



PENTYL ACETATE, ALL ISOMERS(3)

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)

동물실험 연구

생식/성장

Pentyl acetate의 생식/성장 효과에 대해 발표된 연구 결과들 중 유용한 것은 없었다. Pentyl acetate에 관한 MAK 보고는 발표되지 않은 두 개의 동물 연구 결과들만을 고려하고 있다.

한 연구는 “primary amyl acetate” 혼합물을 F344 흰쥐들에게 임신 후 6~15일 동안 매일 6시간을 노출시킨 결과 1,000 ppm 이상의 농도에서 생식 독성이 관찰되었다. 1,000 ppm과 1,500 ppm에 노출된 그룹에서는 태아의 무게가 대조군보다 상당히 낮았고, 골격의 기형 증가가 관찰되었다. 성장 독성 결과에 근거하면 NOAEL은 500 ppm이었다.

또 다른 연구는 뉴질랜드산 흰 토끼 15마리에게 임신 후 6-18일 동안 하루 6시간을 pentyl acetate 혼합물을 각각 500, 1,000, 1,500 ppm 농도 수준으로 노출시켰다.

그 결과, 모성 독성과 성장 독성에 대한 NOAEL은 각각 1,000 ppm과 1,500 ppm이었다.⁵⁾

Ames Salmonella assay를 통한 pentyl acetate와 isopentyl acetate에 관한 유전 독성 연구 결과 돌연변이성은 관찰되지 않았다.⁴⁾ Isopentyl acetate는 Bacill-

ust subtilis M45와 H17종에 대한 재조합 평가 테스트에서 돌연변이성에 대해 음성 반응을 보였고³⁰⁾, Saccharomyces cerevisiae종에 있어서도 음성 반응을 보였다.³¹⁾

Isopentyl acetate는 차이나 햄스터를 대상으로 한 염색체 이상 평가에서도 음성 반응을 나타냈다.³²⁾ 또한 isopentyl acetate는 생쥐 면역 세포 돌연변이성뿐만 아니라 Ames, Escherichia coli, B. subtilis의 돌연변이성 평가에서도 음성 반응을 보였다.³³⁾

사람대상의 연구

증기상의 pentyl acetate에 노출된 사람들의 증세로는 두통, 피로, 점막 자극, 과다 타액 분비, 눈물 흘림, 코와 목 자극, 직업적 신경 증세들이 있다.⁴⁰⁾¹⁷⁾³⁴⁾

증기상의 pentyl acetate에 만성 노출된 작업자들에게서 마취 효과와 상기도 자극은 보고되지 않았다.¹⁾ 일반적으로 에스테르는 가수 분해되어 자극 효과를 유발하는 산성 물질을 형성하고 결국에는 마취 현상을 일으킨다.³⁵⁾

Nelson 등³⁶⁾은 사람을 대상으로 한 연구에서 증기 형태로 pentyl acetate 200 ppm에 노출되면 심한 목 자극을, 100 ppm에 노

출되면 경미한 목 불편함이 관찰되었다고 보고하였다.

pentyl acetate의 다른 이성질체들도 유사한 자극 특성을 나타낸다고 보고되었다.¹⁶⁾ Pentyl acetate는 공기 중 300 ppm 농도 수준일 때 눈에 명백히 자극을 주는 것으로 보고되었다.³⁶⁾ 1개월에서 30년 동안 pentyl acetate에 노출된 작업자들은 눈에 심각한 자극을 느껴 결국에는 빛 공포증 증세를 보이는 것으로 나타났다.¹⁹⁾

상업용 pentyl acetate의 혼합물은 Ball-antyne 등³⁷⁾이 기니아 피그를 대상으로 한 실험을 통해 가능한 감작제로 분류되었다.

211명의 패널들에게 20% isopentyl과 20% pentyl acetate에 대해 반복적으로 patch test를 한 결과, 지연성 접촉 과민성 질환을 포함한 다른 어떤 건강상의 장애 반응들은 나타나지 않았다.⁴⁾

Pentyl acetate와 isopentyl acetate에 대한 개별 광독성 연구에서 UV-A와 UV-B 파장 영역에 동시에 노출된 사람들에게서 광독성 효과는 발견되지 않았다.⁴⁾

TLV 권고

Pentyl acetate는 눈과 점막에 자극성을

유발하는 물질이고, 높은 농도 하에서는 마비 현상도 유발한다.³⁴⁾

Pentyl acetate 100 ppm에 노출된 사람들은 경미한 목 통증을 보인 반면, 200 ppm에 노출된 사람들에서는 심각한 수준의 목 통증을 보였다.³⁶⁾ 300 ppm에 노출된 사람들은 결막 충혈 현상을 나타냈다.³⁵⁾

이러한 연구 결과들과 직업 노출기준으로 제안된 43-47 ppm 그리고 상관성이 있는 LD₅₀ 값에 근거하면, pentyl acetate의 자극성을 예방하기 위해서 TLV-TWA는 50 ppm, TLV-STEL은 100 ppm을 권고한다. 이 노출기준치들은 MAK 위원회와 유럽 연합에서 제안한 수치와 동일했다.⁵⁾³⁸⁾

눈과 점막의 자극은 일반적으로 pentyl acetate 노출로 인해 발생하는 중요한 현상이다.⁴⁾⁵⁾³⁶⁾ Pentyl acetate는 알코올과 아세트산으로 대사되기 때문에 체내에 축적될 가능성은 거의 없다.⁴⁾⁵⁾ 마비, 간독성, 성장독성을 포함한 조직 계통의 효과들은 자극을 유발하는 농도 이상에서만 나타난다.⁵⁾

토끼에 있어 1-pentyl acetate의 낮은 피부 독성(LD₅₀ > 20 ml/kg)¹⁴⁾은 피부를 통한 노출 경로에는 큰 문제가 없음을 내포한다.⁵⁾ 따라서 Skin notation을 지정받는 것은 적합하지 않다.

사람의 patch test 연구들을 통해 pentyl

acetate의 피부 감작, 광독성, 빛에 의한 알레르기 증세 유발에 대한 증거는 보고되지 않았다.⁴⁾

TLV의 역사적 변화

n-Amyl acetate

1946-1947년: MAC-TWA, 200 ppm 권고
1948-1962년: TLV-TWA, 200 ppm 권고
1963-1999년: TLV-TWA, 100 ppm 권고
1976-1986년: TLV-STEL, 150 ppm 권고
1985년: TLV-STEL 삭제 제안
1987년: TLV-STEL 삭제
1999년: Pentyl acetate(all Isomers)로 물질 목록 변경

sec-Amyl acetate

1965년: TLV-TWA, 125 ppm 제안
1967-1999년: TLV-TWA, 125 ppm 권고
1976-1986년: TLV-STEL, 150 ppm 권고
1985년: TLV-STEL 삭제 제안
1987년: TLV-STEL 삭제
1999년: Pentyl acetate (all Isomers)Is-oamyl acetate로 물질 목록 변경
1965년: TLV-TWA, 100 ppm 제안
1967-1999년: TLV-TWA, 100 ppm 권고
1976-1986년: TLV-STEL, 125 ppm 권고
1985년: TLV-STEL 삭제 제안
1987년: TLV-STEL 삭제
1999년: Pentyl acetate (all isomers)로 물질 목록 변경
1999년: TLV-TWA 50 ppm; TLV-STEL, 100 ppm 제안
2000-현재: TLV-TWA 50 ppm; TLV-STEL, 100 ppm 권고



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).
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).
16. von Oettingen, W.: The Aliphatic Acids and Their Esters: Toxicity and Potential Ranges. Arch. Ind. Health 21:28-65 (1960).
17. Sandmeyer, E.; Kirwin, C.: Esters. In: Patty's Industrial Hygiene and Toxicology, 3rd ed., Vol. II, Part A, pp. 2267-2278. G. Clayton and F. Clayton, Eds. John Wiley and Sons, Inc., New York (1981).
19. Grant, W.M.; Schuman, J.: Toxicology of the Eye, 4th ed. Charles C. Thomas, Springfield, IL (1993).
30. Yoo, Y.: Mutagenic and Non-Mutagenic Activities of Flavoring Agents Used in Foodstuffs. J. Osaka City Med. Center 34:3-4 (abstract) (1986).
31. Zimmermann, F.K.; Mayer, V.W.; Scheel, I.; Resnick, M.A.: Acetone, Methyl Ethyl Ketone, Ethyl Acetate, Acetonitrile and Other Polar Aprotic Solvents Are Strong Inducers of Aneuploidy in *Saccharomyces cerevisiae*. Mutat. Res. 149(3):339-351 (1985).
32. Ishidate, Jr., M.; Sofuni, T.; Yoshikawa, K.; et al.: Primary Mutagenicity Screening of Food Additives Currently Used in Japan. Food Chem. Toxicol. 22(8):623-636 (1984).
33. Sernau, R.; Upchurch, M.; Cortina, T.; et al.: Genetic Toxicology Studies with Isoamyl Acetate. Environ. Mutagenesis 7(Suppl. 3):63 (abstract) (1985).
34. Mackinson, F.; Stricoff, R.; Partridge, L.; Little, A.: NIOSH/OSHA Pocket Guide to Chemical Hazards, pp. 46-47. U.S. Dept. of Health, Education and Welfare, U.S. Dept. of Labor (1978).
35. Dahl, A.R.; Bond, J.A.; Petridou-Fischer, J.; et al.: Effects of the Respiratory Tract on Inhaled Materials. Toxicol. Appl. Pharmacol. 93(3):484-92 (1988).
36. Nelson, K.W.; Edge, J.F.; Ross, M.; et al.: Sensory Response to Certain Industrial Solvent Vapors. J. Ind. Hyg. Toxicol. 25:282-285 (1943).

37. Ballantyne, B.; Tyler, T.R.; Auletta, C.S.: The Sensitizing Potential of Primary Amyl Acetate in the Guinea Pig. *Veterinary Human Toxicol.* 28(3):213-15 (1986).
38. European Commission: Occupational Exposure Limits Recommendations of the Scientific Expert Group 1991-92, pp. 8-11. Directorate-General, Employment, Industrial Relations and Social Affairs, Luxembourg.