

## 불특정 오염부지에 대한 잠재적 오염물질 선정 및 물리·화학적 특성 정보화

김윤지<sup>1</sup> · 김연태<sup>2</sup> · 한원식<sup>1\*</sup> · 이승학<sup>3</sup> · 정성욱<sup>4</sup>

<sup>1</sup>연세대학교 지구시스템학과

<sup>2</sup>연세대학교 자연과학연구원

<sup>3</sup>한국과학기술연구원 물자원순환연구센터

<sup>4</sup>한국기초과학지원연구원

## Identification of Workflow for Potential Contaminants and their Physicochemical Properties

Yoon Ji Kim<sup>1</sup> · Youn-Tae Kim<sup>2</sup> · Weon Shik Han<sup>1\*</sup> · Seunghak Lee<sup>3</sup> · Sungwook Choung<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Department of Earth System Sciences, Yonsei University

<sup>2</sup>Institute of Natural Sciences, Yonsei University

<sup>3</sup>Water Cycle Research Center, Korea Institute of Science and Technology (KIST)

<sup>4</sup>Korea Basic Science Institute (KBSI)

### ABSTRACT

Among numerous chemicals used globally, the number of emerging contaminants is increasing. Numerical modeling for contaminant fate and transport in the subsurface is critical to evaluate environmental and health risk. In general, such models require physicochemical properties of contaminants as input values, which can be found in numerous chemical databases (DB). However, there exist lack of information specific to recently emerging contaminants, which requires estimation of physicochemical properties using regression programs. The purpose of the study is to introduce the workflow for identifying physicochemical properties of potential contaminants utilizing numerous chemical DBs, which frequently lists up potential contaminants for estimating chemical behavior. In this review paper, details of several chemical DBs such as KISChem, TOXNET, etc. and regression programs including EPI Suite<sup>TM</sup>, ChemAxon, etc. were summarized and also benefit of using such DBs were explained. Finally, a few examples were introduced to estimate predominant phase, removal ratio, partitioning, and eco-toxicities by searching or regressing physicochemical properties.

**Key words :** Physicochemical property, Subsurface contamination, Regression program, Chemical database, Fugacity

### 1. 서 론

산업기술의 발전에 따라 인류가 사용하고 있는 화학물질의 종류 및 유통량은 매년 증가하고 있다. 국내에서는 만 육천여 종의 화학물질이 유통되고 있으며, 미국의 TSCA(Toxic Substances Control Act) 인벤토리에는 팔만 오천여 종, 유럽연합 인벤토리에는 십만여 종의 화학물질이 등록되어 있다(ECHA, 2019; NICS, 2019; US EPA, 2019). 이 중 유해성이 입증되어 사용이 중지되거나, 유통

에 제한을 받는 유해화학물질이 늘어나고 있으며(ME, 2018; The Stockholm Convention, 2019; Zhang et al., 2016), 유해성에 대한 의문이 제기되는 신종유해물질(emerging contaminants) 또한 지속적으로 발생하고 있다(González-Acevedo et al., 2019; Gurke et al., 2015; Lee et al., 2010).

인류, 생태계 및 환경 내 산재하는 화학물질의 위해성을 평가하기 위해서는 물질 자체의 독성과 함께, 환경 중 이동 및 거동 특성에 대한 정보가 필요하다(Lv et al.,

\*Corresponding author : hanw@yonsei.ac.kr

Received : 2019. 2. 1 Reviewed : 2019. 3. 29 Accepted : 2019. 4. 19

Discussion until : 2019. 6. 29

2018; Straub et al., 2019; Tran et al., 2018). 그러나, 화학물질은 그 종류가 매우 다양할 뿐만 아니라, 특히 최근 부각되고 있는 신중유해물질의 경우 환경 매질 내 분석법 및 환경규제 자체가 수립되어 있지 않거나(Caldwell et al., 2019; Rodríguez-Navas et al., 2017) 존재하는 농도가 낮아 현재의 분석기술로는 정량을 하기 힘든 경우가 존재한다(Martín-Pozo et al., 2019; Białk-Bielińska et al., 2016).

유해한 또는 유해성이 의심되는 화학물질이 광범위한 지중 환경에 노출되었을 때, 정밀한 시료 채취 및 분석의 방법을 이용한다 하더라도 실제 유해화학물질의 농도 분포를 확인하는데 현실적인 제약이 있을 수 있다. 보안상(군사기지 등) 또는 사유지 등의 이유로 접근성에 대한 문제에 당면할 수 있고, 분석 비용 및 시간의 문제로 인해 우선순위에 따라 오염물질의 분석 항목을 선택해야할 수도 있다. 이런 경우에는 시나리오에 기반한 모사(시뮬레이션)기법을 적용하여 광범위한 오염 부지의 평가를 수행할 수 있다(Henderson et al., 2009; Vasudevan et al., 2016).

모델링은 특정 시점 또는 지점의 자료를 이용해 광범위한 오염 부지를 upscaling하는 기술로서, 오염원의 추적, 향후 오염물질 거동의 예측 등에 널리 사용되고 있다(Hansen et al., 2018; Li et al., 2017; Steefel et al., 2005). 모델링을 통한 지중환경 내 오염물질의 거동 특성을 평가하기 위해서는 다양한 입력값이 필요하다. 특히, 지하 매질에 대한 정보와 함께 오염물질의 물리화학적 특성값이 필요하다(Lv et al., 2018; Williams et al., 2017; Yue and Li, 2013). 이동 및 거동 특성 평가를 위해 자주 사용되는 물리화학적 특성값과 그에 대한 설명을 Table 1에 요약하였다. 특성값은 해당 화학물질에 대한 실험결과로부터 얻어지며, 신뢰성 있는 결과값이 많을수록 정밀도 및 정확도가 높아진다. 신뢰성 있는 특성값 산출

및 표준화 작업을 위해서 국가차원의 시험소를 지정, 운영하기도 하는데, 우리나라의 경우 국내 우수실험실(Good Laboratory Practice, GLP) 18개 기관이 화학물질안전관리 시스템에 등록되어 있다(NIER, 2019). 이 중 분배계수(distribution coefficient), 액체크로마토그래피법에 의한 토양 및 하수 침전물의 흡착계수(sorption coefficient), 회분식 평형방법을 사용한 흡착(sorption) 및 탈착(desorption), pH에 따른 가수분해(hydrolysis), 물용해도(solubility)를 평가할 수 있는 기관은 5곳이다. 또한, 방대한 양의 물리화학적 특성값을 관리하기 위해, 다수의 기관에서 화학물질 데이터베이스(database, DB)를 구축하여 결과값을 제공하고 있다. 그러나, 실험값이 없는 오염물질의 경우(예, 신중유해물질), 추정프로그램(regression program)을 통해 필요한 물리화학적 특성값을 산출해야만 한다.

본 논문에서는 직접적인 오염 현황 조사가 어려운 오염 지역에서도 적용할 수 있도록 보편적인 잠재오염물질을 도출하고, 지중 환경 내 거동을 예측하기 위해 필요한 오염물질의 물리·화학적 특성값을 다양한 화학물질 DB 및 추정프로그램을 이용하여 정보화하는 전 과정에 대한 연구흐름도(work flow)를 Fig. 1과 같이 제안하였다. 특히, 수집된 오염물질의 물리·화학적 특성값은 지중 환경 내에서 잠재오염물질의 존재 형태, 분배 비율 등 거동 특성과 환경 독성을 예측, 평가하는 데 사용될 수 있다.

## 2. 오염가능물질 도출을 위한 기초조사

첫번째 단계로, 잠재 오염지역의 지중 환경 내에서 위해성 평가가 필요한 오염가능물질을 선정한다. 오염 부지에 대하여 정부기관에서 공개한 오염 현황 자료가 있는지 검색하고, 오염유발시설 및 자연기원 오염물질의 존재 가능성 등에 대한 기초조사를 실시하여, 잠재오염물질 목록을 작성한다.

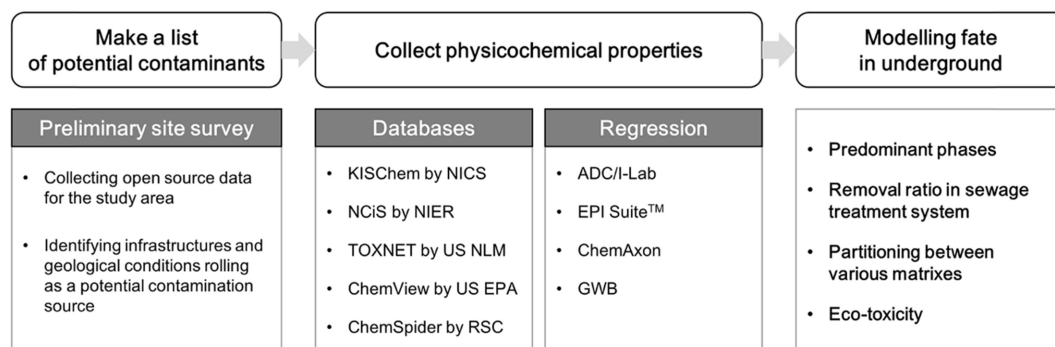


Fig. 1. Work flow for identifying physicochemical properties of potential contaminants.

**Table 1.** Explanation about physicochemical properties frequently used in EPI Suite™ (US EPA, 2012a)

Parameter	Explanation
Kow	n-octanol/water partition coefficient; Ratio of concentration of a chemical in n-octanol and water at equilibrium (specified temperature)
BBB	Blood-brain barrier; Selective semipermeable of brain In this case, BBB means brain penetration ratio of chemicals
Koc	Soil organic carbon-water partitioning coefficient; Chemical partition on solid and solution phase in soil
Koa	Octanol-air partition coefficient; Ratio of a chemical's concentration in octanol to the concentration in air at equilibrium
Kp	Dermal permeability coefficient; Principal factor used to estimate movements of substances through the skins
DAD	Dermal absorbed dose
DAevent	Dermally absorbed dose per event
log D	$\log D_{\text{oct/wat}}$ ; Distribution ratio = $\log \frac{[\text{solute}]_{\text{octanol}}}{[\text{solute}]_{\text{water}}^{\text{ionized}} + [\text{solute}]_{\text{water}}^{\text{neutral}}}$
BCF	Bioconcentration factor; Ratio of the chemical concentration in an organism to the concentration of water
BAF	Bioaccumulation factor; Ratio of the contaminant in an organism to the concentration in the environment (steady state)
TEQ	Toxicity equivalency; Toxicity weighted mass of dioxins and PCBs in terms of 2,3,7,8-TCDD

### 2.1. Open source data 수집

확정된 연구 지역이 존재하는 경우, 환경부 또는 통계청 등의 정부기관에서 공개한 자료가 있는지 확인한다. 환경부 홈페이지(<http://www.me.go.kr/home/web/main.do>)의 알림/홍보-보도-해명 탭에서는 오염 의혹에 대한 환경부의 공식적인 입장 및 해명 자료나, 민간인의 출입이 제한되는 곳의 조사 자료를 얻을 수 있다. 환경통계포털(<http://stat.me.go.kr/nesis/main.do>)에서는 수질 현황, 화학물질 유통 현황 등 환경에 관한 통계자료를 열람할 수 있다. 정부 공개자료를 통해 확인된 오염물질은 연구 지역의 지중 환경 오염물질 목록에 우선적으로 포함시키고, 필요 시 규제 농도 이하로 검출된 물질을 잠재오염물질 목록에 포함시킨다.

### 2.2. 오염유발시설 선정

지중 환경 내 잠재오염물질 선정을 위해 연구 지역 또는 주변지역에서 오염유발 가능 시설들을 조사한다. 연구 지역 및 인근의 도면을 구할 수 있는 경우, 도면에서 확인된 오염유발 가능 시설을 대상으로 조사한다. 연구 지역이 확정되지 않은 경우, 오염유발시설을 가정한 후 잠재오염물질을 도출하는 방법을 적용할 수 있다. 오염유발 가능 시설에는 석유화학, 철강 산업 단지 등 다량의 화학물질이 유통되는 전반적인 시설들이 모두 해당되며(ME, 2018), 선행된 연구를 통해 오염원으로 작용할 수 있다고 확인된 시설을 추가한다. 다이옥신(dioxins) 및 퓨란(furans)과 같은 불완전연소산물의 배출원으로 보고된 쓰레기 소각시설(NIER, 2006; Zhang et al., 2016), 하수

를 통해 집적된 잔류성 의약품질이 충분히 제거되지 않은 채 방류될 수 있는 하수처리장(Caldwell et al., 2019; Gurke et al., 2015; Liu and Wong, 2013) 등이 이에 해당한다.

### 2.3. 잠재적 오염물질 선정

Open source data를 통해 검출이 확인된 오염물질과 함께, 선정된 오염유발시설에서 검출 가능성이 있다고 판단되는 화학물질을 잠재오염물질 목록에 추가한다. 오염유발시설에 따라 고려해야 하는 대표적 오염물질을 Table 2에 요약하였다.

폐기물을 소각하는 소각장과 쓰레기를 태워 열에너지를 생산하는 자원회수 시설에서는 불완전 연소로 인한 다이옥신류(NIER, 2006; Seoul Metropolitan Government, 2014; Zhang et al., 2016) 및 다환성방향족탄화수소(polycyclic aromatic hydrocarbons, PAHs)(Yasuda and Takahashi, 1998; Lombardi and Carnevale, 2018)의 배출을 추정할 수 있다. 국립환경과학원에서 발간한 “폐기물 소각시설 주변지역 환경 중 다이옥신 잔류실태조사 보고서”(NIER, 2006)에 따르면, 울산공단지역 등 공업지역의 소각시설 주변 토양에서는 다이옥신류가 최대 153.229 pg I-TEQ/g dry 농도까지 검출되었다고 보고된다.

하수처리장의 경우에는, 잔류성 의약품질과 향수, UV차단제 등 개인관리용품 물질(Pharmaceuticals and Personal Care Products, PPCPs)(Caldwell et al., 2019; Gurke et al., 2015; Lee et al., 2010; Liu and Wong, 2013), 미세플라스틱(Sun et al., 2019) 등이 하수처리과정에서

**Table 2.** Significant contaminants reported in each contamination source

Source of contamination	Reported contaminants	References
Waste incinerating facility	Dioxins and furans	NIER, 2006; Zhang et al., 2016
	PAHs	Yasuda and Takahashi, 1998
Resource recovery facility	Dioxins, Nitrogen oxides (NOx), etc.	Lombardi and Carnevale, 2018; Seoul Metropolitan Government, 2014
Wastewater treatment plant	PPCPs	Caldwell et al., 2019; Curke et al., 2015; Lee et al., 2010; Liu and Wong, 2013
	Heavy metals such as Cu, Zn, etc.	ME, 2007
	PAHs	Ozaki et al., 2015
	PCBs	Needham and Ghosh, 2019
	PFCs	Arvaniti and Stasinakis, 2015; Park et al., 2012
	Microplastics	Sun et al., 2019

**Table 3.** Summary on databases for hazardous chemicals

Database	Feature
KISChem	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Information of chemicals regulated by Chemical Management Act, Safety Control of Dangerous Substances Act, Industrial Safety and Health Act, and High Pressure Gas Safety Management Act</li> <li>• Information of harmful chemicals circulated in Republic of Korea</li> <li>• Physiochemical properties, accident risk information, exposure standard</li> </ul>
NCiS	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Information of chemicals classified by 9 standards (toxic substances, persistent organics, etc.)</li> <li>• Chemical structure, CAS No., maleficent information, and so on.</li> <li>• Offers experimental data</li> </ul>
TOXNET	<ul style="list-style-type: none"> <li>• HSDB: Information of toxicity and safety</li> <li>• TOXLINE: Offers reference and data about biochemistry, pharmacology, physiology, and toxicology</li> <li>• ChemIDplus: Physiochemical properties less than 10</li> </ul>
US EPA Database	<ul style="list-style-type: none"> <li>• ChemView, Pesticide Chemical Search, CompTox Chemistry Dashboard</li> <li>• Simple information of emerging contaminants</li> </ul>
ChemSpider	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Basic physiochemical information and medical information</li> <li>• Has deviation of information according to chemicals</li> </ul>

충분히 제거되지 않고 배출될 수 있다. Liu and Wong (2013)의 연구에 따르면, 중국의 PPCPs 오염 수준은 하수 및 지표수에서 불검출~10 µg/L, 슬러지, 하천퇴적토 및 토양에서 건조중량으로 불검출~595.48 µg/g 수준으로 알려져 있다. 그 외에도 중금속(ME, 2007), PAHs(Ozaki et al., 2015), 폴리염화바이페닐(polychlorinated biphenyls, PCBs)(Needham and Ghosh, 2019), 과불화화합물(perfluorinated compounds, PFCs)(Arvaniti and Stasinakis, 2015; Park et al., 2012) 등도 하수처리장의 슬러지 및 방류수에서 검출된 바 있으며, 이는 퇴적토 및 토양오염을 유발할 수 있다.

기원 추적이 가능한 점오염원 형태의 오염유발시설 이외에, 광범위 오염을 유발하는 비점오염원이나 자연(예, 지질)에서 유래하는 오염을 필요에 따라 지중 환경 오염 가능물질에 포함시킬 수 있다. 농업활동으로 사용되는 비료로 인해 지하수로 광범위하게 유입되는 질산성질소는 대표적 비점오염원 오염물질이다(Zhang et al., 2014). 또

다른 예로, 발암물질인 비소는 광물찌꺼기나 방부처리목재와 같이 점오염원으로부터 유래할 수도 있지만, 방글라데시 지하수에서 고농도의 비소가 검출되는 것과 같이 지질 기원으로부터 오염이 발생할 수도 있다(Flora, 2015). 뿐만 아니라, 방치된 광물찌꺼기 적치장에서 홍수 등으로 인해 광물찌꺼기의 유출이 반복되는 경우, 그 영향범위가 광범위하여 수십 km 이상 떨어진 위치에서도 비소 오염이 관찰될 수 있다(Choi et al., 2015). 따라서, 잠재적 오염원 목록 작성 시, 연구 지역과 그 상류의 지질, 토지 이용 등에 대한 확인이 필요하다.

### 3. 화학물질 DB를 이용한 오염물질 특성값 수집

지중환경 내 오염물질 및 잠재적 오염물질의 거동 특성 평가에 필요한 물리화학적 특성값은 이미 구축되어있는 DB를 이용해서 일차적으로 정보를 수집할 수 있다. 국내에는 화학물질안전원에서 제공하는 화학물질안전관리정보

시스템(Korea Information System for Chemical Safety Management, KISChem), 국립환경과학원에서 제공하는 화학물질정보시스템(Cheical Information System, NCiS) 등이 있으며, 해외에는 미국 국립의학도서관(U.S. National Library of Medicine)에서 제공하는 TOXNET, 미국 환경청(U.S. Environmental Protection Agency, US EPA)에서 제공하는 화학물질DB, 영국 왕립화학회(Royal Society of Chemistry, RSC)에서 제공하는 ChemSpider 등이 있다. 각 DB에 대한 개괄적 설명은 Table 3에 요약하여 나타냈으며, 각 절에서 상세히 설명하였다.

### 3.1. KISChem

KISChem(<http://kischem.nier.go.kr/kischem2/wsp/main/main.jsp>)은 2009년부터 국가 DB구축사업으로 구축된 유해화학물질 데이터베이스를 제공하는 화학물질안전원의 웹 페이지이다(NICS, 2018). 국내 「화학물질관리법」, 「위험물안전관리법」, 「산업안전보건법」, 「고압가스안전관리법」 등의 국내 법·제도 적용대상 화학물질을 포함하여 국내 유통 중인 유해화학물질 총 6,770종의 물질특성정보(물질기본정보 및 물리화학적특성), 사고위험정보(유해성, 독성정보 등), 안전/특수 대응정보(국내외 규제정보 및 노출기준정보 등)를 제공한다(Park et al., 2013). KISChem은 유해화학물질의 유출사고 및 테러 발생 시, 일반인 및 1차 대응기관이 사고대응정보를 신속하게 얻어 추가 피해를 최소화하는 것을 목적으로 하고 있기 때문에 사고위험정보를 상세히 제공한다는 장점이 있다. 하지만, 제공하는 정보 중에 거동 예측 연구 등에 필요한 물리화학적 특성값이 많지 않고, 접속일 기준 마지막 화학물질의 추가가 2013년이었으므로, 최근에 주목받기 시작한 신종유해물질에 대한 정보를 얻을 수 없다는 단점이 있다.

### 3.2. NCiS

NCiS(<http://ncis.nier.go.kr/main.do>)는 국립환경과학원이 제공하는 화학물질DB이다(NIER, 2018). NCiS는 2015년 1월 1일부터 시행중인 「화학물질의 등록 및 평가 등에 관한 법률」 및 「화학물질관리법」에 대한 산업체 이행을 지원하기 위해 화학물질 관련정보를 통합하여 제공함으로써 국민에게 일원화된 정보를 전달하는 것을 목적으로 하고 있다. 유독물질, 대량생산화학물질, 잔류성 유기오염물질 등 총 9개의 분류기준에 따른 화학물질 45,839건에 대한 정보를 열람할 수 있다. 구조식, 분자식, CAS 번호 등의 일반정보, 물질번호 및 함량정보, 고시정보, 유해성 분류, 시험자료 등을 제공한다. KISChem보다 많은

종류의 화학물질에 대한 정보를 제공하고 있으나, 물리화학적 특성이 제공되는 화학물질이 적다는 단점이 있다.

NCiS에는 국립환경과학원이 보유한 1,539건의 화학물질에 대한 시험자료가 존재한다. 대부분 돌연변이 실험, 급성독성실험과 같은 화학물질의 독성에 관련된 시험자료로 구성되어 있으나, Kow 등 일부 물리화학적 특성에 관한 시험자료를 포함한다.

### 3.3. TOXNET

TOXNET(<https://toxnet.nlm.nih.gov/>)은 화학물질의 독성, 유해성, 규제 등에 대한 정보를 제공하기위해 미국 국립의학도서관의 Division of Specialized Information Service에서 Toxicology and Environmental Health Information Program으로 관리하는 DB이다(US NLM, 2018). 따라서, 물리화학적 성질보다는 독성에 관련된 정보를 주로 다루고 있다. TOXNET에는 여러 종류의 DB가 있는데, 가장 많이 사용되는 것은 다음과 같다.

- HSDB(Hazardous Substances Data Bank): 총 5,951종의 유해 화학물질에 대한 독성 정보 및 안전성에 대한 정보 제공
- TOXLINE: 400만 개의 생화학, 약리학, 생리학, 독성학 관련 참고문헌 및 자료 제공
- ChemIDplus: 40만 종 이상 화학물질의 이름, 화학구조, 끓는점, 녹는점, Kow, 증기압 등 10가지 이하의 간단한 물리화학적 특성 제공

TOXNET의 DB는 접속일 기준 최근 데이터 업데이트일이 2018년 11월로, 새로운 화학물질 및 기존 화학물질 데이터를 꾸준히 업데이트하고 있어 비교적 최근 정보를 얻을 수 있다.

### 3.4. US EPA 데이터베이스

US EPA는 ChemView(US EPA, 2018a), 살충제 성분 관련 데이터베이스인 Pesticide Chemical Search(US EPA, 2018b), CompTox Chemistry Dashboard(US EPA, 2018c; Williams et al., 2017) 등을 통해 여러 화학물질의 구조나 특징, 유출 및 노출 경로에 대한 DB를 제공한다. 이 외에도 이슈가 되는 신종유해물질과 관련된 정보를 홈페이지의 Environmental Topics-Chemicals and Toxic Topics의 배너에서 제공하고 있다.

### 3.5. ChemSpider

ChemSpider(<http://www.chemspider.com/>)는 영국 왕립화학회가 소유한 화학물질 DB로 69,000,000 개의 화학물

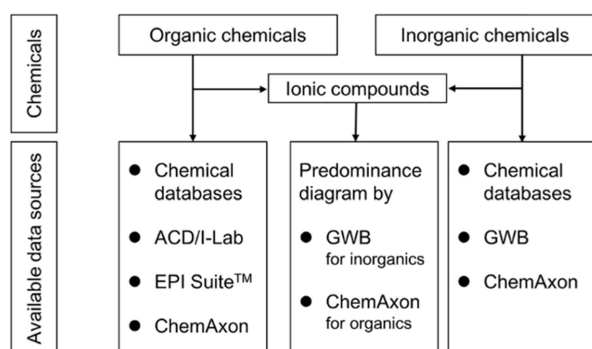


Fig. 2. Classification of emerging contaminants using pre-existing data-base and regression programs.

질 구조에 관련된 정보를 갖고 있으며, US EPA, 미국 식품의약국(U.S. Food and Drug Administration, US FDA), Journal of Heterocyclic Chemistry 등 총 254개의 DB로부터 정보를 제공받고 있다(RSC, 2018). 물질에 따라 다르지만, 끓는점, 녹는점, 용해도 등 화학물질의 기본적인 물리화학적 성질에 대한 데이터와 신체 내에서 화학물질의 작용, 응급 처치 등 의학 관련 정보를 제공한다. 벤젠(benzene)과 같이 기존 연구 결과가 많은 물질은 인 화점, 굴절률 등 다른 DB에서는 제공하지 않는 특성값까지 다양하게 제공되지만, 연구 결과가 적은 물질들의 경우에는 제공되는 특성값이 2~3개로 줄어드는 등 물질에 따라 제공되는 정보량에 편차가 존재한다.

#### 4. 프로그램을 이용한 물리화학적 특성값 추정

신종유해물질과 같이 물리화학적 특성값에 대한 연구가 절대적으로 부족한 화학물질이나 기존 DB에서 찾기 어려운 특성값의 경우에는 ACD/I-Lab, EPI Suite™, ChemAxon, GWB 등의 추정프로그램을 사용해 관련 정보를 수집할 수 있다. 기존 화학물질 DB의 경우에는 물질의 분류에 관계없이 자료의 존재여부에 따라서 사용할 DB가 결정되지만, 추정프로그램들의 경우에는 유효한 결과값을 얻을 수 있는 화학물질이 정해져 있으므로, 알맞은 프로그램을 사용하기 위해서는 오염물질의 분류가 필수적이다. 추정 프로그램의 특성에 따라 적용 가능한 화학물질은 Fig. 2에 정리하여 나타냈으며, 각 추정프로그램에 대한 정보는 각 절에서 설명하였다.

##### 4.1. ACD/I-Lab

ACD/I-Lab(<https://www.acdlabs.com/resources/ilab/>)은 ChemSpider와 연동되어 사용하는 추정프로그램으로,

ChemSpider 내 물질의 성질과 관련된 일부 정보를 열람할 수 있다(ACD, 2018). ACD/Labs 홈페이지 가입을 통해 더 많은 정보를 얻을 수 있는데, 기본적으로 주어지는 credit을 지불하고 정보를 열람할 수 있으며, credit 소진 시에는 유료로 구매할 수 있다. ACD/I-Labs에서 추정하여 얻을 수 있는 특성값은 1) log P, log D, 끓는점, 증기압, 용해도 등의 물리화학적 성질, 2) 생체이용률(bioavailability), 흡수(absorption), BBB 등 ADME(Adsorption, Distribution, Metabolism and Excretion), 3) 해양독성(aquatic toxicity), LD<sub>50</sub> 등 독성값, 4) 화학물질 구조로부터 추정되는 NMR 피크 정보 등이 있다.

ACD/I-Lab은 다음의 규칙에 따라 일부 물질에 대해서는 유효한 추정값을 제공할 수 없다. 무기(inorganic) 화합물과 금속-유기물 화합물(metalorganics)에 대해서는 유효한 추정값 계산이 불가능하기 때문에, 주로 유기물의 물리화학적 특성 추정에 사용 가능하다. 이온의 경우에는 수소이온(H<sup>+</sup>)을 붙여 중성물질로 변환하여 계산하며, 혼합물의 경우에는 가장 큰 유기물에 대해서만 계산하므로 정확한 값을 얻기 위해서는 혼합물의 구성성분을 각각 따로 입력해야 한다. 입체 이성질체를 구분하지 않아 모두 똑같은 추정값을 가지며, 단백질과 폴리펩타이드는 20,000 dalton을 넘지 않는 경우에만 유효한 값을 추정할 수 있다. 중합체의 경우 대괄호 내의 반복 부위를 하나로 간주하고 계산해야만 한다.

##### 4.2. EPI Suite™

EPI Suite™은 US EPA의 Syracuse Research Corp.이 개발한 윈도우 기반의 물리화학적 성질 및 환경적 거동을 예측할 수 있는 프로그램의 모음이다(US EPA, 2012a). 추정을 위해서는 화학물질의 구조를 알아야 하는데, 해당 물질이 EPI Suite™의 DB에 존재할 경우에는 CAS 번호 또는 물질명으로 검색해서 구조를 불러와 프로그램을 실행할 수 있다.

EPI Suite™은 Table 4에 요약한 바와 같이, 총 18개의 프로그램들로 이루어져 있다. 이중AOPWIN™, ECOSAR™, DERWIN을 제외하면 EPI Suite™ 다운로드 시 같이 제공되는 EpiWeb을 사용하여 한번에 실행할 수 있다. EpiWeb을 사용하는 경우, 분자구조만 입력해준다면 그 외 입력값을 사용자가 따로 입력해주지 않아도 프로그램들의 출력값을 얻을 수 있다. 그러나, KOAWIN, WVOLWIN™ 등 분자구조 외 다른 입력값을 필요로 하는 프로그램을 사용할 경우에는, 필요한 입력값을 출력하는 다른 프로그램을 먼저 실행시킨 후 그 결과값을 받아

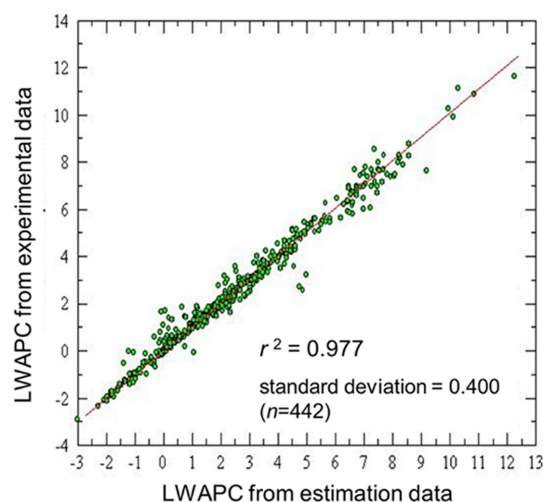
**Table 4.** Programs provided in EPI Suite™ and brief explanation (US EPA, 2012a)

Program	Input	Estimation Purpose	Remark
KOWWIN™	Chemical structure	log Kow	
AOPWIN™	Chemical structure	Gas-phase reaction rate for the reaction between hydroxyl radicals, and a chemical	Can estimate radical reaction rate and half-life for olefin and acetylene
HENRYWIN™	Chemical structure	Henry LC	
MPBPWIN™	Chemical structure, temperature for vapor pressure, boiling point	Boiling point, melting point, vapor pressure	
BIOWIN™	Chemical structure	Biodegradability (aerobic/anaerobic condition)	
BioHCwin	Chemical structure	Hydrocarbon biodegradation half-life	Only for hydrocarbon
KOCWIN™	Chemical structure, Kow	Koc	
WSKOWWIN™	Chemical structure, Kow, melting point	Water solubility	Using Kow for estimation
WATERNT™	Chemical structure	Water solubility	Using fragment constant for estimation
BCFBAF™	Chemical structure, Kow	BCF, BAF, Biotransformation half-life	
HYDROWIN™	Chemical structure	Hydrolysis rate and half-life	For ester, carbamate, epoxide, halo-methane, some alkyl halide and phosphorus ester
KOAWIN	Chemical structure, Kow, Henry LC	Koa	
AEROWIN™	Vapor pressure, Kp, Koa	Parameter phi ( $\Phi$ ) *	
WVOLWIN™	Henry LC	Rate of vaporization (lake, river)	Can set up condition of river and lake
STPWIN™	Henry LC, water solubility, melting/boiling point, vapor pressure, Kow	Ratio of chemicals' biodegradation, sludge adsorption, air stripping (typical activated sludge-based sewage treatment plant)	Use default value for biodegradation half-life input
LEV3EPI™	Koc, Biodegradation half-life, Emission value, Advection value	Partitioning of air, soil, sediment (level III multimedia fugacity model, steady-state)	
ECOSAR™	Water solubility, melting point, Kow	Aquatic toxicity	
DERMWIN	Chemical structure, Kow, event duration, concentration of chemical in water, fraction absorbed water	Kp, DAD, DAevent	Default values: 0.58 h for event duration 0 for chemical concentration 1 for fraction absorbed water

\* Parameter phi ( $\Phi$ ) means the fraction of airborne substance sorbed to airborne particulates

사용해야한다. 분자구조는 'draw' 기능을 이용하여 직접 그리거나, 'smiles(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)'를 입력하거나, CAS 번호 또는 물질명을 이용하여 EPI Suite™ DB 내에서 검색하여 입력할 수 있다. 단, 물질명을 사용할 시에는 입력한 물질명에 알맞은 화학물질의 구조가 검색되지 않을 수 있다.

EPI Suite™ 프로그램들은 금속류 및 무기화합물에 대해서는 유효한 추정값을 산출하지 못하므로, ACD/I-Lab과 마찬가지로 유기물의 물리화학적 특성값 추정에만 사용할 수 있다. 추정 결과는 실제 실험값과 다른 오차를 포함할 수 있으므로, 정확성에 대한 검증이 요구된다. Fig. 3은 프로그램 중 하나인 HENRYWIN™ Bond Method로 추정한 LWAPC(Log Water-to-Air Partition Coefficient)를 실험값과 비교하여 정확성을 검증한 그래프이다. 프로



**Fig. 3.** Accuracy of HENRYWIN™; the graph was modified from the On-line HENRYWIN™ User Guide (US EPA, 2012b).

그럼 추정값이 실험값과 약간의 차이가 있지만,  $r^2=0.977$ 로서 높은 설명력을 갖는다. 기능 및 원리에 대한 더 자세한 정보는 홈페이지에서 확인할 수 있다.

### 4.3. ChemAxon

ChemAxon은 생체 분자, 화학물질의 구조와 이름 변환 등 다기능의 프로그램을 제공한다(ChemAxon, 2018). 그 중 ‘Calculators and Predictors’ 기능은 ChemAxon에서 제공하는 프로그램 중 Chemicalize, Marvin, Instant Jchem을 포함한 총 10개 프로그램에서 수행 가능한 기능으로, 화학물질에 따른 pKa, NMR 피크 위치 및 세기 예측값, 등전위점, log D 등 다양한 특성값을 추정할 수 있다. 이온 형태로 존재하는 유기산 및 금속류에 대하여, 상평형도(predominance diagram), Eh-pH 도표 등을 제공한다.

### 4.4. GWB

GWB는 미국 일리노이 대학 지질학과에서 최초 개발한 프로그램으로, 화학반응식에 대한 계산을 하는 Rxn, 온도에 따른 fugacity와 활동도(activity)의 그래프를 그리는

Tact을 포함하여 총 10개의 프로그램으로 구성되어 있다(Aqueous Solutions LLC, 2012). 그 중 Act2 프로그램은 화학물질의 존재형태(phase), pH조건 등 설정된 환경에서 활동도 그래프를 계산하고 그릴 수 있다. 산성물질에 대하여 pH에 따른 화학종 별 존재비율이나 log D 등의 수치 만을 산출하는 ChemAxon과 달리, GWB는 그래프로 결과를 산출할 수 있는데, 다양한 조건으로 그래프의 x축과 y축 설정이 가능하고, 활동도 또는 공존물질 등 세부적인 조건 설정이 가능하다. GWB는 금속류 등 이온 물질에 적용할 수 있는 추정프로그램으로, 앞서 소개한 프로그램들에서 추정할 수 없는 질소(Nitrogen, N), 인(Phosphorus, P) 등 다양한 존재형태를 갖는 영양물질에 대해서도 적용할 수 있다.

## 5. 잠재적 오염물질의 거동 특성 평가

### 5.1. 이온성 물질의 존재형태 평가

지중 환경 내 금속류, 질소, 인 등은 pH, 산화환원조건, 온도 등의 환경조건에 따라 존재 형태가 달라진다. 금속

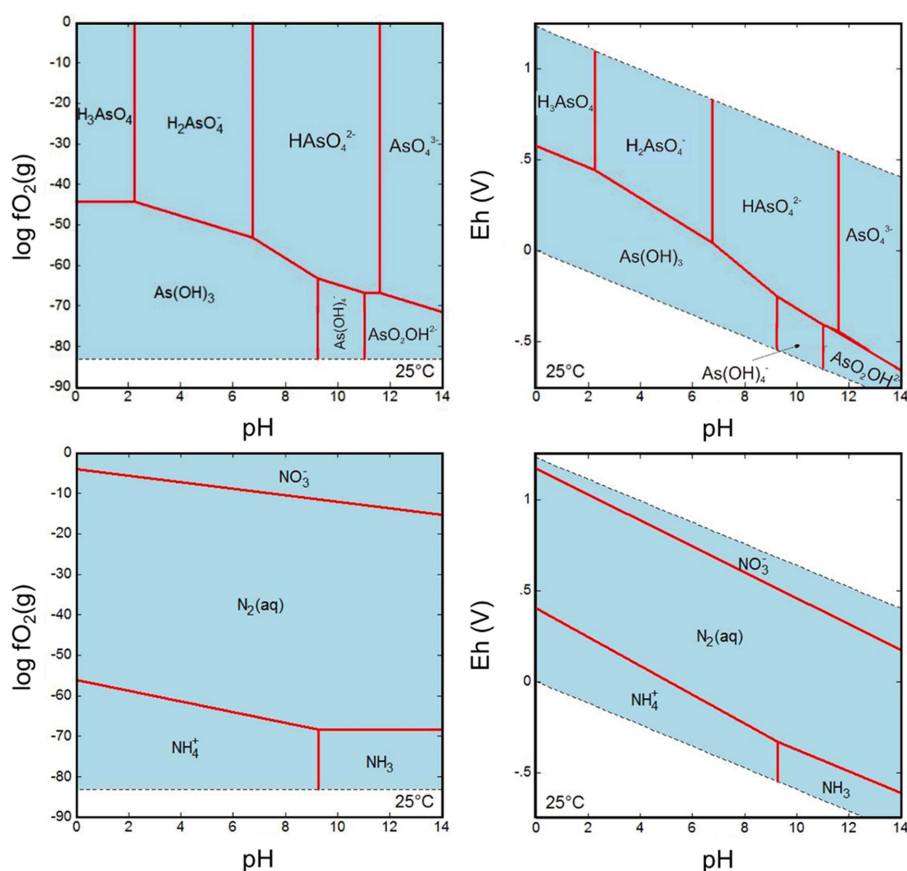


Fig. 4. Phase diagrams of Arsenic with a) log  $f(\text{O}_2)$ -pH and b) Eh-pH and Nitrogen with c) log  $f(\text{O}_2)$ -pH and d) Eh-pH.



류의 경우에는 존재 형태와 반응하는 매질 특성에 따라 흡착, 침전 등 거동 특성이 크게 달라질 수 있다(Anand et al., 2016). 비소(Arsenic, As)의 경우를 예로 들면, 지중환경의 pH 및 산화환원 조건에 따라 음이온 또는 전하를 띄지 않는 형태로 존재할 수 있고, 철과 유사한 영역에서 산화·환원 전이가 일어나 복잡한 거동 특성을 나타낸다(Gorny et al., 2015). 질소는 필수영양성분으로 동식물에 이용되며, 지중 환경 내 암모니아성 질소, 아질산성 질소, 질산성 질소 등의 형태로 존재하는데, 탈질화되어 대기중으로 배출될 때 온실가스인  $N_2O$ 가 일부 생성될 수 있으므로 다양한 분야에서 이와 관련한 연구가 이루어지고 있다(Jurado et al., 2017; Rivett et al., 2008). Fig. 4는 GWB Act2 프로그램을 사용하여, 수용액 내에서 비소와 질소의 존재 형태를 평가하여 출력한 결과이다. 비소와 질소의 활동도는  $1 \times 10^{-10}$ , 다른 이온종 없이 활동도 1.0의 순수한 물만 용매로 존재하는 환경에 대해서, x축을 pH, y축을  $fO_2(g)$  (Fig. 4(a) and (c)) 또는 Eh(Fig. 4(b) and (d))로 설정한 후 해당 영역에서 열역학적으로 가장 안정한 화학종을 도출하였다. 온도는 초기값인 25°C를 사용하였다.

## 5.2. 유기오염물질의 제거율 평가

PPCPs 등 신중유해물질은 하수를 통해 집적되어 하수처리장에서 처리를 거친 후 슬러지 또는 방류수를 통해 환경중으로 배출되고 있다(Gurke et al., 2015; Liu and Wong, 2013; Tran et al., 2018). 따라서, 하수처리과정에서의 제거율은 잠재적 오염물질의 환경 중 배출량에 결정적인 영향을 미칠 수 있다. 활성 슬러지법을 기반으로 하는 하수처리장에서의 유기물 제거 효율은 여러 추정프로그램 중 EPI Suite™의 STPWIN™을 사용하여 추정할 수 있다. STPWIN™은 활성슬러지 기반 하수처리장에서 유기오염물

질이 생분해(biodegradation), 흡착(sludge adsorption), 탈기(air stripping)에 의해 제거된다고 가정하고, 총 제거율 및 세 방법에 의해 각각 제거된 비율을 제시한다.

Table 5는 신중유해물질 중 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-furan(TCDF, CAS No. 51207-31-9)와 perfluorooctane sulfonic acid(PFOS, CAS No. 1763-23-1)에 대한 출력 결과 예시이다. TCDF는 다이옥신류 중 한 물질로 강한 독성을 가지며, 스톡홀름 협약에 따라 잔류성 유기물질(Persistent Organics Pollutants, POPs)로 지정된 규제물질이고(Palmer et al., 2018; The Stockholm Convention, 2019), PFOS는 대표적 PFCs 중 하나로 생물농축성 및 독성이 높아 유해독극물로 지정된 규제물질이다(Land et al., 2018; ME, 2013). 입력값으로는 물에 대한 용해도, log Kow, 헨리 상수, 끓는점, 녹는점, 증기압이 필요한데, 직접 입력하거나 EPI Suite™ 내에서 자동으로 불러오는 다른 프로그램의 결과값을 이용해 실행할 수 있다. 프로그램은 클래리파이어(clarifier) → 활성오니조(aeration vessel) → 침전조(settling tank)의 세 단계를 거쳐 화학물질 제거가 이루어진다고 가정한다. 이 때 각 단계의 생분해 반감기를 조절할 수 있는데, 사용자가 직접 값을 입력하거나 EPI Suite™의 BIOWIN™의 결과값을 사용할 수 있다. 프로그램 초기값은 사실상 생분해가 일어나지 않는 상황을 의미하는 10,000 h으로, 세 단계 모두 초기값을 사용하면 최저 제거율이 도출된다(US EPA, 2012c). 그 외 탱크의 넓이나 깊이, 생체량(biomass fraction) 등은 프로그램 설정값을 사용하는데, 그 값은 US EPA의 On-Line STPWIN on-line Help에서 확인할 수 있다. Table 5는 세 단계의 반감기를 모두 초기값으로 설정하여 최악의 상황에 대해 계산한 결과로, 각 물질의 휘발성, 용해도 등의 물리화학적 성질에 따라 하수처리과정에서 각 제거 방법의 기여도가 달라짐을 확인할 수 있다.

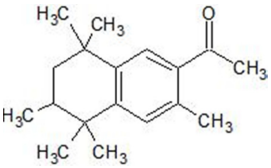
**Table 5.** Estimation results for chemical removal in wastewater by activated sludge-based sewage treatment system

Contaminant (CAS No)		TCDF (51207-31-9)	PFOS (1763-23-1)
Input	Water solubility (mg/L)	$6.92 \times 10^{-4}$	0.1039
	Log Kow	6.53	4.49
	Henry LC (atm-m <sup>3</sup> /mole)	$1.54 \times 10^{-5}$	$110 \times 10^{-2}$
	Boiling point (°C)	382.92	313
	Melting point (°C)	227	90
	Vapor pressure (mmHg)	$1.47 \times 10^{-7}$	0.0064
Removal after 10 <sup>4</sup> h	Biodegradation	0.78%	0.22%
	Adsorption onto sludge	92.69%	39.17%
	Air	0.01%	48.08%
	Total removal	93.48%	87.47%

**Table 6.** Estimation results for fugacity model-partitioning

Contaminant (CAS No.)		Benzene (71-43-2)	Galaxolide (1222-05-5)
Input	Log K <sub>ow</sub>	2.164	4.294
Mass fraction	Air	31.8%	0.149%
	Water	41.1%	10.9%
	Soil	26.7%	73.2%
	Sediment	0.37%	15.7%
Half-life (h)	Air	209	6.79
	Water	900	1.44×10 <sup>3</sup>
	Soil	1.8×10 <sup>3</sup>	2.88×10 <sup>3</sup>
	Sediment	8.1×10 <sup>3</sup>	1.3×10 <sup>4</sup>

**Table 7.** Estimation of aquatic toxicity for tonalide (CAS No. 1506-02-1)

Input		Aquatic Toxicity			
Property	value	Organism	Duration	End point	Prediction
Chemical structure		Fish	96 h	LC50	0.027 mg/L
				ChV	0.004 mg/L
		Fish (SW*)	96 h	LC50	0.034 mg/L
				ChV	0.053 mg/L
Log K <sub>ow</sub>	5.70				
Melting point	54.5°C	Daphnid	48 h	LC50	0.023 mg/L
Water solubility	1.25 mg/L			ChV	0.007 mg/L
ADME		Green algae	96 h	EC50	0.088 mg/L
log BCF	2.843			ChV	0.056 mg/L
Biotransformation half-life	11.17 days	Mysid	96 h	LC50	0.00134 mg/L
log BAF	4.058	Mysid (SW)		ChV	3.21×10 <sup>-5</sup> mg/L
Bioavailability	0.3-0.7	Earthworm	14 days	LC50	159.191 mg/L

\* SW: seawater

### 5.3. 매질 내 분배비율 평가

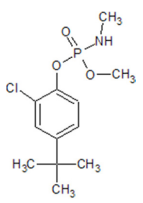
EPI Suite™의 LEV3EPI™ 프로그램을 사용하면, Donald Mackay 방법을 적용한 Level III fugacity 모델을 사용하여 정상상태(steady-state)에서의 유기 화합물의 환경 내 분배를 예측할 수 있다(US EPA, 2012d). 프로그램의 실행을 위해서는 반감기, 배출값(emissions values), 이류값(advection values), 토양 K<sub>oc</sub>가 필요하다. 반감기와 K<sub>oc</sub>는 사용자가 값을 입력해주거나, 화학물질 구조 또는 CAS 번호 입력을 통해 BIOWIN™/AOPWIN™, KOCWIN™에서 결과값을 받는 옵션을 선택할 수 있다. 배출 및 이류값은 사용자가 값을 설정하지 않으면 초기값(Emissions values 1,000 kg/h; Advection value for air 100 h, for water 1,000 h, and for sediment 50,000 h)을 사용하여 계산한다. Table 6은 벤젠과 향수 성분 중 하나인 galaxolide(1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethylcyclopenta(g)-2-benzopyran(HHCB), CAS No. 1222-

05-5)에 대한 LEV3EPI™ 프로그램의 실행 결과이다. K<sub>oc</sub> 값을 제외한 나머지 값은 다른 추정프로그램의 결과 값을 받거나 프로그램의 초기값을 사용하였다.

### 5.4. 환경독성 평가

ECOSAR™과 ACD/I-Lab을 이용하면 해양독성을 추정할 수 있으며, BCFBAF™을 사용하여 생물농축특성을 구할 수 있다. ECOSAR™은 어류, 녹조류 등의 해양생물에 대한 급성독성 및 만성독성을 추정하는데, 이 때 K<sub>ow</sub>, 녹는점, 물에 대한 용해도가 필요하다. BCFBAF™은 분자구조와 K<sub>ow</sub>를 이용해 BAF, BCF, 생물변환 반감기(biotransformation half-life)를 계산할 수 있다. ACD/I-Lab은 분자구조를 입력하면 생체이용률, LD<sub>50</sub>, BBB 등의 값을 얻을 수 있다. Table 7는 PPCPs의 범주에 속하는 화학물질 tonalide(7-acetyl-1,1,3,4,4,6-hexamethyltetraline (ANTH), CAS No. 1506-02-1)에 대한 LC<sub>50</sub>(lethal con-

**Table 8.** Physicochemical information of crufomate (CAS No. 299-86-5) from chemical databases and regression programs

a) Information from databases and regression		b) Removal in wastewater after 10 <sup>4</sup> h			
Property	Value				
Chemical structure		Biodegradation		0.17%	
		Adsorption		11.17%	
		To air		0.00%	
		Total		11.34%	
		c) Partitioning			
		Mass fraction	Half-life (h)	Emissions (kg/h)	
Air		0.0129%	7.49	1000	
Water		13.6%	1.44×10 <sup>3</sup>	1000	
Soil		86.2%	2.88×10 <sup>3</sup>	1000	
Sediment		0.151%	1.3×10 <sup>4</sup>	0	
		d) Eco-toxicity			
		log BCF	log BAF	log half-life**	
		1.924	2.353	0.4423 days	
		Organism	Duration	End point	Prediction
		Fish	96 h	LC50	2.220 mg/L
				ChV	0.009 mg/L
		Fish (SW)	96 h	LC50	1.117 mg/L
				ChV	0.047 mg/L
		Daphnid	48 h	LC50	0.004 mg/L
		Green algae	96 h	EC50	158.770 mg/L
				ChV	21.423 mg/L
		Mysid	96 h	LC50	0.008 mg/L
		Mysid (SW)		ChV	8.58×10 <sup>-5</sup> mg/L
Density	1.16 g/cm <sup>3</sup> at 20°C				
log Kow	5.70				
Boiling point	117-118°C				
Melting point	60°C				
Vapor pressure	0.01 mmHg at 117°C				
Water solubility	Insoluble				
Henry constant	2.46×10 <sup>-9</sup> atm·m <sup>3</sup> /mole				
Estimated values*					
log Koa	10.418				
log Koc	4.419				
log Kp	-2.169				
DAD (70.0 kg human)	0.0533 mg/kg·day				
DAevent	5.04×10 <sup>-4</sup> mg/cm <sup>2</sup> ·atm				
pKa	10.7				

 \* Estimated by EPI Suite<sup>TM</sup> or Chemicalize in ChemAxon

\*\* Biotransformation half-life

centration, 50%), ChV(chronic value) 등 독성 추정 결과이다.

## 6. 물리화학적 특성값 정보화 및 거동특성 평가 사례

앞서 언급한 바와 같이, 실험값이 거의 없는 신종유해 물질의 경우에는 지중 환경 내 거동 특성 평가를 위한 입력값 대부분을 추정프로그램을 사용해 도출해야 한다. 본 연구에서는 이런 경우에 대한 예시로서, 사고대비물질로 지정되어 있으나 상대적으로 획득할 수 있는 정보가 적은 크루포메이트(crufomate)와 최근에 주목을 받기 시작한 PFHxS에 대하여, 본문 중 소개한 화학물질DB와 추정 프로그램을 통해 수집한 정보를 제시하고, 이를 이용해 거동특성을 평가하였다.

### 6.1. 크루포메이트(Crufomate)

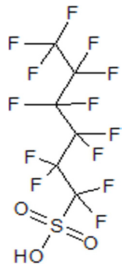
CAS 번호 299-86-5, IUPAC 이름 N-[(4-tert-Butyl-2-chlorophenoxy)-methoxyphosphoryl] methanamine의 화학 물질인 crufomate(또는 ruelene)는 국내 「산업안전보건

법」에 의거한 노출기준설정 물질로서(MEL, 2018), 살충제 및 구충제에 사용된다(Pekas et al., 1977). Crufomate에 대한 특성값 수집 시 끓는점, 녹는점, Kow 등의 물리화학적 성질은 KISChem, ChemSpider, TOXNET의 ChemIDplus에서 실험값을 참고하였다. DB에서 값을 얻을 수 없는 Koa, Koc, Kp, DAD, DAevent는 ACD/I-Lab 및 EPI Suite<sup>TM</sup> 프로그램을 사용하여 추정값을 얻었다. Crufomate는 유기산(organic acid)의 형태이므로, ChemAxon의 프로그램 중 하나인 Chemicalize를 사용하여 화학물질의 구조로부터 pKa 및 log D, 등전위점 등의 값을 추정하였다. Table 8은 crufomate의 물리화학적 특성값을 수집한 결과이다.

### 6.2. PFHxS

PFHxS는 CAS 번호 355-46-4, IUPAC 이름 tridecafluorohexane-1-sulfonic acid의 화학물질이다. PFCs 중 하나로, 국제적으로는 친환경선언 글로벌 의류업체 폐수 무방출 관리물질이자 스톡홀름협약에 의한 잔류성 유기오염물질에 속하며, 주로 쓰이는 곳은 레이저 프린터의 분홍색 잉크, 캠핑 팬 코팅 제품 등이다(Land et al., 2018;

**Table 9.** Physicochemical information of PFHxS (CAS No. 355-46-4) from chemical databases and regression programs

a) Information from databases and regression		b) Removal in wastewater after 10 <sup>4</sup> h			
Property	Value				
Chemical structure		Biodegradation	0.12%		
		Adsorption	6.60%		
		To air	14.30%		
		Total	21.02%		
		c) Partitioning	Mass fraction	Half-life (h)	Emissions (kg/h)
		Air	1.61%	1.83×10 <sup>3</sup>	1000
		Water	3.73%	4.32×10 <sup>3</sup>	1000
		Soil	93.3%	8.64×10 <sup>3</sup>	1000
		Sediment	1.36%	3.89×10 <sup>4</sup>	0
		d) Eco-toxicity	log BCF	log BAF	log half-life**
	2.112	2.112	0.3127 days		
	Organism	Duration	End point	Prediction	
	Fish	96 h	LC50	301.319 mg/L	
			ChV	33.403 mg/L	
	Fish (SW)	96 h	LC50	381.972 mg/L	
			ChV	83.960 mg/L	
	Daphnid	48 h	LC50	190.354 mg/L	
			ChV	24.981 mg/L	
	Green algae	96 h	EC50	220.417 mg/L	
			ChV	72.203 mg/L	
	Mysid	96 h	LC50	129.773 mg/L	
	Mysid (SW)		ChV	7.965 mg/L	
	Earthworm	14 days	LC50	5279.056 mg/L	
Density	1.841 g/cm <sup>3</sup> at 25°C				
Boiling point	289.1-294.5°C				
Estimated values*					
Melting point	41.25°C				
Vapor pressure	0.00458 mmHg				
Water solubility	6.174 mg/L				
Henry constant	3.94×10 <sup>-4</sup> atm·m <sup>3</sup> /mole				
log Kow	3.16				
log Koa	4.950				
log Koc	3.552				
log Kp	-2.2167				
DAD (70.0 kg human)	0.00394 mg/kg·day				
DAevent	3.73×10 <sup>-5</sup> mg/cm <sup>2</sup> ·atm				
pKa	-3.3				

\* Estimated by EPI Suite™ or Chemicalize in ChemAxon

\*\* Biotransformation half-life

ME, 2013). 하지만, PFHxS를 규제하는 화학물질관리법, 산업안전보건법 등의 국내 화학물질 관련 법규가 존재하지 않고, 국제적으로도 비교적 최근에서야 관련 규제가 생긴 신중유해물질이다. 따라서, 오염물질의 거동 예측 및 피해 예측 등의 연구를 위한 화학물질 특성값 수집 시, 기존 DB를 통해서는 일부 제한적인 정보만 획득 가능하였다. Table 9는 PFHxS에 대한 특성값 수집 결과로, 대부분의 정보는 추정프로그램을 사용하여 수집되었다.

## 7. 결론 및 제언

본 연구는 오염물질의 물리화학적 특성을 정보화하는 전 과정에 대한 연구흐름도(Fig. 1)를 제시하고, 각 단계에서 사용 가능한 화학물질 데이터베이스 및 추정프로그램에 대한 정보를 제공함으로써, 지중환경 내 오염물질 거동특성 평가에 필요한 기초정보를 수집하는 데 실질적인 도움을 주고자 하였다. 제시한 연구흐름도는 직접적인 오염 조사가 불가능한 경우에도 적용할 수 있도록 잠재적

오염물질을 선정하는 과정에서 시작하였으며, 필요한 정보를 수집하기 어려운 신중오염물질에 초점을 맞추어 화학물질DB 및 추정프로그램의 활용사례를 소개하였다. 수집한 물리화학적 특성값은 오염물질의 확산 방향, 유동 속도, 잔류 농도 등을 예측하는데 사용되며, 오염에 따른 피해 추정 및 정화계획, 추가 오염 방지 계획 수립 등에 필요한 정보를 제공하는데 활용할 수 있다.

다만 이런 방법을 적용할 때에는 몇 가지 주의점이 있다. 추정프로그램을 사용하여 도출한 물리화학적 특성값에는 오차가 발생할 수 있으며, 화학물질에 따라 유효한 값을 제시할 수 없어 사용이 제한되는 추정프로그램이 존재한다. 널리 사용되는 EPI Suite™ 프로그램의 사용자 설명서에는 발생하는 오차의 90%가 오차를 41.4% 이하라고 제시되어 있다(US EPA, 2012a). 그러므로, 정밀한 계산이 필요할 시에는 최대한 기존 화학물질 DB 및 실험값을 구하여 사용하고, 추정 프로그램은 화학물질에 대한 정보를 구할 수 없는 경우에 한하여 제한적으로 사용할 것을 제안한다.

## 사 사

본 연구는 환경부 “지중환경오염·위해관리기술개발사업 (과제번호 2018002440003)” 및 국가과학기술연구회 창의형 융합연구사업(CAP-15-07-KICT)으로부터 연구비를 지원받아 수행하였습니다. 이에 감사드립니다.

## References

- ACD (Advanced Chemistry Development, Inc.), 2018, ACD/I-Labs Software 2018.1, Advanced Chemistry Development Inc., Toronto.
- Anand, R.R., Aspandiar, M.F., and Noble, R.R.P., 2016, A review of metal transfer mechanisms through transported cover with emphasis on the vadose zone within the Australian regolith, *Ore Geol. Rev.*, **73**, 394-416.
- Aqueous Solutions LLC, 2012, The Geochemist's Workbench Professional Release 9.0, Aqueous Solutions LLC, Shampaign.
- Arvaniti, O.S. and Stasinakis, A.S., 2015, Review on the occurrence, fate and removal of perfluorinated compounds during wastewater treatment, *Sci. Total Environ.*, **524-525**, 81-92.
- Białk-Bielińska, A., Kumirska, J., Borecka, M., Caban, M., Paszkiewicz, M., Pazdro, K., and Stepnowski, P., 2016, Selected analytical challenges in the determination of pharmaceuticals in drinking/marine waters and soil/sediment samples, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **121**, 271-296.
- Caldwell, D.J., D'Aco, V., Davidson, T., Kappler, K., Murray-Smith, R.J., Owen, S.F., Robinson, P.F., Simon-Hettich, B., Straub, J.O., and Tell, J., Environmental risk assessment of metformin and its transformation product guanylurea. II. Occurrence in surface waters of Europe and the United States and derivation of predicted no-effect concentrations, *Chemosphere*, **216**, 855-865.
- ChemAxon, 2018, ChemAxon, <https://chemaxon.com/products/calculators-and-predictors>, [accessed 18.12.05]
- Choi, M., Park, J., Cho, D., Jang, D., Kim, M., and Choi, J., 2015, Tracing metal sources in core sediments of the artificial lake An-Dong, Korea: Concentration and metal association, *Sci. Total Environ.*, **527-528**, 384-392.
- ECHA (European Chemicals Agency), 2019, EC Inventory, <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>, [accessed 19.01.08].
- Flora, S.J.S., 2015, Arsenic: Chemistry, occurrence, and exposure, In: S.J.S. Flora(ed.), *Handbook of arsenic toxicology*, Academic Press, p.1-49.
- González-Acevedo, Z.I., García-Zarate, M.A., and Flores-Lugo, P., 2019, Emerging contaminants and nutrients in a saline aquifer of a complex environment, *Environ. Pollut.*, **244**, 885-897.
- Gorny, J., Bilon, G., Lesven, L., Dumoulin, D., Madé, B., and Noiriell, C., 2015, Arsenic behavior in river sediments under redox gradient: A review, *Sci. Total Environ.*, **505**, 423-434.
- Gurke, R., Röbber, M., Marx, C., Diamond, S., Schubert, S., Oertel, R., and Fauler, J., 2015, Occurrence and removal of frequently prescribed pharmaceuticals and corresponding metabolites in wastewater of a sewage treatment plant, *Sci. Total Environ.*, **532**, 762-770.
- Hansen, A.L., Donnelly, C., Refsgaard, J.C., and Karisson, I.B., 2018, Simulation of nitrate reduction in groundwater-An upscaling approach from small catchments to the Baltic Sea basin, *Adv. Water Resour.*, **111**, 58-69.
- Henderson, J.K., Falta, R.W., and Freedman, D.L., 2009, Simulation of the effect of remediation on EDB and 1,2-DCA plumes at sites contaminated by leaded gasoline, *J. Contam. Hydrol.*, **108**, 29-45.
- Jurado, A., Borges, A.V., Brouyère, S., 2017, Dynamics and emissions of N<sub>2</sub>O in groundwater: A review, *Sci. Total Environ.*, **584-585**, 207-218.
- Land, M., de Wit, C.A., Bignert, A., Cousins, I.T., Herzke, D., Johansson, J.H., and Martin, J.W., 2018, What is the effect of phasing out long-chain per- and polyfluoroalkyl substances on the concentrations of perfluoroalkyl acids and their precursors in the environment? A systematic review, *Environ. Evid.*, **7**, 4
- Lee, I.S., Lee, S.H., and Oh, J.E., 2010, Occurrence and fate of synthetic musk compounds in water environment, *Water Res.*, **44**, 214-222.
- Li, L., Maher, K., Navarre-Sitchler, A., Druhan, J., Meile, C., Lawrence, C., Moore, J., Perdrial, J., Sullivan, P., Thompson, A., Jin, L., Bolton, E.W., Brantley, S.L., Dietrich, W.E., Mayer, K.U., Steefel, C.I., Valocchi, A., Zachara, J., Kocar, B., McIntosh, J., Tutolo, B.M., Kumar, M., Sonnenthal, E., Bao, C., and Beisman, J., 2017, Expanding the role of reactive transport models in critical zone processes, *Earth-Sci. Rev.*, **165**, 280-3001.
- Liu, J.L. and Wong, M.H., 2013, Pharmaceuticals and personal care products (PPCPs): A review on environmental contamination in China, *Environ. Int.*, **59**, 208-224.
- Lombardi, L. and Carnevale, E.A., 2018, Evaluation of the environmental sustainability of different waste-to-energy plant configurations, *Waste Manage.*, **73**, 232-246.
- Lv, X., Sun, Y., Ji, R., Gao, B., Wu, J., Lu, Q., and Jiang, H., 2018, Physicochemical factors controlling the retention and transport of perfluorooctanoic acid (PFOA) in saturated sand and limestone porous media, *Water Res.*, **141**, 251-258.
- ME (Ministry of Environment), 2007, Comprehensive Measures for Sewage Sludge Management (Following the Entry into Force of the London Convention 1996 Protocol), Ministry of

Environment (ME), Gwacheon.

ME, 2013, Study on the Actual Use of PFCs (PFOS and its salt, and PFOSF) and Management Plan, National Institute of Environmental Research (NIER), Incheon.

ME, 2018, Environmental Statistics Yearbook 2016, Ministry of Environment (ME), Sejong.

MEL, 2018, Notification No. 2018-62 of MEL Exposure criteria for chemical substances and physical factors, Sejong.

Needham, T.P. and Ghosh, U., 2019, Four decades since the ban, old urban wastewater treatment plant remains a dominant source of PCBs to the environment, *Environ. Pollut.*, **246**, 390-397.

NICS (National Institute of Chemical Safety), 2018, KISChem, <http://kischem.nier.go.kr/kischem2/wsp/main/main.jsp>, [accessed 18.12.04]

NICS, 2019, Pollutant release and transfer register information system, <https://icis.me.go.kr/prtr/main.do>, [accessed 19.01.08].

NIER (National Institute of Environmental Research), 2006, Final Report: Study on the Residual Concentrations of Dioxins near the Waste Incineration Facilities (III), NIER, Incheon.

NIER, 2018, NCiS, <http://ncis.nier.go.kr/main.do>, [accessed 18.12.04]

NIER, 2019, Domestic GLP Status, <http://ncis.nier.go.kr/bbs/bbsEtcView.do?bbsId=0009>, [accessed 2019.01.08].

Ozaki, N., Takamura, Y., Kojima, K., and Kindaichi, T., 2015, Loading and removal of PAHs in a wastewater treatment plant in a separated sewer system, *Water Res.*, **80**, 337-345.

Palmer, D., Pou, J.O., Gonzalez-Sabaté, L., and Díaz-Ferrero, J., 2018, Multiple linear regression based congener profile correlation to estimate the toxicity (TEQ) and dioxin concentration in atmospheric emissions, *Sci. Total Environ.*, **622-623**, 510-516.

Park, J.E., Kim, S.K., Oh, J.K., Ahn, S.Y., Lee, M.N., Cho, C.R., and Kim, K.S., 2012, Study on concentrations and mass flows of perfluorinated compounds (PFCs) in a wastewater treatment plant, *J. Kor. Soc. Environ. Eng.*, **34**(5), 326-334.

Park, Y.S., Hwang, M.S., Noh, H.R., Chun, K.S., and Kim, S.B., 2013, Development of chemical database and information system for safety management, *Kor. J. Haz. Mat.*, **1**(1), 58-64.

Pekas, J.C., Bakke J.E., Giles, J.L., and Price, C.E., 1977, Rat intestinal metabolism of crufomate (4-tert-butyl-2-chlorophenyl methyl methylphosphoramidate), *J. Environ. Sci. Health Part B.*, **12**(4), 261-268. DOI: 10.1080/03601237709372070

Rodríguez-Navas, C., Rosende, M., and Miró, M., 2017, *In-vitro* physiologically based extraction of solid materials: Do we have reliable analytical methods for bioaccessibility studies of emerging organic contaminants?, *Trends Anal. Chem.*, **91**, 42-52.

RSC (Royal Society of Chemistry), 2018, ChemSpider, <http://www.chemspider.com/>, [accessed 18.12.05]

[www.chemspider.com/](http://www.chemspider.com/), [accessed 18.12.05]

Seoul Metropolitan Government, 2014, Environment of Seoul, Seoul Metropolitan Government, Seoul.

Steeffel, C.I., DePaolo, D.J., and Lichtner, P.C., 2005, Reactive transport modeling: An essential tool and a new research approach for the Earth sciences, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **240**, 539-558.

Straub, J.O., Caldwell, D.J., Davidson, T., D'Aco, V., Kappler, K., Robinson, P.F., Simon-Hettich, B., and Tell, J., 2019, Environmental risk assessment of metformin and its transformation product guanylurea. I. Environmental fate, *Chemosphere*, **216**, 844-854.

Sun, J., Dai, X., Wang, Q., van Loosdrecht, M.C.M., and Ni, B.-J., 2019, Microplastics in wastewater treatment plants: Detection, occurrence and removal, *Water Res.*, **152**, 21-37.

The Stockholm Convention, 2019, On Persistent Organic Pollutants, <http://chm.pops.int/>, [accessed 19.01.08].

Tran, N.H., Reinhard, M., and Gin, K.Y.H., 2018, Occurrence and fate of emerging contaminants in municipal wastewater treatment plants from different geographical regions-a review, *Water Res.*, **133**, 182-207.

US EPA (Environmental Protection Agency), 2012a, Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.11, United States Environmental Protection Agency, Washington DC.

US EPA, 2012b, On-line HENRYWIN™ User Guide, United States Environmental Protection Agency, Washington DC.

US EPA, 2012c, On-line STPWIN on line Help, United States Environmental Protection Agency, Washington DC.

US EPA, 2012d, Level III Fugacity Model Quick Guide, United States Environmental Protection Agency, Washington DC.

US EPA, 2018a, ChemView, <https://chemview.epa.gov/chemview/>, [accessed 18.12.05]

US EPA, 2018b, Pesticide Chemical Search, <https://iaspub.epa.gov/apex/pesticides/f?p=CHEMICAL-SEARCH:1:0::NO:1>, [accessed 18.12.05]

US EPA, 2018c, CompTox Chemistry Dashboard, <https://comptox.epa.gov/dashboard/>, [accessed 18.12.05]

US EPA, 2019, TSCA Chemical Substance Inventory, <https://www.epa.gov/tscainventory/>, [accessed 19.01.08].

US NLM (National Library of Medicine), 2018, TOXNET, <https://toxnet.nlm.nih.gov/>, [accessed 18.12.05]

Vasudevan, M., Nambi, I.M., and Kumar, G.S., 2016, Scenario-based modelling of mass transfer mechanisms at a petroleum contaminated field site-numerical implications, *J. Environ. Manage.*, **175**, 9-19.

Williams, A.J., Grulke, C.M., Edwards, J., McEachran, A.D., Mansouri, K., Baker, N.C., Patlewicz, G., Shah, I., Wambaugh, J.F., Judson, R.S., and Richard, A.M., 2017, The CompTox Chemistry Dashboard: a community data resource for environmental chemistry, *J. Cheminform.*, **9**, 61.

Yasuda K, and Takahashi M, 1998, The emission of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons from municipal solid waste incinerators during the combustion cycle, *J. Air Waste Manag. Assoc.*, **48**(5), 441-447.

Yue, C., and Li, L.Y., 2013, Filling the gap: Estimating physico-

chemical properties of the full array of polybrominated diphenyl ethers (PBDEs), *Environ. Pollut.*, **180**, 312-323.

Zhang, M., Buekens, A., and Li, X., 2016, Brominated flame retardants and the formation of dioxins and furans in fires and combustion, *J. Hazard. Mat.*, **304**, 26-39.

Zhang, Y., Li, F., Zhang, Q., Li, J., and Liu, Q., 2014, Tracing nitrate pollution sources and transformation in surface- and ground-waters using environmental isotopes, *Sci. Total Environ.*, **490**, 213-222.