

EQC 모델을 이용한 벤조일 퍼록사이드의 다매체 환경거동 예측

김미경 · 배희경 · 송상환 · 구현주 · 김현미 · 최광수 · 전성환 · 이문순[†]

국립환경과학원 환경노출평가과

(2003년 10월 24일 접수, 2005년 10월 27일 채택)

Estimation of Multimedia Environmental Distribution for Benzoyl peroxide Using EQC Model

Mi Kyoung Kim · Hee Kyung Bae · Sang Hwan Song · Hyun Ju Koo · Hyun Mi Kim

Kwang Soo Choi · Sung Hwan Jeon · Moon Soon Lee[†]

National Institute of Environmental Research, Environmental Exposure Assessment Division

ABSTRACT : Benzoyl peroxide is very toxic to aquatic organisms but environmental concentration or exposure effects were not studied. Distribution of the chemical among multimedia environment was estimated using EQC(Equilibrium Criterion) model based on the physical-chemical properties to evaluate the risk of benzoyl peroxide in environment. Level I describes a situation that 100,000 kg of benzoyl peroxide is emitted into the environment which is equilibrium and steady-state without degradation and advection condition. Level II describes a situation that a constant rate of 1,000kg/h of benzoyl peroxide is continuously discharged into the environment which is equilibrium and steady-state with degradation and advection condition. Level III describes a situation that 1,000 kg/h of benzoyl peroxide is continuously introduced in each air, water, soil, and sediment compartment which are non-equilibrium and steady-state with degradation, advection, and inter-media transfer condition. In Level I and II calculations the chemical was distributed to soil(68.3%) and water(28.7%). In Level III calculation it was primarily distributed to soil(99.9%) and overall residence time was estimated to be 3.4 years. Benzoyl peroxide can be persistent in environment.

Key Words : Benzoyl peroxide, EQC Model, Multimedia Environmental Distribution

요약 : 벤조일 퍼록사이드는 수서생물에 대해 매우 높은 독성을 나타냄에도 불구하고 환경 중 잔류 농도 및 노출영향에 대해 연구가 이루어지지 않아 OECD에서 추천하고 있는 대표적인 다매체 환경거동 모델인 EQC 모델을 이용하여 본 물질에 대한 환경중의 농도를 예측하고 위해성평가 및 화학물질의 관리를 수행하기 위한 기초자료로 활용코자 하였다. 평형, 정상상태에서 100,000 kg의 벤조일 퍼록사이드가 환경내로 유입된 상태를 나타내는 Level I과 평형, 정상상태, 이류와 분해현상이 있고 일정한 속도 1,000 kg/h로 유입되었을 경우를 나타내는 Level II에서 벤조일 퍼록사이드는 주로 토양(68.3%)과 물(28.7%)로 배출되는 것으로 예측되었다. 비평형, 정상상태, 이류와 분해현상이 있고 다매체 이동을 하는 시스템에서 벤조일 퍼록사이드가 대기, 물, 토양, 침전물의 각각의 4개 매체에 연속적으로 1,000 kg/h로 유입될 경우인 Level III에서는 주로 토양(99.9%)으로 배출되었고 전체 잔류시간은 3.4년으로 예측되어 벤조일 퍼록사이드가 환경 중에 잔류성이 있는 물질로 평가되었다.

주제어 : 벤조일 퍼록사이드, EQC 모델, 다매체 환경거동

1. 서론

현재 전 세계적으로 1,700만 여종의 화학물질이 개발되어 그 중 약 10만 여종이 상업적으로 유통되고 있으나 안전성 및 위해성 여부를 모르는 상태에서 사용되어 환경매체를 통해 인체에까지 도달할 수 있어 결과적으로 인체 및 환경에 위해를 가할 수 있다.¹⁾ OECD에서는 한 회원국 또는 EU국가에서 1,000톤/년 이상 생산되거나 수입되는 대량생산화학물질(high production volume chemicals)에 대한 초기위해성평가를 수행하고, 잠재적 위해성에 대해 결론 및 권고사항

을 정하는 SIDS(the Screening Information Data Set)사업을 수행해 오고 있다. 2004년 기준으로 각 회원국들에서 제시한 대량생산화학물질의 수는 4,843종이며, 우리나라는 1999년부터 26개 물질에 대한 환경 및 인체 위해성평가를 수행해 오고 있으며, 26개 물질들은 Table 1과 같다.¹⁻³⁾

그 중에서도 벤조일 퍼록사이드는 우리나라에서 2001년 기준으로 1,357톤 생산되었고 수입량은 268톤/년, 수출량은 293톤/년인 대량생산화학물질로서 백색 고체상의 물질이며 알칼리 용액에서 hydrogen peroxide와 benzoyl chloride의 반응에 의해 생성된다. 이 물질은 주로 스티로폼 원료와 의류 제조공정의 싸이징, 페인트 제조공정 중의 아크릴 수지, 밀가루 표백제, 여드름 치료제와 같은 의약품으로 사용된다. 벤조일 퍼록사이드의 환경 중 수생생물에 대한 영향은 어류를 이용한 급성독성시험 시 96시간 노출에 의한 LC₅₀은 0.24,

[†] Corresponding author
E-mail: munlee@hanmail.net
Tel: 032-560-7220

Fax: 032-560-7256

2.0 mg/L 값을 나타냈으며, 조류 성장률에 대한 72시간 반수 영향농도(E_bC_{50} , biomass 기준)는 0.07, 0.44 mg/L, 물벼룩에 대한 48시간 반수영향농도(EC_{50})는 0.07, 2.91 mg/L로서 수서생물에 대해 독성이 매우 높은 것으로 평가되었다.³⁾

본 연구에서는 벤조일 퍼록사이드의 다매체 환경에서 거동을 예측하기 위하여 Mackay 등⁴⁾에 의해 개발되어 EU 및 미국과 일본 등 OECD SIDS 사업에 참여하고 있는 대다수의 나라들에 의해 사용되고 있는 다매체 환경거동 예측 모델인 EQC (Equilibrium Criterion) 모델이 이용되었다. 신규 및 기존화학물질의 환경에서 안전성, 환경거동 및 배출결과에 대한 잠재적인 영향을 평가하고 환경위해성평가를 수행하기 위하여 환경거동평가가 이용되고 있으며, 그 중에서도 다매체 거동모델은 한 화학물질이 다수의 매체로 동시에 배출되거나 또는 한 매체로 배출된 후에 다른 매체로 이동하여 전체 환경에서 화학물질의 최종적인 거동을 예측할 수 있기 때문에 환경 중 화학물질의 거동연구에 많이 이용되고 있다.^{2,5,6)}

다매체 모델의 매체간 흐름에 퓨가시티(fugacity)가 이용되고 퓨가시티 모델은 Mackay 모델이라고 불리는 다매체 박스 모델이다. 다매체 모델의 일반환경(general environment)은 공간적으로 균일한 박스 묶음으로 표현되고, 각 환경 매체에서 화학물질은 균일하게 배출한다고 가정한다. 대기, 물, 부유물질, 침전물, 토양, 수서생물의 여섯 개의 매체가 사용

되며 한 지역을 10^4 - 10^5 km²정도로 구분한다.^{5,6)} 이러한 일 반환경에 대한 개념은 Baughman과 Lassiter에 의해 처음 제안되었고 Mackay 등에 의해 확인되었는데,⁷⁾ 화학물질 거동 평가결과를 국제적으로 공유할 수 있는 이점이 있다. 화학물질 거동은 화학물질 고유의 특성(수용해도, 증기압, 반응성 등)과 자연 또는 배출되는 환경의 특성(온도, 대기, 물, 토양의 흐름과 구성)에 의해 통제되는데 환경특성은 지역과 지역간에 다양한 특성이지만 화학물질의 특성은 보편적이다. 그러므로 화학물질 거동을 적용할 수 있는 한 지역의 다양한 패턴은 다른 지역에도 적용이 가능하다.^{5~7)}

Mackay 모델 종류의 다매체 모델들의 대표적인 예로 Caltex, ChemCAN, HAZCHEM와 SimpleBOX 등이 있고 각 모델의 특성은 다음과 같다. Caltex는 4개의 매체를 포함하는 정상상태 Level III 모델과 Level IV 토양매체와 결합한 퓨가시티에 기초한 모델로, 유해 폐기물 관리지역에 인접한 환경거동과 인체노출을 예측하기 위하여 캘리포니아 환경보호청을 지원하기 위해 개발되었다. ChemCAN은 정상상태 Level III 모델로, 캐나다 보건부에 의해 개발되었는데 캐나다 24개 지역의 화학물질의 거동을 예측하기 위해 퓨가시티와 equivalence를 사용한다. 모델은 4개의 주요 환경 매체와 다수의 하위 매체를 포함한다. 이 모델은 가상의 10^5 km²지역에서의 화학물질 거동을 추론하는 평가(evaluative) 모델인 EQC 모델과 매우 비슷하다. HAZCHEM은 5개의 매체와 그 중 두개는 토양인 정상상태 Level III 모델로, ChemCAN과 같은 퓨가시티 모델에 기초해 있으나 다수의 변형을 포함하고 있다. 이 모델은 모든 EU 지역에 대한 지역규모 모델로 개발되었다. SimpleBOX는 정상상태 Level III 모델로 8개의 매체를 가지고 있고 그 중에 3개의 매체가 토양이며 각기 다른 쓰임과 특성을 가지고 있다. 이 모델은 화학물질 평가의 동일한 시스템(Uniform System of Evaluation of Substance, USES)에 사용되는 네덜란드에 대한 지역규모 모델이고 기본 환경 특성은 네덜란드를 대표한다. SimpleBOX는 물질수지식을 평가하기 위하여 전형적인 농도 개념을 사용하였다. 9종의 화학물질(Trichloroethylene, Benzo(a)pyrene, 1,4-Dichlorobenzene, Hexachlorobenzene, Hexachlorobiphenyl, Pentachlorophenol, Atrazine, Linear alkylbenzene sulfonates, Lead)을 대상으로 4개의 모델에 대하여 결과값을 비교한 Round Robin 평가에 따르면, 모든 메커니즘과 매개 변수들이 같은 값으로 주어졌을 때 모델들은 본질적으로 거의 비슷한 결과를 나타낸다. 이러한 다매체모델에서 민감도와 불확실성 및 정확성은 분자량, 용해도, 옥탄올-물 분배계수(K_{ow})와 증기압과 같은 화학물질의 입력변수의 정확도에 달려있으며, 모델 결과에서 예측된 농도는 그 지역의 각 환경매체의 평균 또는 배경 농도이므로 대개 측정된 농도의 어느 정도 수준범위 안에 있다.^{5,7~9)}

본 연구에서는 EQC 모델을 이용하여 대기, 물, 토양, 침전물 등 각 환경매체의 특징 및 시스템내의 유입특성에 따른 벤조일 퍼록사이드의 환경중의 농도와 주로 배출되는 매체

Table 1. List of OECD SIDS HPV Chemicals sponsored by Korea³⁾

Chemical name	CAS No.	Molecular formula
Sodium metabisulfite	7681-57-4	Na ₂ O ₅ S ₂
N-acetyl aniline	103-84-4	C ₈ H ₉ NO
Benzoyl peroxide	94-36-0	C ₁₄ H ₁₀ O ₄
Calcium sulfate, dihydrate	10101-41-4	CaH ₄ O ₆ S
p-Toluenesulfonyl chloride	98-59-9	C ₇ H ₇ ClO ₂ S
Iron(II) chloride	7758-94-3	FeCl ₂
Barium carbonate	513-77-9	BaCO ₃
Copper monochloride	7758-89-6	CuCl
Strontium carbonate	1633-05-2	CO ₃ Sr
4,4'-Oxydibenzene- sulfonyl hydrazide	80-51-3	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₅ S ₂
1,1-Difluoroethane (HFC-152a)	75-37-6	C ₂ H ₄ F ₂
Potassium phosphate, dibasic	7758-11-4	HK ₂ O ₄ P
Tricalcium phosphate	7758-87-4	Ca ₃ O ₈ P ₂
1,4-Cyclohexanedimethanol	105-08-8	C ₈ H ₁₆ O ₂
Saccharin, sodium deriv	128-44-9	C ₇ H ₄ NNaO ₃ S
Disulfide, bis(dimethylthiocarbamoyl)-	137-26-8	C ₆ H ₁₂ N ₂ S ₄
Manganase dioxide	1313-13-9	MnO ₂
Calcium stearate	1592-23-0	C ₃₆ H ₇₀ CaO ₄
Dimethyl-4,4-bipyridinium dichloride	1910-42-5	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₂ N ₂
Magnesium sulfate	7487-88-9	MgO ₄ S
Phosphoric acid	7664-48-2	H ₃ PO ₄
Strontium sulphate	7759-02-6	O ₄ SSr
Magnesium chloride	7786-30-3	MgCl ₂
Calcium lignosulfonate	8061-52-7	C ₂₀ H ₂₆ O ₁₀ S ₂ Ca
Calcium nitrate	10124-37-5	CaN ₂ O ₆
Titanium dioxide	13463-67-7	TiO ₂

Table 2. Compartment dimensions and properties for Level I and Level II calculations¹¹⁾

Compartment	Air	Water	Soil	Sediment	Suspended sediment	Fish
Volume, V(m ³)	10 ¹⁴	2×10 ¹¹	9×10 ⁹	10 ⁸	10 ⁶	2×10 ⁵
Depth, h(m)	1,000	20	0.1	0.04	-	-
Area, A(m ²)	100×10 ⁹	10×10 ⁹	90×10 ⁹	10×10 ⁹	-	-
Organic fraction(θ _{oc})	-	-	0.02	0.04	0.2	-
Density, ρ(Kg/ m ³)	1.2	1,000	2,400	2,400	1,500	1,000
Advection residence time, t(hours)	100	1,000	-	50,000	-	-
Advection flow, G(m ³ /h)	10 ¹²	2×10 ⁸	-	2,000	-	-

및 분해속도와 잔류기간 등의 특성을 파악하였다. 또한 벤조일 퍼록사이드에 대한 환경위해성을 평가하기 위해 앞서 필요한 기초적인 자료를 제공하고 화학물질 관리계획을 수립하는데 도움이 되고자 하였다.

2. 연구 방법

2.1. 모델환경

EQC 모델은 Mackay 등⁴⁾에 의해 기술된 다매체평가모델로써 화학물질의 거동이 평가되는 일반적인 환경들을 기술한다. 평가되는 환경은 100,000 km²의 지역으로 대략 미국 오하이오주 또는 그리스 크기의 관할상 또는 생태학적으로 동질한 지역이다. 통계청 자료에 따르면 우리나라 전체 국토 면적은 2003년 기준으로 99,600.87 Km²이므로 EQC 모델을 적용할 수 있는 크기이다. 대기 고도는 지역적 대기 방출에 의해 대부분 영향을 받는 대류권을 반영하여 임의의 1000 m로 선택한다. 10%의 수표면 지역 또는 10,000 km²이 사용되고 물의 깊이는 20 m이고 부피는 2×10¹¹ m³이다. 토양은 10 cm의 깊이로 잘 혼합된다고 간주되어지고 2%의 유기탄소가 고려된다. 토양의 부피는 9×10⁹ m³이다. 침전물은 물과 같은 지역이고 깊이는 1 cm이며 유기탄소 함량은 4%, 부피는 10⁸ m³이다. 수중 부유물질은 물의 흡수용량을 비교할 때 중요한 매체로 20%의 유기탄소를 함유하고 있고, 5×10⁶의 몰 부피 fraction(약 5 mg/L)으로 나타낸다. 어류는 10⁶의 전체적 임의의 부피 fraction을 포함하고 옥탄을 흡수 용량과 등가인 5%의 지질을 포함한다고 가정한다. 시스템의 특징별로 Level I, II, III로 분류되며 각 Level별 환경매체 면적과 성질 등은 Table 2와 3에 요약되어 있다.^{4,10~12)}

2.2. 모델의 시스템별 특징 및 수식

화학물질의 유형은 다른 매체로의 분배 특징별로 유형(type) 1에서 5로 나뉘지며 (Table 4), 평형기준은 화학물질의 유형별로 퓨가시티(fugacity)와 equivalence로 나뉜다. 분배 특징은 Z값(fugacity capacity)으로 계산되어지는데(Table 5), Z값은 각각 환경매체에 대한 화학물질의 친화성을 표현하는 것으로서 매체에 대한 Z값의 크기가 0일 때 그 화학물질은 그 매체에 대한 분배가 0이거나 무시할 수 있는 경향을 보여준다.^{6,7)} 각 Level별 특징 및 수식은 다음과 같다.^{4,11,12)}

Table 3. Bulk compartment dimensions and volume fraction (v) for Level III¹¹⁾

Bulk compartment		Volume
Air	Total volume	10 ¹⁴ m ³
	Air phase	10 ¹⁴ m ³
	Aerosol phase	2,000 m ³ (v = 2×10 ⁻¹¹)
Water	Total volume	2×10 ¹¹ m ³
	Water phase	2×10 ¹¹ m ³
	Suspended sediment phase	10 ⁶ m ³ (v = 5×10 ⁻⁶)
Soil	Total volume	18×10 ⁹ m ³
	Air phase	3.6×10 ⁹ m ³ (v = 0.2)
	Water phase	5.4×10 ⁹ m ³ (v = 0.3)
Sediment	Total volume	9.0×10 ⁹ m ³ (v = 0.5)
	Water phase	500×10 ⁶ m ³
	Solid phase	400×10 ⁶ m ³ (v = 0.8)
Sediment	Water phase	400×10 ⁶ m ³ (v = 0.8)
	Solid phase	100×10 ⁶ m ³ (v = 0.2)

2.2.1. Level I

Level I에서는 100,000 kg의 화학물질이 유입되고 폐쇄계, 평형상태, 정상상태 (steady-state)이며 분해 및 어류(advection) 현상이 일어나지 않는 시스템이다. Level I 계산은 6개(대기, 물, 토양, 침전물, 어류, 부유물질)의 환경매체에서 수행된다. 농도 C(mol/m³)는 다음식에 의해 Q로 지정된 평형 기준(Equilibrium criteria, fugacity Pa)으로 퓨가시티를 나타낸다.

$$C = QZ \tag{1}$$

화학물질의 배출은 다음식으로 계산된다.

$$Q = M/\Sigma V_i Z_i \tag{2}$$

M은 시스템 내로 유입된 화학물질의 양(mol)이며, V_i는 환경매체 i의 부피(m³)이며, Z_i는 매체 i의 용적(mol/m³ · Pa)이다. 이 계산식은 화학물질이 배출될 것 같은 매체와 각 매체에서의 상대적인 농도를 나타낸다. 또한 생물농축농도에 대한 경향이 정량화 된다.

Table 4. Type of chemicals and their classification¹¹⁾

Chemical category	Z value	Partitioning data required	Examples	Equilibrium criterion
Type 1	Measurable in all phase	Water and fat or lipid solubility, vapor pressure, Henry's law constant, and octanol-water partition coefficient	Most organic chemicals. e.g., chlorobenzene. Hexachlorobenzene, PCBs, etc.	Fugacity
Type 2	Zero or near zero in air, measurable in all other phases	Partition coefficients to solid surfaces and to organic carbon, solubility in water and fat	Cations, anions, and involatile organic chemicals	Aquivalence
Type 3	Zero or near zero in water, measurable in all other phases	Partition coefficient to solids from air or from a pure phase	Very hydrophobic compounds, e.g., long-chain hydrocarbons, silicones, and polymers	Fugacity
Type 4	Zero or near zero in air and water	Sorptive properties from a pure phase to various solids	Large molecular weight substances, polymers, many elemental metals, and inorganic substances such as minerals	Models may not be useful
Type 5	Relevant Z values required for all species in all phases	Partitioning data for all species	Organo-metals, phenols of low pKa	Probably equivalence

Table 5. Summary of Z value equations¹¹⁾

Media	Equations
Air	$Z_1 = 1/RT$
Water	$Z_2 = 1/H = C^S/P^S$
Soil	$Z_3 = Z_2 \cdot \rho_3 \phi_3 K_{OC}/1000$
Sediment	$Z_4 = Z_2 \cdot \rho_4 \phi_4 K_{OC}/1000$
Suspended sediment	$Z_5 = Z_2 \cdot \rho_5 \phi_5 K_{OC}/1000$
Fish	$Z_6 = Z_2 \cdot \rho_6 L K_{OW}/1000$
Aerosol	$Z_7 = Z_1 \cdot 6 \times 10^6 / P_L^S$
Airbulk	$Z_{B1} = Z_1 + 2 \times 10^{-11} Z_7$ (approximately 30 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ aerosols)
Waterbulk	$Z_{B2} = Z_2 + 5 \times 10^{-6} Z_5 + 1 \times 10^{-6} Z_6$ (5ppm solids, 1ppm fish by volume)
Soilbulk	$Z_{B3} = 0.2Z_1 + 0.3Z_2 + 0.5Z_3$ (20% air, 30% water, 50% solids)
Sedimentbulk	$Z_{B4} = 0.8Z_2 + 0.2Z_4$ (80% water, 20% solids)

R = gas constant, 8.314 Pa m³/mol K, T = temperature, C^S = solubility in water(mol/m³), P^S = vapor pressure(Pa), H = Henry's Law Constant (Pa m³/mol), P_L^S = liquid vapor pressure(Pa), K_{OW} = octanol-water partition coefficient, K_{OC} = organic carbon partition coefficient(=0.41 K_{OW}), ρ_i = density of phase i (kg/m³), ϕ_i = mass fraction organic-carbon in phase i (g/g), L = lipid content of fish. (All partition coefficients are dimensionless and all densities are Kg/m³)

2.2.2. Level II

Level II에서는 Level I에서와 같은 6개의 환경매체가 다루어지고 화학물질이 1,000 kg/h의 일정한 속도 E(mol/h)로 연속적으로 배출되는 정상상태이며, 유입과 유출속도가 같은 평형상태인 상황을 기술한다. 이류와 분해속도는 반감기 또는 속도상수 $k(\text{h}^{-1})$ 와 이류유출속도 G(m³/h)와 배출속도E(mol/h)가 고려되어 계산된다.

계산식은 분해(D_{Ri})와 이류D값(D_{Ai})에 의해 수행된다.

$$D_{Ri} = V_i Z_i k_i \quad (3)$$

$$D_{Ai} = G_i Z_i \quad (4)$$

D_{Ri} 는 매체i의 분해 D값을, D_{Ai} 는 이류D값을 나타낸다. D값은 퓨가시티 계산에 대한 mol/Pa · h의 용적(dimension)이고 과정의 속도는 DQ mol/h이다. 토양이나 침전물로부터 이류손실은 없고 평형기준(equilibrium criterion, Q)은 양과 농도로부터 다음과 같이 계산된다.

$$Q = E / (\sum D_{Ai} + \sum D_{Ri}) \quad (5)$$

Level II에서 부가적인 정보는 전체 지속성 또는 잔류 시간(t_0)인데 다음과 같이 계산된다.

$$t_0 = M/E \quad (6)$$

M은 시스템에서 존재하는 moles의 양이다. 반응지속성(t_R)과 이류지속성(t_A)은 다음과 같다.

$$t_R = M / \sum D_{Ri} Q \quad \text{and} \quad t_A = M / \sum D_{Ai} Q \quad (7)$$

$$1/t_0 = 1/t_R + 1/t_A \quad (8)$$

$1/t_0$ 은 전체의 지속성을 나타낸다.

화학물질의 장거리 대기이동에 의한 잠재성은 대기 이류손실의 정도에 의해 나타낸다. 지구단위에서 화학물질의 지속성은 반응 지속성에 의해 나타내는 반면에 지역단위의 지속성은 전체 지속성에 의해 나타낸다.

2.2.3. Level III

주요 환경 매체인 대기, 물, 토양, 침전물 등 4개의 상위매체와 대기 중의 에어로졸과 같은 각 매체에 속한 하위매체를 포함한다. 각각의 매체에 1,000 kg/h의 화학물질이 연속적으로 유입되었을 때의 화학물질 배출을 나타낸다. 정상상태이며 분해와 이류현상이 있고 매체간 이동이 있는 비평형

Table 6. Intermedia transport D values in Level III⁽¹⁾

Environmental media		Process	Equation
From	To		
Air	Water	Total(D ₁₂) Absorption(D _{VW}) Rain dissolution(D _{RW}) Aerosol deposition(D _{QW})	D ₁₂ = D _{VW} + D _{RW} + D _{QW} D _{VW} = A _w /(1/U ₁ Z ₁ + 1/U ₂ Z ₂) D _{RW} = U ₃ A _w Z ₂ D _{QW} = U ₄ A _w Z ₇
Water	Air	Volatilization(D ₂₁)	D ₂₁ = D _{VW}
Air	Soil	Total(D ₁₃) Absorption(D _{VS}) Air boundary layer(D _S) Air phase diffusion in soil(D _A) Water phase diffusion in soil(D _W) Rain dissolution(D _{RS}) Deposition(D _{QS})	D ₁₃ = D _{VS} + D _{RS} + D _{QS} D _{VS} = 1/[1/D _S + 1/(D _W + D _A)] D _S = U ₇ A _S Z ₁ D _A = U ₅ A _S Z ₁ D _W = U ₆ A _S Z ₂ D _{RS} = U ₃ A _S Z ₂ D _{QS} = U ₄ A _S Z ₇
Soil	Air	Volatilization(D ₃₁)	D ₃₁ = D _{VS}
Water	Sediment	Diffusion plus deposition(D ₂₄)	D ₂₄ = D _{WS} + D _D = U ₈ A _w Z ₂ + U ₉ A _w Z ₅
Sediment	Water	Diffusion plus resuspension(D ₄₂)	D ₄₂ = D _{WS} + D _R = U ₈ A _w Z ₂ + U ₁₀ A _w Z ₄
Soil	Water	Runoff of water and solids(D ₃₂)	D ₃₂ = D _{SW} + D _{SS} = U ₁₁ A _S Z ₂ + U ₁₂ A _S Z ₃

A_w : the air-water area(m²), A_S : the soil horizontal area(m²)

Table 7. Intermedia transport parameters(U) in Level III⁽¹⁾

U	m/h	m/year
Air side, air-water MTC, k _A or U ₁	5	43,800
Water side, air-water MTC, k _w or U ₂	0.05	438
Rain rate, U _R or U ₂	10 ⁻⁴	0.876
Aerosol wet and dry deposition ^a	6×10 ⁻¹⁰	5.256×10 ⁻⁶
Soil-air phase diffusion MTC, k _{SA} or U ₅	0.02	175.2
Soil-water phase transport MTC, k _{SW} or U ₆	10 ⁻⁵	0.0876
Soil-air boundary layer MTC, k _S or U ₇	5	43,800
Sediment-water MTC, k _T or U ₈	10 ⁻⁴	0.876
Sediment deposition, U _D or U ₀ ^a	5.0×10 ⁻⁷	0.00438
Sediment resuspension, U _{RE} or U ₁₀ ^a	2.0×10 ⁻⁷	0.00175
Soil-water runoff, U _{sw} or U ₁₁	5×10 ⁻⁵	0.438
Soil-solids runoff, U _{ss} or U ₁₂	10 ⁻⁸	0.0000876

MTC is mass transfer coefficient.

^a Velocities U₄, U₉ and U₁₀ are the volumetric rate of particle transport, m³ of particles per hour divided by the horizontal area.

상태의 시스템이다. 일곱 개의 다매체 이동 D값(Table 6)을 계산하기 위해 Z값(Table 5)과 다매체 이동 변수(Table 7)가 이용되며 4개의 상위 매체에 대한 물질수지식은 Table 8에 나타내었다.

2.3. 자료입력 및 배출량 계산

EQC 모델을 운용하기 위해 필요한 자료로 Level I의 경우 화학물질의 분자량, 온도, 수용해도, 증기압, 옥탄올-물 분배계수, 녹는점을 입력하고 Level II와 III의 경우 위의 입력 자료 외에 대기, 물, 토양, 침전물에서의 반감기 자료가 필요하다. 또한 벤조일 퍼록사이드는 모든 매체로 분배하는 휘발성 유기용매이므로 유형 1로 분류하였고 유형 1물질의 평

Table 8. Level III mass balance equations in units of mol/h and relative solutions⁽¹⁾

Compartment	Mass balance equations
Air	E ₁ +Q ₂ D ₂₁ +D ₃₁ = Q ₁₁
Water	E ₂ +Q ₁ D ₁₂ +Q ₃ D ₃₂ +Q ₄ D ₄₂ = Q ₂ D _{T2}
Soil	E ₃ +Q ₁ D ₁₃ = Q ₃ D _{T3}
Sediment	E ₄ +Q ₂ D ₂₄ = Q ₄ D _{T4}
Where	D _{T1} = D _{R1} +D _{A1} +D ₁₂ +D ₁₃ D _{T2} = D _{R2} +D _{A2} +D ₂₁ +D ₂₄ D _{T3} = D _{R3} +D _{A3} +D ₃₁ +D ₃₂ D _{T4} = D _{R4} +D _{A4} +D ₄₂
Solution	
Water	Q ₂ = (E ₂ +J ₁ J ₄ /J ₃ +E ₃ D ₃₂ +E ₄ D ₄₂ /D _{T4})/(D _{T2} -J ₂ J ₄ /J ₃ -D ₂₄ D ₄₂ /D _{T4})
Air	Q ₁ = (J ₁ +Q ₂ J ₂)/J ₃
Soil	Q ₃ = (E ₃ +Q ₁ D ₁₃)/D _{T3}
Sediment	Q ₄ = (E ₄ +Q ₂ D ₂₄)/D _{T4}
where	J ₁ = E ₁ /D _{T1} +E ₃ D ₃₁ /(D _{T3} D _{T1}) J ₂ = D ₂₁ /D _{T1} J ₃ = 1-D ₃₁ D ₁₃ /(D _{T1} D _{T3}) J ₄ = D ₁₂ +D ₃₂ D ₁₃ /D _{T3}

형기준인 퓨가시티에 따랐다. 모델입력자료는 모델결과치의 신뢰성 제고를 위하여 실험결과와 신뢰성 있는 문헌자료를 입력하였다(Table 9).³⁾

EQC 모델의 각 Level에 따른 화학물질의 매체별 배출량은 필요한 자료를 입력하면 자동으로 운용되며 Level III의 경우 시스템 내로 유입되는 화학물질의 양을 임의적으로 변화시킬 수 있다. 본 연구에서는 Level III에서 매체별 유입량 변화에 4가지 유입 시나리오를 정하여 모델을 운용하였으며 유입 Scenario는 다음과 같다. Scenario I은 대기 1,000 kg/h, 물 0 kg/h, 토양 0 kg/h인 경우, Scenario II는 대기 0 kg/h, 물

Table 9. Physical-chemical data and half-lives for benzoyl peroxide³⁾

Input parameters	Value
Molecular mass(g/mol)	242.23
Temperature(°C)	25
Water solubility(g/m ³)	9.1
Vapor pressure(Pa)	0.00929
Log P _{ow}	3.43
Melting point(°C)	105
Half-life in air(h)	36
Half-life in water(h)	5
Half-life in soil(h)	10 ¹¹ (negligible)
Half-life in sediment(h)	10 ¹¹ (negligible)

1,000 kg/h, 토양 0 kg/h인 경우, Scenario III는 대기 0 kg/h, 물 0 kg/h, 토양 1,000 kg/h인 경우, Scenario IV는 대기 1,000 kg/h, 물 1,000 kg/h, 토양 1,000 kg/h인 경우로 하였다. 각 Level에 대한 결과는 그림으로 기술되며 대표적으로 Level III의 Scenario IV를 Fig. 1에 나타내었다.

3. 결과 및 고찰

벤조일 퍼옥사이드를 유형 1 물질로 분류하여, 다매체 환경 중 거동 및 배출을 Level I, II 및 III에서 예측한 결과는 다음과 같고 그 내용은 Table 10에서 14에 나타내었다.

3.1. Level I

Table 10. Estimated results for benzoyl peroxide in Level I calculation

Compartment	Z value (mol/m ³ · Pa)	Concentration (g/m ³)	Amount	
			(kg)	(%)
Air	4.03×10 ⁻⁴	1.43×10 ⁻⁸	1430	1.430
Water	4.044	1.43×10 ⁻⁴	28668	28.7
Soil	214	7.59×10 ⁻³	68333	68.3
Sediment	428	0.015	1519	1.519
Suspended sediment	1339	0.047	47.5	0.047
Fish	544	0.019	3.858	3.86×10 ⁻³

(Fugacity = 0.146 μPa), unit = mg/kg

Table 11. Estimated results for benzoyl peroxide in Level II calculation

Compartment	Amount		Concentration (g/m ³)	D value		Loss		Removal (%)
	(kg)	(%)		Reaction(mol/Pa · h)	Advection(mol/Pa · h)	Reaction(kg/h)	Advection(kg/h)	
Air	354	1.4	3.54×10 ⁻⁹	7.77×10 ⁸	4.03×10 ⁸	6.807	3.536	1.035
Water	7089	28.7	3.54×10 ⁻⁵	1.12×10 ¹¹	8.09×10 ⁸	983	7.089	99.009
Soil	16898	68.3	1.88×10 ⁻³	13.4	0	1.17×10 ⁻⁷	0	1.17×10 ⁻⁸
Sediment	376	1.5	3.76×10 ⁻³	0.297	8.57×10 ⁵	2.60×10 ⁻⁹	7.51×10 ⁻³	7.51×10 ⁻⁴
Suspended sediment			0.012					
Fish			4.77×10 ⁻³					

(Fugacity = 0.036 μPa), unit = mg/kg

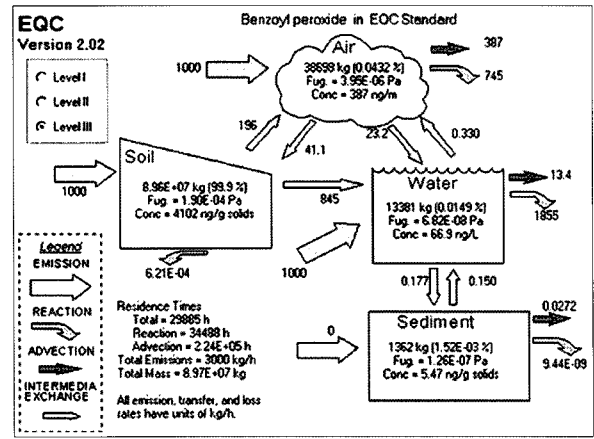


Fig. 1. Results for benzoyl peroxide in level III calculation ; Scenario 4 diagram.

Level I에서는 100,000 kg의 벤조일 퍼옥사이드가 100,000 km²인 환경에 유입되었을 때 매체간의 배출량을 예측해주며 그 결과는 Table 10에 나타내었다. 유입된 벤조일 퍼옥사이드의 대부분은 토양(68.3%)과 물(28.7%)에 배출될 것으로 예측되었고 그 농도는 각각 7.59×10⁻³mg/kg과 1.43×10⁻⁴g/m³이었다. Fugacity는 0.146 μPa로 계산되었고 대기와 침전물의 배출은 1.4%와 1.5%로 소량이었다.

3.2. Level II

Level II에서는 벤조일 퍼옥사이드가 1,000 kg/h으로 연속적으로 유입될 때 각 매체별 배출량을 예측해주며 그 결과는 Table 11에 나타내었다. 각 매체에 대한 배출은 Level I과 동일한 형태를 보여 벤조일 퍼옥사이드는 대부분 토양(68.3%)

Table 12. Estimated results for benzoyl peroxide in Level III calculation; fugacity, concentration and amounts

Emission medium and rate of emissions(kg/h)	Fugacity(Pa)				Concentration(g/m ³)				Amounts(kg)			
	Air	Water	Soil*	Sediment	Air	Water	Soil	Sediment	Air (%)	Water (%)	Soil (%)	Sediment (%)
Air (1,000)	3.33×10 ⁻⁶	1.74×10 ⁻⁹	6.30×10 ⁻⁶	3.22×10 ⁻⁹	3.26×10 ⁻⁷	1.71×10 ⁻⁶	0.165	6.94×10 ⁻⁵	32,560 (1.1)	341 (0.01)	2.98×10 ⁶ (98.9)	34.7 (0.001)
Water (1,000)	5.87×10 ⁻¹⁰	3.65×10 ⁻⁸	1.11×10 ⁻⁹	6.77×10 ⁻⁸	5.75×10 ⁻¹¹	3.58×10 ⁻⁵	2.92×10 ⁻⁵	1.46×10 ⁻³	5,748 (0.07)	7,162 (6.2)	525 (6.2)	729 (8.7)
Soil (1,000)	6.26×10 ⁻⁷	3.00×10 ⁻⁸	1.83×10 ⁻⁴	5.55×10 ⁻⁸	6.13×10 ⁻⁸	2.94×10 ⁻⁵	4.813	1.20×10 ⁻³	6,132 (0.007)	5,878 (0.007)	8.66×10 ⁷ (100)	598 (0.0007)
All three (1,000+1,000+1,000)	3.95×10 ⁻⁶	6.82×10 ⁻⁸	1.90×10 ⁻⁴	1.26×10 ⁻⁷	3.87×10 ⁻⁷	6.69×10 ⁻⁵	4.978	2.72×10 ⁻³	38,698 (0.04)	13,381 (0.02)	8.96×10 ⁷ (99.9)	1,362 (0.001)

* unit = mg/kg

과 물(28.7%)에 배출될 것으로 예측되었다. 토양에서 반응으로 인한 손실은 전체 손실량의 1.17×10⁻⁸%로 미약하였고 물에서의 반응 손실량이 983 kg/h, 이류 손실량이 7.089 kg/h로 전체 손실량의 99%를 차지하였다. 또한 대기와 침전물에서의 배출량은 비슷하지만 대기에서 이류와 반응 손실량은 각각 6.8 kg/h와 3.5 kg/h로 전체 손실량의 1%를 차지해 반응에 의한 손실량으로 보아 벤조일 퍼록사이드가 대기이동의 잠재성을 가지고 있다고 판단할 수 있었다. 전체 잔류시간은 24.7시간이었고 반응에 의한 잔류시간은 25시간, 이류에 의한 잔류시간은 96.9일로 전체 잔류시간으로 보아 이 화학물질이 Level II 시스템에서 지속성이 없다고 판단할 수 있었다.

3.3. Level III

Level III는 화학물질의 거동에서 다매체간의 이동을 보여주는 가장 이상적인 시스템이다. Scenario I, 2, 3 및 4에 대한 결과를 Fig. 1과 Table 12, 13 및 14에 나타내었다.

3.3.1. Scenario I

Scenario I에서는 벤조일 퍼록사이드 1,000 kg/h이 대기 중으로 유입되었을 때 각 매체로의 배출을 나타낸 것으로서, 대부분의 벤조일 퍼록사이드가 0.165 g/m³의 농도로 토양(98.9%)으로 배출될 것을 알 수 있다(Table 12). Table 14는 매체간의 이동속도를 보여주는데 대기에서 토양으로 34.6 kg/h, 토양에서 물로 28.1 kg/h의 속도로 이동함을 보여준다. 주요한 손실은 대기에서의 반응손실 627 kg/h와 이류손실 326 kg/h이었으며 전체적인 잔류시간은 125일이었고 반응잔류시간은 186일, 이류잔류시간은 385일이었다(Table 13).

3.3.2. Scenario II

Scenario II에서는 물에 벤조일 퍼록사이드가 1,000 kg/h로 유입되었을 때 배출을 예측한다. 이때는 대부분의 벤조일 퍼록사이드가 7,162 kg이 물로, 729 kg이 침전물로, 525 kg이 토양에 배출될 것으로 예측되었으며 대기로의 배출은 소량

임을 알 수 있었다(Table 12). 손실은 대부분 물에서 이루어졌고 반응손실은 993 kg/h, 이류손실은 7.2 kg/h이었다. 전체 잔류시간은 8.4시간이었으며 반응잔류시간은 8.4시간, 이류 잔류시간은 49일이었다(Table 13). 물에서 대기로의 이동속도는 0.18 kg/h이었고 물에서 침전물로의 반응속도는 0.095 kg/h, 침전물에서 물로의 이동속도는 0.08 kg/h이었다(Table 14).

3.3.3. Scenario III

Scenario III은 토양에 벤조일 퍼록사이드가 1,000 kg/h로 유입되었을 때의 배출을 예측해 주는데 8.66×10⁷ kg이 토양으로 배출되는 것이 예측되었다(Table 12). 대기와 물에서의 배출량은 비슷하였으며 침전물에서의 배출은 소량이었다. 토양에서 물로의 이동속도는 817 kg/h이었고 토양에서 대기는 189 kg/h, 대기에서 토양은 6.5 kg/h, 대기에서 물로는 3.7 kg/h이었다(Table 14). 주요한 반응손실은 물과 대기에서 이루어졌고 속도는 815 kg/h와 118 kg/h이었으며 주요한 이류손실은 대기에서 61.3 kg/h, 물에서 5.9 kg/g의 속도로 이루어졌다(Table 13). 전체잔류시간은 9.89년이었고 반응잔류시간은 10.6년, 이류잔류시간은 147.3년으로 벤조일 퍼록사이드는 다른 매체에서보다 토양으로 유입되었을 때 지속성이 있다고 볼 수 있었다.

3.3.4. Scenario IV

Scenario IV는 대기, 물, 토양의 각 매체에 벤조일 퍼록사이드가 각각 1,000 kg/h로 유입되었을 때 즉, 전체 환경 중의 유입량이 3,000 kg/h일 때를 가정하였다. 각 매체에 동시에 유입된 벤조일 퍼록사이드는 주로 99.9%가 토양에 배출되는 것으로 예측되었다(Fig. 1). 이때 토양으로 배출한 벤조일 퍼록사이드 8.96×10⁷ kg은 토양에만 100% 분배되었을 때 8.66×10⁷ kg, 물로만 100% 분배되었을 때 525 kg과 대기로 100% 분배되었을 때 2.98×10⁶ kg이 합쳐진 값이다(Table 12). 전체잔류시간은 3.4년, 반응잔류시간은 3.9년, 이류잔류시간은 56일로 벤조일 퍼록사이드가 환경 중에 잔류성이 있는 화학물질이라고 평가할 수 있었다(Table 13).

Table 13. Estimated results for benzoyl peroxide in Level III calculation; loss and residence time

Emission medium and rate of emissions(kg/h)	Loss, Reaction(Pa)				Loss, Advection(g/m ³)				Overall residence time(h)	Reaction residence time(h)	Advection residence time(h)
	Air	Water	Soil	Sediment	Air	Water	Soil	Sediment			
Air(1,000)	627	47.3	2.06×10 ⁻⁵	2.41×10 ⁻¹⁰	326	0.341	0	6.94×10 ⁻⁴	3009	4464	9232
Water(1,000)	0.111	993	3.64×10 ⁻⁹	5.05×10 ⁻⁹	0.057	7.162	0	0.015	8.422	8.483	1164
Soil(1,000)	118	815	6.00×10 ⁻⁴	4.15×10 ⁻⁹	61.3	5.878	0	0.012	86,638	92,880	1.29×10 ⁶
All three (1000+1000+1000)	745	1855	6.21×10 ⁻⁴	9.44×10 ⁻⁹	387	13.4	0	0.027	29,885	34,488	2.24×10 ⁵

Table 14. Estimated results for benzoyl peroxide in Level III calculation; intermedia rate of transport

Emission medium and rate of emissions(kg/h)	Intermedia Rate of Transport(kg/h)						
	Air to water	Air to soil	Water to air	Water to sediment	Soil to air	Soil to water	Sediment to water
Air(1,000)	19.5	34.6	8.41×10 ⁻³	4.52×10 ⁻³	6.508	28.1	3.83×10 ⁻³
Water(1,000)	3.45×10 ⁻³	6.10×10 ⁻³	0.177	0.095	1.15×10 ⁻³	4.96×10 ⁻³	0.080
Soil(1,000)	3.681	6.512	0.145	0.078	189	817	0.066
All three (1000+1000+1000)	23.2	41.1	0.330	0.177	196	845	0.150

본 연구의 결과는 우리나라에서의 환경농도가 아니라 일 반적인 수준을 나타내는 것이므로, 대기나 물의 면적 및 잔류시간 등과 같은 실제 우리나라의 지역 특이적인 환경매개 변수를 이용한 연구와 국내에서 벤조일 퍼옥사이드의 배출 및 모니터링 연구를 수행하여 실제 지역에 대해 모델을 적용하여 모델 결과들과 실제 농도와의 차이에 관한 연구 등 모델의 정확도 개선을 위하여 앞으로의 지속적인 연구가 필요하리라 본다.

4. 결론

벤조일 퍼옥사이드는 OECD에서 대량생산화학물질로서 초기위해성평가를 수행하고 있는 물질 중의 하나로 수생생물에 대해 독성이 높다고 평가되는 물질이다. 이 물질에 대한 환경 중의 잔류량이나 노출영향에 대한 평가연구가 이루어 지지 않아 본 연구에서는 벤조일 퍼옥사이드의 환경 중의 거동 특성을 대표적으로 제시하여 환경 위해성평가에 이용 될 기초자료가 되고자 하였다. 다매체 환경거동 모델인 EQC 모델을 이용하여 각 매체의 특징별로 모델을 수행한 결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

- 1) Level I에서는 100,000 kg의 벤조일 퍼옥사이드가 100,000 km²인 환경에 유입되었을 때 벤조일 퍼옥사이드의 대부분은 토양(68.3%)과 물(28.7%)로 배출되는 것으로 예측되었다.
- 2) Level II에서는 벤조일 퍼옥사이드가 1,000 kg/h로 연속적으로 유입될 경우 대부분은 토양(68.3%)과 물(28.7%)로 배출될 것으로 예측되었다.
- 3) 가장 이상적인 시스템인 Level III에서 벤조일 퍼옥사이드가 대기에 1,000 kg/h로 유입되었을 때 대부분은 토양(98.9%)에 존재하고, 물에 1,000 kg/h로 유입되었을 때 대부

분은 물(85%)에 존재한다고 평가되었다. 또한 토양에 1,000 kg/h로 유입되었을 때 토양에 거의 100% 존재하고 각 매체에 동시에 1,000 kg/h로 유입되었을 때 토양으로 99.9% 배출된다고 평가되었다. 이때 환경 중 잔류시간이 3.4년으로 계산되어 벤조일 퍼옥사이드가 잔류성이 있는 화학물질이라고 평가할 수 있었다.

참고문헌

1. 환경부, 환경백서, pp. 581~582(2004).
2. Organisation for Economic Co-operation and Development, Co-operation on the Investigation of Existing Chemicals, http://www.oecd.org/department/0,2688,en_2649_34379_1_1_1_1_1,00.html(2003).
3. 국립환경연구원, 대량생산화학물질 초기위해성평가: 벤조일 퍼옥사이드, 행정간행물 등록번호 11-1480083-000278-01(2005).
4. Mackay, D., Guardo, A. D., Paterson, S., and Cowan, C. E., "Evaluating the environmental fate of a variety of types of chemicals using the EQC model," *Environmental Toxicology and Chemistry*, **15**(9), 1627~1637 (1996).
5. Cowan, C. E., Versteeg, D. J., Larson, R. J., and Kloepper-Sams, P. J., "Integrated approach for environmental assessment of new and existing substances," *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, **21**, 3~31(1995).
6. Meent, D. V. D., De Bruijn, J. H. M., De Leeuw, F. A. A. M., De Nus, A. C. M., Jager, D. T. and Vermeire, T. G., Risk assessment of chemicals: an introduction, van Leeuwen, C. J. and Hermens, J. L. M.(Eds), Kluwer Aca-

- demic Publishers, Dordrecht /Boston /London, pp. 122 ~ 129(2001).
7. Mackay, D., Paterson, S., and Shiu, W. Y., "Generic models for evaluating the regional fate of chemicals," *Chemosphere*, **24**(6), 695 ~ 717(1992).
 8. Cowan, C. E., Mackay, D., Feijtel, T. C. J., Meent, D. V. D., Guardo, A. D., Davies, J., Mackay, N., The multimedia fate model: a vital tool for predicting the fate of chemicals, proceedings of a workshop organized by the Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC), SETAC PRESS, 1010 North 12th Avenue, Pensacola, Florida 32501, USA, pp. 21 ~ 46(1995).
 9. Cousins, I. T., Staples, C. A., Klečka, G. M., and Mackay, D., "A multimedia assessment of the environmental fate of bisphenol A," *Human and Ecological Risk Assessment*, **8**(5), 1107 ~ 1135(2002).
 10. 통계청홈페이지, [http://kosis.nso.go.kr/cgi-bin/sws_999.cgi?ID=DT_1A1 &IDTYPE= 3&A_LANG=1&FPUB=3&ITEM=T1](http://kosis.nso.go.kr/cgi-bin/sws_999.cgi?ID=DT_1A1&IDTYPE=3&A_LANG=1&FPUB=3&ITEM=T1)(2005).
 11. Mackay, D., Shiu, Y. W., and Ma, K. C., Illustration handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals vol III, volatile organic chemicals, Lewis Publishers, pp. 18 ~ 32(1993).
 12. Mackay, D., Multimedia environmental models-the fugacity approach. CRC Press LLC, 2000 N.W. Corporate Blvd., Boca Raton, Florida 33431(2001).