

OCTANE, 모든 이성질체 포함 (1)

연세대학교 보건대학원 / 김 치 년

분자식: C_8H_{18}

구조식: $H_3C-C_6H_{12}-CH_3$ (모든 이성질체)

n-OCTANE

CAS 번호: 111-65-9

동의어: Normal octane; Octane; Alkane C(8)

Structural formula: $CH_3-(CH_2)_6-CH_3$

ISOCTANE

CAS 번호: 540-84-1

동의어: Isooctane; Isobutyltrimethylmethane; 2,4,4-Trimethylpentane

구조식: $CH_3-C(CH_3)_2-CH_2-CH(CH_3)-CH_3$

TLV-TWA, 300ppm (1,401mg/m³)

요약

옥탄과 이성질체에 대한 직업적 노출기준 TLV-TWA는 300ppm(1,401mg/m³)으로 권고하였다. 이 수준은 고농도로 노출되었을 때 나타나는 점막자극과 마취작용의 가능성을 최소화하는데 목적이 있다. 옥탄의 TLV 근거는 사람과 동물이 옥탄 이성질체에 호흡

으로 노출될 때 나타나는 급성반응과 헵탄, 헥산 그리고 펜탄과 같은 파라핀류 탄화수소의 구조 유사성에 기초를 두고 있다(헵탄, 헥산 그리고 펜탄의 TLV 도큐멘테이션 참조). “피부”, “감작제” 그리고 발암성은 유용한 자료가 충분하지 않아 권고하지 않았다.

옥탄 혼합물의 인화성 때문에 TLV-STEL

이 권고되지는 않지만, TLV 값에 가까운 상한치는 폭발 하한값의 10% 정도 또는 약 1000ppm으로 관리되어야 한다.

물리화학적 성질

옥탄의 이성질체는 무색의 인화성 액체로 n-octane과 isooctane의 이성질체는 18종을 포함한다. 냄새 서한도는 48ppm⁽¹⁾과 150ppm⁽²⁾으로 보고 되었으며 n-octane과 isooctane의 물리화학적 특성은 다음과 같다⁽³⁾⁽⁴⁾.

- 분자량: 114.22
- 비중: 20℃일 때 0.7025 (n-octane), 0.6919 (isooctane)
- 녹는점: -56.8℃ (n-octane), -116℃ (isooctane)
- 끓는점: 125.7℃ (n-octane), 99.2℃ (isooctane)
- 인화점: closed cup인 경우 13℃ (n-octane), -12℃ (isooctane), open cup인 경우 22℃ (n-octane), 4.5℃ (isooctane)
- 폭발한계(공기 비): 상한값 4.66%, 하한값 0.96% (n-octane)
상한값 6%, 하한값 1.1% (isooctane)
- 증기압: 20℃일 때 10.45torr (n-

octane);

21℃일 때 40.6torr (isooctane)

- 용해도: n-octane과 isooctane은 물에는 불용성, 에탄올에는 약간 용해되며 에테르와 벤젠에는 용해됨
- 전환계수: 25℃, 760torr 일 때 1ppm = 4.67mg/m³
25℃, 760torr일 때 1mg/m³=0.241ppm
다른 16종의 이성질체들의 휘발성은 n-octane과 isooctane 사이의 중간 정도이다.

주요 용도

n-Octane은 유기합성과 공비혼합물 증류에서 용매로 그리고 isooctane은 휘발류의 노킹방지를 측정하는 표준물질로 사용한다. 옥탄은 VM&P 나프타와 같은 형태로 휘발유와 석유에 존재한다.

동물실험 연구

Cavender⁽³⁾는 옥탄의 유용한 독성정보를 요약하였으며 파라핀류에 관련된 마취와 점막자극이 일반적인 특징이며 분자량이 증가할수록 이러한 증상은 강하게 나타난다고 보고하였다. ☺

참 고 문 헌

1. Amooore, J.E.; Hautala, E.: Odor as an Aid to Chemical Safety: Odor Thresholds Compared with Threshold Limit Values and Volatilities for 214 Industrial Chemicals in Air and Water Dilution. *J. Appl. Toxicol.* 3(6):272-290 (1983).
2. May, J.: Odor Thresholds of Solvents for Assessment of Solvent Odors in the Air. *Staub-Reinhalte* 26(9):385-389 (1966).
3. Cavender, F.: Aliphatic Hydrocarbons. In: Patty's Industrial Hygiene and Toxicology, 4th ed., Vol. II, Part B, Toxicology, pp. 1221-1266. G.D. Clayton and F.E. Clayton, Eds. John Wiley & Sons, New York (1994).
4. Merck & Co., Inc.: The Merck Index, 12th edition on CD-ROM, Version 12:1. S. Budavari, M. O'Neil, A. Smith, et al. (Eds.): Chapman & Hall, New York (1996).
5. Fuhner, H.: The Narcotic Effect of Gasoline and Its Components C Pentane, Hexane, Heptane, and Octane. *Biochem. Z.* 115:235-261 (in German) (1921).
6. Swann, H.E.; Kwon, B.K.; Hogan, G.K.; Snellings, W.M.: Acute Inhalation Toxicology of Volatile Hydrocarbons. *Am. Ind. Hyg. Assoc. J.* 35:511-518 (1974).
7. Schaper, M.: Development of a Database for Sensory Irritants and Its Use in Establishing Occupational Exposure Limits. *Am. Ind. Hyg. Assoc. J.* 54:488-544 (1993).
8. Patty, F.A.; Yant, W.F.: Report of Investigations C Odor Intensity and Symptoms Produced by Commercial Propane, Butane, Pentane, Hexane, and Heptane Vapor. Report Invest. No. 2979. U.S. Dept. of Commerce, U.S. Bureau Mines, Washington, DC (1929).
9. Flury, F.; Zernik, F.: Mineral Oil and Mineral Oil Products in Noxious Gases. In: *Schadliche Gase*, pp.257-264. J. Springer, Berlin (1931).
10. DiVincenzo, G.D.; Kaplan, C.J.; Dedinas, J.: Characterization of the Metabolites of Methyl n-Butyl Ketone, Methyl Iso-Butyl Ketone, Methyl Ethyl Ketone in Guinea Pigs Serum and Their Clearance. *Toxicol. Appl. Pharmacol.* 36:511-522 (1976).