

[메틸벤조에이트]		
물리·화학적 특성 ¹⁾²⁾³⁾⁴⁾⁵⁾⁶⁾⁷⁾⁸⁾⁹⁾		
유기화합물로 무색의 액체이다. 물에는 잘 녹지 않지만 유기 용매에 잘 섞인다. 메틸 벤조에이트는 페이조아 나무의 열매를 강하게 연상시키는 쾌적한 냄새가 나며 향수 제조에 사용된다. 또한 난초 꿀 벌과 같은 곤충을 유인하는 용매 및 살충제로 사용된다.		
물질명	국문 : 메틸벤조에이트 영문 : Methyl benzoate	
관리정보	CAS 번호 : 93-58-3	
성상	무색 투명한 액체, 결정질 고체 또는 액체에 용해된 고체로 나타난다. 20℃ and 1013 hPa : 액체 (무색 또는 황색) 향기로운 냄새, 과일향과 함께 꽃냄새가 남. 과일 견과류 맛 등이 난다.	
분자식	C ₈ H ₈ O ₂ or C ₆ H ₅ COOCH ₃	
분자량	136.15	
끓는점	199.0℃	
녹는점	-14.5℃	
밀도	25℃ 에서 1.0837 g/cm ³ 상대 밀도(물=1): 1.09	
증기압	50.7 Pa at 25℃	
분배 계수	log K _{ow} = 2.2	
용해도	물 : 20℃ 에서 2100 mg/L	
상대증기밀도	자료없음	
인화점	77℃ at 1013 hPa, 일반적인 범위는 77 to 85℃ 이다	
자연 발화	표준 대기압에서 542 ± 5℃	
폭발성	폭발성이 있다.	
점성	1.94 mPa · s at 20℃ .	
독성 정보 ¹⁰⁾¹¹⁾		
독성	종(species)	결과
급성 구강독성	rat	LD ₅₀ = 2000 mg/kg bw
급성 흡입독성	rat	흡입에 영향을 미칠 가능성이 낮은 것으로 간주된다.
급성 피부독성	rabbit	LD ₅₀ > 5000 mg/kg bw
피부 자극	rabbit	피부에 자극을 주지 않았다. 피부를 통한 흡수율이 낮고 피부를 느리게 투과한다. 눈, 코, 목, 상기도 및 피부를 자극함. 알레르기성 피부 및 호흡기 반응을 일으킬 수 있다.
눈 자극	rabbit	눈에 자극을 주지 않았다. 결막 부종, 결막 충혈
반복선량 독성	rat	NOEL = 557 mg/kg bw/day
유전독성	S. typhimurium, E. coli, human lymphocytes	시험관 내 유전자 돌연변이 분석에서 유의미한 유전적 독성을 생성하지 않았다.
발암성	자료없음	-
생식독성	rat	NOAEL = 557 mg/kg bw/day
발달독성	Rat, mouse Hamster Rabbit	NOEL (maternal/teratogenicity) = 165 mg/kg bw/day NOEL (maternal/teratogenicity) = 283 mg/kg bw/day NOEL (maternal/teratogenicity) = 236 mg/kg bw/day
건강 영향 ¹⁵⁾¹⁶⁾¹⁷⁾¹⁸⁾¹⁹⁾²⁰⁾		
흡입 노출	쥐는 0.8 L/min/kg×240 min×5 mg/L 에어로졸 = 960 mg/kg의 전신 용량을 투여받았다. 급성 경구 LD ₅₀ 이 이 값보다 높았기 때문에 급성 흡입 연구에서 사망률이 관찰될 가능성은 낮다. 국소호흡 효과와 관련해 메틸벤조에이트는 피부나 눈 자극으	

	로 분류되지 않고 피부에 아무런 영향도 주지 않고 눈에 약간의 영향만 미치는 것으로 나타났다. 따라서 메틸벤조에이트는 호흡 점막에서 국소 자극 효과를 발휘하지 않는 것으로 간주된다. 따라서 급성 흡입 연구의 수행은 과학적 이유로 필요하지 않으며, Methyl Benzoate는 흡입에 영향을 미칠 가능성이 낮은 것으로 간주된다.
경구 노출	<p>OECD TG 401에 따른 GLP 연구에서 시험물질 경구 적용 후 급성 독성을 조사하였으며, 수컷 쥐 5마리와 암컷 쥐 5마리로 구성된 그룹에는 시험물질 500, 1000, 2000, 4000 mg/kg bw를 gavage로 투여하였다. 투여 후 1시간과 4시간, 14일 동안 매일 1회 관찰되었다. 500 mg/kg bw 및 1000 mg/kg bw를 투여한 후 사망은 발생하지 않았다. 동물들은 0일째에는 웅크린 자세, 발기부전, 무기력 증세를 보였지만 1일째부터는 모두 정상으로 돌아왔다. 부검 시, 500 mg/kg bw를 투여한 수컷 1마리에서 위 분비선 부위의 두꺼워진 부위가 관찰되었다. 1000 mg/kg bw를 투여한 한 수컷은 폐부종을 보였다.</p> <p>2000 mg/kg bw 투여 후 0일째 수컷 1마리, 1일째 수컷 3마리, 암컷 1마리가 사망했다. 동물들은 4시간 관찰 시 구부정한 자세, 발기, 무기력, 안검하수, 호흡수 감소, 무호흡증 등의 임상 징후를 보였다. 생존한 쥐들은 치료 후 4~5일 후에 점차 회복되었다. 연구 중에 죽은 동물의 경우, 위의 출혈이 관찰되었다.</p> <p>4,000 mg/kg bw를 투여한 후 0일째에 모든 수컷과 암컷 3마리가 사망했다. 암컷 2마리는 첫날 사망했다. 치료 1시간 후, 동물들은 구부정한 자세, 발기, 침, 안검하수 증, 침 증가, 호흡수 감소의 징후를 보였다. 4시간 동안 생존해 있는 두 암컷은 추가적인 신체 떨림, 무감각, 오른쪽 반사 상실, 창백함, 사지가 가늘고 약해 보였다. 심장, 폐, 간, 신장, 비장의 비정상적으로 어둡거나 충혈된 모습이 관찰되었다. 위는 내벽이 혈면서 출혈이 심했다. 장 또한 출혈이 있거나 충혈이 있었다.</p>
피부 노출	<p>뉴질랜드 흰 토끼의 건강한 알비노 토끼 3마리(12~16주, 몸무게 2.2~2.6kg)의 등과 옆구리를 제모했다. 실험 당일, 손상되지 않은 동물의 피부에 테스트 물질 0.5 mL 분량을 도포했다. 패치는 노출 4시간 후 제거됐으며 남은 검사 물질은 에테르에 적신 솜털로 부드럽게 면봉해 제거되었다. 피부 반응은 Draize(1959)가 개발한 점수 시스템에 따라 등급이 매겨졌다. 테스트 소재는 72시간의 관찰 기간 동안 어떤 토끼에게도 일차 피부 자극의 증거를 보여주지 않았으며, 치료 후 24시간, 48시간, 72시간 관찰 시점에서 홍반과 외부종의 개별 점수는 0이었다. 피폭 부위 이상으로 확장된 박리현상은 72시간 판독 시에만 세 동물 모두에서 관찰되었다. 테스트 결과에 기초하여 메틸벤조에이트는 토끼 가죽에 자극적이지 않다고 결론지었다.</p>
눈 노출	<p>생후 12~16주, 몸무게 2.6~3.2kg의 건강한 안구 질환 없는 뉴질랜드 흰 토끼 3마리가 실험에 사용됐다. 각 토끼의 오른쪽 눈에 0.1 mL의 깔끔한 테스트 물질을 주입했다. 왼쪽 눈은 치료되지 않고 대조군 역할을 했다. 드레이즈가 개발한 수치평가 방식에 따라 시술 후 1, 24, 48, 72시간 경과 후 눈의 손상과 염증을 평가했다. 치료 후 24시간 동안 관찰한 결과 3마리 모두 각막이나 홍채에 아무런 영향이 없는 것으로 나타났다. 세 동물 모두에서 결막의 붉은기가 관찰되었고 세 동물 중 두 동물에서 화학작용이 관찰되었다. 모든 효과는 일시적이었고 치료 후 72시간 후에 이루어진 관찰에서 사라졌다. 결막충혈과 결막부종의 (24시간, 48시간, 72시간 평균) 점수는 0.66을 넘지 않았다. 따라서 이 물질은 토끼 눈에 자극적이지 않은 물질로 간주된다.</p>
급성 영향	<p>메틸 벤조에이트를 사용하는 인간은 피부, 눈, 점막 및 상부 호흡기에 자극이 발생했다. 이 액체를 삼키면 폐로의 흡인으로 인해 화학적 폐렴이 발생할 수 있다. 일반적으로, 메틸 벤조에이트는 섭취 및 흡입에 의한 독성은 낮거나 중간 정도이다.</p>
만성 영향	<p>다세대 연구에서 20마리의 수컷 쥐와 20마리의 암컷 쥐로 구성된 2개의 실험 그룹</p>

	<p>에 0.5와 1%의 벤조산을 식품에서 처리했다. 통제 그룹은 처리되지 않은 음식을 받았다. 20마리의 수컷 쥐와 20마리의 암컷 쥐로 구성되었다. 1세대와 2세대는 평생 노출되었고, 3세대는 16주, 4세대는 태아 때부터 노출됐다. 3세대 암컷 쥐의 간 두께 증가는 치료와 관련이 없는 것으로 간주돼 수유 중 체중 증가와 분만 크기의 변화로 해석됐다. 3세대 동물에서 조직병리학적 소견은 보이지 않았다. 이 만성 연구에서 사망 원인은 조사되지 않았다. 본 연구의 데이터에 기초하여 식단에서 벤조산에 대한 만성노출 NOEL은 1%이다(500 mg/kg bw/일 및 557 mg/kg bw/일 메틸벤조에이트에 해당).</p>
<p>환경거동 (잔류성, 반감기 등)</p>	<p>메틸벤조에이트 물질은 쉽게 생분해된다. 생분해성에 대한 두 가지 스크리닝 연구에서 환경에서 빠르게 분해되는 것으로 보인다. 그 물질의 환경적 지속이 잘되지 않는 것으로 보여진다. log K_{ow} 값 2.2는 물질의 생물학적 축적 가능성이 낮음을 나타낸다. 또한 유기체에서 물질이 비축적 대사로 빠르게 전환된다.</p> <p>또한, 이 물질은 토양이나 부유 입자에 대한 흡착 가능성이 낮으며 토양에서 이동성으로 분류된다. 물질의 사용 패턴을 고려할 때, 가장 많은 양의 물질이 폐수로 방출될 것으로 예측된다. 폐수 처리 과정에서 생분해로 폐수에서 상당 부분이 제거된다. 소량은 생물분해가 계속될 가능성이 높은 지표수에 방출될 수 있다. 이 물질은 적당히 휘발성이며 물 표면에서 어느 정도 증발할 수 있다. 슬러지 또는 침전물에 대한 흡착은 크지 않을 것으로 보인다.</p> <p>하이드록시 라디칼과의 반응으로 인한 물질의 대기에서의 반감기는 약 12일이다. 메틸벤조에이트의 생분해성은 EU 방법 C.4-C에 따른 CO₂ 실험에서 29일의 시험 기간에 걸쳐 연구되었다. 테스트는 테스트 가이드라인에 제시된 기준을 만족했다. 시험 기간 종료 시 시험물질의 62%의 분해되었다(표준물질 아닐린의 분해는 69%였다). 메틸 벤조에이트의 생산 및 사용은 향수, 소독제, 간장 및 살충제의 첨가제, 화장품 및 퍼스널케어 제품의 첨가제, 방부제, 용매 또는 염료 등 다양한 폐기물을 통해 환경으로 방출될 수 있다. 메틸 벤조에이트는 정향, 일랑일랑 및 튜베로즈 오일에서 발생한다. 또한 일부 미생물에 의해 생성되며 담배에서도 보고된 바 있다. 공기 중으로 방출될 경우 25℃에서 0.38mmHg의 증기압을 가진 메틸 벤조에이트는 대기 중 증기상으로만 존재한다. 대기 중 메틸 벤조에이트는 광화학적으로 생성된 하이드록실 라디칼과의 반응하여 분해됩니다. 공기 중에서 이 반응의 반감기는 38일로 추정된다. 메틸 벤조에이트는 290nm 이상의 파장에서 흡수하는 발색단을 포함하지 않으므로 햇빛에 의한 직접적인 광분해에 민감하지 않을 것으로 예상된다.</p> <p>토양으로 방출되는 경우 메틸 벤조에이트는 95~178 범위의 K_{oc} 값을 기준으로 높거나 중간 정도의 이동성을 가질 것으로 예상된다. 습한 토양 표면에서 휘발은 3.24X10⁻⁵ atm-cu의 헨리 법칙 상수에 따르면 중요한 과정으로 여겨진다. 메틸 벤조에이트는 증기압에 따라 건조한 토양 표면에서 휘발되지 않을 것으로 예상된다. Modified Sturm 테스트를 사용하여 29일 후 활성 하수 슬러지에서 62%의 생분해를 달성했으며, 이는 토양과 물에서 생분해가 중요한 과정임을 시사한다. 강과 호수의 예상 휘발 반감기는 각각 22시간과 14일이다. 수생 생물의 생물 농축 가능성이 낮다. 메틸 벤조에이트의 가수분해염기 및 산 촉매 작용을 하며; 염기 촉매 반응은 산 촉매 반응보다 빠르다. pH 9 및 pH 7에서 메틸 벤조에이트의 가수분해로 인한 반감기는 각각 10일 및 2.8년이다.</p> <p>메틸 벤조에이트에 대한 직업적 노출은 메틸 벤조에이트가 생성되거나 사용되는 작업장에서 이 화합물과의 흡입 및 피부 접촉을 통해 발생할 수 있다. 모니터링 및</p>

	사용 데이터에 따르면 일반 인구는 벤조산 메틸을 함유한 소비자 제품과의 흡입 및 피부 접촉을 통해 음식 섭취 및 메틸 벤조에이트에 노출될 수 있다.
노출 경로별 사고사례	25명을 대상으로 실험하였다. 바셀린 내 4% 농도에서 테스트 되었으며 과민반응을 일으키지 않았다. 여러 집단(총 n=4737, 일본인 남성 2341명, 일본인 여성 2396명)에서 메틸 벤조에이트(향수 베이스 크림, 무향 베이스 크림 또는 99% 에탄올에서 0.05%~0.5%)에 대해 패치 테스트를 수행했다. 관찰된 시험물질에 대한 가시적인 반응은 없었다.
안전 가이드 ²¹⁾²²⁾	
응급조치 요령	<p>[눈에 들어갔을 때]</p> <p>먼저 피해자에게 콘택트렌즈가 있는지 확인하고 렌즈가 있으면 제거한다. 환자의 눈을 물 또는 생리식염수로 20~30분간 씻어 내면서 동시에 병원이나 독극물관리센터에 연락한다. 의사의 특별한 지시 없이 환자의 눈에 연고, 오일 또는 약물을 넣지 않는다.</p> <p>[피부에 접촉했을 때]</p> <p>오염된 모든 의복을 제거하고 격리하는 동안 영향을 받은 피부는 즉시 물로 씻는다. 영향을 받는 모든 피부 부위를 비누와 물로 철저히 씻는다. 발적 또는 자극과 같은 증상이 나타나면 즉시 의사에게 연락하고 환자를 병원으로 이송하여 치료를 받을 준비를 한다.</p> <p>[흡입했을 때]</p> <p>즉시 오염된 지역을 벗어난다. 신선한 공기를 심호흡한다. 증상(쌽쌽거림, 기침, 숨가쁨 또는 입, 목 또는 가슴의 작열감 등)이 발생하면 의사에게 연락하고 피해자를 병원으로 이송 준비를 한다. 미지의 대기에 들어가는 구조자에게 적절한 호흡 보호구를 제공한다. 가능하면 자급식 호흡 장치(SCBA)를 사용해야 한다.</p> <p>[섭취했을 때]</p> <p>구토를 유도하지 않는다. 피해자가 의식이 있고 경련을 일으키지 않으면 1~2잔의 물을 준다. 화학물질을 희석하고 즉시 병원이나 독극물 관리 센터에 연락한다. 의사의 지시가 있는 경우 피해자를 병원으로 이송할 준비를 한다. 환자가 경련을 일으키거나 의식이 없는 경우에는 아무것도 입으로 주지 말고 환자의 기도가 열려 있는지 확인하고 머리를 몸보다 낮추고 환자를 옆으로 눕힌다. 구토를 유도하지 말고, 즉시 피해자를 병원으로 이송한다.</p>
취급 및 보관	<p>[취급]</p> <p>공기 중 물질 농도에 맞게 조정된 유기 가스 및 증기용 필터 호흡기. 누출 및 유출된 액체는 가능한 한 밀봉 가능한 용기에 수집한다. 모래 또는 불활성 흡수제에 남아있는 액체를 흡수한다.</p>

[참고문헌]

- 1) National Center for Biotechnology Information. "PubChem Compound Summary for CID 7150, Methyl benzoate"
" PubChem, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Methyl-benzoate>. Accessed 11 January, 2022.
- 2) EPA Chemicals under the TSCA
- 3) Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
- 4) National Toxicology Program, Institute of Environmental Health Sciences, National Institutes of Health (NTP). 1992. National Toxicology Program Chemical Repository Database. Research Triangle Park, North Carolina.
- 5) Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015, p. 3-360
- 6) Riddick, J.A., W.B. Bunger, Sakano T.K. Techniques of Chemistry 4th ed., Volume II. Organic Solvents. New York, NY: John Wiley and Sons., 1985.
- 7) Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 479
- 8) U.S. Coast Guard. 1999. Chemical Hazard Response Information System (CHRIS) - Hazardous Chemical Data. Commandant Instruction 16465.12C. Washington, D.C.: U.S. Government Printing Office.
- 9) Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989.
- 10) Bingham, E.; Cochrissen, B.; Powell, C.H.; Patty's Toxicology Volumes 1-9 5th ed. John Wiley & Sons. New York, N.Y. (2001)., p. V6 643
- 11) Opdyke, D.L.J. (ed.). Monographs on Fragrance Raw Materials. New York: Pergamon Press, 1979., p. 537
- 12) U.S. Coast Guard. 1999. Chemical Hazard Response Information System (CHRIS) - Hazardous Chemical Data. Commandant Instruction 16465.12C. Washington, D.C.: U.S. Government Printing Office.
- 13) Lewis, R.J. Sr. (ed) Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials. 11 판. Wiley-Interscience, Wiley & Sons, Inc. Hoboken, NJ. 2004., p. 2388
- 14) Bingham, E.; Cochrissen, B.; Powell, C.H.; Patty's Toxicology Volumes 1-9 5th ed. John Wiley & Sons. New York, N.Y. (2001)., p. V6 644
- 15) Kieckebusch & Lang, 1960
- 16) Kravets-Bekker & Ivanova, 1970
- 17) Pohanish, R.P. (ed). Sittig's Handbook of Toxic and Hazardous Chemical Carcinogens 6th Edition Volume 1: A-K, Volume 2: L-Z. William Andrew, Waltham, MA 2012, p. 1761
- 18) Bingham, E.; Cochrissen, B.; Powell, C.H.; Patty's Toxicology Volumes 1-9 5th ed. John Wiley & Sons. New York, N.Y. (2001)., p. V6 643
- 19) Opdyke, D.L.J. (ed.). Monographs on Fragrance Raw Materials. New York: Pergamon Press, 1979., p. 537
- 20) Cosmetic Ingredient Review Expert Panel; International Journal of Toxicology: 31(suppl. 3): 342S-372S (2012). Available from, as of July 2, 2015
- 21) National Toxicology Program, Institute of Environmental Health Sciences, National Institutes of Health (NTP). 1992. National Toxicology Program Chemical Repository Database. Research Triangle Park, North Carolina.
- 22) Sigma-Aldrich; Safety Data Sheet for Methyl benzoate. Product Number: 18344, Version 3.11 (Revision Date 06/18/2015). Available from, as of June 26, 2015