



PENTYL ACETATE, ALL ISOMERS(1)

연세대학교 보건대학원 / 김치년

분자식: $C_7H_{14}O_2$

1-PENTYL ACETATE

CAS 번호 : 628-63-7

동의어 : Acetic acid pentyl ester; n-Amyl acetate; 1-Pentanol acetate; n-Pentyl acetate;
Primary amyl acetate

구조식 : $CH_3COO-(CH_2)_4CH_3$

2-PENTYL ACETATE

CAS 번호 : 626-38-0

동의어 : 2-Acetoxypentane; sec-Amyl acetate; 1-Methylbutyl acetate; 2-Pentanol acetate

구조식 : $CH_3COO-CH(CH_3)(CH_2)_2CH_3$

3-PENTYL ACETATE

CAS 번호 : 620-11-1

동의어 : 3-Amyl acetate

구조식 : $CH_3COO-CH(CH_2CH_3)_2$

ISOPENTYL ACETATE

CAS 번호 : 123-92-2

동의어 : Banana oil; Isoamyl acetate; 3-Methyl-1-butanol acetate; 3-Methylbutyl acetate

구조식 : $CH_3COO-(CH_2)_2CH(CH_3)_2$

1,1-DIMETHYLPROPYL ACETATE

CAS 번호 : 625-16-1

동의어 : tert-Amyl acetate

구조식 : $CH_3COO-C(CH_3)_2CH_2CH_3$

2-METHYLBUTYL ACETATE

CAS 번호 : 624-41-9

동의어 : 2-Methyl-1-butanol acetate

구조식 : $CH_3COO-CH_2CH(CH_3)CH_2CH_3$

TLV-TWA, 50 ppm (266 mg/m³)

TLV-STEL, 100 ppm (532 mg/m³)

요약

Pentyl acetate와 그것의 이성질체에 관한 작업환경 노출기준으로 TLV-TWA는 50 ppm(266 mg/m³), TLV-STEL은 100 ppm(532 mg/m³)이 권고되고 있다.

노출기준 수준은 눈과 점막의 염증 가능성을 줄이며 또한 높은 농도에서는 마비 증세와 간독성을 줄이기 위해 설정되었다. 피부(Skin), 감각제(SEN), 발암성에 대한 경고 표지는 충분한 데이터가 확보되지 않아 현재 권고되지 않고 있다.

물리화학적 성질

Pentyl acetate는 서양배 냄새가 약하게 나는 무색의 휘발성 액체이다.

몇몇 종류의 pentyl acetate는 자연에서 발생되는데 1-pentyl acetate는 과일에 존재하고 iso-pentyl acetate는 일부 곤충 내에 있으면서 유인물질 역할을 한다.¹⁾

공업용 pentyl acetate는 이성질체 혼합물이며 특성은 유도체나 순도에 따라 달라진다.²⁾ 주요 공업용 이성질체는 isopentyl acetate, 1-pentyl acetate 그리고 2-pentyl acetate이다.

물질 구조에 따라서 녹는점은 -70.6℃ ~ -8.5℃이고 끓는점은 121℃ ~ 149℃로 보

고되었다.³⁻⁶⁾ Isopentyl acetate와 pentyl acetate의 이성질체에 대한 후각반응은 연구가 잘 이루어졌으며⁷⁾ 취기제로서 후각 시스템을 이용하여 임상학적인 평가를 하였다.⁸⁾ 99% 1-pentyl acetate의 냄새서한도는 0.18 ppm(± 0.03 ppm)으로 보고되었다.⁹⁾ 다른 물질들은 낮은 농도의 냄새서한도이다. 2-pentyl acetate는 0.002 ppm이다.³⁾ 1-pentyl acetate의 물리화학적 특성은 아래와 같다.³⁻⁶⁾ 그 외 다른 물질들의 물리화학적 특성은 <표1>과 같다.

분자량(Molecular weight) : 130.19

비중(Specific gravity) : 20°C일 때 0.8756

녹는점(Melting point) : -70.8°C

끓는점(Boiling point) : 149.2°C

증기압(Vapor pressure) : 25°C일 때 3.5 torr

인화점(Flash point) : 25°C(closed cup)

폭발한계(Explosive limits) : 하한치 1.1%(공기 부피비)

자기발화점 (Autoignition temperature) : 380°C

용해도(Solubility) : 물에는 약간 녹으며, 에탄올과 에테르에는 혼합된다.

분해산물(Decomposition products) : 화재시 발생하는 것과 같이 일산화탄소

단위전환 계수(Conversion factors) :

〈표 1〉 Physical Properties of the Pentyl Acetate Isomers(excluding 1-Pentyl Acetate)³⁻⁶⁾

Isomer	MP (°C)	BP (°C)	Specific Gravity	Vapor Pressure (torr)
2-Pentyl acetate	-78.5	134	0.862-0.866(20°C)	7(20°C)
3-Pentyl acetate	NA	133	0.871(20°C)	NA
Isopentyl acetate	-78.5	142.5	0.875(15°C)	5.6(25°C)
1,1-Dimethylpropyl acetate	NA	124.5	0.874(19°C)	NA
2-Methylbutyl acetate	NA	142-143	0.880(12.5°C)	NA

*NA = not available

25°C, 760 torr일 때

1 ppm=5.325 mg/m³; 1 mg/m³=0.188 ppm

주요 용도

상업용 1-pentyl acetate는 형광에 있는 래커, 페인트, 사진 필름 및 매니큐어와 인광체를 위한 용매를 포함하여 다양한 용도로 사용된다. 또한 맛을 내는 인자로 사용되며 인쇄와 끝마무리 직물에서 활용되고 있다.

그밖에도 경고 취기제, 드라이클리닝, 페니실린의 적출, 관상식물 보호를 위한 개와 고양이 의 퇴치제, 살충제로 사용되고 있

다.^{1,10)}

2-Pentyl acetate는 니트로셀룰로오스와 에틸셀룰로오스의 인쇄화합물을 위한 용매로 이용되고, 시멘트, 광택지, 플라스틱 나무 및 래커의 생산에서 이용된다.

Isopentyl acetate는 산업 측면에서 에어로졸 첨가제로 이용되는데,¹⁾ 이는 화장품 성분과 보호구의 fit testing을 위한 방향제로 활용된다.¹¹⁾ Pentyl acetates의 혼합 이성질체들은 주로 아밀알코올과 아세트산의 에스테르화 과정에 의해 주로 합성되는 반면, 특정 이성질체는 이것들의 증기화나 순수화 과정을 통해 새로이 다시 생성된다.²⁾

참 고 문 헌

1. Bisesi, M.: Esters. In: Patty's Industrial Hygiene and Toxicology, 4th ed., Vol. II, Part D, pp. 2967-3118. G. Clayton and F. Clayton, Eds. John Wiley and Sons, Inc., New York, NY (1994).
2. Lewis, Sr., R.J. (Ed.): Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 13th ed. In: Comprehensive Chemical Contaminants Series CD-ROM. Van Nostrand Reinhold, New York (1997).
3. U.S. National Institute for Occupational Safety and Health: Occupational Safety and Health Guideline for sec-Amyl Acetate. Unpublished Report. (1992).
4. Anonymous: Final Report on the Safety Assessment of Amyl Acetate and Isoamyl Acetate. J. Am. Coll. Toxicol. 7(6):705-719 (1988).
5. Deutsche Forschungsgemeinschaft: Pentyl Acetate and Its Isomers. MAK Documentation - Draft 14.03.96 (in German). DFG, Bonn, FRG (1997).
6. U.S. National Library of Medicine: 1-, 2-, and 3- Pentyl acetates. In: Hazardous Substances Data Bank. Toxicology Data Network (TOXNET). Online at: <http://toxnet.nlm.nih.gov/>.
7. Evans, W.J.; Cui, L.; Starr, A.: Olfactory Event-Related Potentials in Normal Human Subjects: Effects of Age and Gender. Electroencephalogr. Clin. Neurophysiol. 95(4):293-301 (1995).
8. Gross-Isseroff, R.; Ophir, D.; Bartana, A.; et al.: Evidence for Genetic Determination in Human Twins of Olfactory Thresholds for a Standard Odorant. Neuroscience Lett. 141(1):115-118(1992).
9. Laing, D.G.: Characterisation of Human Behaviour During Odour Perception. Perception 11(2):221-230 (1982).
10. Colton, C.: Respiratory Protection. In: Fundamentals of Industrial Hygiene, 4th ed. B. Plog, Ed. National Safety Council, Itasca, IL (1996).
11. Inoue, T.; Takeuchi, Y.; Hisanaga, N.; et al.: A Nationwide Survey on Organic Solvent Components in Various Solvent Products. Part 1. Homogeneous Products Such as Thinners, Degreasers and Reagents. Ind. Health 21(3):175-183 (1983).