

## Ethyl acetate

[酢酸エチル]

## Experimental Data - 1

(B9406-1/3)

Chemical Name; Ethyl acetate  
 Synonym ; Acetic acid ethyl ester  
Ethyl ethanoate

Molecular Weight ; 88.11  
 Melting Point ; - 82.4 °C [CHCD]  
 - 84 °C [Aldrich]  
 - 83 °C [Merck]  
 Boiling Point ; 70.4 °C [CHCD]  
 76.5-77.5 °C [Aldrich]  
 77 °C [Merck]  
 Flashing Point ; - 4 °C [CHCD]  
 - 3 °C [Aldrich]  
 7.2 °C (o. c.) [Merck]  
 Molecular Formula; C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>

## Chemical Structure



CAS No. ; 141-78-6  
 MITI No. ; (2)-726  
 ML No. ; -

Specified Chemical Substances; -

Source of Substance; Tokyo Kasei Kogyo Co., Ltd.  
 Lot No. ; FGD01  
 Purity ; 99.5 %  
 Vehicle ; Distilled H<sub>2</sub>O

Mutagenicity in Bacterial Test ; **Negative**

IARC Evaluation ; not yet cited

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate									
	Base-substitution						Frame-shift			
	TA100		TA1535		WP2uvrA		TA98		TA1537	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
H <sub>2</sub> O	(128)	(140)	( 19)	( 16)	( 34)	( 36)	( 13)	( 24)	( 6)	( 9)
	92	138	14	13	17	32	14	20	7	9
	97	113	11	9	28	31	9	28	5	5
0.0763	( 95)	(126)	( 13)	( 11)	( 23)	( 32)	( 12)	( 24)	( 6)	( 7)
	119	138	13	13	30	41	16	18	6	6
	105	119	21	10	20	26	13	26	5	7
0.305	(112)	(129)	( 17)	( 12)	( 25)	( 34)	( 15)	( 22)	( 6)	( 7)
	129	121	26	17	26	29	15	21	6	9
	120	131	18	11	30	31	5	28	3	5
1.22	(125)	(126)	( 22)	( 14)	( 28)	( 30)	( 10)	( 25)	( 5)	( 7)
	112	124	20	15	28	44	9	22	5	9
	114	127	15	21	24	26	16	30	5	5
4.88	(113)	(126)	( 18)	( 18)	( 26)	( 35)	( 13)	( 26)	( 5)	( 7)
	115	137	17	15	31	47	10	23	6	7
	121	131	20	11	23	39	18	23	10	6
19.5	(118)	(134)	( 19)	( 13)	( 27)	( 43)	( 14)	( 23)	( 8)	( 7)
	117	114	15	18	32	48	9	28	3	8
	108	131	14	16	29	32	9	24	3	8
78.1	(113)	(123)	( 15)	( 17)	( 31)	( 40)	( 9)	( 26)	( 3)	( 8)
	123	142	17	11	28	37	16	15	9	7
	112	144	11	10	31	39	14	23	6	8
313	(118)	(143)	( 14)	( 11)	( 30)	( 38)	( 15)	( 19)	( 8)	( 8)
	122*	135	8*	14	33	37	13	22	5	8
	113*	138	15*	13	29	45	8	23	8	6
1250	(118*)	(137)	( 12*)	( 14)	( 31)	( 41)	( 11)	( 23)	( 7)	( 7)
	106*	119	8*	6	20	31	18*	18	9*	7
	124*	121	16*	20	34	33	13*	22	2*	9
5000	(115*)	(120)	( 12*)	( 13)	( 27)	( 32)	( 16*)	( 20)	( 6*)	( 8)
<b>Judgement</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Specific Mutagenicity</b>										
Positive Control	AF-2 (909)	2-AA (1116)	NaN <sub>3</sub> (446)	2-AA (354)	AF-2 (280)	2-AA (1177)	AF-2 (346)	2-AA (253)	9-AA (697)	2-AA (173)

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate									
	Base-substitution						Frame-shift			
	TA100		TA1535		WP2uvrA		TA98		TA1537	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
H <sub>2</sub> O	(128)	(146)	( 16)	( 19)	( 32)	( 41)	( 16)	( 23)	( 8)	( 13)
	128		14							
19.5	(142)		( 16)							
	134		14							
	127		15							
39.1	(131)		( 15)							
	129	141	11	24	29	40	15	11	10	17
	144	145	11	17	37	45	16	11	10	16
78.1	(137)	(143)	( 11)	( 21)	( 33)	( 43)	( 16)	( 11)	( 10)	( 17)
	123	141	15	17	33	44	9	22	9	7
	128	149	18	16	32	34	13	17	8	11
156	(126)	(145)	( 17)	( 17)	( 33)	( 39)	( 11)	( 20)	( 9)	( 9)
	131	155	11	17	32	33	17	22	7	21
	128	153	17	11	24	40	10	17	13	13
313	(130)	(154)	( 14)	( 14)	( 28)	( 37)	( 14)	( 20)	( 10)	( 17)
	134	162	15*	17	32	47	16	20	13	17
	137	170	10*	14	36	36	21	20	10	8
625	(136)	(166)	( 13*)	( 16)	( 34)	( 42)	( 19)	( 20)	( 12)	( 13)
	117*	145	14*	10	28	44	9	16	7	21
	153*	145	14*	9	37	46	14	17	11	9
1250	(135*)	(145)	( 14*)	( 10)	( 33)	( 45)	( 12)	( 17)	( 9)	( 15)
	128*	138	17*	13	39	51	10*	11	6	11
	138*	177	20*	18	29	32	14*	22	22	13
2500	(133*)	(158)	( 19*)	( 16)	( 34)	( 42)	( 12*)	( 17)	( 14)	( 12)
	135*	138	16*	17	36	37	15*	20	6*	9
	157*	144	14*	18	30	46	11*	26	6*	14
5000	(146*)	(141)	( 15*)	( 18)	( 33)	( 42)	( 13*)	( 23)	( 6*)	( 12)
Judgement	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Specific Mutagenicity</b>										
Positive Control	AF-2 (938)	2-AA (1650)	NaN <sub>3</sub> (454)	2-AA (309)	AF-2 (327)	2-AA (1361)	AF-2 (437)	2-AA (445)	9-AA (600)	2-AA (280)

Experimental Data - 3

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate					
	Base-substitution					
	TA102		TA104		WP2uvrA/pKM101	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
H <sub>2</sub> O	(259)	(307)	(296)	(337)	( 48)	( 85)
	230	340	274	350	43	77
	228	293	312	319	44	71
0.0763	(229)	(317)	(293)	(335)	( 44)	( 74)
	249	389	303	359	43	92
	211	364	313	353	46	94
0.305	(230)	(377)	(308)	(356)	( 45)	( 93)
	260	352	278	371	39	84
	241	335	278	364	37	97
1.22	(251)	(344)	(278)	(368)	( 38)	( 86)
	215	329	268	365	52	79
	216	272	284	343	59	64
4.88	(216)	(301)	(276)	(354)	( 56)	( 72)
	228	356	299	355	44	111
	252	353	265	337	52	96
19.5	(240)	(355)	(282)	(346)	( 48)	(104)
	343	338	260	370	44	82
	233	373	303	376	39	85
78.1	(238)	(356)	(282)	(373)	( 42)	( 84)
	223	326	278	349	54	84
	221	310	276	353	33	71
313	(222)	(318)	(277)	(351)	( 44)	( 78)
	247	380	300	358	55	100
	223	358	280	406	54	102
1250	(235)	(369)	(290)	(382)	( 55)	(101)
	221	346	323*	349	51	83
	221	362	320*	344	56	92
5000	(221)	(354)	(322*)	(347)	( 54)	( 88)
<b>Judgement</b>	—	—	—	—	—	—
<b>Specific Mutagenicity</b>						
Positive Control	BLM (684)	2-AA (2081)	PA (1205)	2-AA (1121)	AF-2 (1435)	2-AA (886)

Experimental Data - 4

(B9406-3/3)

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate					
	Base-substitution					
	TA102		TA104		WP2uvrA/pKM101	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
H <sub>2</sub> O	(204)	(248)	(254)	(274)	( 47)	( 73)
			228			
			232			
78.1			(230)			
	204	275	238	298	53	75
	199	215	205	234	53	84
156	(202)	(245)	(222)	(266)	( 53)	( 80)
	238	332	242	282	43	66
	239	316	263	325	47	96
313	(239)	(324)	(253)	(304)	( 45)	( 81)
	208	285	195	290	45	74
	198	274	212	287	52	71
625	(203)	(280)	(204)	(289)	( 49)	( 73)
	230	272	260	279	59	75
	255	291	276	275	56	77
1250	(243)	(282)	(268)	(277)	( 58)	( 76)
	212	300	271*	305	52	81
	235	290	254*	307	56	98
2500	(224)	(295)	(263*)	(306)	( 54)	( 90)
	192	247	202*	290	69	57
	183	254	221*	273	45	78
5000	(188)	(251)	(212*)	(282)	( 57)	( 68)
<b>Judgement</b>	—	—	—	—	—	—
<b>Specific Mutagenicity</b>						
Positive Control	BLM (678)	2-AA (1548)	PA (1496)	2-AA (1140)	AF-2 (1020)	2-AA (880)