

***n*-BUTYLACETAT/ISOBUTYLACETAT**

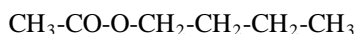
Jord, afdampningskriterium: 0,1 mg/m³

CAS nr: 123-86-4 / 110-19-0

Bruttoformel: C₆H₁₂O₂

Strukturformel:

n-Butylacetat:



Isobutylacetat:



Fysisk-kemiske egenskaber

Synonymer: *n*-Butylacetat: 1-butylacetat, eddikesyrebutylester. Isobutylacetat: Eddikesyreisobutylester; 2-methyl-1-propyl acetat. Molvægt: 116,16. Beskrivelse: Flygtige, farveløse, brandbare væsker med en stærk frugtlig lugt. Smeltepunkt: -77,9/-98,6 °C. Kogepunkt: 125/117 °C. Massefylde: 0,88. Damptryk: 15/12,75 mmHg (2/1,7 kPa). Flammepunkt: 22-24/17 °C. Vandopløselighed: 8,3/6,3 g/l. Octanol/vandfordeling (logP): 1,8/1,6 Omregningsfaktor (i luft): 1 ppm = 4,74 mg/m³. Lugtgrænse: 0,39/0,64 ppm (185/303 mg/m³) (luft); 0,17/0,15 mg/l (vand).

Forekomst og anvendelse

Både *n*-butylacetat og isobutylacetat forekommer naturligt i små mængder i forskellige frugter, eksempelvis æbler og bananer.

n-Butylacetat og isobutylacetat bruges som opløsningsmidler i farve-lak- og kosmetik industrien; ved fremstilling af tekstiler, kunstig læder og plastic; samt som ekstraktionsmiddel i fødevarer. Endvidere benyttes de som aromastoffer i fødevarer og parfumer.

Miljømæssige forhold

Begge isomere af butylacetat er relativt mobile i jord. Begge forbindelser vil hurtigt afdampe fra jord og vand. I basisk miljø (fugtig jord eller vand med pH > 9) nedbrydes stofferne kemisk. I luften nedbrydes de ved en reaktion med hydroxyl radikaler, halveringstiderne er henholdsvis 6 dage og 21 timer for *n*-butylacetat og isobutylacetat.

En ophobning af *n*-butylacetat og isobutylacetat i fisk eller andre akvatiske organismer forventes ikke ud fra den anførte logP. Ligeledes forventes

en adsorption af stofferne til sedimentet eller organiske materialer heller ikke.

Optagelse, omdannelse og udskillelse

n-Butylacetat og isobutylacetat optages i kroppen efter indtagelse, inhalation, og ved kontakt med hud og øjne. Efter optagelse nedbrydes de let til eddikesyre og de respektive alkoholer (*n*-butanol og isobutanol). Både eddikesyre og alkoholerne omdannes videre til kuldioxid, som udskilles.

Sundhedsmæssige effekter

Den akutte giftighed af disse stoffer er lav hos både mennesker og forsøgsdyr, men de kan forårsage irritation af de øvre luftveje, huden og øjnene.

Indånding af dampe af *n*-butylacetat (1.000-1.500 mg/m³) og isobutylacetat (4.500 mg/m³) kan hos mennesker medføre en svag irritation af hals, øjne og næse. Ved indånding af højere koncentrationer (*n*-butylacetat: 15.600 mg/m³) kan en stærk irritation af øjne og næse forekomme.

LD₅₀-værdierne for *n*-butylacetat hos gnavere ligger i intervallet 7,1-14,1 g/kg lgv., ved oral indgift. For isobutylacetat er LD₅₀-værdien ved oral indgift bestemt til 4,8 g/kg lgv. hos kaniner. Hos rotter er LC₅₀-værdien for *n*-butylacetat bestemt til 9.480 mg/m³ efter 4 timers inhalation. Derimod medførte 4 timers indånding af 18.960 mg/m³ isobutylacetat ikke død hos rotter, hvorimod den dobbelte koncentration (37.920 mg/m³) medførte døden hos 4 ud af 6 rotter.

Dyreforsøg med gentagen daglig oral dosering af *n*-butylacetat har vist, at høje doser (2-6 g/kg lgv.) kan skade slimhinderne i maven og have en sløvende effekt. I disse forsøg blev et nul-effekt-niveau (NOAEL) fundet ved 600 mg/kg lgv./dag.

n-Butylacetat havde ikke fosterbeskadigende virkning i rotter eller kaniner ved en indåndingskoncentration på 7.110 mg/m³. En eventuel fosterbeskadigende effekt af isobutylacetat er ikke undersøgt.

n-Butylacetat er ikke genotoksisk. En eventuel genotoksisk effekt af isobutylacetat er ikke undersøgt.

En eventuel kræftfremkaldende effekt af de to stoffer er ikke undersøgt.

Reguleringer/ vurderinger

Klassificering:

n-Butylacetat: R10 R66 R67.

Isobutylacetat: F;R11 R66.

B-værdi:

n-Butylacetat: 0,1 mg/m³ L.

Isobutylacetat: 0,3 mg/m³ L.

Grænseværdi, arbejdsmiljøet: 150 ppm (710 mg/m³).

Grundlag for kvalitetskriterier

Der foreligger ikke humane data, som er vel-egnede med henblik på fastsættelse af sundhedsmæssigt baserede kvalitetskriterier.

En tolerabel daglig indtagelse (TDI) beregnes med udgangspunkt i et observeret nul-effekt-niveau (for skader på maveslimhinden) på 600 mg/kg lgv./dag. Der anvendes en UF_I på 10, idet mennesker kan være mere følsomme end forsøgsdyr; en UF_{II} på 10 for at beskytte særligt følsomme mennesker; en UF_{III} på 10, idet forsøget er af begrænset varighed. TDI beregnes således til 0,6 mg/kg lgv./dag.

TDI'en er beregnet på toksiciteten af *n*-butylacetat, men det er rimeligt at lade denne gælde for isobutylacetat også.

Da mennesker primært eksponeres for *n*-butylacetat og isobutylacetat via indåndingsluften, tolereres et bidrag på kun 10% af TDI fra indtagelse af hhv. jord eller drikkevand.

Et sundhedsmæssigt baseret kvalitetskriterium i jord baseret på børns jordspisning beregnes til 3 g/kg jord, under forudsætning af, at et barn på 10 kg i gennemsnit indtager 0,2 g jord per dag.

Imidlertid har både *n*-butylacetat og isobutylacetat et højt damptryk og en lav lugtgrænse i luft. Derfor fastsættes et afdampningskriterium lig med den lugtbaserede B-værdi for *n*-butylacetat, som er på 0,1 mg/m³.

Et sundhedsmæssigt baseret kvalitetskriterium i drikkevand beregnes til 2 mg/l, under forudsætning af at en voksen person på 70 kg indtager 2 liter drikkevand per dag.

Imidlertid har butylacetaterne en lav lugtgrænse i vand. Derfor fastsættes drikkevandkvalitetskriteriet baseret på lugtgrænsen i vand (150-170 µg/l) ved MST's beregningsmodel til 10 µg/l.

Reference

Strube, M. (1994): Evaluation of health hazards by exposure to *n*-butyl acetate and isobutyl acetate and estimation of quality criteria in soil and

drinking water. Institutet for Toksikologi, Levnedsmiddelstyrelsen, 1994. Baggrundsrapport udarbejdet for Miljøstyrelsen.

Marts 1995 MS/IT/2.
December 2002 ENI/IFSE.