

EQC모델을 이용한 Benzoic acid의 환경분포 예측

박 광 식

동덕여자대학교 약학대학

Estimated Environmental Distribution of Benzoic Acid using EQC Model

Kwangsik Park

College of Pharmacy, Dongduk Women's University 23-1,
Wolgok-dong, Seongbuk-gu, Seoul 136-714, Korea

ABSTRACT

Benzoic acid is produced about 700 tons/year in Korea as of 1998 survey. Most is used as a stabilizer in the processes of synthesis of pharmaceuticals and dyes. It is also used for ingredient of paint, disinfections, and antifungals. Due to the antioxidant activity of benzoic acid, the chemical is also used as food preservatives. Although the chemical is widely used in Korea, exposure levels in air, water, soil or sediment have not been monitored or estimated so that risk evaluation of benzoic acid was not possible. In this study, distribution of the chemical among environmental media was estimated using EQC model based on the chemical-physical properties. In Level I and II of which the chemical are hypothesized in equilibrium and no transfer through the media, more than 93% of benzoic acid are estimated to be distributed in water. However, in Level III of which non-equilibrium and intermedia transfer could be occurred, the chemical is estimated to distributed to soil, 64% and water, 35% as of total amount.

Key words : benzoic acid, EQC, Environmental distribution, food preservatives

서 론

Benzoic acid (안식향산)은 우리나라에서 1998년 기준으로 약 700톤 가량 유통되는 화학물질로서 대부분이 페인트성분, 합성축매제 등에 이용되며 항산화 작용으로 인해 방부제, 방균제, 살균소독제 등에 이용되기도 한다(환경부, 1998). 현재 우리나라에서는 식품보존료로서 허용되어 있으며 과실, 채소류음료, 탄산음료수 및 혼합음료 등에 첨가되

어 식품의 신선도를 보존하고 유지하기 위한 목적으로 사용되고 있다(한국약학대학협의회, 2001; 식약청, 2002). 유해화학물질과는 달리 그동안 의약품 원료나 식품첨가물로서 이용되는 화학물질이 환경에 미치는 영향에 대해서는 상대적으로 연구가 이루어지지 않았는데 최근 미국 환경청에서는 항생제, 호르몬제를 포함하여 인체의약품 및 식품원료 등에 대한 환경영향을 평가하기 위해 새로운 규제 조치 등을 마련하여 시행하고 있다(US EPA, 1999).

Benzoic acid가 환경중 서식하는 생물체에 미치는 영향에 대한 수종의 결과가 보고되어 있으나 아직 benzoic acid에 대한 환경영향에 대해서는 완

※ To whom correspondence should be addressed.

Tel: 82-2-940-4522, E-mail: kspark@dongduk.ac.kr

전히 규명된 바 없다 (Nair, 2001; Lopez *et al.*, 2002; Cheng *et al.*, Jayasinghe *et al.*, 2003). 다만, 어류를 이용한 급성독성시험시 96시간 노출에 의한 반수치사량이 어류 종에 따라 50~500 mg/l 범위로 나타났으며 조류(조류) 성장률에 대한 14day-EbC₅₀은 10 mg/l 이상, 수생무척추동물류인 물벼룩에 대한 48 hr-EC₅₀은 비교적 안전한 농도라 할 수 있는 100 mg/l 이상으로 보고되었다 (IUCLID, 2001). 그러나 현재 환경 중 노출농도에 근거한 만성적 영향에 대해서는 알려진 바 없으며 더구나 분자생물학적 지표나 조직면역학적 방법 등 치사량 이외의 독성종말점을 이용한 생태영향은 알려져 있지 않다. 국내에서도 benzoic acid에 대한 체계적인 환경 노출자료가 생산된 적은 없으며 따라서, 대기, 수질, 토양 등에 대한 오염농도 등 노출평가 자료에 근거한 위해성평가는 어려운 실정이다. 본 연구는 benzoic acid에 대한 위해성평가의 일환으로서 EQC모델링을 이용하여 환경중 분포를 예측함으로써 향후 위해성평가에 필요한 기초적인 자료를 제공하고자 시작하였다.

재료 및 방법

1. 예측모델

EQC (Equilibrium Criterion) 모델은 캐나다 Trent University에서 개발한 환경거동예측모델로서 동예측모델을 이용하면 대기, 수질, 토양, 저질, 에어로졸 및 부유침적물 등을 포함한 환경매체중의 화학물질 분포를 예측하는 것이 가능하다. 화학물질의 물리화학적 특성에 따라 모든 매체로 분배가 용이한 물질은 Type 1, 비휘발성물질은 Type 2, 난용성 물질은 Type 3으로 선택하고 매체간의 평형 및 안정상태에 따라 Level I, Level II, Level III 등의 노출 시나리오를 선택한다. Level I은 밀폐계에서 물질의 분해현상 없이 각 매체간의 평형상태가 도달하였을 때를 가정한 것이며 Level II는 물질의 이동과 분해현상이 동시에 일어나면서도 매체간의 평형상태가 유지되는 때를 가정, Level III은 물질의 이동과 분해현상이 동시에 일어나면서 매체간의 평형상태가 유지되는 않고 매체간의 이동이 나타나는 상태를 가정한 것이다 (Mackay, 1991; Mackay *et*

al., 1992).

OECD 화학물질그룹은 대량생산화합물의 위해성평가를 수행함에 있어 화학물질의 거동을 예측하는 모델로서 EQC모델을 추천하고 있는 바 본 연구에서는 이를 benzoic acid의 매체간 분포예측에 사용하였다. EQC모델의 입력자료로는 기본적으로 분자량, 환경중 설정온도 및 대기, 수질, 토양, 저질에서의 반응반감기를 입력하고 Type 1 물질의 경우 수용해도, 증기압, 몰육탄올 분배계수 및 용접 등을 입력하였다. Type 2 물질의 경우 물에 대한 공기, 토양, 물고기, 부유 분진, 퇴적물의 분배계수를 Type 3 물질의 경우 공기에 대한 물, 토양, 물고기, 부유 분진 및 퇴적물의 분배계수를 입력하도록 설계되어 있다.

2. 자료입력

Benzoic acid는 토양 및 물에서의 휘발성이 낮은 물질이며 전 환경매체로의 분포가 가능할 것으로 생각되어 Type I 물질로 분류하였다. 모델입력자료는 예측의 신뢰성을 높이기 위해 실험결과 및 신뢰성있는 문헌자료를 선별하여 입력하였다. 분자량은 122.1, 환경온도는 20°C, 수용해도는 2,931 (g/m³) 증기압 0.11 (Pa), 옥탄올/물 분배계수 (Log Kow)는 1.88, 녹는점은 122°C를 입력하였다. 반응반감기는 대기 중 206.4시간, 수질 및 토양은 15일을 최대값으로 가정하고 360시간을 저질에서의 반응반감기는 확인되지 않아 default 값으로 처리하였다 (IUCLID, 2001).

3. 분포율계산

EQC모델은 자료입력 후 프로그램에 따라 자동으로 분포율을 계산하였다. 선택한 물질자료를 입력하고 분포율은 모델에서 제시한 매뉴얼에 따라 자동적으로 실행되도록 하였다.

결과 및 고찰

Benzoic acid를 type 1 물질로 가정하고 Level I, Level II, Level III에서의 환경중 거동을 예측한 결과를 Figs. 1, 2 및 3으로 각각 나타내었다. Fig. 1의 Level I에서는 100톤의 물질이 밀폐된 시스템에서

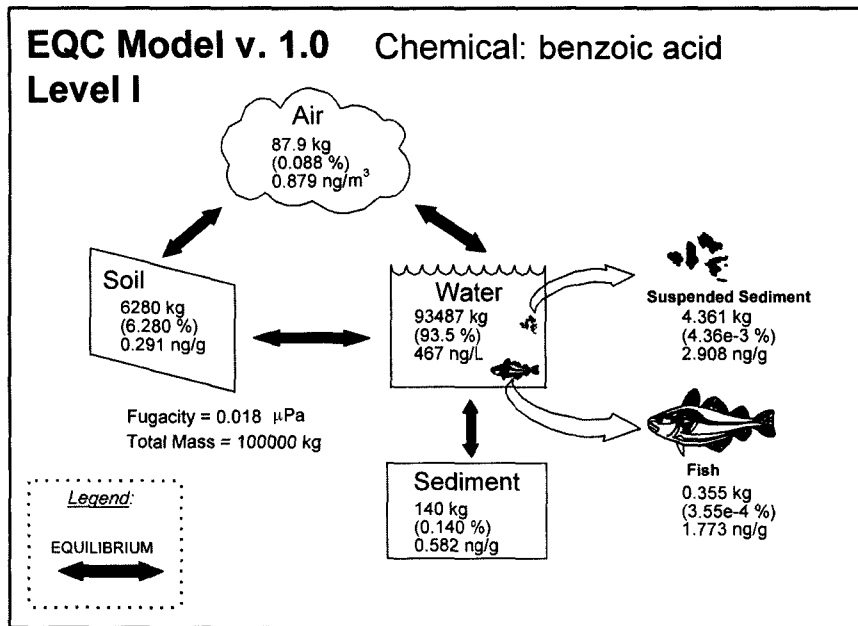


Fig. 1. Distribution of Benzoic acid in Level I. This estimated the equilibrium partitioning of the quantity of organic chemical between the homogeneous environmental media with defined volumes, densities, organic carbon contents, and lipid fraction. There are no in- or out-flows of chemical, and no degrading reactions occur.

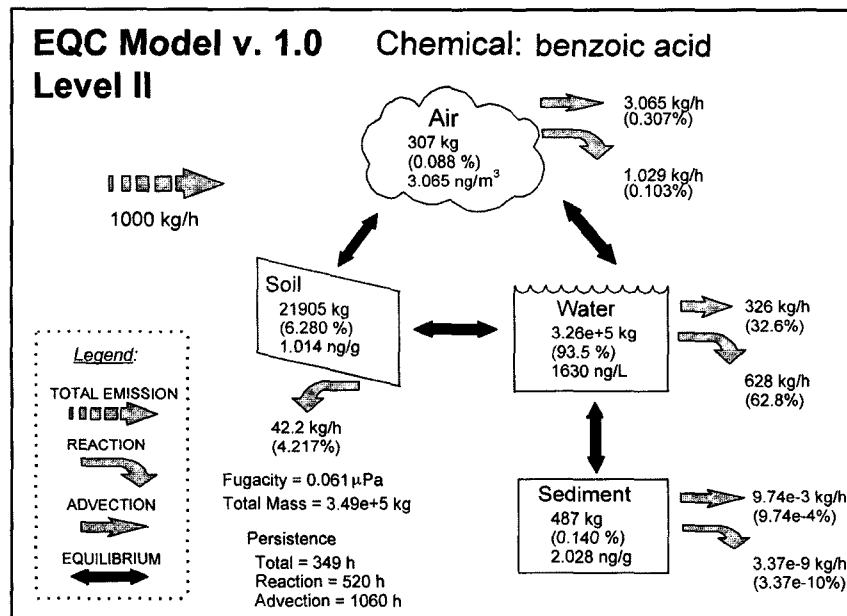


Fig. 2. Distribution of Benzoic acid in Level II. This estimation is similar to the Level I of Fig.1. This is a steady state model with a constant input rate, rather than single dose of chemical. There is both advective in- and out-flow of chemical from the unit world. Chemical losses can also occur through degrading reactions.

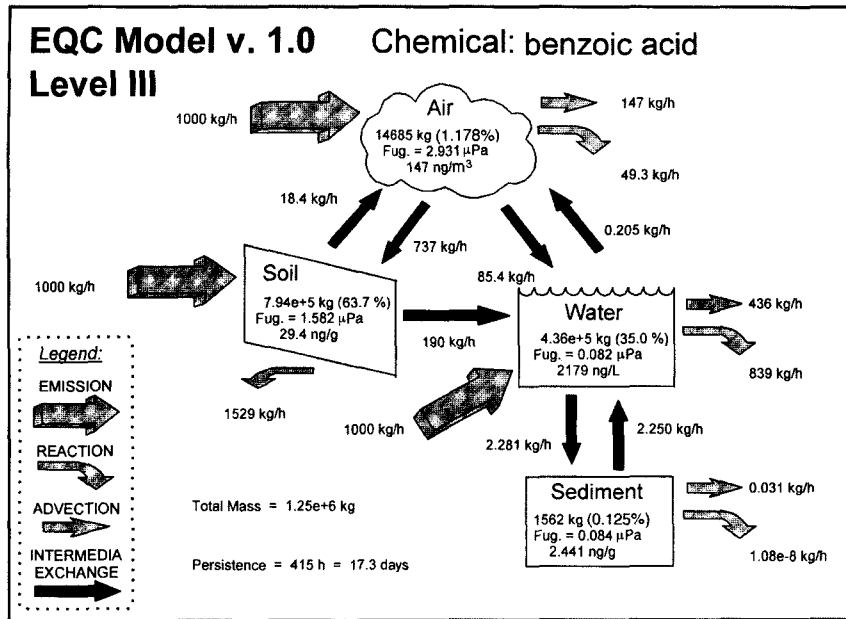


Fig. 3. Distribution of Benzoic acid in Level III. This does not assume an equilibrium state, but only steady state. This model uses conventional expressions and typical parameters for intermedia transfer by processes such as wet deposition from the air, sediment deposition in the water, a soil runoff.

Table 1. Estimated distribution of Acetanilide (as total amount)

Type	분포율 (%)			
	대기	수질	토양	저질
I	0.09	93.50	6.28	0.14
II	0.09	93.50	6.28	0.14
III	1.18	35.00	63.70	0.13

대기, 수질, 저질 및 토양에서 평형상태를 유지하고 있다고 가정하였을 때 각 매체로 분포된 양을 보여주고 있다. Fig. 2의 Level II는 시간당 1톤의 양이 대기 중으로 유입될 경우 각 매체에서 반응으로 인한 소실과 타 매체로의 이동, 평형상태에서 각 매체중의 분포량을 보여주고 있으며 Fig. 3의 Level III은 각 대기, 수질 및 토양으로 시간당 1톤씩 유입되는 것으로 가정하였을 때 각 매체에서의 이동량 및 반응량, 그리고 평형상태에서의 분포 비율 등을 표시하고 있다. 이러한 결과로 보아 benzoic acid는 Level I, II에서는 주로 수계에 분포하는 것으로 알려졌으며 이를 매체당 농도로 환산할

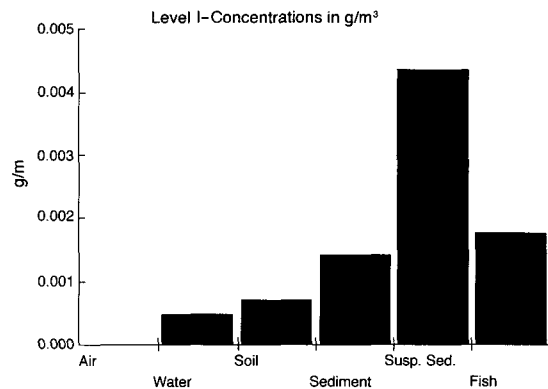


Fig. 4. Concentration of Benzoic acid in Level I distribution. Highest concentration of benzoic acid was shown in suspended sediment.

경우에는 부유 퇴적물 중에 가장 고농도로 존재하는 것으로 나타났다. Level III의 경우 최종적으로 토양계 (63.7%)와 수계 (35.0%)에 주로 잔류하게 되는 데 농도비율로 환산할 때는 토양 중에 가장 높게 존재하는 것으로 나타났다 (Table 1, Figs. 4, 5,

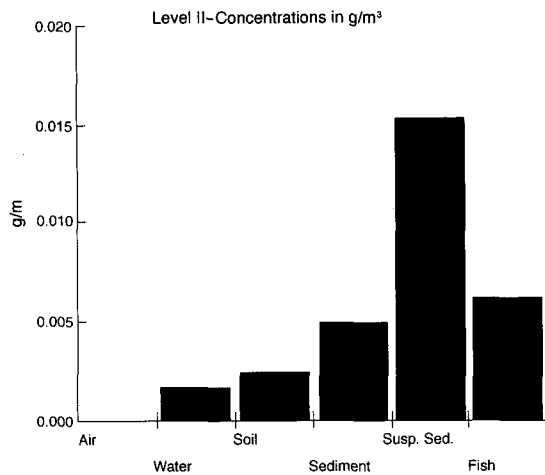


Fig. 5. Concentration of Benzoic acid in Level II distribution. Highest concentration of benzoic acid was shown in suspended sediment. The pattern is similar to Level I distribution.

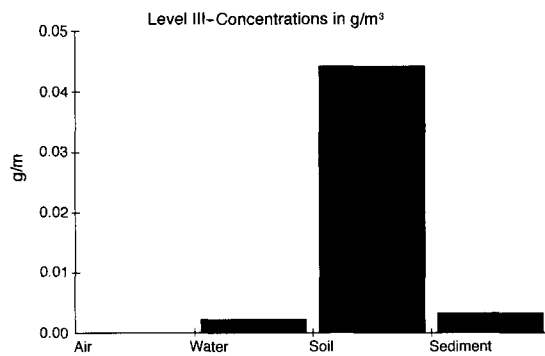


Fig. 6. Concentration of Benzoic acid in Level III distribution. Highest concentration of benzoic acid was shown in soil. The concentration of suspended solid was negligible.

6). Level III에서 benzoic acid의 부유퇴적물 농도는 거의 무시할 정도인데 이는 부유물질이 시간이 흐름에 따라 가라앉아 퇴적물이나 토양으로 이행되었음을 의미한다. Level I과 Level II에서 나타나는 분포 값이 동일하게 나타나는 것은 특이할 만한 사항으로 여겨지는 데 이는 Level I과 Level II 공히 수계에서 90% 이상의 높은 분포값을 가지기 때문에 상대적으로 타 매체에 대한 분포비율이 크게 변화하지 않은 것으로 생각된다.

이러한 결과는 본질적으로 benzoic acid의 수용해도가 매우 높기 때문에 나타나는 현상으로 볼 수 있으며 예측한 바대로 실온에서 증기압이 낮은 benzoic acid는 공기 중에는 거의 분포하지 않는 것으로 나타났다.

감사의 글

본 연구는 2002년 환경부의 “차세대 핵심 환경 기술 개발사업(Eco-technopia 21 project)”으로 일부 지원받은 과제입니다.

참고 문헌

식품의약품안전청, 식품첨가물공전, 2002.
 한국약학대학협의회 위생화학분과회. 위생약학 I-식품첨가물 2001; 365-414.
 환경부. 기존화학물질 유통량조사, 1998
 Cheng Z, Ren J, Li Y and Chang W. Establishment of a quantitative structure-activity relationship model for evaluating and predicting the protective potentials of phenolic antioxidants on lipid peroxidation.
 IUCLID (International Uniform Chemical Information Database). data set, Benzoic acid (CAS No 65-85-0) Aug. 2001; 14.
 Jayasinghe L, Kumarihamy BM, Jayarathna KH, Udishani NW, Bandara BM, Hara N and Fujimoto Y. Antifungal constituent of the stem bark of *Bridelia retus*, *Phytochemistry* 2003; 62(4): 637-641.
 Lopez A, Ming DS and Towers GH. Antifungal activity of benzoic acid derivatives from *Piper lanceaeifolium*, *J. Nat. Prod.* 2002; 65(10): 62-4.
 Mackay D. Multimedia environmental models : The fugacity approach, 1991; Lewis, Chesea, MI, USA.
 Mackay D, Paterson S and Shiu WY. Generic models for evaluating the regional fate of chemicals, *Chemosphere* 1992; 24: 695-717.
 Nair B. Final report on the safety assessment of benzyl alcohol, benzoic acid, and sodium benzoate, *Int. J. Toxicol.* 2001; 20(suppl 3): 23-50.
 US EPA, 40 CFR Part 439, Pharmaceutical Manufacturing Category Effluent Limitations Guidelines, Pretreatment Standards and New Source Performance Standards: Final Rule, pp. 10391-10394, March 4, 1999.