

Computer Program을 이용한 화학물질의 환경동태 예측

김 균 · 김용화

Prediction of Environmental Fate of Certain Chemicals Using Computer Simulation Programs

Kyun Kim and Yong-Hwa Kim

Abstract

Environmental hazards of a chemical could be assessed by two different approaches : toxicity test and assessment of exposure potentials to human and environmental organisms.

For the prediction of environmental fate of chemicals three available computer programs were compared each other and were verified. The results obtained by using these computer programs, PCHEM, EXAMS, and E4CHEM were summarised as follows.

The estimated octanol/water partition coefficients by PCHEM were similar to the experimental values in the literature. But the other factors, water solubility and vapor pressure were different from the data in the literature.

The simulation results of selected compounds by EXAMS showed similar tendency to the literature results of model field environment. Therefore, this computer program could be utilized to predict the environmental fate of chemicals.

E4CHEM program is very simple and this program could predict the ultimate environmental fate of stable chemicals by input of two or three parameters. However, the validity should further be verified in the future field study using more compounds.

It is suggested that these approaches could be fully utilized by understanding their limitations to predict the environmental fate of new chemicals under development, to screen the potential environmental pollutants among chemicals already-in use, and to devise measures to minimize the hazards to the environment.

한국 화학연구소 안전성 연구센터

Toxicology Research Center, Korea Research Institute of Chemical Technology, Daejeon, Chungnam.

서 론

현대 산업사회의 발달과 함께 의약품, 농약, 비료, 화장품 등 비롯한 각종 화학물질의 사용이 증가함에 따라 이들이 생산되는 단계에서부터 소비자가 사용한 후 폐기하여 환경에 유입되는 단계에 이르기까지 전 과정에서 인체 및 환경에 미칠 수 있는 부작용에 대한 고려가 점차 중요시되고 있다.

화학물질의 흡수속에서 인체 및 환경의 안전을 기하기 위한 노력은 1960년대 여러 선진국에서 인명피해가 수반되는 사고가 발생한 이후 국가적인 차원에서 법에 의한 규제가 정착되고 있지만 아직까지는 대부분 사후대책 마련에 그치고 있는 실정이다. 따라서 새로운 화학물질이 사용되기 이전에 그 위험성을 미리 평가해야 할 필요성이 대두되었으며, 화학물질의 환경내에서의 동태를 빠른 시간에 예측할 수 있는 방법에 관하여 최근 연구가 활발히 수행되고 있다.

화학물질의 동태를 예측하는데 있어서는 실험실에서의 직접 측정에 의한 결과나 이론적인 추정치이거나를 막론하고 각각에서 얻어진 환경동태에 영향을 미치는 요인들을 종합하여 서로 연계된 2개 이상의 환경계에서 그 행적을 예측해 보는 것이 중요하다. 수계로부터 대기로의 화학물질의 증발에 관한 예측방법은 여러 연구자들의 제안이 있었으나, Liss와 Slater¹⁾가 제안한 two-film 이론이 실제 환경을 묘사하고 있는 것으로 Cohen 등²⁾이 증명한 바 있으며, Mackay와 Leinonen 등³⁾은 물에 난용성인 화합물의 수면으로부터의 증발을 예측하였으며 화학물질이 토양표면에 존재하는 경우는 Swann 등⁴⁾이 관계식을 가정하였다. 그 외 실제 환경내에서의 동태를 좀더 정확하게 예측하는 방법에 관하여는 Hartley, Hamaker, Mayer, Jury 등이 제안한 방법⁵⁾을 예로 들 수 있다.

또한 화학물질의 물리화학적 특성을 평가하거나 환경내에서의 동태를 기존의 실험실적 방법보다 빠른시간에, 그리고 여러종류에 대하여 즉각 예측할 수 있도록 하는 PC 용 프로그램들도 개발되었는데, 대표적 모델로는 PCHEM, EXAMS(Exposure Analysis Modeling System), 그리고 E4CHEM(Exposure and Ecotoxicity

Estimation for Environmental Chemicals) 등이 있다. PCHEM 프로그램은 미국 General Science Co.가 미국 EPA 와의 계약에 의해 개발한 것으로⁶⁾ 화학물질의 구조식만을 사용하여 물리화학적 특성을 예측할 수 있으며,⁷⁾ EXAMS 프로그램은 미국 EPA의 Burns⁸⁾ 등이 개발한 것으로 유기화합물의 수계에 있어서의 동태를 예측하는 종합적인 컴퓨터 프로그램이다. E4CHEM은 EXAMS와 유사한 체계이나 그 보다 훨씬 간단한 프로그램으로 서독에서 개발되었다. E4CHEM은 EXTND (Exposure Tendency), EXATM, EXWAT, EXSOL, EXAIR의 submodel로 나뉘어져 있다.^{9, 10)}

아직까지 국내에서는 화학물질의 환경내에서의 동태를 평가하기 위하여 이런 프로그램들이 활발히 사용되지 못하고 있는 실정이다. 따라서 본 연구에서는 그동안 직접 실험을 통하여 얻은 자료와 문헌에 나와 있는 자료들을 입력자료로 하여 위에서 언급된 3개의 computer 프로그램을 사용해서 예측 모델로서의 활용 가능성과 국내 농경상황에서의 적용 가능성을 확인하고자 시도하였다.

재료 및 방법

1. PCHEM 프로그램의 자료 입력

PCHEM 프로그램에 자료를 입력하는 방법은 다음과 같다. 먼저 PCHEM 프로그램으로 옥타놀/물 분배계수치를 구하였는데, 이때 필요한 자료는 원하는 화학물질의 구조식만을 SMILES (Simplified Molecular Identification and Line Entry System) notation 공식에 따라 입력하였다. 다음 Table 1은 PCHEM 프로그램에 입력한 몇가지 화학물질의 SMILES notation 공식의 예다.

Table 1과 같은 화학물질을 선택한 이유는 다음과 같다. Trichlorethylene, dichlormethane, chlorinated paraffin 등은 본 연구실에서 이미 실험을 수행하여 각각의 분배계수치를 구한바 있었으므로 PCHEM 프로그램으로 구한 결과와 비교하기가 용이하였으며, 나머지 농약들은 실험을 수행한 결과가 문헌에 제시되어 있기 때문에 상호 비교하기가 용이할 것으로 생각되었다.

앞에서와 같이 옥타놀/물 분배계수치를 구한 다음에는

Table 1. Structure and SMILES notation of selected chemicals

Chemical	Structure	SMILES notation
Trichlorethylene	C ₂ HCl ₃	(Cl)C = C(Cl)(Cl)
Dichlormethane	CH ₂ Cl ₂	C(Cl)(Cl)
Chlorinated Paraffin	C ₁₄ H ₂₄ Cl ₆	C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)C(Cl)CCCCCCCC
BPMC	C ₁₂ H ₁₇ NO ₂	CNC(=O)Oclcccc(C)CC)I
Carbaryl	C ₁₂ H ₁₁ NO ₂	CNC(=O)Oclcccc2cccc2cl
Diazinon	C ₁₂ H ₂₁ N ₂ O ₃ PS	CCOP(=S)(OCC)Oclnc(C(C)C)nc(C)cl
Fenitrothion	C ₉ H ₁₂ NO ₅ PS	COP(=S)(OC)Oclcc(C)c(N(=O)=O)ccl
Malathion	C ₁₀ H ₁₉ O ₆ PS ₂	COP(=S)(OC)SC(CC(=O)OCC)C(=O)OCC
Propoxur	C ₁₁ H ₁₅ NO ₃	clcc(OC(C)C)c(OC(=O)NC)ccl
Thiobencarb	C ₁₂ H ₁₆ ClNOS	CCN(CC)C(=O)SCclcccc(Cl)ccl

이 분배계수치로 수용성, 증기압 등을 구하여 이 추정치를 본 연구실에서 수행한 실험결과¹¹⁾ 및 문헌상의 결과^{12, 13)} 와 비교하였다.

2. EXAMS 프로그램의 자료 입력

EXAMS 프로그램에 자료를 입력하는 방법은 EXAMS manual¹⁴⁾ 과 Sanders¹⁵⁾ 의 예를 따랐다.

EXAMS 프로그램으로 simulation을 하기 위하여 먼저 몇개의 환경과 대상화학물질을 선정하였다. 화학물질은 butachlor와 diazinon, carbofuran을 선택했는데 이물질

들은 현재 국내에서 가장 많이 사용되고 있는 농약들이며, 야외시험 결과가 이미 보고된 바 있으므로 컴퓨터의 예측 결과와 비교하기가 용이하다고 생각되었다. 이들의 구조는 Figure 1과 같다.

Simulation을 위한 환경 설정은 EXAMS 프로그램에 입력되어 있는 "pond Model"을 기본으로 하고, 신등¹⁶⁾, 이 등¹⁷⁾, 이 등¹⁸⁾ 이 수행한 실험의 환경조건을 참고로 해서 3개의 환경을 설정하였다.

Table 2는 EXAMS에 입력한 butachlor에 대한 특성 자료와 그것을 컴퓨터에 입력하는 방법을 나타낸 것으로 handbook^{12, 13)} 의 자료와 문헌¹⁶⁾ 등을 참고로해서 작성된 것이다.

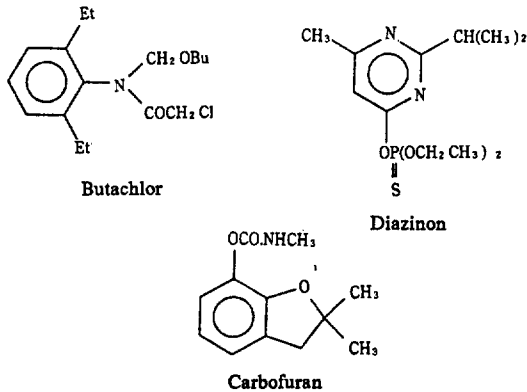


Fig. 1. Structure of selected chemicals for simulation.

3. E4CHEM 프로그램의 자료 입력

E4CHEM 프로그램은 PCHEM 프로그램 및 문헌^{12, 13)} 상에서 구한 토양흡착계수와 Henry 상수만을 환경내의 화합물의 평형농도를 예측하는 submodel EXTND에 입력하여 대상 화학물질의 환경중의 분포, 즉 수계와 토양 및 대기중의 분포양상을 예측하였다.

본 연구의 수행을 위하여 사용한 컴퓨터는 Hewlett Packard사 제품으로 20 mega byte의 기억용량을 가진 math coprocessor가 장착된 personal 컴퓨터였다.

Table 2. Example of data input in EXAMS program - butachlor

Parameters	Value
Molecular Weight (MWT(1))	302
Water Solubility (SOL(1, 1))	20 ppm
Vapor Pressure (VAPR(1))	4.5X10 ⁻⁶ torr
Soil Adsorption Coeff. (KOC(1))	10,000
Octanol/Water Partition Coeff. (KOW(1))	2.61X10 ⁵
No. of Compartment (KOUNT)	2
Type of Compartment 1 (Type(1))	L (Littoral)
Type of Compartment 2 (TYPE(2))	B (Benthic)
Compartment Connection Variable (JTURB(1))	1
Compartment Connection Variable (ITURB(1))	2
Littoral Compartment Depth (DEPTH(1, 1))	0.04 m
Benthic Compartment Depth (DEPTH(2, 1))	0.15 m
Littoral Compartment Volume (VOL(1, 1))	60.8 m ³
Benthic Compartment Volume (VOL(2, 1))	228 m ³
Surface Area (AREA(*,*)	1520 m ²
Temperature (TCEL(*,*)	20 °C
pH (pH(1, 1))	6.5
pOH (pOH(1, 1))	7.5
pH (pH(2, 1))	5.2
pOH (pOH(2, 1))	8.8
Benthic Saturation Factor (PCTWA(2, *))	137
Bulk Density of Benthic Compartment (BULKD(2, *))	1.87

결과 및 고찰

1. PCHEM 프로그램의 simulation 결과

PCHEM 프로그램을 이용하여 먼저 옥타놀/물 분배 계수를 비교하여 보았다. 먼저 본 연구실에서 수행한 trichloroethylene과 dichloromethane, chlorinated paraffin의 옥타놀/물 분배계수의 측정치¹⁾와 Kanazawa¹⁰⁾가 실험한 실험치를 PCHEM 프로그램의 추정치와 비교한 결과는 Table 3과 같다.

이 표에서와 같이 PCHEM 프로그램으로 추정한 분배계수치는 실험치와 비교해 볼 때 비교적 유사한 것을 알 수 있었다. 이때 상관계수를 구해 보면 $r = 0.89682$

Table 3. Octanol/water partition coefficient of chemicals

Chemical	Log Kow *	Log Kow**
Trichloroethylene	2.811	2.267
Dichloromethane	1.681	1.249
Chlorinated paraffin	> 5.146	6.378
BPMC	3.18	3.317
Carbaryl	2.29	2.385
Diazinon	3.14	3.707
Fenitrothion	3.44	3.159
Malathion	2.89	2.136
Propoxur	1.52	1.578
Thiobencarb	3.42	3.357

* experimental data by Jun Kanazawa¹⁰⁾

** calculated from PCHEM program

Table 4. Water solubility and vapor pressure of chemicals

Chemical	Water Solubility(mg/L)			Vapor Pressure(torr)		
	Calculated	Literature*	Literature**	Calculated	Literature*	Literature**
BPMC	33	610	-	77.51	3.6E-4	-
Carbaryl	268	120	< 0.1 %	5.30	< 4.99E-3	5.25E-3
Diazinon	101	40	40	- ***	7.3E-7	1.35E-4
Fenitrothion	381	14	30	- ***	1.35E-4	5.25E-5
Malathion	6401	145	145	- ***	3.98E-5	1.20E-4
Propoxur	2580	2000	0.2 %	2.70	9.75E-3	9.75E-3
Thiobencarb	33	30	-	77.51	-	-

* Worthing, C. R.¹²⁾

** Hartley, D.¹³⁾

*** calculation is not possible

이었으며 이 화학물질들의 평균적인 절대오차는 0.28 log Kow 정도였고 최대오차는 0.75 log Kow 정도였다.

이와같은 프로그램을 이용하여 실시 실험을 수행하기 전에 분배계수치를 추정해 보아 환경중에 생물농축의 문제를 일으킬 소지가 있는 화학물질을 선별하는 screening을 수행할 수 있다고 사료된다.

PCHEM에서 구한 분배계수치 외에 증기압과 수용성을 문헌치와 비교해 본 결과는 Table 4와 같다.

이 표에서 보면 분배계수치와는 달리 수용성과 증기압의 자료가 handbook에서 제시한 것과는 차이가 있었다. 증기압의 경우는 프로그램 자체에서 계산을 하지 못한 화합물도 있었는데 그 이유는 PCHEM 프로그램에서는 증기압을 계산할 때 Antoine 식을 이용하기 때문인데 Antoine 식은 증기압의 범위가 0.001~760 mmHg 일 경우에만 적용되기 때문에 증기압을 계산하지 못한 것으로 사료된다.⁵⁾ 따라서 PCHEM 프로그램은 증기압의 경우 각 화학물질의 증기압의 범위에 맞는 식을 선택할 수 있는 기능이 필요하다고 생각된다.

이와같이 수용성과 증기압은 전반적으로 추정치와 문헌치 사이에 확실한 차이가 있음을 보았는데 그 이유는 아직 프로그램에 도입된 가정식이 전반적인 화합물에 적용되지 않기 때문인데 앞으로 더 많은 자료가

수집되고 프로그램이 보완된다면 옥타놀/물 분배계수 추정치와 같이 비교적 정확한 화합물의 수용성과 증기압을 예측할 수 있을 것이며 그 밖의 다른 물리화학적 성질도 비교적 정확하게 추정할 수 있으리라 사료된다.

참고로 PCHEM 프로그램에서 출력되는 자료로는 분배계수치와 수용성, 증기압 외에도 비점과 융점, Henry 상수, 생물농축계수, 토양흡착계수 등도 예측할 수 있으나 이들에 대한 추정치는 앞으로 프로그램이 보완되어야 할 것으로 생각되며, diazinon의 분배계수치와 물리화학적 성질에 대한 출력자료는 Table 5와 같다.

2. EXAMS 프로그램의 simulation 결과

1) 제초제 Butachlor의 모델 환경에서의 동태

제초제로 널리 사용되고 있는 butachlor를 선택하여 EXAMS 프로그램으로 simulation 한 결과와 model agrosystem 내에서 신 등¹⁶⁾이 수행한 물에서의 butachlor의 농도감소와 물과 토양이 함께 존재할 때 물에서의 butachlor의 농도감소 양상을 비교해 본 결과 서로 유사한 경향을 보였다. 즉 각각에 남아있는 butachlor의 농도는 차이가 있었으나 감소하는 경향이 유사함을 보였다(Fig. 2).

Figure 3은 신 등이 수행한 결과의 2일째 농도와 유사

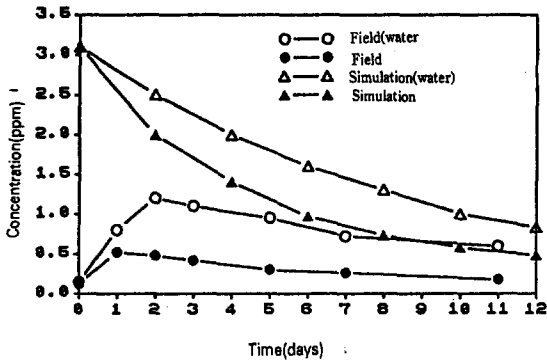


Fig. 2. Disappearance of butachlor in soil and water.

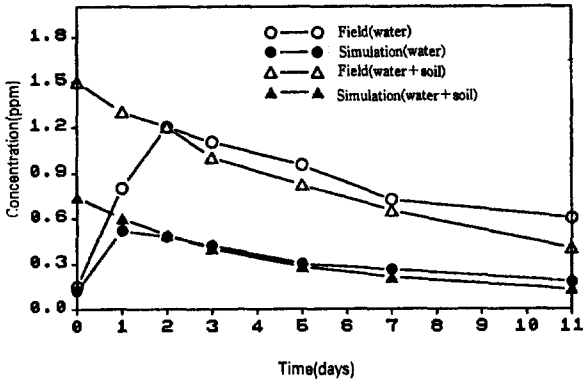


Fig. 3. Disappearance of butachlor in soil after synchronizing the maximum concentration.

한 양이 처리되었다고 가정하였을 경우, 즉 초기농도가 서로 같을 경우 simulation을 수행한 결과로 model agrosystem 내에서의 실험과 simulation 결과가 거의 유사함을 보였다.

위의 두 simulation 결과가 차이가 나는 이유는 Figure 2에서는 실지실험의 경우 제제된 형태의 약제를 처리하였으므로 수증으로 용출되는 속도가 완만하게 진행되리라 예상되며 휘발되는 양도 차이가 있다고 보여진다. 그러나 simulation의 경우는 처리하자 바로 약제가 균일하게 퍼진다고 가정되므로 이와같은 농도의 차이가 발생한다고 사료된다.

Butachlor의 simulation에 영향을 미치는 인자를 알

아보기 위하여 EXAMS에 입력하는 매개변수를 몇 개 선정하여 그 결과를 알아 보았다. 일반적으로 hanbook^{12, 13)}에 의하면 butachlor는 가수분해에 대하여 비교적 안정하다고하여 가수분해 인자는 고려해 보지 않았고 먼저 온도에 의한 영향과 휘발성에 영향을 미치는 바람의 속도를 변화시켜 simulation을 수행하였다. 그 결과를 보면 온도의 변화는 butachlor의 농도감소에 영향을 크게 미치지 않았으며 전체적인 simulation 결과에도 거의 영향을 미치지 않는 것으로 나타났다. 그러나 바람의 속도를 변화시켜 본 결과는 농도감소와 잔류 양상에는 영향을 크게 미치지 않으나 외부로 흘러나가는 butachlor의 양에는 영향을 미치는 것을 볼 수 있었다. 즉 butachlor를 처리하였을 때 바람의 속도에 따라서 휘발되는 양은 각각 바람의 속도가 0.5, 1.0, 1.5, 2.0 m/s 일때 환경중으로 바로 유입되는 양의 49, 65, 74, 79% 정도였다. 그러나 butachlor의 대부분은 토양중에 흡착되는 것을 알 수 있었다. 또한 토양중의 유기화합물의 비율을 변화시키며 simulation을 수행한 결과 토양중에 유기화합물의 양이 많을수록 물층에서 butachlor의 농도가 급격히 감소하는 것을 볼 수 있었다. 토양중의 유기화합물의 비율에 따른 butachlor의 물에서의 감소양상은 Figure 4와 같으며 토양에 흡착되는 양의 변화는 Figure 5와 같다.

이상과 같이 butachlor에 대한 model agrosystem 내에서의 실험과 simulation 결과는 서로 유사함을 볼 수 있었으며, 환경조건이 바뀌더라도 butachlor의 소멸에 영향을 미치는 것은 유기물의 양이며, 바람의 속도는 어느정도 영향을 미치는 것으로 생각되며, 대략적으로 환경중에서 butachlor의 소멸 및 흡착양상은 Figure 4, 5의 범위안에서 일어날 것으로 사료된다. 이와같은 유기물 함량에 의한 butachlor의 흡착은 Sato등²⁰⁾ 과 Felsot과 Dahm²¹⁾ 의 결과와도 같음을 알 수 있었다.

2) Diazinon의 모델 환경에서의 동태

Diazinon의 simulation 결과는 모델 환경에서의 실험 결과와는 다른 양상을 보였는데 모델 환경에서의 실험 결과는 diazinon의 초기농도가 3.5ppm 정도에서 급격하게 감소하여 30일이 경과한 후에는 0.1ppm 이하를 유지하였으나 simulation의 경우는 초기농도가 약 0.6

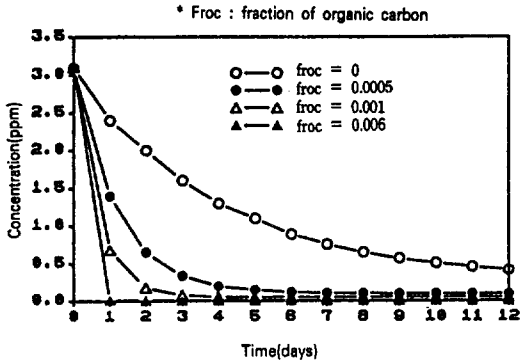


Fig. 4. Disappearance of butachlor in water with variation of the soil organic carbon contents.

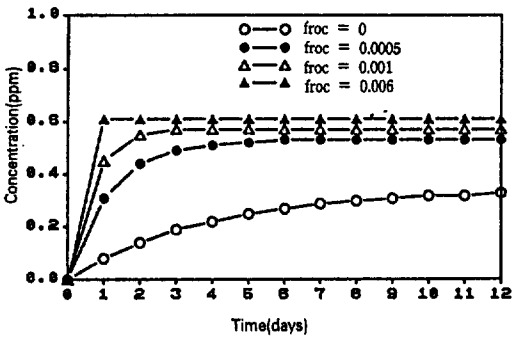


Fig. 5. Adsorption of butachlor in soil with variation of the soil organic carbon contents.

ppm 이었으며 실지 실험과는 달리 완만하게 감소하는 양상을 보였으며 diazinon을 토양에 직접 처리한 경우에는 초기농도가 1ppm 수준이었다. 이와같은 결과로 볼 때 이 등¹⁷⁾의 실험 결과와의 차이는 야외실험의 경우 토양을 채취하여 잔류분석을 수행시 토양만이 채취되는 것이 아니라 토양과 물층이 함께 있으므로 순수한 토양에서의 diazinon의 잔류수준이라 단정하기는 문제가 있다고 생각되며 simulation 프로그램에서는 물층과 토양층이 명확하게 구분되어 있으므로 야외실험 결과와 simulation 결과를 비교하는데 있어서는 다소간의 문제가 있다고 생각되며, 또한 약제의 처리형태가 실지실험의 경우 입체의 형태로 처리하였으므로 초기 시료를 채취

시 미처 용해되지 못한 토양표면에 있는 diazinon이 함께 정량되어 초기의 농도가 높아졌을 가능성도 배제할 수 없다고 생각한다. Figure 6은 diazinon의 토양에서의 소멸양상을 보인 것이다.

Figure 7은 모델 환경에서의 실험과 simulation의 초기농도가 같다고 가정하여 diazinon의 소멸 양상을 비교한 것이다. 이때 simulation의 조건은 토양층의 총 부피를 변화시킨 것 외에는 실지 실험조건과 유사하게 하여 simulation을 수행하였는데, diazinon의 소멸양상이 유사함을 볼 수 있었으며 butachlor와 마찬가지로 diazinon도 초기농도가 같다면 simulation의 결과로 전체적인 소멸 양상을 예측할 수 있다고 생각한다.

Diazinon의 경우 대개변수를 선정하여 각각을 변화시켜

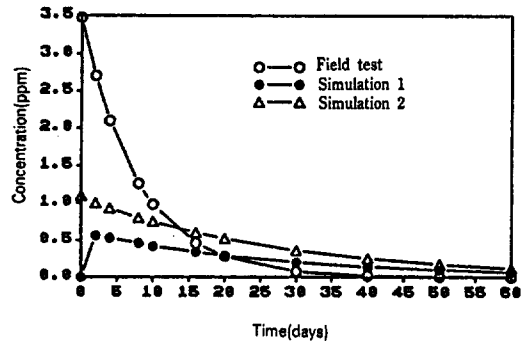


Fig. 6. Disappearance of diazinon in soil

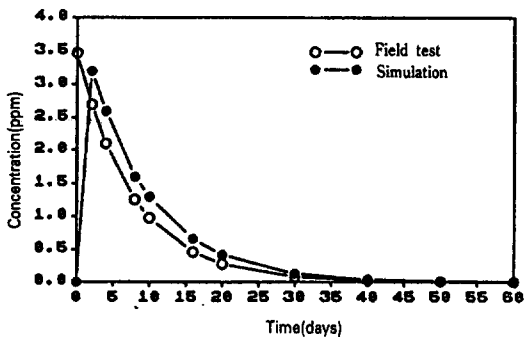
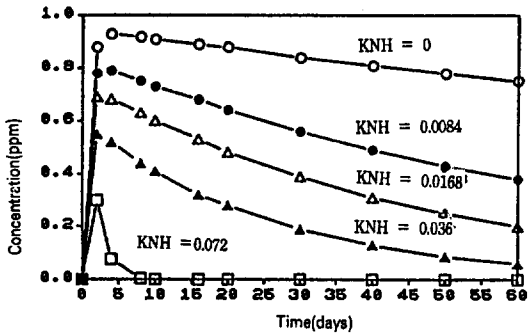


Fig. 7. Disappearance of diazinon in soil after synchronizing the maximum concentration.



*KNH : Hydrolysis rate constant in water

Fig. 8. Disappearance of diazinon in water with variation of hydrolysis rate constant.

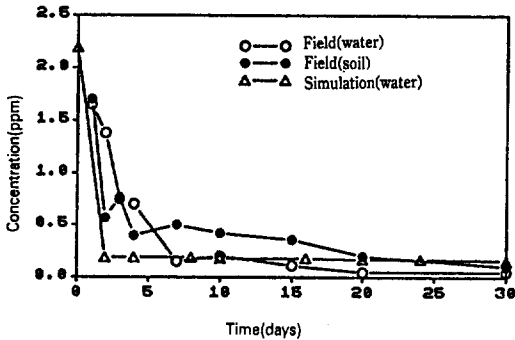


Fig. 9. Disappearance of carbofuran in water and soil.

가며 simulation을 수행하였는데 그 매개변수는 휘발성에 영향을 주는 바람의 속도와 가수분해 상수이다. 먼저 바람의 영향은 butachlor와는 다르게 diazinon에 있어서는 휘발성에 큰 영향을 미치는 것을 볼 수 있었다. Simulation 결과 처리한 diazinon은 바람의 속도에 따라 10~25% 정도가 직접 환경계로 유입이 되는데 이 중에서 70~90% 정도가 휘발되는 것을 알 수 있었다. 이와 같은 결과로 보아 휘발성이 diazinon의 소실에 영향을 많이 미친다고 추측된다.

또한 가수분해 상수를 변화시켜 simulation을 한 결과는 Figure 8과 같으며, 가수분해 속도상수 변화에 따라서 토양에 흡착되는 diazinon의 양의 변화가 큰 것을 볼 수 있었으며, 환경중에서 일어날 수 있는 diazinon의 가수분해에 의한 영향은 대략적으로 이와 같은 범위내에서

일어난다고 추측해 볼 수 있었다. 즉 이와 같은 환경동태 예측 프로그램을 이용하여 환경중에서 일어날 수 있는 화합물의 변화양상을 빠른 시간에 예측할 수 있으며 변화양상에 대한 범위를 추정할 수 있으므로 실지 실험을 수행하는데 있어서도 많은 참고가 될 수 있을 것으로 생각한다.

3) Carbofuran의 모델 환경에서의 동태

Carbofuran의 simulation은 이 등¹⁸⁾의 실험결과를 참고로하여 각각의 양상을 비교하여 보았다. Carbofuran은 비교적 분해가 빠르게 일어나 물층과 토양에 잔류되는 양이 낮은 것으로 나타났는데 simulation 결과는 처리 후 3일 이내에 농도가 급속히 감소하는 경향을 보였으며 그 후에는 일정한 농도를 보였다(Fig. 9).

Figure 10은 carbofuran의 환경인자 중 유기탄소의 양을 조절하여 simulation을 수행한 결과인데 야외시험 결과와 유사함을 보였다. 이와같은 결과를 볼 때 유기탄소의 양이 carbofuran의 simulation에 영향을 미치는 주요한 인자임을 알 수 있었으며 이 과정에서 문제점으로 제기된 것은 butachlor의 경우도 마찬가지로 유기화합물(organic matter)과 유기탄소(organic carbon)에 대한 정의가 확실하지 않으므로 본 연구에서는 유기물의 양을 유기탄소의 양으로 하여 simulation을 수행하였으므로 다소간의 문제가 있는 것으로 사료되었다.

Carbofuran의 경우는 매개변수를 바람의 속도 변화와 수용성의 변화, 온도의 변화, 그리고 유기물의 양의 변화를 주고 동태를 예측해 보았으나 바람의 속도 변화에 따른 휘발되는 양의 변화는 거의 없었으며, 수용성과

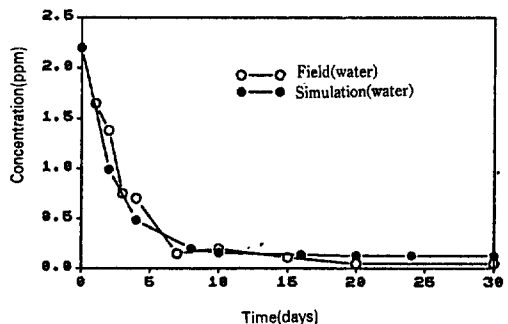


Fig. 10. Disappearance of carbofuran in water.

온도 변화에 따른 동태 변화도 거의 없는 것을 보았다. 또한 유기물 양의 변화는 다소간에 차이를 보이나 그 범위는 크지 않음을 알 수 있었다. 유기물 양에 따른 carbofuran의 소멸 양상은 Figure 11과 같다.

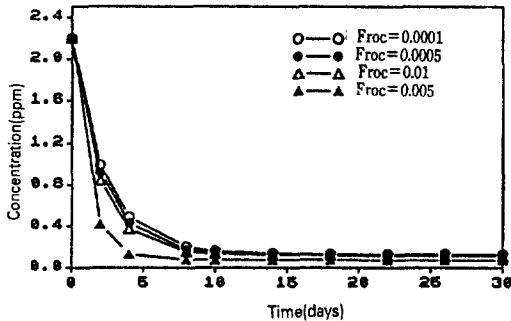


Fig. 11. Disappearance of carbofuran in water with variation of the soil organic carbon contents.

이것으로 보아 carbofuran의 소멸에 있어서는 위에 언급한 인자들이 큰 영향을 미치는 것으로 생각되지 않으며 차후로 carbofuran에 대한 동태예측은 분해에 큰 영향을 미치는 것으로 알려진 다른 매개변수, 즉 광분해 인자나, 가수분해(carbofuran의 경우 알칼리 용액에서 불안정) 등을 고려하여 simulation을 수행해 볼 예정이다.

위에 언급한 3개 농약의 simulation 결과 부분적으로 실지 축소 환경에서 수행한 실험결과와 비슷한 양상을 보이며 simulation 결과를 실지 환경에 적용시킬 수 있다고 생각되며 좀 더 정확한 simulation 결과를 얻기 위해서는 본 연구에서 수행한 화학물 외에도 더 많은 화학물의 야외실험 결과와 simulation 결과를 비교해 볼 필요성이 있으며 EXAMS 프로그램의 simulation에 영향을 미치는 자료의 입력 등이 고려되어야 할 것이다. 즉 EXAMS 프로그램에 입력시킬 수 있는 자료가 미흡한 상태이고 handbook에 나와 있는 자료의 정확도에도 문제가 있다고 생각된다. 예를 들면 광분해에 대한 자료와 미생물에 의한 영향 등은 거의 입력을 시키지 못하는 등 환경에 관한 정확한 자료의 입력에 문제가 있는 것으로 생각된다. Honeycutt 등²⁾이 지적한 EXAMS 프

로그래ムの 제한점으로는 농약에 대한 입력자료는 반드시 정확해야 하며, 실제적이어야 하며(예를 들면 입력하는 자료의 조그마한 변화도 출력되는 결과에 큰 영향을 미칠 수 있기 때문이다). EXAMS 프로그램은 수질환경에서 발생하는 중요한 transformation과 transport 과정을 설명하지 못하는 경우도 있다고 하였다.

본 연구실에서 수행한 simulation에 관한 연구는 아직 시작단계에 불과하므로 앞으로 많은 자료를 수집하고 기초 실험들을 수행해 나가면서 simulation에 관한 연구를 병행한다면 좋은 결과가 나오리라 예상되며 이에 대한 연구를 계속 수행할 예정이다.

3. E4CHEM 프로그램의 응용

E4CHEM 프로그램은 화학물이 환경중에 유입될 때 그 동태를 예측하는 프로그램인데 EXAMS와는 달리 입력하는 자료가 극히 간단하다는 것이다. 예를들면 다음 Table 5와 같이 Henry 상수와 토양흡착계수만 입력하면 대략적으로 공기중에 있는 것과 토양중에 있는 비율, 그리고 수계에 남아있는 비율을 알 수 있는 것이다. Table 5는 PCHEM 프로그램에서 구한 Henry 상수와 토양흡착계수를 E4CHEM 프로그램에 입력하여 환경계별 농도를 추정한 결과이다.

이 표에서 보는 바와 같이 자료 2개만 입력하면 어떤 화학물의 환경중에서의 동태를 바로 알 수 있으므로 화학물질이 오염을 야기시킬 수 있는 환경을 설정하는데 용이하며 빠른 시간에 많은 화학물에 대한 환경중에서의 분포를 쉽게 예측할 수 있다고 생각한다. 즉 표 5에서와 같이 trichloroethylene은 휘발이 잘되므로 공기중에서의 오염문제를 일으킬 가능성이 높을 것으로 추정되며 dichloromethane은 수계에서 문제를 일으킬 가능성이 있는 것으로 추정해 볼 수 있는 것이다. 특 화학물질에 대한 환경 중에서의 오염 우선순위를 간단한 자료를 통하여 빠른 시간에 결정할 수 있는 것이다. 하지만 이 프로그램은 변환에 대한 요인이 고려되지 않고 있어서 분해가 용이한 일반 화학물질에 적용하는 데는 제한점이 있음을 알 수 있다.

본 연구실에서 보유하고 있는 E4CHEM 프로그램은 완벽한 것이 아니라 submodel EXAIR에 관한 프로그램이

Table 5. Distribution in environmental compartments of chemicals by E4CHEM submodel EXTND

Substance	Henry	XKOC	Distribution in environmental compartments					
			%			Concentration(kg/m3)		
			Air	Water	Soil	Air	Water	Soil
1. Trichloroethylene	0.22E-2	1E+2	64.74	34.81	0.45	0.11E-9	0.50E-7	0.15E-6
2. Dichloromethane	0.54E-3	1E+2	31.52	67.61	0.87	0.53E-10	0.97E-7	0.29E-6
3. Chlorinated Paraffin	0.22E-4	1E+4	0.80	43.40	55.80	0.17E-9	0.23E-10	0.7E-10
4. Parathion	0.49E-6	1E+3	0.04	88.57	11.39	0.62E-13	0.13E-6	0.38E-5
5. Carbofuran	0.29E-7	1E+2	0	98.73	1.27	0.41E-14	0.14E-6	0.42E-6
6. Diazinon	0.34E-5	1E+3	0.26	88.38	11.36	0.43E-12	0.13E-6	0.38E-5
7. DDVP	0.12E-6	1E+2	0.01	98.72	1.27	0.17E-13	0.14E-6	0.42E-6
8. Butachlor	0.22E-6	1E+4	0.01	43.75	56.25	0.14E-13	0.62E-7	0.19E-4
9. Carbaryl	0.57E-2	1E+2	82.78	17.0	0.22	0.14E-9	0.24E-7	0.73E-7
10. Propoxur	0.32E-3	1E+2	21.2	77.8	1.0	0.35E-10	0.11E-6	0.33E-6
11. Thiobencarb	0.73E-2	1E+3	84.72	13.54	1.74	0.14E-9	0.19E-7	0.58E-6
12. BPMC	0.96	1E+3	99.86	0.12	0.02	0.17E-9	0.17E-9	0.52E-8

누락되어 있어 submodel 상호간의 자료를 구할수 없으므로 submodel EXATM에 대한 프로그램도 운용할 수 없었다. 따라서 앞으로 E4CHEM 프로그램이 완전하게 갖추어지면 화합물에 관한 기초적인 자료만 입력하여 전반적인 환경에서의 화합물의 동태에 관한 simulation을 수행할 예정이다.

다른 submodel인 EXSOL에서의 simulation 결과로 알 수 있는 것은 처리한 화학물질의 휘발되는 양과 토양에서 용탈되는 양을 예측해 볼 수 있으며 전체적으로 공기와 수계, 그리고 흡착되는 양상을 토양층의 깊이에 따라서 예측해 볼 수 있었다. 또한 EXWAT의 경우는 하천에 유입되는 화학물질이 흘러가는 경로에 따른 농도의 변화와 침전물에 존재하는 양을 예측해 볼 수 있었다.

이상과 같이 몇개의 컴퓨터 프로그램을 이용하여 simulation을 수행해 본 결과 아직은 초보적인 단계이므로 각 프로그램 상호간을 연결하여 전반적인 환경에서의 simulation을 수행하지는 못하였다. 예를들면 EXAMS 프로그램으로 일정한 농을 설정하여 계속 여러 농약을 처리할 때 공기중으로 휘발되거나 논물을 통하여 흘러

나가는 농약은 E4CHEM 프로그램을 사용하여 그 동태를 예측할 수 있으리라 사료되며 PCHEM 프로그램은 이들 프로그램에 입력하는 기본적인 자료를 정확하게 구할 수 있다면 화합물의 환경중 동태를 비교적 정확하게 예측할 수 있으리라 생각된다.

현재 사용하고 있거나 개발되고 있는 물질 모두에 대하여 실지 환경에서 실험을 수행하려면 많은 시간이 걸리며, 그에 따른 비용도 많이 들므로 실질적으로 이와 같은 실험의 수행에는 많은 문제점과 어려운 점이 예상된다. 그러므로 앞에서 언급한 환경중에서 화학물질의 동태를 예측할 수 있는 simulation 프로그램을 활용한다면 일차적으로 문제성이 있는 화학물질의 우선 순위를 결정하여 극소수 물질에 대해서만 야외실험을 수행하므로써 이러한 난점이 극복 될 수 있을 것이다.

결 론

화학물질의 환경동태 예측에 관련된 3개의 simulation 프로그램을 이용하여 문헌상의 실측 자료와 비교 검토한

결과 다음과 같은 결론에 도달하였다.

1. PCHEM 프로그램의 경우 옥타놀/물 분배계수치를 구하는 것은 추정치와 실험으로 구한 결과가 비교적 유사함을 보였다. 그러나 다른 인자, 즉 수용성과 증기압 등은 오차가 있음을 보았는데 이와같은 이유로는 비교적 간단한 가정식으로 구할 수 있는 자료는 추정치가 상당히 정확한 수치를 보이는 좀 더 복잡한 가정식은 상호간의 상관관계가 불완전하게 가정되었기 때문이라 생각된다. 그러나 여러 화합물들에 관한 자료를 빠른시간에, 환경에 문제를 일으킬 가능성이 있는 화합물을 선별하기에는 충분히 활용성이 있는 프로그램이라 생각한다.
2. EXAMS 프로그램으로 simulation을 수행한 결과 야외실험의 결과와 유사한 것을 알 수 있었다. 따라서 이 프로그램을 이용하여 화학물질의 환경중에서의 동태를 충분히 예측할 수 있는 가능성을 확인하였다. EXAMS 프로그램은 PCHEM 프로그램과는 달리 직접 환경중에 화합물이 노출되었을 때의 동태를 예측할 수 있으며 원하는 환경을 임의로 설정할 수 있고, 장기간 화합물이 환경에 노출되었을 때의 동태를 예측할 수도 있으므로 그 활용범위는 매우 넓다고 생각한다.
3. E4CHEM 프로그램은 비교적 간단한 것으로 환경중에서 잔류의 가능성이 있거나 생물체에 농축의 가능성이 있는, 즉 환경오염 문제를 야기시킬 수 있는 화합물들의 우선 순위를 결정하는데 매우 유용하게 활용할 수 있다고 생각한다. E4CHEM 프로그램으로는 단순히 화합물의 환경에서의 분포상향과 각물이나 토양에서의 전반적인 양상만을 보았으므로 다른 실제 환경모델에서의 실험 결과와는 비교해 보지 못하였다.

참 고 문 헌

1. Liss, P. S. and Slater, P. G. (1974) : Flux of gases across the air-sea interface, *Nature*, 247, 181.
2. Cohen, Y., Cocchio, W. and Mackay, D. (1978) : Laboratory Study of Liquid phase controlled volatilization rates in presence of wind waves, *Environ. Sci. Technol.*, 11, 405.
3. Mackay, D. and Leinonen, P. J. (1975) : Rate of evaporation of low solubility contaminants from water bodies to atmosphere, *Environ. Sci. Technol.*, 9, 1178.
4. Swann, R. L., McCall, P. J. and Unger, S. M. (1979) : Volatility of pesticides from soil surfaces, 177th National Meeting Am. Chem. Soc.
5. Lyman, W. J., W. F. Reehl, and D. H. Rosenblatt(1982) : Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Co., New York.
6. chen, J. (1986) : Automated procedures for physicochemical property estimation, U. S. EPA Contract No. 68-02-3970, General Sciences Corporation, Laural.
7. Anderson, E., D. V. Gilman, and D. Weininger(1987) : Environmental Research Brief : SMILES ; A Line Notation and computerized Interpreter for Chemical Structures, U. S. EPA, EPA/600/M-87/021.
8. Lassiter, R. R., G. L. Baughman, L. A. Burns(1978) : State-of-the-Art in Ecological Modeling, 7 : 219~245, *Int. Soc. Ecol. Mod.*, Copenhagen.
9. Rohleder, H., B. Munzer, and K. Voigt(1985) : E4CHEM (Exposure and Ecotoxicity Estimation for Environmental Chemicals)-A Computerized Aid for Priority Setting -, *Environmental Modeling for Priority Setting among the Existing Chemicals, Workshop* 11. ~13. Nov. 1985, Munchen-Neuherberg.
10. Matthies, M., R. Bruggemann, and R. Trenkle (1985) : Multimedia Modeling Approach for Comparing the Environmental Fate of Chemicals, *Environmental Modeling for Priority Setting among the Existing Chemicals, workshop* 11.~13. Nov. 1985, Munchen-Neuherberg.
11. 김용화의(1988) : 합성 화학물질의 안전성 시험, 한국 화학 연구소.
12. Worthing, C.R.(Ed.) (1987) : The Pesticide Manual

- (8th Ed.), (1987) : The Pesticide Manual (8th Ed.), British Crop Protection Council, Suffolk, U.K.
13. Hartley, D.(1983) : The Agrochemicals Handbook, Royal Society of Chemistry, Nottingham, U. K.
 14. Burns, L. A., D. M. Cline, R. R. Lassiter (1982) : Exposure Analysis Modeling system(EXAMS) : User Manual and System Documentation, U. S. EPA, EPA-600/ 3-82-023
 15. Sanders, P. F., and J. N. Seiber(1984) : Organophosphorus Pesticide Volatilization-Model Soil Pits and Evaporation Ponds, ACs Symposium Series No. 259, Treatment & disposal of Pesticide Wastes, pp 270~295
 16. 신천철, 이성규, 김영배, 김용화, 노정구(1987) : 농약에 대한 송사리의 생육단계별 감수성의 변화, 한국환경 농학회지, 6, 50.
 17. 이영득, 이성희, 박영선(1983) : 담토양 및 수도체중 Diazinon의 잔류평가, 한국 환경 농학회지, 2, 1.
 18. 이영득, 박형만, 박영선, 박창규(1987) : 소형 수도 재배구중 Carbofuran의 흡수 이행 및 잔류특성, 한국 환경 농학회지, 6, 31.
 19. Kanazawa, J. (1987) : Biodegradability of Pesticides in Water by Microbes in Activated Sludge, Soil and Sediment, Environmental Monitoring and Assessment, 9, 57.
 20. Sato, T., Kohnosu, S. and Hartwig, J. F. (1987) : Adsorption of Butachlor to soils, J. Agri. Food Chem, 35, 397.
 21. Felsot, A. and Dahm, P. A. (1979) : Sorption of Organophosphorus and Carbamate Insecticides by soil, J. Agri. Food Chem., 27(3), 557.
 22. Honeycutt, R. C., and L. G. Ballantine(1983) : Mathematical Modeling Application to environmental Risk Assessment, ACS symposium series 225, American Chemical Society, Washington, D. C.