

Benzoyl peroxide의 환경에서의 초기 위해성 평가

김미경, 배희경, 김수현*, 송상환, 구현주, 박광식**,
이문순*, 전성환, 나진균

국립환경연구원 위해성평가과, *(주) 바이오톡스텍, **동덕여자대학교 약학대학

Initial Risk Assessment of Benzoyl peroxide in Environment

Mi Kyoung Kim, Heekyung Bae, Su-Hyon Kim*, Sanghwan Song, Hyunju Koo,
Kwangsik Park**, Moon-Soon Lee*, Sung-Hwan Jeon and Jin-Gyun Na

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

*Biototech Co., Ltd., 58-1 Block, Ochang Scientific Industrial Complex,
Cheongwon-gun, Chungcheongbuk-do, 363-883, Korea

**College of Pharmacy, Dongduk Woman's University 23-1, Wolgok-dong,
Seongbuk-gu, Seoul 136-174, Korea

ABSTRACT

Benzoyl peroxide is a High Production Volume Chemical, which is produced about 1,375 tons/year in Korea as of 2001 survey. The substance is mainly used as initiators in polymerization, catalysts in the plastics industry, bleaching agents for flour and medication for acne vulgaris. In this study, Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) are used for getting adequate information on the physical-chemical properties of this chemical. And hydrolysis in water, acute toxicity to aquatic and terrestrial organisms for benzoyl peroxide were studied. The physical-chemical properties of benzoyl peroxide were estimated as followed; vapor pressure = 0.00929 Pa, Log K_{ow} = 3.43, Henry's Law constant = 3.54×10^{-6} atm-m³/mole at 25°C, the half-life of photodegradation = 3 days and bioconcentration factor (BCF) = 92. Hydrolysis half-life of benzoyl peroxide in water was 5.2 hr at pH 7 at 25°C and according to the structure of this substance hydrolysis product was expected to benzoic acid. Benzoyl peroxide has toxic effects on the aquatic organisms. 72 hr-ErC₅₀ (growth rate) for algae was 0.44 mg/L, 48 hr-EC₅₀ for daphnia was 0.07 mg/L and the 96 hr-LC₅₀ of acute toxicity to fish was 0.24 mg/L. Acute toxicity to terrestrial organisms (earth worm) of benzoyl peroxide was low (14 day-LC₅₀ = > 1,000 mg/kg). Although benzoyl peroxide is high toxic to aquatic organisms, the substance is not bioaccumulated because of the rapid removal by hydrolysis (half-life = 5.2 hr at pH 7 at 25°C) and biodegradation (83% by BOD after 21 days). The toxicity observed is assumed to be due to benzoyl peroxide rather than benzoic acid, which shows much lower toxicity to aquatic organisms. One can assume that effects occur before hydrolysis takes place. From the acute toxicity value of algae, daphnia and fish, an assessment factor of 100 was used to determine the predicted no effect concentration (PNEC). The PNEC was calculated to be 0.7 µg/L.

※ To whom correspondence should be addressed.

Tel: +82-32-560-7113, E-mail: munlee@hanmail.net

based on the 48 hr-EC₅₀ daphnia (0.07 mg/L). The substance shows high acute toxicity to aquatic organisms and some information indicates wide-dispersive use of this substance. So this substance is a candidate for further work, even if it hydrolysis rapidly and has a low bioaccumulation potential. This could lead to local concern for the aquatic environment and therefore environmental exposure assessment is recommended.

Key words : benzoyl peroxide, initial risk assessment, physical chemical properties, environmental fate, ecotoxicity

서 론

현재 전 세계적으로 1,700만 여종의 화학물질이 개발되어 그 중 약 10만 여종의 화학물질이 상업적으로 유통되고 있으며, 매년 2천여 종의 신규 화학물질이 새로이 유통되고 있다. 그 중 대부분의 기존화학물질들은 안전성에 대한 구체적인 확신이나 위해성 평가의 기초 자료가 없는 상태에서 생산, 유통, 사용 및 폐기되어 대기, 수질, 토양 등 환경매체를 통해 인체에까지 도달할 수 있어 결과적으로 인체 및 환경 모두에게 위해를 가할 수 있다(국립환경연구원, 1999). OECD에서는 이들 기존화학물질들에 대한 안전성 및 위해성 평가 작업을 수행하기 위한 구체적인 활동으로서 SIDS (Screening Information Data Set) 사업을 수행해 오고 있다. OECD SIDS 사업은 한 회원국 또는 EU국가에서 1,000톤/년 이상 생산되거나 수입되는 대량생산화학물질 (high production volume chemicals, HPV Chemicals)들에 대한 특징, 영향, 노출 정보의 수집, 시험수행에 의한 초기 위해성 평가 보고서를 완성하여, 각 물질의 결과에 대한 초기 위해성 평가를 행하고 조사된 화학물질에 대하여 잠재적 위해성에 대한 결론 및 권고사항을 정하는 것이다. 이러한 활동들은 각 회원국들로부터 동의를 받아 이루어지며, 2000년 기준으로 각 회원국들에서 제시한 대량생산화학물질의 수는 5,235종이다. 우리나라는 「기존화학물질 위해성 저감 및 체계적 조사를 위한 상호협력규정」 [C(90)163]에 따라 1999년부터 7개 물질에 대한 환경 및 인체 위해성 평가를 수행해 오고 있다(국립환경연구원, 1999; Organisation for Economic Co-operation and Development, 2003).

그 중에서도 Benzoyl peroxide는 우리나라에서 2001년 기준으로 1,357톤 생산되었고 수입되는 양은 268톤/년, 수출되는 양은 293톤/년의 대량생산

화학물질로서 백색의 고체상의 물질이며 알칼리 용액에서 hydrogen peroxide와 benzoyl chloride의 반응에 의해 생성된다. 이 물질은 주로 스티로폼 원료와 의류 제조공정의 싸이징, 페인트 제조공정 중의 아크릴 수지, 밀가루 표백제, 여드름 치료제와 같은 의약품으로 사용된다(국립환경연구원, 2002).

OECD SIDS 프로그램에서는 화학물질의 환경에 대한 초기 위해성 평가를 수행하기 위하여 물리화학적 특징, 환경거동 및 생태독성에 대한 신뢰성 있는 자료들을 요구하고 있다. Benzoyl peroxide의 경우 기존문헌의 신뢰성 있는 자료가 미미하고 SIDS 필수항목(녹는점 등 13항목)에 대한 데이터가 부족하여 이 물질에 대한 초기 위해성 평가를 수행하는데 어려움이 있었다. 따라서 본 연구에서는 신뢰성 있는 문헌자료와 필수항목에 대한 모델링 예측을 통해 benzoyl peroxide의 물리화학적 특성과 환경거동을 확인하고자 하였고, OECD Test-guideline (OECD TG 201, 202, 203, 207)에 따라 생태독성시험을 수행하여 이를 기초로 환경에 대한 초기 위해성 평가를 수행하였다.

재료 및 방법

1. 물리화학적 특성

물리화학적 특성 중에서 SIDS 필수 항목인 녹는점, 끓는점, 증기압, 옥탄올-물 분배계수 및 수용해도에 대하여 OECD SIDS 지침서에서 추천하고 있는 CRC HandBook, Merck Index와 같은 참고문헌 및 IUCLID, HSDB와 같은 데이터베이스 검색 시스템에 의하여 일차적으로 검색되었으며, 검색된 데이터가 존재하지 않거나 수준이 평가기준에 못 미치는 경우 QSAR (Quantitative Structure Activity Relationships) 모델에 의해 예측되었다(Syracuse Research Corporation, 2002). 본 연구에서는 증기

압, 옥탄올-물 분배계수, 헨리 상수 값을 예측하는데 QSAR 모델이 사용되었으며, 증기압의 경우는 MPBPWIN 모델 (version 1.4), 옥탄올-물 분배계수는 KOWWIN 모델 (version 1.6), 헨리 상수는 HENRYWIN 모델 (version 3.10)에 의해 계산되었으며 이들 모델은 Syracuse Research Corporation (SRC)에 의해 개발되었다. 이들 QSAR 모델 프로그램들은 화학물질의 구조식으로부터 값이 예측되는데 구조식은 SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) 표기법으로부터 자동으로 입력되어 계산된다. Benzoyl peroxide의 SMILES 표기법은 O=C(OOC(=O)c1ccccc1)c1ccccc1c2 이었다.

2. 환경거동 및 경로

환경거동 및 경로분야에 대해서는 기존의 참고 문헌 및 데이터베이스 검색결과 생분해성 이외의 다른 분야에서는 자료가 존재하지 않았기 때문에 모델예측과 수중안전성 시험이 수행되었다. 광분해성의 경우 AOPWIN 모델 (version 1.9)이, 생물농축성의 경우 BCFWIN 모델 (version 2.14)이 이용되었고 두 모델은 위의 경우와 같이 QSAR 모델로 SRC에 의해 개발되었고 모델수행방법도 동일하였다.

수중안전성의 시험은 OECD TG 111 (Organisation for Economic Co-operation and Development, 2001), "Hydrolysis as a Function of pH"에 따라 pH 4.0, pH 7.0, pH 9.0의 수용액에서 가수분해시험이 실시되었다. 예비시험은 0.05 M citrate buffer (pH 4.0), 0.05 M phosphate buffer (pH 7.0), 0.05 M borate buffer (pH 9.0)에 benzoyl peroxide (순도 70%, Sigma-Aldrich사, Milwaukee, WI, USA)를 농도가 4 ppm이 되도록 녹인 다음 밀봉하여 산소의 유입을 막고 빛을 차단하여 광분해를 방지한 조건에서 50°C의 수조에서 5일간 incubation 한 후 분석하였고 분석은 C₁₈ column을 이용한 HPLC 법을 사용하였다. 본 시험은 위의 pH 4.0, pH 7.0, pH 9.0의 buffer에 benzoyl peroxide를 농도가 4 ppm이 되도록 제조하여 각각의 pH에서 가수분해 정도가 약 10~50% 정도 일어나는 범위 내에서 일정시간 간격으로 시험용액 1 mL를 취하여 benzoyl peroxide를 분석하였으며 시험 기간 중의 시험용액은 water bath에 25°C로 유지되었다.

환경거동분야는 다매체 환경거동 예측 모델인 EQC (Equilibrium Criterion) 모델을 이용하여 예측되었다 (Canadian Environmental Modelling Centre, 2002). EQC 모델은 Mackay, D.에 의해 캐나다 Trent University에서 개발되었고 모델링을 수행하는데 필요한 입력 자료는 화학물질의 분자량, 온도, 수용해도, 증기압, 옥탄올-물 분배계수, 녹는점, 대기, 수질, 토양, 저질에서의 반감기 데이터이며 이러한 자료를 입력하면 자동으로 매체별 분포율이 계산된다.

3. 생태독성

생태독성에서는 필수항목인 어류, 물벼룩, 조류 세 종의 생물에 대한 기존의 신뢰성 있는 문헌이 존재하지 않아 OECD TG에 따른 독성시험이 수행되었다.

어류 급성독성시험은 OECD TG 203 (Organisation for Economic Co-operation and Development, 2001), "Fish, Acute Toxicity Test"에 따라 유수식 (continuous flow-through system)으로 실시되었다. 시험어종은 OECD TG 추천 어종인 송사리 (*Oryzias latipes*)로 한국화학연구원 부설 안전성평가연구소 생태독성 어류 사육실에서 계대 사육한 약 9개월 된 개체로 체장은 3.5±0.1 cm, 체중은 0.34±0.04 g이었으며 시험개시 24시간 전부터 절식시켰다. 어류의 사육수 및 시험에 사용한 희석수는 수돗물을 membrane filter (1 μm)와 활성탄 여과장치를 통과시켜 사용하였으며 희석수의 경도는 53.5 mg/L CaCO₃, 알칼리도는 30.5 mg/L CaCO₃였다. 시험기간은 96시간이었고 시험용액 조제시 benzoyl peroxide는 아세톤 (Wako, Japan)에 녹여 사용되었으며, 시험에 사용된 benzoyl peroxide는 순도 97.3%의 Hansol chemical company, Korea 제품이었다. 시험농도는 평균측정시험농도로 0.23, 0.47, 0.69, 1.54, 2.17 mg/L이었으며 시험용액 조제시 사용된 아세톤의 농도는 750 mg/L였다. 이때 대조군 (희석수), 유기용매대조군 (아세톤) 또한 시험되었고, 시험기간 동안 시험물질은 HPLC C₁₈ column을 이용하여 분석되었다. 노출은 8.7 L의 사각유리수조에 유수식으로 시험되었고 시험 농도 당 10마리를 반복 없이 처리하였으며 시험기간 동안 수온은 24.4~25.0°C, 용존산소는 8.0~8.6 mg/L, pH는 7.27~

7.55, 광주기는 형광등으로 16L/8D가 되도록 조절하였으며 조도는 284~309 Lux였다. 시험기간 동안 먹이와 공기는 공급하지 않았고 관찰은 24시간마다 치사어와 독성증상을 관찰하여 기록하였으며 미병을 접촉 자극할 때 반응이 없는 것과 아가미 호흡이 중단된 것을 치사한 것으로 간주하였고 결과 분석은 Moving-Average Angle법 (US EPA, 1985)에 의하여 96시간 LC₅₀값과 95% 신뢰한계를 구하였다.

물벼룩 급성독성시험은 OECD TG 202 (Organisation for Economic Co-operation and Development, 2001), "Daphnia sp., Acute Immobilisation Test"에 따라 지수식(static)으로 수행되었다. 시험생물은 OECD TG 추천종인 *Daphnia magna*로 한국화학연구원 부설 안전성평가연구소 사육실에서 계대 배양한 24시간 미만의 어린개체를 사용하였다. 사육수 및 시험에 사용된 회석수는 OECD M₄배지를 사용하였고 수질은 경도가 226.5 mg/L CaCO₃, 알칼리도는 39.0 mg/L CaCO₃이었으며 pH는 8.0이었다. 시험환경조건은 광주기가 16L/8D가 되도록 조절하였고 조도는 1,427~1,457 Lux였고 시험 기간 동안 수온은 21.0~21.1°C, 용존산소는 7.5~8.6 mg/L, pH는 7.71~7.99였으며 시험 기간동안 먹이는 공급하지 않았다. 시험은 48시간동안 지수식으로 수행되었고 시험에 사용된 benzoyl peroxide는 순도 97.3%의 Hansol chemical company, Korea 제품으로, 시험용액 조제시 아세톤(Wako, Japan) 1000 mg/L에 녹여 사용되었다. 시험농도는 대조군(회석수), 용매대조군(아세톤), 0.03, 0.06, 0.13, 0.25, 0.50 mg/L(설정농도)에서 실시하였으며 150 mg/L 용량의 crystallizing dish에 시험용액 100 mg/L를 10마리씩 3반복으로 처리하였으며, 시험농도 당 노출 마리수는 총 30마리로 하였다. 시험물질의 농도분석은 HPLC C₁₈ column을 이용하여 분석되었다. 관찰은 24시간과 48시간에 시험용액을 가볍게 저어 준 다음, 약 15초 후에 물벼룩이 물의 흐름을 벗어나지 못하는 개체를 영향 받은 것으로 간주하였으며 Moving-Average Angle법(US EPA, 1985)에 의하여 48시간 EC₅₀값과 95% 신뢰한계를 구하였다.

조류 성장저해시험은 OECD TG 201 (Organisation for Economic Co-operation and Development, 2001), "Alga, Growth Inhibition Test"에 따라 OECD TG 추천종인 *Selenastrum capricornutum* (Strain

No. ATCC 22662)을 시험생물로 하여 72시간동안 독성시험이 수행되었다. 시험 조류는 미국 American Type Culture Collection에서 구입하여 한국화학연구원 안전성연구센터 생태독성연구실에서 계대배양하고 있는 것을 사용하였다. 시험시 조류의 배양액은 OECD 배지를 사용하였고 삼각플라스크에 배양액을 100 mL 넣고 시험 조류의 농도를 1×10^4 cells/mL로 접종하여 전배양하였으며 배양은 Shaking Incubator 내에서, 온도 22~24°C, 조도 8,772~9,106 Lux (형광등으로 계속 조명) 조건에서 배양하였고, 1분에 약 100회 정도 흔들어주었다. 시험은 대조군, 용매대조군(아세톤), 0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.8 mg/L(설정농도) 농도에서 실시되었으며 시험물질(benzoyl peroxide, 97.3%, Hansol chemical company, Korea)은 아세톤(Wako, Japan) 1,700 mg/L에 녹여 사용되었다. 각각의 시험물질 용액은 0.45 µm acrodisc에 통과시켜 멸균시킨 후 100 mL의 배양액에 투여하여 시험농도를 만들었고 시험농도 당 조류의 세포수가 1×10^4 cells/mL가 되게 접종하였으며 시험환경은 전배양 조건과 동일하였다. pH는 시험 시작시 7.45~7.78, 시험 종료시 7.45~8.01이었으며 시험물질의 농도분석은 HPLC C₁₈ column을 이용하여 분석하였다. 관찰 및 측정은 조류를 접종한 후 0, 24, 48 및 72시간에 각 삼각플라스크의 세포수를 Thomas 혈구판을 이용하여 200배 또는 400배율의 현미경하에서 계수하였다. 각 시험농도별 성장저해는 성장률을 이용한 계산법과 면적 계산법을 이용하여 계산하였으며 EC₅₀값은 Comprehensive Toxicity Data Analysis and Database Software (Version 5.0)로, 무영향농도(NOEC)와 최저영향농도(LOEC)는 $p < 0.05$ 에서 Dunnett's test를 이용하여 구하였다.

Benzoyl peroxide의 육상무척추 동물에 대한 영향을 알아보기 위하여 지렁이에 대한 14일 급성독성시험이 이루어졌다. 시험은 OECD TG 207 (Organisation for Economic Co-operation and Development, 2001), "Earthworm, Acute Toxicity Test-Artificial Soil Test"에 따라 시행되었다. 시험생물은 *Eisenia foetida*로 농업과학기술원에서 분양받아 사용하였고 시험 24시간 전에 12 L 용량의 플라스틱 통에 지렁이를 약 150마리 넣고 온도 $20 \pm 2^\circ\text{C}$, 조명 400~800 Lux에서 순화 및 절식을 실시하였고 시험에 사용한 지렁이의 체중은 348 ± 28 mg이었

Table 1. Hydrolysis rate constant and half life of benzoyl peroxide at 25°C.

pH	Temp. (°C)	Initial concentration, C ₀ (M)	Hydrolysis rate constant k _{obs} (1/s × 10 ⁵)	Half life (T _{1/2} , h)	Correlation, R ²
4.0	25	1.7 × 10 ⁻⁵	1.6	11.8	0.99
		1.65 × 10 ⁻⁵	1.6	11.9	0.96
7.0	25	1.46 × 10 ⁻⁵	3.6	5.3	0.99
		1.46 × 10 ⁻⁵	3.26	5.9	0.98
9.0	25	1.65 × 10 ⁻⁵	NA	NA	NA

*NA = not detected

다. 인공토양은 OECD TG에 따라 조제되었고 pH는 6.0 ± 0.5가 되도록 CaCO₃를 일정량 가하여 혼합기를 이용하여 완전히 혼합하여 사용하였다. 시험농도는 대조군, 유기용매대조군 (아세톤), 1024 mg/kg이었으며 이때 사용된 benzoyl peroxide는 순도 97.3%의 Hansol chemical company, Korea 제품이었으며 시험용액은 아세톤 (Wako, Japan)에 녹여 제조되었다. 시험농도 당 지렁이를 10마리씩 4반복으로 처리하였고 시험환경은 지렁이를 처리한 용기를 향온기에 넣어 온도 20.3 ± 0.2°C, 조도는 형광등으로 24시간 계속 점등하여 525 ~ 603 Lux였고 시험기간 동안 먹이는 공급하지 않았다. 관찰 및 측정은 7일, 14일에 치사마리수를 계수하였고, 처리군에서 살아있는 지렁이의 체중 측정, 형태이상, 행동의 변화, 토양수분 변화 등을 기록하였다.

결과 및 고찰

1. 물리화학적 특성 및 환경거동

Benzoyl peroxide의 물리화학적 특성은 다음과 같다. 녹는점은 105°C (Lide, D.R. ed, 1995 ~ 1996) 이었고 MPVPWIN 모델을 이용하여 예측한 증기압은 25°C에서 0.00929 Pa였으며 KOWWIN 모델을 이용한 옥탄올-물 분배계수의 예측결과는 25°C에서 Log K_{ow} = 3.43으로 소수성이 작은 화합물질로 예측될 수 있었다. 이 물질의 수용해도는 25°C에서 9.1 mg/L로 수용액에서 거의 녹지 않으며 (the CSCL Japan, 1992), HENRYWIN 모델로 예측된 헨리 상수 값은 25°C에서 3.54 × 10⁻⁶ atm·m³/mole로 수질에서 대기로 느리게 휘발하는 성질이 있음을 나타내었다. 대기 중의 광분해 반감기는 AOPWIN

Table 2. Environmental distribution of benzoyl peroxide in Fugacity level III.

Compartment	Release 100% to air	Release 100% to water	Release 100% to soil	All three
Air	1.08	0.068	0.007	0.04
Water	0.01	85.0	0.0068	0.02
Soil	98.9	6.24	99.999	99.9
Sediment	0.001	8.65	0.0007	0.002

모델에 의해 예측되었는데, 대기에서 수산화기(OH radical) 반응에 의한 광화학적으로 산화하는 분해 반감기는 3일 (12시간 노출기준)이었고 반응상수는 3.6 × 10⁻¹² cm³/molecule·sec 이었다. OECD TG 111에 따른 수중안전성 시험에서 예비시험 결과 pH 4.0, pH 7.0, pH 9.0의 조건에서 50°C에서 5일간 반응했을 때 benzoyl peroxide의 90% 이상이 가수분해된 것으로 확인되어 본 시험이 수행되었다. Benzoyl peroxide는 25°C 수용액에서 가수분해 반응속도와 반감기를 측정된 본 시험 결과는 Table 1에 나타내었다. pH 4에서 반감기는 11.9시간, pH 7에서는 5.2시간, pH 9에서는 반응속도가 매우 빨라 시험에 사용한 분석조건 하에서는 반감기의 측정이 불가능하여, benzoyl peroxide가 수용액 상태에서 가수분해가 매우 빠른 물질임을 확인할 수 있었다. Benzoyl peroxide의 환경중의 거동을 예측하기 위하여 EQC 모델이 이용되었는데 그 결과는 Table 2에 나타내었다. Table 2에서와 같이 benzoyl peroxide는 Fugacity level III에서 주로 토양(99.9%)으로 분포하는 경향이 있으나 100% 수질로 화학물질이 유입되었을 때는 대부분 수질(85%)에 분포하는 경향을 보였다. Benzoyl peroxide의 생분해성은 OECD TG 301C에 따라 시험되었는데 BOD 농도변화에

Table 3. Cumulative mortality of *Oryzias latipes* for benzoyl peroxide during 96 hr exposure.

Nominal concentrations (mg/L)	Mean measured concentration (mg/L)	Cumulative mortality (percent mortality)			
		24 hr	48 hr	72 hr	96 hr
Control	Control	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
Solvent control	Solvent control	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
0.25	0.23	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
0.5	0.47	2(20)	6(60)	10(100)	10(100)
1.0	0.69	4(40)	10(100)	10(100)	10(100)
2.0	1.54	10(100)	10(100)	10(100)	10(100)
4.0	2.17	10(100)	10(100)	10(100)	10(100)

의한 미생물의 분해율이 21일 후에 83%로 나타나 이 물질은 환경 중에서 빠르게 생분해되는 물질로 판단되었다(the CSCL Japan, 1992). 또한 생물축적은 BCFWIN 모델에 의해 $\log K_{ow}$ 3.46을 이용하여 예측한 결과 BCF 값이 92로 계산되어 benzoyl peroxide는 생체 내에서 축적될 가능성이 적은 물질임을 보여주었다.

2. 생태독성

어류, 물벼룩, 조류 및 지렁이에 대한 생태독성시험 결과는 다음과 같다.

Benzoyl peroxide의 96시간 어류급성독성시험은 평균측정농도 기준으로 0.23, 0.47, 0.69, 1.54 및 2.17 mg/L와 용매대조군, 대조군에서 실시되었으며 결과는 Table 3에 나타내었고, 대조군 및 용매대조군에서는 치사 또는 영향 받은 개체나 독성증상은 관찰되지 않았다. 송사리(*Oryzias latipes*)의 96시간 LC₅₀값은 0.24 mg/L였으며 이때 5% 신뢰한계는 0.20~0.27 mg/L, 최대 0% 치사 시험농도는 0.23 mg/L, 최저 100% 치사 시험농도는 0.47 mg/L, 무영향수준은 0.23 mg/L이었다. Benzoyl peroxide의 48시간 물벼룩 급성독성 시험 결과는 Table 4에 나타내었다. 시험농도는 설정농도로서 0.03, 0.06, 0.13, 0.25, 0.50 mg/L와 용매대조군 및 대조군에서 실시되었으며 *Daphnia magna*의 48시간 EC₅₀값은 0.07 mg/L이었고 이때 95% 신뢰한계는 0.06~0.09 mg/L, 최대무영향농도는 0.03 mg/L, 최저 100% 영향농도는 0.13 mg/L였고 대조군 및 용매대조군에서는 치사 또는 영향 받은 개체나 독성증상은 관

Table 4. Cumulative mortality of *Daphnia magna* for benzoyl peroxide during 48 hr exposure.

Nominal concentration (mg/L)	Cumulative number of organisms immobilized (percent immobility)	
	24 hr	48 hr
Control	0(0)	0(0)
Solvent control	0(0)	0(0)
0.03	0(0)	0(0)
0.06	0(0)	3(10)
0.13	30(100)	30(100)
0.25	30(100)	30(100)
0.50	30(100)	30(100)

Table 5. Percent biomass/growth rate inhibition per concentration of *Selenastrum caprocornutum* for benzoyl peroxide during 72 hr.

Nominal concentration (mg/L)	Cell density ($\times 10^4$ cells/mL)			
	0 hour	24 hours	48 hours	72 hours
Control	1.4	3.1	32	130
Solvent control	1.2	2.4	25	66
0.05	1.3	1.9	22	59
0.1	1.2	2.1	19	67
0.2	1.2	1.5	6.4	53
0.4	0.99	1.1	2.7	20
0.8	1.0	0.78	0.54	0.04

찰되지 않았다. 담수조류에 대한 성장저해 정도를 파악하기 위한 72시간 조류성장 저해시험은 0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.8 mg/L(설정농도 기준) 및 대조군과 용매대조군에서 실시되었으며 결과는 Table 5에 나타내었다. *Selenastrum caprocornutum*의 72시간 EC₅₀값은 성장률을 이용한 계산법으로 0.44 mg/L이었고 이때 95% 신뢰한계는 0.39~0.51 mg/L, 최대무영향농도(NOEC)는 0.2 mg/L, 최저영향농도(LOEC)는 0.4 mg/L이었으며 대조군과 용매 대조군에서의 조류성장은 정상적이었다. 면적계산법을 이용한 결과는 72시간 EC₅₀값은 0.07 mg/L였고 이때 95% 신뢰한계는 0.04~0.11 mg/L였으며 최대무영향농도(NOEC)는 0.05 mg/L 이하였고 최저영향농도(LOEC)는 0.05 mg/L이었다. Benzoyl peroxide의 육상생물에 대한 영향을 알아보기 위하여 지렁이(*Eisenia foetida*)에 대한 14일 급성독성시험이 수행되었다(Table 6). 독성시험은 1,024 mg/kg, 유기용매대조군 및 대조군에서 실시되었으며 이때 14

Table 6. Cumulative mortality of *Eisenia foetida* for benzoyl peroxide during 14 days.

Nominal concentration (mg/kg)	Number of worms tested	Cumulative number of dead worms	
		7 days	14 days
Control	40	0	0
Solvent control	40	0	0
1000	40	0	0

일 LC₅₀값은 1,000 mg/kg 이상, 무영향수준은 1,000 mg/kg 이상이였으며 유기용매대조군 및 대조군에서 치사 또는 독성영향은 관찰되지 않았다.

이러한 수서생물에 대한 높은 독성 영향은 benzoyl peroxide가 수중환경에서 빠르게 가수분해되므로 가수분해산물인 benzoic acid에 의한 것이라고 생각될 수도 있으나, benzoic acid의 생태독성은 어류의 경우 *Lepomis macrochirus*의 96시간 LC₅₀값은 44.6 mg/L였고, 물벼룩의 경우 *Daphnia magna*의 48시간 EC₅₀값은 100 mg/L 이상, 조류의 경우에는 *Scenedesmus quadricauda*의 3시간 EC₅₀값은 75 mg/L로(The OECD HPV program, 2001), benzoyl peroxide의 독성값과 매우 차이가 나므로 이는 benzoyl peroxide가 수용액상에서 가수분해 되기 전에 수서생물에 독성 영향을 미치는 것으로 판단할 수 있었다.

3. 초기 위해성 평가

Benzoyl peroxide의 환경중의 초기 위해성 평가를 위하여 물리화학적 성질, 환경거동 및 생태독성에 대한 연구가 이루어졌다. Benzoyl peroxide는 국내에서 2001년 기준으로 1,357톤 생산된 대량생산 화학물질로 한 공장에서만 생산되고 또한 생산 공정이 밀폐된 시스템 내에서 이루어지기 때문에 benzoyl peroxide의 환경 중 노출 가능성은 낮다고 할 수 있으며, 수중환경에서 가수분해가 매우 빨라 생물축적의 잠재성 또한 낮은 물질로 평가할 수 있다.

수생생물에 대한 독성영향 평가를 하기 위해 PNEC (predicted no effect concentration)값을 예측하였는데 어류, 물벼룩, 조류 각각의 독성값으로부터 예측계수 100을 이용하였다(Organisation for Economic Co-operation and Development, 2003). 3

가지 종류의 생물 중에서 benzoyl peroxide의 독성에 가장 민감한 daphnia의 독성값 0.07 mg/L가 이용되었으며, 그 결과 PNEC값은 0.7 µg/L로 계산되었다.

이와 같이 수생생물에 대해서 독성영향이 있고 환경거동 모델 예측결과 수질로 이물질이 유입되었을 경우, 대부분 수질에 분포하므로 수생환경에서 benzoyl peroxide의 독성 영향은 클 것으로 예측되며 또한 이 물질이 여드름약과 같은 의약품 및 밀가루 표백제 등으로 사용되어 전세계적으로 광범위하게 사용되는 물질이므로 이 물질에 대한 환경 노출평가가 권고된다.

결 론

본 연구에서는 benzoyl peroxide의 환경 분야의 초기 위해성 평가를 수행하기 위하여 이 물질에 대한 물리화학적 특성, 환경거동 및 생태독성에 대한 자료를 조사하고 모델링 예측 및 시험을 수행하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. Benzoyl peroxide의 녹는점은 105°C이며 25°C에서 9.1 mg/L의 수용해도를 갖고 있고 예측된 증기압은 0.00929 Pa이었다. 예측된 옥탄올-물 분배계수는(LogK_{ow}) 3.43, 헨리상수는 3.54 × 10⁻⁶ atm·m³/mole이었으며, 대기에서 분해 반감기는 12시간 노출기준으로 3일로 계산되었다. 생분해도는 21일 후 83%로 빠른 생분해성을 갖고, 수중안전성 시험 결과 수용액에서 가수분해가 매우 빠른 물질임을 확인할 수 있었으며, 예측된 BCF 값은 92로 benzoyl peroxide가 생체 내에서 축적될 가능성이 적은 물질이었다.

2. 수생생물에 대한 영향은 어류를 이용한 급성 독성시험에서 *Oryzias latipes*의 96시간-LC₅₀값이 0.24 mg/L, 물벼룩 급성독성시험에서 *Daphnia magna*의 48시간-EC₅₀값은 0.07 mg/L, 조류의 성장 저해시험에서 *Selenastrum caprocornutum*의 72시간-ErC₅₀값은 0.44 mg/L(성장률을 이용한 계산법)로서 benzoyl peroxide가 수생생물에 대한 독성영향이 있는 것으로 평가되었다.

3. 어류, 물벼룩, 조류의 독성값으로부터 PNEC 예측계수 100이 이용되어 PNEC값은 0.7 µg/L로 예측되었고, 물리화학적 특성, 환경거동 및 생태 독성

값으로부터 benzoyl peroxide의 초기 위해성 평가 결과 benzoyl peroxide의 수생생물에 대한 독성 영향 때문에 수중 환경에서의 위해성이 예측되므로 이 물질에 대한 환경 노출평가가 권고된다.

감사의 글

본 연구는 환경부 국립환경연구원 2002년 OECD/SIDS 대량생산화학물질 초기 위해성평가 사업에 일환으로 수행되었으며, 이와 관련하여 한 국화학연구원 안전성평가연구소와 LG생명과학/기술연구원 안전성센터에 감사드립니다.

참 고 문 헌

국립환경연구원. 환경자료집 제2집, 1999.
Canadian Environmental Modelling Centre, <http://www.trentu.ca/cemc/models/EQC2.html>. 2002.
Lide DR ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics,

Boca Raton, FL, CRC Press Inc 1995~1996; 76th ed: 3-250.

Ministry of International Trade and Industry, Japan. Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL. http://www.cerij.or.jp/ceri_en/index_e4.s.html. 2002.

National Institute of Environmental Research (NIER), Korea. Survey on Circulation Volume and Use Pattern of Benzoyl peroxide in Korea. 2002.

Organisation for Economic Co-operation and Development, Co-operation on the Investigation of Existing Chemicals. http://www.oecd.org/department/0,2688,en_2649_34379_1_1_1_1_1,00.html. 2003.

Organisation for Economic Co-operation and Development. OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Thirtieth Addendum to the OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, December. 2001.

Syracuse Research Corporation, <http://esc.syrres.com/interkow/estsoft.htm>. 2002.

The OECD HPV program. SIDS Initial Assessment Report for 13th SIAM-Benzoates category. <http://cs3-hq.oecd.org/scripts/hpv>. 2002.