



## PENTYL ACETATE, ALL ISOMERS(2)

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/m<sup>3</sup>)

TLV-STEL, 100 ppm (532 mg/m<sup>3</sup>)

## 동물실험 연구

### 급성

1-Pentyl acetate와 pentyl acetate의 혼합 이성질체에 대한 흰쥐의 경구 LD<sub>50</sub>은 5-16.6 g/kg이다.<sup>12,13,14</sup> Isopentyl acetate에 대한 토끼의 경구 LD<sub>50</sub>은 7.4 g/kg로 보고되었다.<sup>15</sup> 증기상의 pentyl acetate가 약 5,200 ppm으로 포화된 공기에 노출된 흰쥐들은 8시간 후에 모두 죽었으나, 4시간 동안의 노출에서는 죽지 않았다.<sup>14</sup> Pentyl acetate 2,200 ppm에 3.5시간, 5,000 ppm에 1시간 동안 흡입을 통해 노출된 고양이들은 타액 분비, 눈물 흘림, 불규칙한 호흡 증세를 보였다.<sup>16</sup> 흡입을 통해 pentyl acetate 5,000 ppm에 30분 동안 노출된 흰쥐들의 경우는 마비 증세가 관찰되었다.<sup>17</sup>

높은 농도로 2-Pentyl acetate에 노출된 후 죽은 기니피그들은 경미한 뇌 손상과 전신의 조직에 이상을 나타냈다.<sup>11</sup> 13.5시간 동안 5,000 ppm에 노출되면 경미한 폐 손상을 보였으나 2,000 ppm에 노출된 기니피그들은 병리학적 이상 증세를 보이지 않았다.<sup>11</sup> Pentyl acetate의 모든 이성질체는 동물의 눈, 피부, 호흡기계에 자극을 유발할 수 있다. Pentyl acetate는 피부 탈지 작용을 일으켜 장기간 접촉되면 자극성을 나타낼 수도 있다.<sup>18</sup>

토끼의 경우 amyl acetate에 대한 24시

간 피부 침투 테스트를 통해 산출된 LD<sub>50</sub>은 20 mL/kg 보다 큰 수치였다.<sup>14</sup> 1-Pentyl acetate가 토끼의 눈에 주입되면 중간 정도의 비가역적인 각막 상피 세포의 손상을 일으켰다.<sup>19</sup> 토끼 눈의 자극성 테스트에서 희석되지 않은 amyl acetate는 1-10 등급 중 2등급을 부여 받았다.<sup>14</sup> 증기상의 n-pentyl acetate에 대한 흰쥐의 LD<sub>50</sub>은 1438-1562 ppm의 범위를 보였다.<sup>20</sup>

감각 자극제들에 대한 0.03×LD<sub>50</sub>과 TLV-TWA간의 조직학적으로 관련성은 43-47 ppm 수준의 노출 정도로 제안하였다.<sup>20</sup> LD<sub>50</sub>의 생물학적 검정은 직업 노출 가이드라인을 제안하는 데 지금까지 활용되어 왔고, 0.03×LD<sub>50</sub>은 감각 자극제 노출에 따른 안전기준 예측수치를 산정하는 데 이용되어 왔다.<sup>20,21</sup>

### 아만성

상업용 pentyl acetate의 간독성을 평가하기 위해 수컷 기니피그들을 대상으로 0.75-1.5 g/kg을 복막간 주사를 통해 주입하였다.<sup>22</sup>

그 결과, 1,500 mg/kg 투여군에서 4마리 중 3마리가 죽었다. 혈청 ornithine carbamyl transferase 활성도는 실험군에서 상승하였다. 간의 조직병리학적 평가에서는 과다 투여된 그룹에서만 지질 변성 현상이 관찰되었다. 결과를 종합한 연구자들은 pe

nyl acetate는 상대적으로 낮은 간독성을 가지고 있다고 결론을 내렸다.<sup>22)</sup>

Pentyl acetate 관련 독일의 MAK 자료들에 의하면 동물을 대상으로 한 아만성 연구에서 이 물질의 target organ 중 하나가 간이라고 하였다.<sup>5)</sup> Pentyl acetate는 콜린성 신경 구조와 아세틸콜린 수용체에 영향을 준다.<sup>23)</sup> 1-Pentyl acetate는 동물 연구에서 염증 증세를 완화시키는 것으로 나타났다, 따라서 사람에게 항염증 치료제로 이용되어 왔다.<sup>24)</sup>

Amyl acetate의 혈액학적 효과는 아만성 연구에서 명확히 밝혀지지 않았다.<sup>25)</sup> Pentyl acetate는 실험에서 100 ppm 농도 수준일 때 항응혈 특성을 가지는 것으로 보고되었다.<sup>26)</sup> 이러한 예방적 효과는 용매에 의한 적혈구 세포막의 안정도 증가와 연관이 있다.<sup>26)</sup>

Pentyl acetate에 대한 아만성 연구들은

거의 보고된 바 없다. 하지만 acetate가 알코올로 대사되고<sup>5,27)</sup> 이 알코올이 petnyl acetate와 비슷한 수용성을 보이기 때문에 pentyl acetate와 그것에서 유래하는 알코올의 아만성 독성은 유사하다.<sup>4)</sup> 흰쥐에 있어 n-amy alcohol의 역효과는 하루에 적어도 100 mg/kg 이상 노출되지 않는 한 관찰되지 않았고, 이러한 결과는 pentyl acetate의 경우와도 유사하다 할 수 있다.<sup>28)</sup>

#### 만성/발암성

Pentyl acetate와 관련한 만성 독성 연구들은 보고된 바 없다. 다만 독일 MAK 위원회에서 한 주에 두 번 isoamyl alcohol을 경구로 흰쥐들에게 투여하여 악성 종양 발생의 증가를 발견한 Gibel 등(1975)의 연구 결과만을 검토하였다.

MAK 위원회는 적은 수의 동물 연구와 이에 따른 통계 분석 결과의 부족으로 본 연구 결과로 발암 유효성을 판단내리기는 어렵다고 결정하였다. ☹

**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).
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).
12. Raw Material Data Handbook, Vol. 1. Nat. Assoc. Print Ink Res. Inst., Bethlehem, PA (1974).
13. Jenner, P.; Hagan, E.; Taylor, J.; et al.: Food Flavorings and Compounds of Related Structure. I. Acute Oral Toxicity. Food Cosmet. Toxicol. 2:327 (1964).
14. Smyth, H.; Carpenter, C.; West, C.; et al.: Range Finding Toxicity Data: List VI. Am. Ind. Hyg. Assoc. J. 23:95-107 (1962).
15. Munch, J.: Aliphatic Alcohols and Alkyl Esters: Narcotic and Lethal Potencies to Tadpoles and to Rabbits. Ind. Med. 41:31-33 (1972).
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).
18. American Industrial Hygiene Association: Hygienic Guide Series: Amyl Acetate. AIHA, Fairfax, VA (1965).
19. Grant, W.M.; Schuman, J.: Toxicology of the Eye, 4th ed. Charles C. Thomas, Springfield, IL (1993).
20. Schaper, M.: Development of a Database for Sensory Irritants and Its Use in Establishing Occupational Exposure Limits. Am. Ind. Hyg. Assoc. J. 54(9):488-544 (1993).
21. Kane, L.E.; Barrow, C.S.; Alarie, Y.: A Short-Term Test to Predict Acceptable Levels of Exposure to Airborne Sensory Irritants. Am. Ind. Hyg. Assoc. J. 40:207-229 (1979).
22. Divincenzo, G.; Krasavage, W.: Serum Ornithine Carbamyl Transferase as a Liver Response Test for Exposure to Organic Solvents. Am. Ind. Hyg. Assoc. J. 35:21-29 (1974).

23. Takagi, K.; Takayanagi, I.: The Effects of Acetates of Aliphatic Alcohols on the Cholinergic Nerve Structures and the Acetylcholine Receptor of the Guinea Pig Ileum. *J. Pharm. Pharmacol.* 18(12):795-800 (1966).
24. Khedouri, E.; Warne, P.; West, G.: Anti-Inflammatory Activity of Esters of Acetic Acid. *J. Pharm. Pharmacol.* 28(11):839-840 (1976).
25. Insera, A.: Behavior of the Reticulocytes in Experimental Poisoning with Amyl Acetate. *Bollettino-Societa Italiana Biologia Sperimentale* 42(9):551-554 (1966).
26. Holmberg, B.; Jakobson, I.; Malmfors, T.: The Effect of Organic Solvents on Erythrocytes During Hypotonic Hemolysis. *Environ. Res.* 7(2):193B205 (1974).
27. Ghittori, S.; Imbriani, M.; Borlini, F.; et al.: Stability of Esters in the Blood in vitro. *Bollettino-Societa Italiana Biologia Sperimentale* 60(11):2207-2213 (1984).
28. Butterworth, K.; Gaunt, I.; Heading, C.; et al.: Short-Term Toxicity of n-Amyl Alcohol in Rats. *Food Cosmet. Toxicol.* 16:203-207 (1978).