

## QSAR을 이용한 지방족 할로겐화합물 흡착 및 탈착 계수의 예측

김종오·박증석·최연돈\*

경상대학교 건설공학부 및 공학연구원

\*경상대학교 대학원 환경보건학과/경상남도 보건환경연구원

\*\*경상대학교 대학원 환경보건학과

(2001년 10월 25일 접수; 2002년 7월 18일 채택)

## Prediction of Sorption/Desorption Parameters of Halogenated Aliphatic Compounds Using QSAR

Jong-Oh Kim, Jeung-Seok Park\* and Yeon-Don Choi\*\*

Division of Construction Engineering/ERI, Gyeongsang National Univ., Gyeongnam 660-701, Korea

\*Kyongsangnam-do Research Institute of Health & Environment, Gyeongnam 641-850, Korea

\*\*Dept. of Environmental Protection, Graduate School, Gyeongsang National Univ., Gyeongnam 660-701, Korea

(Manuscript received 25 October, 2001; accepted 18 July, 2002)

Sorption and desorption is an important phenomenon to determine the fate of halogenated aliphatic hydrocarbons in the aqueous phase. This study was conducted to develop a predictive equation capable of estimating the sorption and desorption potentials of halogenated aliphatic hydrocarbons onto the sludge from activated process, sediment, and clay. It has shown that the sorption and desorption parameters can be accurately estimated using Quantitative Structural Activity Relationship(QSAR) models based on molecular connectivity indexes of test compounds. The QSAR model could be applied to predict the sorption and desorption capacity of the other halogenated aliphatic hydrocarbons. The QSAR modeling would provide a useful tool to predict the sorption and desorption capacity without time-consuming experiments.

Key words : Halogenated aliphatic compounds, Sorption, Desorption, Molecular connectivity indexes, QSAR

### 1. 서론

하수처리장에는 산업활동이나 일상생활에서 발생하는 다양한 유기독성오염물질이 유입될 수 있다. 실제 미국 하수처리장에 지방족 할로겐탄화수소 화합물이 비교적 저농도( $10\mu\text{g}/\ell$  이하)로 하수내에 존재하고 있으나, 하수슬러지에는 훨씬 높은 농도로 농축되어 있다는 보고들이 제시되고 있다.<sup>1-3)</sup> 그리고 문효방 등<sup>4)</sup>의 연구보고에 의하면 한국연안의 퇴적물 시료를 채취하여 다환방향족탄화수소(PAHs) 농도분포 조사 결과, 포항연안이  $149.5\sim 657.2\mu\text{g}/\text{g}$ , 울산연안이  $37.9\sim 249\mu\text{g}/\text{g}$ , 부산연안이  $134.2\sim 568.9\mu\text{g}/\text{g}$ , 진해만이  $49.4\sim 135.1\mu\text{g}/\text{g}$  범위로 농도분포를

나타냈다. 이와같은 결과를 보면 다환방향족탄화수소(PAHs)뿐만 아니라 다른 유기독성오염물질도 오염이 된 것으로 추정된다. 또한 매립지 주변의 토양이 휘발성유기화합물(VOCs)들에 의해 오염된 사례도 보고되고 있다(U.S. EPA 1995)<sup>5)</sup>. 우광제 등<sup>6)</sup>은 수도권 매립지에서 유출되는 가스를 분석한 결과 benzene, toluene, xylene 등의 평균 농도가 각각 3.36, 0.18, 0.12mg/m<sup>3</sup>이었다. 이렇듯 폐기물 매립지에는 이미 상당한 양의 휘발성 유기화합물들이 포함되어 있으며, 매립 가스 및 침출수를 통해 유출되어 주변 환경을 오염시킨다. 이와같이 유기독성오염물질이 하수처리장 활성슬러지와 해안 저질 및 매립지 토양 등에 농축되는 현상은 흡착현상으로 파악되는데, 흡착현상의 가역성으로 인해 하수처리장 활성슬러지와 해안 저질 및 매립지 토양 등에 흡착된 유기독성오염물질이 적절한 조건에서 다시 탈착될 가능성이 있기 때문에 하수처리장 활성슬러

Corresponding Author : Jong-Oh Kim, Division of Construction Engineering/ERI, Gyeongsang National Univ., Jinju, Gyeongnam 660-701, Korea  
Phone : +82-55-751-5323  
E-mail : kjo1207@nongae.gsnu.ac.kr

지와 해안 저질의 처리 및 처분시 문제가 될 수 있고 또한 매립지 침출수문제를 야기시킬 수도 있다.

이에 본 연구에서는 대표적인 지방족 할로젠화합물의 활성슬러지와 해안 저질 및 점토에 대한 흡탈착실험을 통해 측정된 흡탈착계수를 이용하여 여타 지방족 할로젠화합물에 대한 흡착과 탈착특성을 예측할 수 있는 Quantitative structure activity relationship (QSAR) 모델을 제시하고자 하였다. 이와같은 흡탈착 예측 모델은 비용이나 시간이 소요되는 실험을 행하지 않고 지방족 할로젠화합물의 흡탈착을 예측하는데 유용한 방법이 될 수 있을 것이다. 이를 위하여 분자연결지수 (MCI, molecular connectivity index)를 이용하여 흡탈착계수의 연관성을 다중회귀분석으로 검토하고 선형관계식을 제시하고자 하였다.

## 2. 이론적 배경

### 2.1. 흡착계수

대부분 희석된 상태의 수용액중 고형물에 대한 흡착계수(Kp)는 분배계수라고도 표현되는데, 분배계수는 식(1)과 같이 나타낸다.

$$Kp = \frac{C_a}{C_s} \quad (1)$$

여기에서  $C_a$  = 액상에서의 오염물 농도(mg/l),  
 $C_s$  = 고상에서의 오염물 농도(mg/l).

그리고 Kp는 무차원 값이다. 흡착계수는 흡착제에 흡착되는 특정 화합물의 흡착량을 나타내는 것으로, 만약 흡착계수 값이 크다면 흡착량도 크다. 생물학적 활성슬러지와 토양 및 저질과 같은 혼합 고형물에서 흡착과정을 다룰 때 고상과 액상 사이의 유기화합물의 분배정도는 고상의 특성과는 무관한 것으로 관찰되고 있으며,<sup>3,7)</sup> 많은 연구자들은 흡착계수를 표준화하기 위해 총유기탄소농도(TOC)를 사용하고 있다. 이에 본 연구에서도 활성슬러지와 해안 저질 및 점토 세가지 서로 다른 고형물에 대해 TOC를 기준으로 500mg/l로 고정된 조건에서 지방족 할로젠화합물의 흡탈착실험을 실시하여 측정된 표준화된 흡탈착계수를 이용하였다.

### 2.2. QSAR 모델

화학물질의 분자들에 대한 구조분석 연구는 그 분자의 물리적, 화학적, 생물학적 특성을 이해하는데 결정적인 역할을 할 수 있는 것으로 알려져 있으며, 화학물질의 구조와 기능과의 관계를 연구하기 위하여 다양한 방법으로 분자구조 분석 연구가 수행되어 왔다. 이와 같이 화학물질의 구조와 물질들이 나타내는 특성들 간의 상관관계를 연구하는 방법을 QSAR (Quantitative Structure Activity

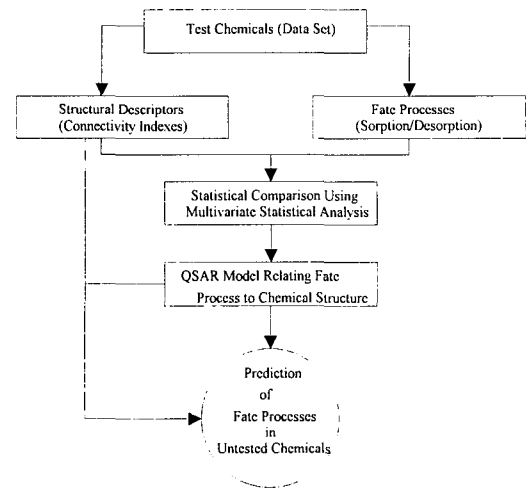


Fig. 1. Procedure of QSAR analysis.

Relationships : 정량적 구조 활성 상관관계)이라 한다.<sup>8~11)</sup> 정량적 구조 활성 상관관계(QSAR) 분석의 기초를 도식화하여 Fig. 1에 나타내었다.

최근 QSAR모델은 화학 분야에서 유기화합물의 물리화학적 특성인 Henry상수, 용해도, 등온흡착식 예측에 적용되었고,<sup>8,12,13)</sup> 의약품, 제초제, 살충제 등과 같은 생물학적 활성화합물의 특성과약에도 적용되었다<sup>14)</sup>. 본 연구에서는 활성슬러지와 저질 및 점토에서의 지방족 할로젠화합물의 흡탈착 분배계수(Kp)를 예측할 수 있는 QSAR모델식을 도출하고자 하였다. QSAR 적용방식에는 여러가지가 있으나, 본 연구에서는 분자연결지수(molecular connectivity index)를 활용하였다. 분자연결지수는 어떤 화합물이 가지고 있는 화학적 구조를 고유의 값으로 나타내는 것으로 화합물의 물리화학적 및 생물학적 특성을 나타내는데 이용되고 있다. 이 방법은 Randic에 의해서 처음 소개되었으며 물리화학적 특성에 적용하였다<sup>15)</sup>. 분자연결지수의 원리는 분자의 뼈대와 뼈대의 분할차수에 기초를 두고 있다. 예를 들어 유기 원자의 탄소나 헤테로원자와 같은 무수원자에 의해 계산된다. 이 때  $^mX$ 에서 'm'은 m차수의 분자연결지수를 의미하는 것으로 2차, 3차 또는 그 이상의 연결지수와 같은 고차 분자연결지수는 연속적인 이웃한 m개의 원자에 부여된 기수를 바탕으로 계산할 수 있다. 또한 탄소가 아닌 원자와 다중 결합된 원자를 구분하기 위하여, 윗첨자 v를 이용하여 원자가지수(valence index)를 계산한다. 본 연구에서 각 지방족 할로젠화합물에 대한 분자연결지수는 Sabljic<sup>11)</sup>에 의해 개발된 GRAPAH III software를 사용하여 Mukherjee<sup>17)</sup>가 58종의 지방족

QSAR을 이용한 지방족 할로겐화합물 흡착 및 탈착 계수의 예측

할로겐화합물에 대해 계산해 놓은 값을 이용하였다. 이에 따라 각 화합물의 분자연결지수와 흡탈착 분배계수의 상관성을 다중회귀분석을 통해 검토함으로써 분배계수 예측에 QSAR 모델의 적용 가능성을 고찰하고자 하였다.

3. 분배계수와 분자연결지수

3.1. 측정된 분배계수

분배계수(Kp)는 Freundlich 등온흡착식의 X/M (mg/g)과 Ce(mg/l) 관계에서 Dobbs 등, Sudhi 등이 유도한 식을 사용하였다.<sup>3,17)</sup>

$$\frac{X}{M} = K \cdot Ce^{1/n} \quad (2)$$

$$Kp = \frac{Ca}{Cs} = \frac{(X/M) (mg/g)}{Ce(mg/l) \times 10^{-3} (l/g)} = \frac{X/M(mg/g)}{Ce \times 10^{-3}(mg/g)} \quad (3)$$

Ce = 1 mg/l 일 때 (2)식에서 X/M = K이므로 (3)식에 적용하면 Kp = K · 1000 (4)

즉, log Kp = log (K · 1000) = log K + 3 (5)

Table 1과 Table 2는 지방족 할로겐화합물을 대표하는 것으로 선택된 6개 화합물을 사용하여 5, 10, 20, 30, 40mg/l 로 주입농도별 활성슬러지와 해

안저질 및 점토의 흡탈착 실험결과로부터 흡탈착 분배계수를 정리하여 나타낸 것이다. 6종의 지방족 할로겐화합물의 흡탈착량(K)과 분배계수(Kp)를 Table 3의 분자연결지수, 옥탄올-물 분배계수, 분자량과 다중회귀분석에 의한 모델 개발에 사용하였다.

3.2. 분자연결지수

본 연구에서 분자연결지수(MCI, molecular connectivity index)<sup>17)</sup>는 GRAPHIII 컴퓨터 프로그램을 이용하여 지방족 할로겐화합물에 대해 6차수 (<sup>0</sup>χ에서 <sup>6</sup>χ, 그리고 <sup>0</sup>χ<sup>v</sup>에서 <sup>6</sup>χ<sup>v</sup>)까지 카이 지수 발렌스를 계산한 결과를 사용하였다. Table 3에는 6종의 지방족 할로겐화합물에 대한 분자연결지수가 나타나 있다. 또한 화합물의 흡탈착 특성과 상관성이 높은 것으로 판단되는 옥탄올-물 분배계수(log P)와 분자량에 대한 특성값을 정리하여 나타내었다.

4. 모델 개발과 검증

4.1. 흡탈착 상관관계 비교와 QSAR 모델식

활성슬러지와 해안 저질 및 점토의 고형물의 흡탈착 분배계수와 분자연결지수의 정량적 모델을 개발하기 위해 다중선형회귀분석을 실시하였다. 이 분석에서 분배계수(log Kp)를 Y변수로 하고, 옥탄

Table 1. Sorption coefficients and log Kp of activated sludge, sediment, and clay

Compounds	Activated sludge		Sediment		Clay	
	K*	log Kp**	K*	log Kp**	K*	log Kp**
1-Bromobutane	0.18	2.26	0.22	2.34	0.02	1.30
1.2-Dichloroethane	0.05	1.70	0.40	2.60	0.23	2.36
Iodoethane	0.12	2.08	0.27	2.43	0.16	2.20
1.1.2.2-Tetrachloroethane	0.17	2.23	0.18	2.26	0.13	2.11
1.1.1-Trichloroethane	0.08	1.90	0.21	2.32	0.19	2.28
Trichloromethane	0.03	1.48	0.28	2.45	0.45	2.65

\* K = sorption coefficient=(mg/g) at Ce= 1.0mg/l

\*\* log Kp = log (K · 1000)

Table 2. Desorption coefficients and log Kp of activated sludge, sediment, and clay

Compounds	Activated sludge		Sediment		Clay	
	K*	log Kp**	K*	log Kp**	K*	log Kp**
1-Bromobutane	0.16	2.20	5.83	3.79	0.51	2.71
1.2-Dichloroethane	0.17	2.23	4.91	3.69	1.22	3.09
Iodoethane	0.20	2.30	1.64	3.21	0.74	2.87
1.1.2.2-Tetrachloroethane	0.15	2.18	4.76	3.68	0.73	2.86
1.1.1-Trichloroethane	0.16	2.20	1.29	3.11	1.00	3.00
Trichloromethane	0.17	2.23	2.63	3.42	1.08	3.03

\* K = desorption coefficient=(mg/g) at Ce=1.0 mg/l

\*\* log Kp = log (K · 1000)

Table 3. Molecular connectivity indexes, octanol-water partition coefficients and molecular weights of test compounds

Compound Name	Molecular Connectivity Indexes								logP*	MW**
	<sup>0</sup> χ	<sup>1</sup> χ	<sup>2</sup> χ	<sup>3</sup> χ	<sup>0</sup> χ <sup>v</sup>	<sup>1</sup> χ <sup>v</sup>	<sup>2</sup> χ <sup>v</sup>	<sup>3</sup> χ <sup>v</sup>		
1-Bromobutane	4.121	2.414	1.354	0.707	5.082	3.094	1.834	1.047	2.71	137.02
1,2-Dichloroethane	3.414	1.914	1.000	0.500	3.679	2.101	1.132	0.641	1.48	98.96
Iodoethane	2.707	1.414	0.707	0.000	4.207	2.475	1.768	0.000	2.00	155.97
1,1,2,2-Tetrachloroethane	5.207	2.561	2.914	1.061	5.606	2.641	3.231	1.110	2.39	167.85
1,1,1-Trichloroethane	4.500	2.000	3.000	0.000	4.897	2.198	3.621	0.000	2.49	133.40
Trichloromethane	3.577	1.732	1.732	0.000	3.974	1.961	2.221	0.000	1.94	119.38

\* logP : octanol-water partition coefficient

\*\* MW : molecular weight

올-물 분배계수(log P)와 분자량에 대한 특성 값 및 분자연결지수를 각각 X변수로 하여, 모든 자료 처리와 모델링 및 다중회귀분석인 통계적인 분석은 개인용 컴퓨터에서 Microsoft Excel의 통계 데이터 분석 프로그램을 이용하였다.

Table 3으로부터 알 수 있듯이, 목표화합물의 분자연결지수가 고차 지수에서는 0의 값으로 나타나기 때문에 6개의 고차카이지수(<sup>4</sup>χ 에서 <sup>6</sup>χ 그리고 <sup>4</sup>χ<sup>v</sup> 에서 <sup>6</sup>χ<sup>v</sup>)는 상관관계분석에서 제외되었다. 매개변수의 대부분의 값이 0일때, 기본적으로 매개변수가 모델 개발을 위해 구조활성상관관계(QSAR) 분석과 다중상관관계분석에 이용할 수 없다. 다중상관관계 분석은 동시에 전체 자료를 분석하는 기본적인 다중선형회귀방법을 이용하여 수행했고, 그리고 순차적으로 회귀분석중 매개변수의 수를 감소시켰다.

일반적으로 흡착상관관계에서 가장 영향을 미치는 것이 흡착제의 특성과 액상 용해도, 옥탄올/물 분배계수이다. 또한 분자량이 클수록 흡착제 상의 양이온 계면활성제와 상호 작용하는 van der Waals 인력이 크게 작용하기 때문에 흡착량이 크고, 유기화합물의 반응기중 이온화가능성이 있는 것들이 존재하는 것도 흡착에 중요한 영향을 미치는 것으로 알려져 있다<sup>18,19</sup>. Table 3에서 추가적인

Table 4. Comparison of correlation coefficients with various physicochemical properties

Solids	MCI*		logP**		Molecular Weight	
	Sorption(r <sup>2</sup> )	Desorption(r <sup>2</sup> )	Sorption(r <sup>2</sup> )	Desorption(r <sup>2</sup> )	Sorption(r <sup>2</sup> )	Desorption(r <sup>2</sup> )
Activated sludge	0.82	0.86	0.47	0.27	0.58	0.00
Sediment	0.89	0.80	0.81	0.00	0.64	0.02
Clay	0.91	0.93	0.46	0.57	0.10	0.44

\* MCI : molecular connectively index

\*\* logP : octanol-water partition coefficient

확인을 위해 흡착에 가장 크게 영향을 미치는 옥탄올-물 분배계수와 분자량을 선정해서 분자연결지수와 함께 실험에서 얻어진 흡탈착 분배계수와 회귀분석을 실시한 결과 상관계수는 Table 4와 같이 나타났다. 상관관계에서도 알 수 있듯이 분자연결지수를 이용한 식의 상관계수가 다른 두가지의 상관계수 보다 월등히 높은 값을 나타내므로 분자연결지수를 이용한 흡탈착 예측모델 식이 효과적임을 알 수 있었다. 분자연결지수와 분배계수(log P)와의 다중선형회귀에 의한 결과에서 가장 적절한 상관관계가 평가된 8개의 분자연결지수로는 흡착에서 활성슬러지는 <sup>1</sup>χ<sup>v</sup>, 해안 저질은 <sup>0</sup>χ<sup>v</sup>, 점토는 <sup>1</sup>χ<sup>v</sup> 가 그리고 탈착에서 활성슬러지는 <sup>0</sup>χ, 해안 저질은

Table 5. Multiple regression results using MCI and log Kp

Solids	Sorption			Desorption		
	Equation	r <sup>2</sup> *	SE**	Equation	r <sup>2</sup> *	SE**
Activated sludge	log Kp = 0.67 <sup>1</sup> χ <sup>v</sup> + 0.32	0.82	0.15	log Kp = - 0.04 <sup>0</sup> χ + 2.40	0.86	0.02
Sediment	log Kp = - 0.15 <sup>0</sup> χ <sup>v</sup> + 3.11	0.89	0.04	log Kp = 0.46 <sup>3</sup> χ <sup>v</sup> + 3.27	0.80	0.14
Clay	log Kp = - 1.04 <sup>1</sup> χ <sup>v</sup> + 4.66	0.91	0.15	log Kp = - 0.32 <sup>1</sup> χ <sup>v</sup> + 3.70	0.93	0.04

\* r<sup>2</sup> = correlation coefficient

\*\* SE = standard error

QSAR을 이용한 지방족 할로겐화합물 흡착 및 탈착 계수의 예측

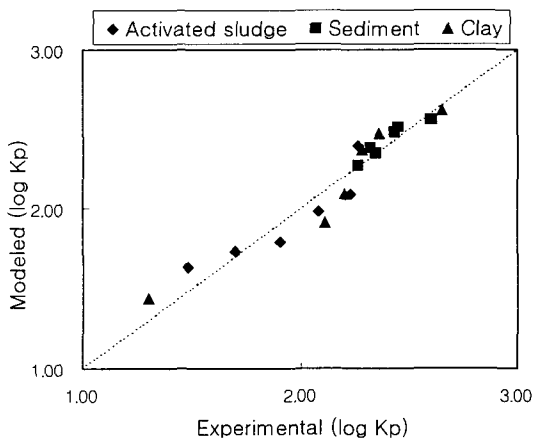


Fig. 2. Comparison between experimentally determined and modeled value for the sorption partition coefficients.

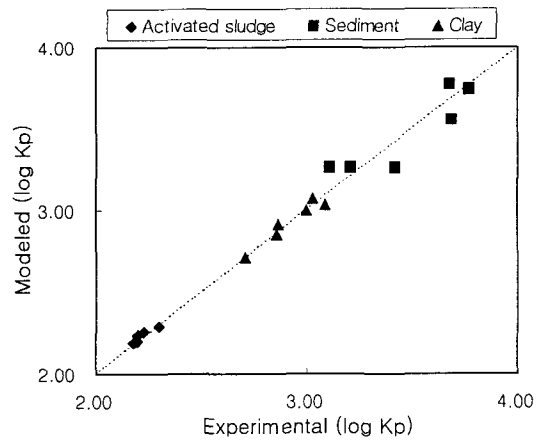


Fig. 3. Comparison between experimentally determined and modeled value for the desorption partition coefficients.

$^3\chi^v$ , 점토는  $^1\chi^v$  가 분배계수와 높은 상관관계를 나타내었다. 이 분자연결지수를 이용하여 각 고형물별로 가장 적합한 QSAR모델식은 Table 5에 나타내었다.

4.2. QSAR 모델식 검증

한편 분자연결지수를 이용한 흡탈착 예측모델 식인 Table 5를 이용하여 계산된 예측값과 실험값을 비교하였고, Fig. 2와 Fig. 3은 실험값과 예측값을 비교하여 도시하였는데, 모델에 의한 예상값과 실험에서 얻어진 값과 상당히 일치하였다.

결론적으로 지방족 할로겐화합물의 활성슬러지와 해안 저질 및 점토 고형물의 분배계수와 분자연결지수를 이용하여 효과적인 예측식을 확인할 수 있었다. 이것은 개발된 모델이 분자연결지수를 이용하여 활성슬러지와 해안 저질 및 점토 고형물에 대한 흡탈착량을 예측할 수 있다는 것을 의미한다.

5. 결 론

본 연구는 활성슬러지와 해안 저질 및 점토 고형물의 지방족 할로겐화합물에 대한 흡탈착 특성을 예측할 수 있는 모델식 개발을 목적으로 수행하였으며 도출된 결론을 요약하면 다음과 같다.

- 1) 분자연결지수를 이용한 QSAR 모델을 통해 지방족 할로겐화합물의 흡탈착 분배계수를 추정할 수 있는 예측식을 다음과 같이 제시할 수 있었다. 흡착작용에서 활성슬러지는  $\log Kp = 0.67 \ ^1\chi^v + 0.32$  ( $r^2 = 0.82$ ), 해안 저질은  $\log Kp = -0.15 \ ^0\chi^v + 3.11$  ( $r^2 = 0.89$ ), 점토는  $\log Kp = -1.04 \ ^1\chi^v + 4.66$  ( $r^2 = 0.91$ )

로 나타났으며, 탈착작용에서 활성슬러지는  $\log Kp = -0.04 \ ^0\chi + 2.40$  ( $r^2 = 0.86$ ), 해안 저질은  $\log Kp = 0.46 \ ^3\chi^v + 3.27$  ( $r^2 = 0.80$ ), 점토는  $\log Kp = -0.32 \ ^1\chi^v + 3.70$  ( $r^2 = 0.93$ )로 각각 나타났다.

- 2) 대표적인 6개 지방족 할로겐화합물의 분배 계수 실험값을 분자연결지수와 옥탄올 분배 계수 및 분자량과 회귀분석에서 얻은 상관 관계 값에서 분자연결지수와의 상관관계 값이 월등히 우수하였다. 또한 분자연결지수를 이용하여 개발된 모델의 예측값과 실험값이 매우 일치하였다.
- 3) 이 연구는 지방족 할로겐화합물의 흡착 및 탈착량은 활성슬러지와 해안 저질 및 점토고형물에 대한 분배계수와 분자연결지수를 바탕으로 하는 구조활성상관관계 모델식을 사용하여 정확하게 수식화할 수 있음을 알 수 있었다. 분자연결지수와 같은 이론적으로 유래된 매개변수를 이용함으로써 실험상의 시간과 노력을 줄일 수 있는 장점이 있어 다양한 적용이 가능할 것으로 판단된다.

감사의 글

본 연구는 KOSEF (핵심) 981-1205-014-2의 지원으로 수행되었으며 이에 감사 드립니다.

참 고 문 헌

- 1) Martin, E.J. and J.H. Johnson, 1987, Hazardous waste management engineering, Van

- Nostrand Reinhold.
- 2) U.S. EPA., 1982, Fate of priority toxic pollutants in publicly-owned treatment works, EPA-40/1-82-303, Vol. I and II, Office of Water Regulation and Standards, Washington D.C.
  - 3) Dobbs, R. A., M. Jelus, and K. Y. Cheng, 1986, Partitioning of toxic organic compounds on municipal wastewater treatment plant solids, Proceedings of the International Conference on Innovative Biological Treatment of Toxic Waste waters, Virginia, 584~600pp.
  - 4) 문효방, 최희구, 김상수, 김평중, 이필용, 2000, 한국 남동해 연안 퇴적물 중 다환방향족탄화수소(PAHs)의 분포 특성, 2000년도 춘계 수산관련 학회 공동학술대회 발표 요지집, 국립수산진흥원, PD-15.
  - 5) U.S. EPA, 1995, Bioremediation of hazardous wastes-research, development, and field evaluations, Washington, EPA /504/R-95/532.
  - 6) 우광제, 김지형, 1997, 매립지의 VOC 배출에 관한 연구, 한국폐기물학회지, 14(7), 841-848.
  - 7) Wang, L., R. Govind, and R. A. Dobbs, 1993, Sorption of toxic organic compounds on wastewater solids: mechanism and modeling, Environmental Science and Technology, 27(1), 152-158.
  - 8) Nirmalakhandan, N. N. and R. E. Speece, 1988, Prediction of aqueous solubility of organic chemicals based on molecular structure, Environmental Science and Technology, 22(3), 328-338.
  - 9) Sabljic, A., 1987, On the prediction of soil sorption coefficients of organic pollutants from molecular structure: application of molecular topology model, Environmental Science and Technology, 21(4), 358-366.
  - 10) Sabljic, A. and W. T. Piver, 1992, Quantitative modeling of environmental fate and impact of commercial chemicals, Environmental Toxicology and Chemistry, 11, 961-972.
  - 11) Sabljic, A., H. Gusten, H. Verhaar, and J. Hermens, 1995, QSAR modelling of soil sorption. improvements and systematics of logKoc vs. logKow correlations, Chemosphere, 31(11/12), 4489-4514.
  - 12) Sun, B., N. N. Nirmalakhandan, E. Hall, X. H. Wang, J. Prakash, and R. Maynes, 1994, Estimating Toxicity of Organic Chemicals to Activated-sludge Microorganisms, J. Environ, Engineering, American Soc. Civil Engineers, 120, 1459-1469.
  - 13) 김종오, 1991, QSAR 방법을 이용한 가스 상태의 등온흡착선 예측, 대한토목학회지, 11(3), 11-18.
  - 14) Govers, H., C. Ruepert, T. Slovens, and C. J. van Leeuwen., 1986, Experimental determination and prediction of partition coefficients of thioureas and their toxicity to photobacterium phosphreum, Chemosphere, 15(4), 383-393.
  - 15) Randic, M. J., 1975, On characterization of molecular branching, J. Amercian Chem. Soc., 97, 6609-6615.
  - 16) Dobbs, R. A., L. Wang, R. Govind, 1989, Sorption of toxic organic compounds on wastewater solids: correlation with fundamental properties, Environmental Science and Technology, 23(9), 1092-1097.
  - 17) Mukherjee, S. R., 1996, Development of a multivariate QSAR model to predict contaminant desorption of halogenated aliphatic hydrocarbons from activated sludge solids, Diss. Ph. D., NJIT., Newark, NJ, U.S.A.
  - 18) Mortland, M. M., S. Shaobai, and Boyd, S. A., 1986, Clay organic complexes as adsorbents for phenol and chlorophenols, Clay & Clay Minerals, 34, 581-585.
  - 19) Shimizu, Y., 1998, Sorption of organic pollutants in aquatic environments : The effects of solid composition, Ph. D. Diss., Texas Univ., Austin, USA.