

Determination of Octanol/water Partition Coefficient by HPLC estimation method

김 균*, 이봉재, 김정환

한국화학연구소 안전성연구부 환경독성연구팀

분배계수 측정은 Hansch와 Fugita에 의해 1964년에 처음으로 제안되어 시도되었으며, 이들의 연구는 많은 구조활성관계(Structure Activity Relationship, SAR) 연구에 있어 기본이 되었다. 유기화학 물질의 환경동태 연구에 있어서 분배계수는 주요 인자로 평가되었는데, 그 이유는 화학물질의 수용성과 토양/저니토 흡착상수, 생물농축과 분배계수가 밀접한 관계가 있기 때문이며, SAR 측면에서의 분배계수의 중요성은 환경중에서 유기화합물의 움직임을 예측하는 포괄적인 방법임이 입증되었다. 따라서 새로운 화합물의 동태를 평가하는 첫 번째 과정으로 분배계수 측정의 필요성이 강조되었다.

현재 OECD guideline이나 EPA guideline에서 공식적으로 채택하고 있는 시험법은 flask-shaking 방법이나, 보다 간편한 방법인 HPLC 측정에 의한 분배계수의 측정이 점차로 확대되고 있으며, 공식적인 시험법으로 채택될 것으로 예상된다. 따라서 본 연구에서는 HPLC estimation 방법에 의해 분배계수를 측정하여 flask-shaking 방법에 의한 결과와 computer program에 의한 예측치와 비교하여 각각의 상관관계를 비교하여 HPLC estimation 방법의 적용 가능성을 알아보고자 하였다.

농약과 일반 화학물질을 포함한 총 52개 화합물을 대상으로 분배계수를 측정한 결과 flask-shaking 방법에 의한 문헌치와 측정치 간의 상관관계수 $r=0.957$ 로서 상관성이 있음을 확인하였으며, 문헌치와 computer program에 의한 예측치 간의 상관관계수 $r=0.892$ 로 computer program에 의한 분배계수의 예측이 다소 상관성이 낮으나 flask-shaking 방법이나 HPLC estimation 방법을 대체할 수 있는 가능성이 있음도 확인하였다. 따라서 computer program에 의한 분배계수의 예측은 짧은 시간에 매우 많은 화합물을 대상으로 분배계수치를 예측해야 할 필요성이 있는 경우 장점이 있으나, 단점으로는 상기의 2가지 방법보다 정확성이 다소 떨어진다는 것이고, HPLC estimation에 의한 분배계수치의 측정은 분석 가능한 화합물의 제한성이 있으나, 분배계수치가 비교적 정확하다는 것이다. HPLC estimation 방법에 의한 분배계수 측정시 표준물질로 사용한 물질은 aniline, benzene, bromobenzene, naphthalene, biphenyl, bibenzyl, p,p'-DDT 등 7개였으며, 7개 물질의 분배계수 범위는 $\log Kow=0.9\sim 6.2$ 범위였고, standard curve의 상관관계수 $r=0.982$ 였다.