정다형용 고분해능 측정이라도 1분 정도)될 것이다.

테라헤르츠 전자기파를 물체에 조사하여 투과하거나 반사한 테라헤르츠광의 비행시간과 흡수량을 측정하고 그 데이터를 처리하여 물체의 내부영상(이미지)을 얻을 수 있다. 테라헤르츠 영상은 분자간 및 분자내 진동 모드에 의한 흡수를 탐지하며, 고유 정보를 활용하면 물질의 판별이 가능하다. 뿐만 아니라 테러헤르츠 영상은 테라헤르츠파가 투과하면서 포장된 상태의 물질을 분석하는데 활용될 수 있다. 왜냐하면 테라헤르츠파는 포장재로 널리 쓰이는 종이, 플라스틱과 같은 여러 비극성 물질을 투과할 수 있기 때문이다. 테라헤르츠 영상 기술의 응용 예를 들어보면, 의약품 등의 시료에서 화학 물질의 분포와 농도 분석등에 시도된다. 그림 6(a)는

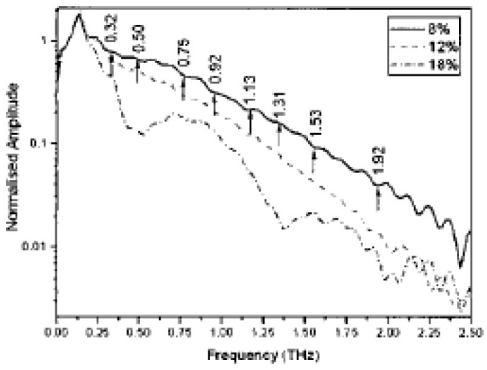

그림 3. 밀가루의 바탕 보정된 투과 스펙트럼
(출처: IEEE 2004)

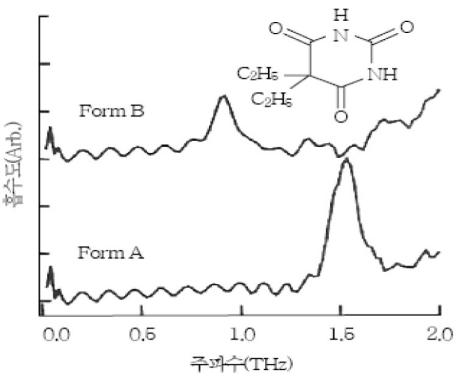

그림 4. Barbital 결정형태에 의한 테라헤르츠 흡수 스펙트럼의 변화
Form A: 실온에서 아세톤/물로부터 재결정화된 것
Form: 160에서 30분간 가열한 것

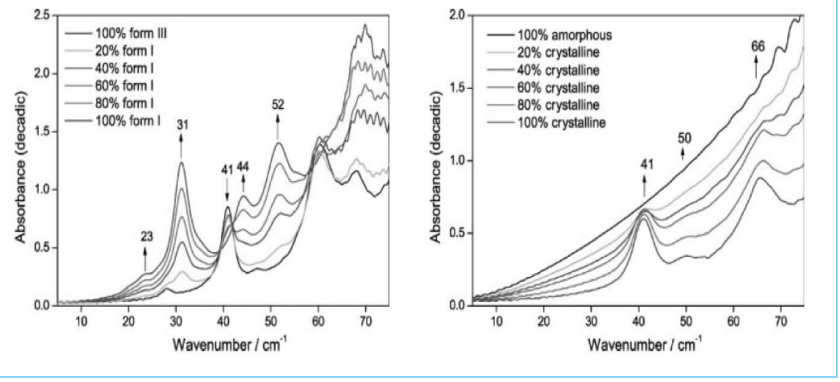

그림 5. Carbamatazine (Left: I형 및 II형 혼합물) 및 indomethacin(Right; 무결정형 및 결정형 혼합물)의 테라헤르츠 스펙트럼(출처: J Phamaceutical Sci 2005)

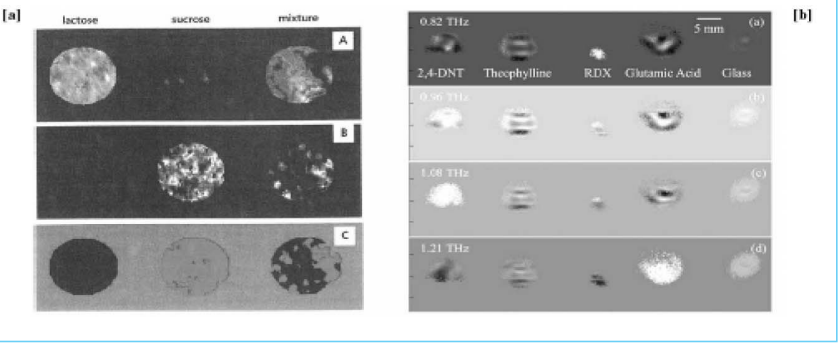

그림 6. [a] Lactose α monohydrate, acetylsalicylic acid, sucrose, tartaric acid 압착 펠렛의 2차원 테라헤르츠 화학 맵핑. 맵핑 영상은 (A) lactose, (B) sucrose, (C) 시료의 재구성한 화학 맵을 보여줌. [b] 5종 화학물질 시료를 대상으로, 각각의 고유 진동 모드 주파수 부근의 피크면적을 적분한 테라헤르츠 영상. 2,4-DNT, RDX, glutamic acid는 각 흡수 피크 주파수에 해당하는 영상에서 동정가능함 (출처: 미국 광학 학회 2006)

lactose α monohydrate, acetylsalicylic acid, sucrose 및 tartaric acid의 압착 펠렛(pellet)의 테라헤르츠 2차원 화학 맵핑(mapping)을 보여주고 있다(A; lactose, B; sucrose, C; 시료의 재구성 화학 맵). 그림 6(b)는 각 화학 물질에 있어서 고유 진동 모드의 주파수 부근에서 피크 면적을 적분하여 화학물질 시료 5개의 각 테라헤르츠 영상을 보여주고 있다. 2,4-DNT, RDX, 및 glutamic acid은 각 해당하는 흡수 피크 주파수에서의 영상으로 판별할 수 있다.

2.2 생물학적 위해의 검출

테라헤르츠 기술을 이용해 바이러스나 세균류의 검사가 가능하다는 보고는 이미 확인되었다. 보통 이러한 검사에는 배양이나 전자 현미경법, 혹은 특수 장치에 의한 유전자 검출처럼 번잡하고 어려운 기술 조작이 많이 요구되는 방법을 사용하였다. 반면 테라

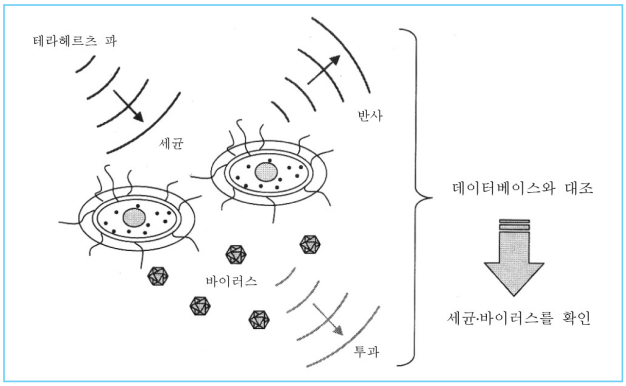

그림 7. 세균 검사로의 응용
(출처: 전자통신연구원 2004)

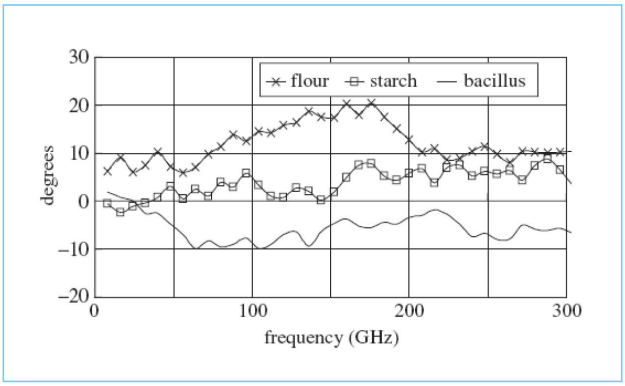

그림 8. 봉투내 시료(밀가루, 전분, 바실러스) 중 테라헤르츠 투과상
(출처: Phil Trans R. Soc 2004)

헤르츠파를 이용했을 경우에 제안되는 검출법은 기본적으로는 그림 7처럼 바이러스나 세균류에서 테라헤르츠파가 어떤 식으로 흡수되는지 혹은 반사되는지를 계측하여 그 데이터를 데이터베이스와 비교하기만 하면 된다. 다시 말해 기존 방법과는 비교도 안 될 정도로 조작이 간략화 될 가능성이 있다는 것이다. 현재로서는 아직까지 연구 예가 적으므로, 앞으로 다양한 바이러스나 세균류에 테라헤르츠 기술을 적용해보고 테라헤르츠 파에 대한 바이러스나 세균류의 응답에 관한 데이터베이스를 구축할 필요가 있다. 현 시점에서는 겉으로 판별이 어려운 탄저균과 소맥분 등의 무해한 분말의 구별이 충분히 가능하다는 보고가 있다.

한 예로 10~300GHz 범위 내에서 Choi 등은 각각 투과 및 반사의 측정 방식을 사용하여 설탕, 전분과 바실러스(탄저병 세균과 유사한 아포 간균) 분말의 반사 계수와 굴절률 정보를 얻었다. 실험 결과, 반사 혹은 투과의 측정에 의해 모두 다른 물질로 구분할 수 있었다. Globus는 여러 종류의 다른 세균을 식별할 수 있는가에 대한 연구를 실시하였다. 시판 푸리에변환적외선분광기를 사용하여 투과분석을 실시한 결과, 3~10cm^{-1}의 테라헤르츠대역 범위 내에서 여러 종 세균의 특징 흡수 피크를 얻었다. Alexei는 대장 간균, 아포 간균과 그들의 DNA 분자 공진 분광을 얻었으며, 아포 간균 포자의 공진 분광과 DNA분자의 공진 분광의 존재에는 커다란 상관성이 있다는 사실을 발견하였다.

2.3 물리적 위해의 검출

국내의 경우, 2008년에는 식품 이물질 혼입사고가 빈번하게 발생함에 따라 소비자 불안감이 가중되어 사회적으로 큰 파장을 일으켰다. 2008년 발생한 식품사고의 유형은 이물혼입 41.5%, 부패/변질 20.7%, 화학물질 1.8%로 이물질에 의한 사고가 가장 큰 비중을 차지하고 있다. 지난해 발생했던 이물질 혼입사고는 식품산업 전반에 걸친 경제적 문제로 발전하였고 정부의 식품안전 정책을 불신하게 됨에 따라 이의 해결이 국가적 현안문제로 대두하였다. 현재 식품제조현장에서 이물질의 검출을 위해서는 사람에 의존하거나 금속검출기 또는 X-ray 투시기 등을 이용하고 있다. 그러나 현 검출기 가운데 가장 검출력이 우수한 것으로 평가받고 있는 X-ray 투시기의 경우도 일정 밀도(1 kg/cm^3 이상)와 크기(0.4 mm 이상)를 가진 것만 검출이 가능하다. 따라서 다빈도 검출 이물인 벌레, 곰팡이 등 연질 이물질은 검출이 불가능하여 이물사고 재발 가능성을 항상 내포하고 있다. 밀리미터파와 적외선 사이에 있는 100GHz에서 10THz 대역의 테라헤르츠파는 세라믹이나 플라스틱 및 종이를 투과하고, 각종 물질의 분자상태에 따라 특이한 투과특성을 나타낸다. 특히 인체에 많이 포함된 물에는 강하게 흡수되고 칼이나 총(銃) 등의 금속에는 반사되는 특징이 있다. 이 성질을 이용하여 의복이나 구두, 봉투, 포장 내에 있는 화학물질이나 금속을 X선 검사 장치와 동일하게 개봉하지 않고 비접촉으로 검출할 수 있다. 그림 9는 테라헤르츠 시영역 영상 장치에 의한

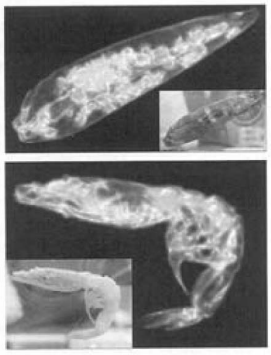

그림 9. 테라헤르츠 시영역 분광 시스템을 사용한 고추와 새우의 영상 (출처: 전자통신동향분석, 2006)

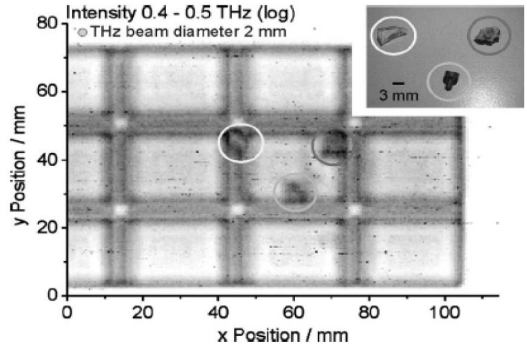

그림 10. 돌 및 유리 파편 등 이물이 오염된 초콜렛의 사진 및 테라헤르츠 영상(출처: Optical Engineering 2008)

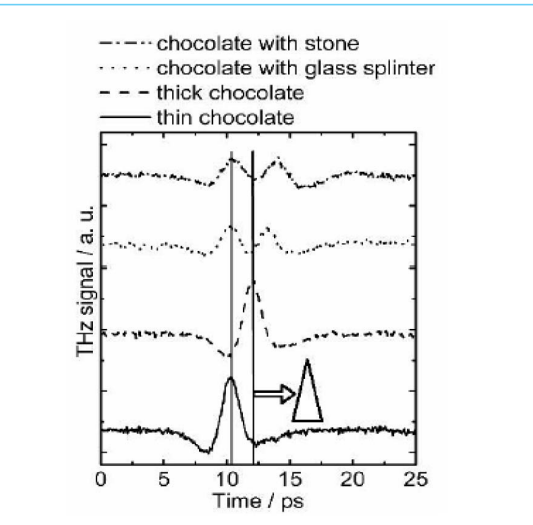

그림 11. 돌 및 유리 파편이 함유된 초코렛의 테라헤르츠 주사상 (출처: Optical Engineering 2008)

관측 예를 나타낸 것이다. 건조시킨 고추와 새우의 투과상으로서, 내부 구성 물질이 명확하게 나타나고 있다. 따라서 이러한 테라헤르츠파의 특성을 활용하면 포장된 상태에서 다양한 크기와 밀도를 가진 식품 이물의 검색이 가능하고, 물질 고유의 투과, 흡수, 반사 특성을 이용한다면 검색된 식품 이물질의 성분 동정도 가능하다. 특히 X-ray 투시기와는 달리 인체 건강 및 식품에 무해하므로 테라헤르츠파는 식품 속에 존재하는 이물질 탐지에 적합한 기술이라 할 수 있겠다.

Jordens 등은 초콜렛 속에 혼합되어 있는 직경 1 mm의 금속 나사, 유리 파편 등의 이물에 대해 테라헤르츠 분광과 영상 분석을 실시하였다(그림 10). 실험을 통해 시영역 파형이 그림 11과 같다는 사실을 알았다. 굴절률의 차이로 인해 불순물을 함유한 테라헤르츠 펄스 파형 중 쌍펄스의 존재를 발견할 수 있었다. 또한 이 연구팀은 시영역 파형의 분석을 통해 초코렛의 성분 물질과 기타 불순물을 구분해 내었고, 테라헤르츠 영상 처리 분석을 통해 초콜렛 속에 혼합된 유리 파편을 성공적으로 검출하였다.

결 론

테라헤르츠파가 가진 고유한 특성 때문에 최근 테라헤르츠파에 대한 관심이 전 세계적으로 고조되고 있다. 테라헤르츠파를 이용한 분광 및 영상 기술은 신물질, 의료, 바이오, 보안, 국방, 환경, 우주 및 통신 등과 같은 다양한 고부가가치 서비스 및 첨단 산업 부문에서 관심을 갖고 있을 만큼 매력적인 연구 분야로 성장하고 있다(그림 12). 따라서 향후 5-10년 이내에 테라헤르츠 시스템의 기술 수준과 상용화 가능성이 크게 확장될 것으로 전망된다. 이와 같은 전망은 미국의 MIT대학 발행의 Technical Review 지가 2004년 2월, 경제와 인간의 삶에 큰 영향을 미치는 10대 기술로서 테라헤르츠 기술을 6번째로 선정한 사실과 2005년 1월초 일본정부가 일본의 미래 10대 근간 기술로서 테라헤르츠 기술을 첫 번째로 선정한 것 등이 뒷받침해준다. 특히 식품분야에 있어서 품질이나 안전성 평가를 위한 테라헤르츠파 기술의 응용

및 산업화 실현이라는 과제를 해결하기 위하여, 광학 설계, 광원, 검출 시스템의 개선, 각 식품 성분분석에 관한 데이터베이스의 구축 등이 요구된다. 이를 위해서는 분야를 막론한 다학제간의 연계와 산 · 학 · 연 협동의 효과적인 연구개발의 추진이 필요하다.

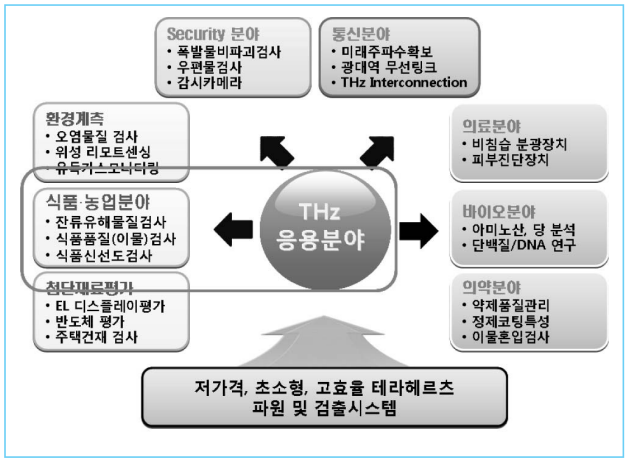

그림 12. 테라헤르츠파 시스템의 활용영역
(출처: 산업기술연구회 연구기획보고서 2009)

참고 문헌

1. 손주혁, 강철, 테라헤르츠(THz) 전자기파의 발생 및 응용, 서울시립대, 물리학과 첨단기술 pp. 34-38, 2003. 06
2. 이충희, 테라헤르츠 펄스영상기술 동향, KISTI 기술동향보고서, 한국, 2004
3. 윤두협, 곽인환, 유용구, 류한철, 테라헤르츠파 기술의 현황과 전망, 전자통신동향분석, 21(4), 129-141, 2006
4. 전향숙, 김재호, 김종욱, 박경현, 신재길, 손주혁, 전석기, 최재익, 최성욱, 구민선, 김윤지, 김현정, 오세욱, 이나리, 장현주, 테라헤르츠 분광/영상 기술기반 식품 이물질 실시간 비파괴 탐지기술 개발, 산업기술연구회, 기획보고서 및 연구계획서, 한국, 2009
5. Applied Research and Photonics, Inc., Terahertz Spectroscopy Brings a New Dawn of Biological Research, USA, 2008
6. Choi MK, Alan Bettermann, D. W. van der Weide, Potential for detection of explosive and biological hazards with electronic terahertz systems, Phil. Trans. R. Soc. Lond 362, 337-349, 2004
7. Chua HS., Upadhya PC, Haigh AD. Obradovic J, Gibson AAP, Linfield EH, Terahertz Time-Domain Spectroscopy of Wheat Grain, Infrared and Millimeter Waves, 2004 and 12th International Conference on Terahertz Electronics, 2004. Conference Digest of the 2004 Joint 29th International Conference on, 399-400, 2004
8. Jördens C, Koch M, Detection of foreign bodies in chocolate with pulsed terahertz spectroscopy, Optical Engineering 47(3), 037003-1~5, 2008
9. Kawase K, Ogawa Y, Watanabe Y, Inoue H, Non-destructive Terahertz Imaging of Illicit Drugs Using Spectral Fingerprint, Optics Express, 11(20), 2549-2554, 2003
10. Kawase K, Terahertz parametric source and real-life applications, 12th international Symposium on Laser Spectroscopy, KAERI, Daejon, Korea 11, 2004
11. Kohler R, Tredicucci A, Beltram F, Beere HE, Linfield EH, Davies AG, Ritchie DA, Iotti RC, Rossi F, Terahertz Semiconductor- heterostructure Laser, Nature, 417, 156-159, 2002
12. Ralph S, Grischkowsky D, THz spectroscopy and source characterization by optoelectronic interferometry, Appl. Phys. Lett. 60 (9), 1070-1072, 1992
13. Shen F, Ying Y-b, Application of terahertz spectroscopy and imaging techniques in food safety inspection, Spectroscopy and spectral analysis 29(6), 1145-1149, 2009
14. Strachan CJ, Taday PF, Newnham DA, Gordon KC, Zeitler JA, Pepper M, Rades T, Using Terahertz Pulsed Spectroscopy to Quantify Pharmaceutical Polymorphism and Crystallinity, J Pharm Sci, 94(4), 837-846, 2005
15. Tonouchi M, Cutting-edge terahertz technology, Nature Photonics, 1, 97-105, 2007
16. Woodward RM, Cole BE, Wallace VP, Pye RJ, Arnone DD, Linfield EH, Pepper M, Terahertz Pulse Imaging in Reflection Geometry of Human Skin Cancer and Skin Tissue, Phys. Med. Biol., 47, 3853-3863, 2002
17. Zhang Y, Peng X.-H, Chen Y, Chen J, Curioni A, Andreoni W, Nayak SK, Zhang X.-C, A first principle study of terahertz (THz) spectra of acephate, Chemical Physics Letters 452, 59-66, 2008