제 목	**구조활성관계식을 이용한 세정제의 환경독성 예측** **Ecotoxicity of solvents predicted by structure-activity relationship**
이 름	안혜원 · 하준호
소속기관	수원대학교 환경공학과
Abstract	1987년 9월 캐나다의 몬트리올에서는 지구의 환경을 보호하기 위해 오존층을 파괴하는 Chlorofluorocarbon(CFC)-11, 12, 113, 114, 115 (Group I), Halon-1211, 1301, 2402 (Group II) 등을 규제하는 몬트리올 의정서를 채택하였다. CFC는 냉매, 탈지, 수치환 건조, 유성 오염물질 제거 등에 세정제로서 널리 사용되는 물질 중의 하나이므로, 몬트리올 의정서 채택 이후 CFC 관련산업은 큰 타격을 받게 되었고 대체물질 개발에 대한 연구가 활성화되었다. 특히 CFC-113의 대체물질로는 염소계 및 알코올계 세정제 등이 다양하게 사용되고 있으나, 이러한 물질의 사용은 오존층에 대한 환경부하를 줄이는 반면에 수계에 대한 환경부하를 증가시켰다. 염소계 세정제인 Trichloro ethylene (TCE)과 Dichloromethane (DCM)은 유력한 인체 발암 물질 (B2; probable human carcinogen)로 분류되고 있으며, 불소 알코올계 세정제인 Pentafluoropropyl alcohol (5FP)은 최근에 일본 다이킨사에서 개발되었으며, 사용기간이 짧으므로 보고된 독성자료는 없으나, 수생 생태계에 독성이 나타날 가능성은 배재할 수 없다. 따라서 본 연구에서는 염소계 세정제인 TCE와 DCM, 알코올계 세정제인 5FP의 물리 화학적 성질을 EPIWIN (Version 2.2)을 사용해 예측한 후, ECOSAR (EPA, Version 1.01)을 이용하여 수생 생물에 대한 급성독성, 특히 반수치사농도 (LC_{50})를 구하였다. TCE에 96시간 노출된 담수어의 LC_{50}은 39ppm, DCM에 96시간 노출된 담수어와 48시간 노출된 물벼룩의 LC_{50}은 각각 319ppm과 324ppm, 5FP의 경우는 각각 589ppm과 598ppm으로 예측되므로, 급성독성은 TCE>DCM>5FP의 순으로 나타났다. 한편 5FP는 실험결과 보고된 독성자료가 없으므로 ECOSAR로 예측한 독성을 검증할 수 없었으나, TCE와 DCM에 96시간 노출된 어류의 LC_{50}은 각각 20~67ppm과 193~310ppm으로 보고되고 있으며, 이는 ECOSAR로 예측된 LC_{50}과 비교적 유사한 값을 나타내었다.