

[알킬황산나트륨]		
물리·화학적 특성 ¹⁾²⁾		
세제, 식기 세척액, 샤워 젤, 샴푸, 헤어 컨디셔너 및 섬유 유연제에 사용하는 수용성 염, 계면활성제이다.		
물질명	국문 : 알킬황산나트륨 영문 : Sodium alkyl sulfate	
관리정보	CAS 번호 : 68955-19-1	
성상	흰색 분말	
분자식	C ₁₅ H ₃₁ NaO ₄ S 황산 알킬은 황산 알킬은 C8에서 C18의 탄소 사슬 길이를 가지며, 구조적 유사성과 유사한 물리화학적, 독성학적, 생태독성학적 특성으로 인해 함께 분류된다.	
분자량	330.45900	
끓는점	1007 mbar에서 약 208℃	
녹는점	녹는점의 범위로 나타난다 : 36 - 183℃ 155℃가 되면 샘플의 무게가 줄어들며, 식히면 174℃에서 결정화된다.	
밀도	605 g/L	
입자 크기	937 μm (granular form) and 99 μm (powder form)	
증기압	0.18 Pa at 25℃로 추정된다.	
분배계수	log Pow ≤ -2.1 at 20℃	
용해도	> 250 g/L at 20℃	
유기용제용해도	n-octanol 에서 2.2 g/L at 20℃, 유기용제에서 안정적이다.	
표면 장력	31.9 mN/m (c=1 g/L) at 23℃	
인화점	160℃	
폭발성	not explosive	
자연발화	220℃	
산화성	토양에서 산화되지 않는다.	
해리상수	pKa = 2.15 at 20℃	
독성 정보 ³⁾⁴⁾⁵⁾⁶⁾		
독성	종(species)	결과
급성 구강독성	rat	LD ₅₀ = 4010 mg/kg bw
급성 피부독성	rabbit	LD ₅₀ > 2000 mg/kg bw (limit test)
피부 자극	rat, human	피부에 자극적이다.
눈 자극	rabbit	눈에 매우 자극적이다. 눈에 부식을 일으킨다.
반복선량 독성	rat	알킬황산염(AS)의 전체 범주에 대해 구강 및 피부 노출에 대해 일일 488 mg/kg bw의 NOAEL이 설정되었다.
유전독성	cells, mouse	돌연변이 유발 물질로 간주되지 않았다.
발암성	rat	oral: 발암성 있는 물질로 간주 되지 않는다. NOAEL = 1125 mg/kg bw/day; LOAEL > 1125 mg/kg bw/day
생식독성	rat	C12-15AS Na(CAS 68890-70-0), C16-18AS Na(CAS 68955-20-4), C13-15AS Na(CAS 86014-79-1)를 사용한 아만성 반복 경구 독성 연구에서는 생식기에 대한 부작용에 대한 징후가 없었다.
발달독성	rat	임신한 쥐를 일일 500mg/kg bw로 처리한 결과 모성 독성 반응이 유도되었다. 일일 250, 125, 63 mg/kg bw에서는 모성 독성 또는 배아 독성을 유발하지 않았으며 기형 유발 가능성을 보이지 않았다.
건강 영향 ⁷⁾⁸⁾⁹⁾¹⁰⁾¹¹⁾¹²⁾¹³⁾¹⁴⁾¹⁵⁾		
경구 노출	rat을 대상으로 한 연구에서 호흡수의 감소, 운동의 감소, 설사, 경미한 출혈성 비염, 각막반사 및 공공 반응의 경미한 감소가 있었다. C12-18AS Na(CAS 68955-19-1, 분석 순도 30%)의 또 다른 급성 경구 연구가 위스타 쥐를 대상으로 수행되었다. 테스트 물질은 경구를 통해 2000 mg/kg bw에서 그룹당 성별 5마리에게 적용되었다. 사망률, 독성의 임상적 징후, 체중이나 병리학적인 영향은 관찰되지 않았다. 따라서 LD ₅₀ 은 시험 소재 기준 > 2000 mg/kg bw, 활성성분	

	<p>기준 > 600mg/kg bw였다.</p> <p>C12-18AS Na(CAS 68955-19-1, 분석 순도 30%)를 그룹 당 500 mg/kg bw/d로 5마리의 rat에 적용했다(Cawley, 1977). 사망률과 독성 임상 징후는 관찰되지 않았다. 따라서 LD₅₀은 시험 소재 기준 500 mg/kg bw 이상이었다. 사망률은 5000~15000mg/kg bw에서 관찰되었다. 이 연구에서 LD₅₀을 도출할 수 없었다.</p>
피부 노출	<p>교차 물질에 대한 연구로 피부 독성에 관해 생각해볼 수 있다.</p> <p>OECD 지침 402(BASF, 2012)에 따라 C8AS Na(CAS 142-31-4)를 이용했다. 암컷당 5마리의 rat을 반 폐쇄 조건에서 24시간 동안 2000 mg/kg bw로 처리하였다. 사망률은 발생하지 않았으며 전신 독성 징후 및 국소 자극은 관찰되지 않았다.</p> <p>C10-16AS NH₄(CAS 68081-96-9)로 수행된 연구는 3마리의 수컷과 3마리의 암컷 뉴질랜드 흰 토끼를 이용하였다(Frank, 1975a). 시험 물질(분석 순도 25.1%)을 폐쇄 조건에서 24시간 동안 2000 mg/kg bw에서 적용하였다. 사망자는 발생하지 않았다. 심각한 홍반과 24시간 경미한 가피 형성, 2~14일째에는 괴사, 8~14일째에는 피부를 벗겨내었다. 14일째에는 새로운 피부의 과도한 색소 침착이 보였다. 전신 독성의 징후는 관찰되지 않았다. 따라서 LD₅₀ 값은 시험 소재 기준 2000 mg/kg bw 이상, 활성 성분 기준 500 mg/kg bw 이상이다.</p> <p>OECD 지침 402와 유사한 또 다른 연구는 C12-13으로 수행되었다. 세 마리의 수컷, 세 마리의 암컷 뉴질랜드 흰 토끼에 대한 AS K(CAS 91783-22-1)를 사용하였다. 두 성별 모두 폐쇄 조건에서 2000 mg/kg bw (분석 순도 25%)로 24시간 동안 투여되었으며, 연구를 수행하는 동안 사망률은 발생하지 않았다. 본 연구의 연구 결과는 중간에서 심각한 홍반, 부종, 6일째의 박리 및 분열, 가피 형성 및 각질 제거가 나타났다. 상기 조사 결과에 따르면 LD₅₀은 시험재료 기준 2000 mg/kgbw 이상, 활성 성분 기준 500mg/kgbw 이상이다.</p> <p>C12-18AS Na(CAS 68955-19-1, 분석 순도 89%)로 수행된 주요 연구는 OECD 지침 404에 따라 수행되었다(Pels Rijcken, 1994). 뉴질랜드 흰 토끼 3마리는 각각 4시간, 0.5g 노출됐으며 홍반과 부종이 14일 동안 관찰됐다.</p> <p>C12-18AS Na(CAS 68955-19-1, 분석 순도 35%)로 수행된 연구는 생쥐 피부에 10%의 최종 농도로 수행되었다. 테스트 물질을 5일 동안 하루에 두 번 도포했다. 피부 반응은 관찰되지 않았다.</p> <p>동일한 연구보고서에서 최종 농도 5%에서 C12-18AS Na(CAS 68955-19-1, 분석 순도 35%)를 토끼에 대한 4시간 패치테스트 적용했다. 경미하고 가역적인 피부 반응만 관찰되었다.</p> <p>또 다른 연구에서는 5% C12-18AS Na(CAS 68955-19-1)의 1-2방울을 털이 없는 생쥐 5마리의 등 피부에 적용했다. 1-4일동안 하루에 한 번, 5-13일 동안 하루에 두 번 수행되었다. 전혀 자극의 징후를 보이지 않았다.</p> <p>농축 용액과 반복적인 피부 접촉은 피부염을 유발할 수 있다.</p>
눈 노출	<p>OECD 지침 405 연구는 세 마리의 뉴질랜드 흰 토끼에 대해 0.1 mL C12-16 AS Na(CAS 73296-89-6, 분석 순도 30%)로 수행되었다. 관찰 기간은 21일이었다. 눈 반응은 치료 후 1, 24, 48, 72시간 후에 채점되었다. 적용 후 7, 14, 21일에 추가 관찰이 수행되었다. 평균(24, 48, 72시간 판독) 각막, 홍채, 결막 및 화학증 점수는 1, 0.2, 2.8, 3.6이었다. 홍채 효과는 72시간 이내에 역전되었고 화학작용은 21일 관찰 기간 내에 역전되었다. 각막과 결막의 붉은 색조에 관찰된 효과는 21일 이내에 완전히 되돌릴 수 없었다. 따라서 이 물질은 본 연구에서 30% 농도로 눈에 비가역적</p>

	<p>인 영향을 미쳤다.</p> <p>다른 연구에서는 흰 토끼를 이용하여 22%의 농도가 눈과 눈 손상으로 분류되는 전환점이 된 것을 보여주었다.</p> <p>10% 농도를 가지고 시행한 연구에서는 결막 홍조가 나타났다. 테스트 물질은 10% 농도로 눈에 자극을 주지 않거나 중간 정도만 준다.</p> <p>구조적으로 관련된 알킬황산염의 농도가 다른 상기 결과에 따라 눈에 심한 자극으로 분류하는 것은 20%, 자극적인 것으로 분류하는 것은 10%의 농도로 설정하였다.</p>
급성 영향	<p>위장관 자극, 간 효소 수치 상승</p> <p>섭취하면 위장 자극, 구토 및 설사를 유발할 수 있다.</p>
만성 영향	<p>대상 기관인 간이 적응 반응을 보였다. NOAEL은 0.56% (488 mg/kg bw/일)로 설정되었다. 적응성 변화에는 체중감소로 인한 상대적 간 무게 증가, 음식 섭취 감소, 간막 주위 비대, 혈청 알칼리성 포스파타아제(AP) 활성 증가 등이 포함됐다.</p> <p>혈청 AP 활성 증가는 테스트 물질의 분해 및 해독에 필요한 간 대사의 변화로 인한 생리적 적응을 나타내는 것으로 간주된다. AP는 주로 간 실질에 위치하기 때문에, 장기 무게 증가를 동반한 간 실질 세포의 확장은 명백한 결과이다.</p>
환경거동 (잔류성, 반감기 등)	<p>알킬황산염에 속하는 물리화학적 특성은 유사하거나 규칙적인 패턴을 따른다. 특성에 영향을 미치는 가장 중요한 요소는 알킬 체인의 길이 변화이다. 이온 물질로서 낮은 증기압력을 특징으로 한다.</p> <p>알킬황산염 범주에 속하는 물질은 물에 잘 용해된다. 쉽게 생분해된다. 가수분해 등의 비생분해의 경우 환경경로와 관련이 없다. 이는 화학 구조 때문이다. 물질은 비휘발성이다. 생물 축적 가능성은 배제되며, 슬러지, 퇴적물, 토양 흡착력이 상대적으로 낮을 것으로 예측된다. 또한 수생환경에서 지속될 가능성이 낮다.</p> <p>쉽게 생분해된다. 공동하수처리장에서 나오는 슬러지를 보았을 때 물에서는 28일 뒤 93%가 분해됐다. 또 다른 연구에서는 초기 농도가 DOC 로 20mg/L 였을 때 30일 후 96%가 생분해되었다.</p> <p>분배계수 The partition coefficient: $\log P_{ow} \leq -2.1$ at 20°C로 생물 축적은 쉽지 않을 것으로 예측된다.</p> <p>물, 침전물, 토양에서는 물질이 빠르게 생분해되므로 장기간 노출은 배제될 수 있다.</p>
생물학적 모니터링 방법	<p>황산알킬의 주요 배설 경로는 소변이다.</p> <p>흡수되는 방법의 대부분은 경구 섭취에 의한 것이다. 소량만이 피부 경로를 통해 흡수된다. 음이온 계면활성제가 피부 표면에 결합하는 경향이 있기 때문에 경피적 경로에 의한 흡수는 제한적이다(SIDS, 2007). 초기의 인간 피부 연구는 C8에서 C18 탄소 사슬 길이에 이르는 일련의 상동성 AS의 침투를 감지할 수 없었다. 동물 연구 결과 AS의 경피적 흡수량이 낮은 것으로 확인됐다.</p> <p>소변, 대변, 기한이 지난 공기에서 방사선 라벨의 회복에 기초하여 35S 라벨 C12 ASO4Na의 3 μmol 용량 중 0.4% 미만이 기니피그에 경피적으로 흡수되었다. 쥐를 대상으로 한 연구에 따르면 계면활성제로 피부를 사전에 씻으면 AS 피부 침투가 강화되는 것으로 나타났다. (추가적으로 명시되지 않은) 고립된 인간 피부에 대한 초기 연구는 C12AS Na의 피부 침투를 검출할 수 없었다.</p> <p>흡수된 뒤 신장과 간에서 분포가 발견되었다. C16 14.4 mg/kgbw를 개에게 경구 투여했고, 사람에게 대해 250 mg/ 경구 투여했다. 혈장 내 방사능은 두 종 모두 노출 후 30분에서 2시간 이내에 최대였다(SIDS, 2007). 이후 혈장 농도가 급격히 감소했고 6시간 후 최대 농도의 10%에 도달해 빠른 제거가 이뤄졌다. 전신 방사선 촬영을</p>

	<p>하였다. rat을 대상으로 한 실험에서 AS K 또는 체내 대사물. 모든 화합물에 대해 방사능이 검출된 장기는 간과 신장뿐이었다.</p> <p>Alkylsulfate는 각각의 C2와 C4(짝수), C3, C5(홀수)에 대한 오메가와 베타 산화를 수반하게 된다. 산화 생성물은 황산염과 함께 체내에서 배출된다. 지방 알코올과 황산염 사슬 사이의 에테르 결합의 가수분해는 약간 발생할 수 있다. 섭취된 10~20%는 보통 무기황산염으로 제거된다.</p> <p>배설의 경우 주로 소변으로 되었으며 대변을 통해 배설되는 양은 매우 적다.</p>
노출 경로별 사고사례	<p>인간 연구는 20명 대상으로 수행되었다. 0.5% 용액 0.1 mL를 첫날에는 24시간 동안, 2-5일 동안에는 6시간 동안 Duhring 챔버를 사용하여 적용했다. 저자들이 매우 자극적이라고 판단했다. 또한 생쥐에 C12-18 AS Na(CAS 68955-19-1)의 5~10% 수용액을 피지 내 주입한 결과 강한 자극으로 판단된 피부 자극이 나타났다.</p>
안전 가이드	
응급조치 요령	<p>[섭취했을 때] 1-2잔의 물을 마시고, 구토를 유도하지 말고, 항화제(sab simplex)를 투여하고, 의사의 진료를 받는다.</p> <p>[피부에 접촉했을 때] 물로 씻어낸다.</p> <p>[흡입했을 때] 먼지를 흡입하지 않는다.</p> <p>[피부에 접촉했을 때] 물로 행귀내며, 제품에 오염된 의류는 모두 벗는다.</p> <p>[눈에 들어갔을 때] 즉시 충분한 양의 흐르는 물로(10분 동안) 행구고 전문가의 진료를 받는다.</p>
취급 및 보관	<p>[취급] 불꽃을 피한다. 분진의 형성 및 축적을 피한다(분진 폭발의 위험이 있다).</p> <p>[보관] 용기를 단단히 밀폐된 상태로 유지한다. 건조한 곳에 보관한다.</p>

[참고문헌]

- 1) U.S. Coast Guard. 1999. Chemical Hazard Response Information System (CHRIS) - Hazardous Chemical Data. Commandant Instruction 16465.12C. Washington, D.C.: U.S. Government Printing Office.
- 2) OECD 107, Computational Approach
- 3) ECHA European Chemicals Agency: REACH Registration Dossier(2016)
- 4) SIDS initial assessment profile, (2007)
- 5) HERA Draft report, 2002
- 6) Munday et al., 1976, 1977ab
- 7) SODIUM ALKYL SULFATES <https://cameochemicals.noaa.gov/chemical/9053> CAMEO Chemical Reactivity Classification <https://cameochemicals.noaa.gov/browse/react>
- 8) EPA Chemicals under the TSCA <https://www.epa.gov/privacy/privacy-act-laws-policies-and-resources> Sulfuric acid, mono-C12-18-alkyl esters, sodium salts <https://www.epa.gov/chemicals-under-tsca>
- 9) EPA DSSTox <https://www.epa.gov/privacy/privacy-act-laws-policies-and-resources> Sulfuric acid, mono-C12-18-alkyl esters, sodium salts <https://comptox.epa.gov/dashboard/DTXSID9028918> CompTox Chemicals Dashboard Chemical Lists <https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical-lists/>
- 10) European Chemicals Agency (ECHA) <https://echa.europa.eu/web/guest/legal-notice> Sodium pentadecyl sulphaten <https://echa.europa.eu/substance-information/-/substanceinfo/100.033.145> Sulfuric acid, mono-C12-18-alkyl esters, sodium salts <https://echa.europa.eu/substance-information/-/substanceinfo/100.066.578> Sodium pentadecyl sulphate <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/cl-inventory-database/-/discli/details/35080> Sulfuric acid, mono-C12-18-alkyl esters, sodium salts <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/cl-inventory-database/-/discli/details/131346>
- 11) Henkel, 1985
- 12) U.S. Coast Guard. 1999. Chemical Hazard Response Information System (CHRIS) - Hazardous Chemical Data. Commandant Instruction 16465.12C. Washington, D.C.: U.S. Government Printing Office.
- 13) Tortajada, 1997
- 14) OECD SIDS 2007
- 15) Kästner, 1981b