

## EQC모델을 이용한 Acetanilide의 환경중 분포예측

박광식\*, 권민정, 최윤호, 송상환, 박혜연, 구현주

국립환경연구원 환경위해성연구부

### Estimated Environmental Distribution of Acetanilide Using EQC Model

Kwangsik Park\*, Minjeong Kwon, Yoonho Choi,  
Sanghwan Song, Hyeyon Park and Hyunju Goo

National Institute of Environmental Research, Gyeongseo-dong, Seo-gu, Incheon 404-170, Korea

#### ABSTRACT

Acetanilide is a High Production Volume Chemical, which is produced about 2,300 tons/year in Korea as of 1998 survey. Most is used as an intermediate for synthesis of pharmaceuticals and dyes and the chemical is one of seven chemicals of which human and environmental risks are being assessed by National Institute of Environmental Research under the frame of OECD SIDS program. The chemical is water soluble (4 g/l at 20°C) and readily biodegradable (68.7%). Partition coefficient (Log Pow) is 1.16 at 23°C so that the chemical has a low potential for bioaccumulation. The acute toxicities of algae, daphnia and fish are not high. The 72 hr- $E_0C50$  of algae is 13.5 mg/l, 48 hr- $EC50$  of daphnia is over 100 mg/l and 96 hr-LC50 of *Oryzias latipes* is over 100 mg/l. Regarding the exposure, levels in air, water, soil or sediment have not been monitored or estimated so that risk evaluation of acetanilide 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 98% of acetanilide 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 as 51.8% and water as 47.8% as of total amount.

**Key words :** acetanilide, EQC, Environmental distribution

#### 서 론

Acetanilide는 우리나라에서 1998년 기준으로 약 2,300톤 가량 생산된 바 있는 대량생산화학물질 (High Production Volume Chemicals)로서<sup>1)</sup> 환경

부는 「기존화학물질 위해성저감 및 체계적조사를 위한 상호협력규정」[C(90)163]에 따라 1999년부터 동 물질에 대한 환경 및 인체위해성평가를 수행하고 있다.<sup>2)</sup> 이 물질은 대개 의약품 또는 염료 생산공정의 중간체로 사용되고 있으며, 동물실험 결과 반복투여시 헤모글로빈 및 헤마토크리트 감소, 메테모글로빈, 설페모글로빈 및 빈혈을 유발하는 등 혈액학적 이상소견을 나타내는 것으로 알

\* To whom correspondence should be addressed.

Tel: 82-32-560-7070, E-mail: envipark@hanmail.net

려져 있다.<sup>3-5)</sup> 환경중 서식하는 생물체에 미치는 영향에 대한 결과는 잘 알려져 있지 않으나 어류를 이용한 급성독성시험시 96시간 노출에 의한 반수치사량이 어류 중에 따라 100~200 mg/l 범위로 나타났으며,<sup>6,7)</sup> 조류(조류) 성장률에 대한 72 hr- $E_bC_{50}$ 은 13.5 mg/l, 물벼룩에 대한 48 hr- $EC_{50}$ 은 100 mg/l 이상으로 알려졌다.<sup>8,9)</sup>

아직 국내에는 acetanilide에 대한 체계적인 환경 노출자료가 생산된 적이 없어 대기, 수질, 토양 등에 대한 오염현황을 알 수 없으며 따라서 노출 평가 자료에 근거한 위해성평가는 어려운 실정이다. 본 연구는 acetanilide에 대한 위해성평가의 일환으로서 EQC모델링을 이용하여 환경중 분포를 예측함으로써 향후 노출평가에 필요한 기초적인 자료를 제공하고자 수행되었다.

## 자료 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, 난용성물질은 Type 3으로 선택하고 매체간의 평형 및 안정상태에 따라 Level I, Level II, Level III 등의 노출시나리오를 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.<sup>10-11)</sup>

OECD 화학물질그룹은 대량생산화학물질의 위해성평가를 수행함에 있어 화학물질의 거동을 예측하는 모델로서 EQC모델을 추천하고 있는 바 본 연구에서는 이를 acetanilide의 매체간 분포예측에 사용하였다.<sup>11)</sup> EQC모델의 입력자료로는 기본적으로 분자량, 환경중 설정온도 및 대기, 수질,

토양, 저질에서의 반응반감기를 입력하고 Type 1 물질의 경우 수용해도, 증기압, 몰육탄올 분배계수 및 유점 등을 입력하였다. Type 2 물질의 경우 물에 대한 공기, 토양, 물고기, 부유 분진, 퇴적물의 분배계수를 Type 3물질의 경우 공기에 대한 물, 토양, 물고기, 부유 분진 및 퇴적물의 분배계수를 입력하였다.

### 2. 자료입력

아세트아닐리드는 고체분말이며 토양 및 물에서의 휘발성이 낮은 물질이므로 Type 1 물질로 분류하였고 모델입력자료는 예측의 신뢰성을 높이기 위해 실험결과 및 신뢰성있는 문헌자료를 선별하여 입력하였다.

분자량은 135, 환경온도는 20°C, 수용해도는 4,000 g/m<sup>3</sup> 증기압 0.2 Pa, 육탄올/물 분배계수(Log Kow)는 1.16, 녹는점은 113.7°C를 입력하였다. 반응반감기는 대기중 31시간, 수질 8,760시간을 입력하였고 토양 및 저질에서의 반응반감기는 확인되지 않아 default 값으로 처리하였다.<sup>12-18)</sup>

### 3. 분포율계산

EQC모델은 자료입력 후 자동적으로 분포율을 계산하도록 프로그램되어 있어 별도의 수동적 계산은 할 필요가 없다. 따라서 선택한 물성자료를 입력하고 분포율은 모델에서 제시한 매뉴얼에 따라 자동적으로 실행되도록 하였다.

## 결과 및 고찰

Acetanilide를 type 1 물질로 가정하고 Level I, Level II, Level III에서의 환경중 거동을 예측한 결과를 Fig. 1, 2 및 3에 각각 나타내었다. Fig. 1의 Level I에서는 100톤의 물질이 밀폐된 시스템에서 대기, 수질, 저질 및 토양에서 평형상태를 유지하고 있다고 가정하였을 때 각 매체로 분포된 양을 보여주고 있다. Fig. 2의 Level II는 시간당 1톤의 양이 대기중으로 유입될 경우 각 매체에서 반응으로 인한 소실과 타 매체로의 이동, 평형상태에서 각 매체 중의 분포량을 보여주고 있으며 Fig. 3의 Level III은 각 대기, 수질 및 토양으로 시간당

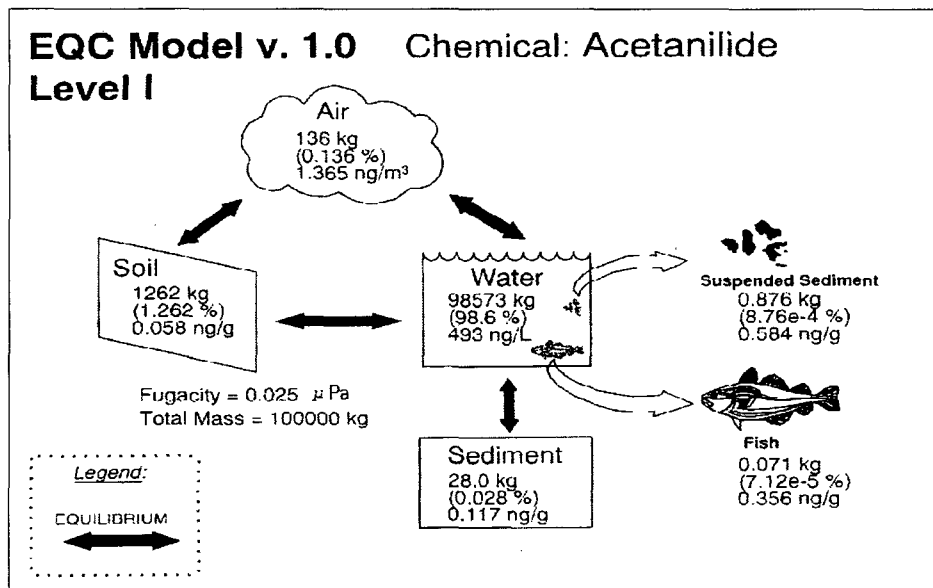


Fig. 1. Distribution of Acetanilide in Level I. This estimated the equilibrium partitioning of a quantity of organic chemical between the homogeneous environmental media with defined volumes, densities, organic carbon contents, and lipid fraction. There are no in- or out-flows of chemical, and no degrading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

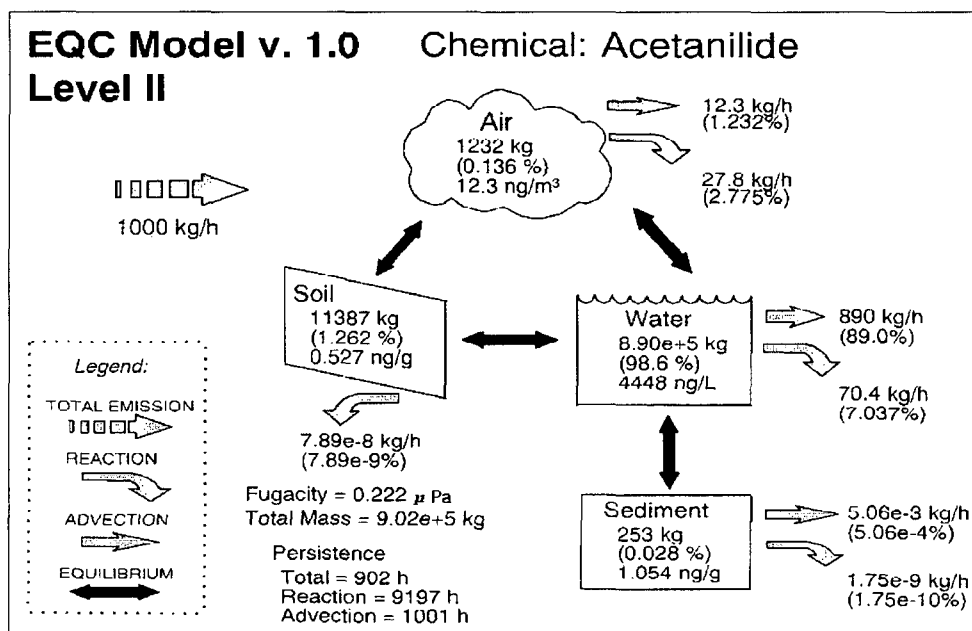


Fig. 2. Distribution of Acetanilide in Level II. This estimation is similar to the Level I of Fig. 1. This is a steady state model with a constant input rate, rather than single dose of chemical. There is both advective in- and out-flow of chemical from the unit world. Chemical losses can also occur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

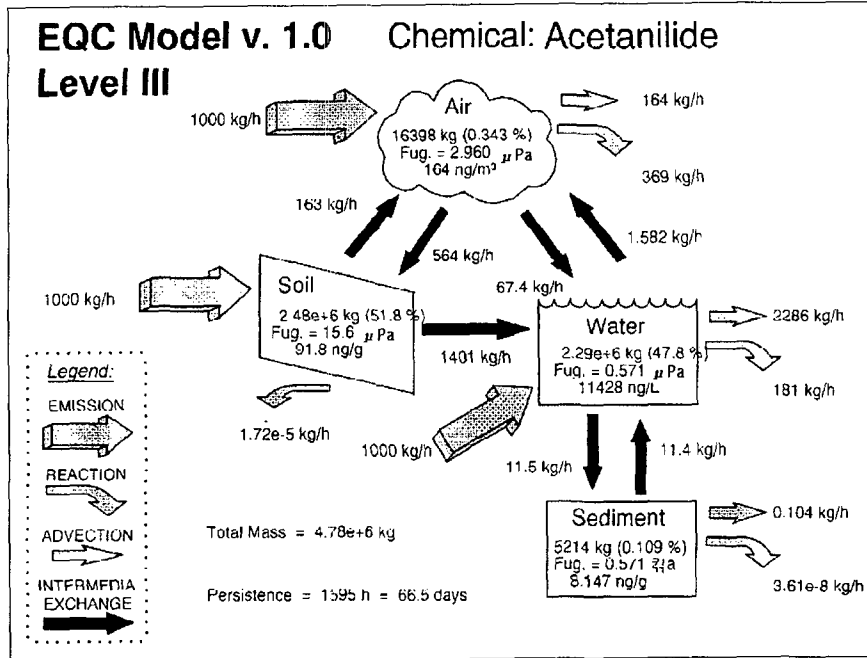


Fig. 3. Distribution of Acetanilide in Level III. This does not assume an equilibrium state, but only steady state. This model uses conventional expressions and typical parameters for intermedia transfer by processes such as wet deposition from the air, sediment deposition in the water, a soil runoff.

Table 1. Estimated distribution of Acetanilide

| Type | 분포율 (%) |       |       |      |      |
|------|---------|-------|-------|------|------|
|      | 대기      | 수질    | 토양    | 저질   | 생물체  |
| I    | 0.13    | 98.57 | 0.02  | 1.26 | 0.02 |
| II   | 0.13    | 98.57 | 1.27  | 0.03 | -    |
| III  | 0.30    | 47.80 | 51.80 | 0.10 | -    |

1톤씩 유입되는 것으로 가정하였을 때 각 매체에서의 이동량 및 반응량, 그리고 평형상태에서의 분포 비율 등을 표시하고 있다. 이러한 결과로 보아 acetanilide는 Level I, II에서는 주로 수계에 분포하는 것으로 알려졌으며 이를 농도로 환산할 경우 부유 퇴적물 중에 가장 고농도로 존재하는 것으로 나타났다. Level III의 경우 최종적으로 수계와 토양에 잔류하게 되는데 농도비율로 볼 때 토양 중에 가장 고농도로 존재하는 것으로 나타났다 (Table 1).

이러한 결과는 본질적으로 acetanilide의 수용해도가 매우 높기 때문에 나타나는 현상으로 볼 수

있으며 예측한 바대로 실온에서 고체인 acetanilide는 공기 중에는 거의 분포하지 않는 것으로 나타났다.

참고 문헌

1. 환경부. (1998) 기존화학물질 유통량조사.
2. 환경부. (2000) 유해화학물질관리기본계획, pp. 53-73.
3. 환경부. (2001) 랫드를 이용한 아세트아닐리드의 반복 투여독성 및 번식/발생독성 병행시험 (환경부지원 한국화학연구소 수행, 시험번호 G00154).
4. Paul K Smith. Changes in blood pigments associated with the prolonged administration of large doses of acetanilid and related compounds. J. Pharm. Exp. Ther., 1940; 170 : 171-178.
5. David L. Formation of methemoglobin: Species differences with acetanilide and acetophenetidine. J. Pharm. Exp. Ther., 1943; 77 : 154-159.
6. 환경부. (1997) 합성화학물질의 안전성시험사업 (X) (환경부지원 한국화학연구소 수행, 시험번호 ES-010).
7. Dawson GW, Jennings AL, Drozdowski D and Rider E.

- The acute toxicity of 47 chemicals to fresh and saltwater fishes. *J. Hazardous Materials*, 1(1975/77) : 303-318.
8. 환경부. (2001) The toxicity of acetanilide to aquatic plants (algae) (EG01001, KRICT, sponsored by Ministry of Environment, Korea).
  9. 환경부. (2001) The acute toxicity of acetanilide to aquatic invertebrate (Daphnia) (EG01002, KRICT, sponsored by Ministry of Environment, Korea).
  10. Mackay D, Paterson S and Shiu WY. (1992) Generic models for evaluating the regional fate of chemicals, *Chemosphere*, 24 : 695-717.
  11. Mackay D. (1991) Multimedia environmental models : The fugacity approach, Lewis, Chelsea, MI, USA.
  12. IUCLID. (1998) (International Uniform Chemical Information Database) data set (Acetanilide: 103-84-4).
  13. Lide LR. (edt) *CRC Handbook of Chemistry and Physics: A Ready-Reference Book of Chemicals and Physical Data* (1991, 71st ed) CRC Press. Inc Boston USA.
  14. Zok S, Gorge G, Kalsch W and Nagel R. Bioconcentration, metabolism and toxicity of substituted anilines in the zebrafish (1991), 109/110 : 411-421.
  15. National Institute of Environmental Research[NIER] (2001), Test of acetanilide hydrolysis as a function of pH (tested by LGCI and sponsored by NIER).
  16. NIER. (2001) Test of acetanilide partition coefficient (n-octano/water) (EG01026, KRICT sponsored by NIER).
  17. NIER. (2001) Test of acetanilide melting point/range (tested by LGCI and sponsored by NIER).
  18. NIER. (2001) Estimation of Physical/chemical properties and Environmental fate of SIDS chemicals.