

TOXIKOLOGISCHE BEWERTUNGEN

ISBN 0937-4248



Monochloressigsäure

Nr. 23

Ausgabe 10/92

Neben der TOXIKOLOGISCHEN BEWERTUNG Nr. 23 Monochloressigsäure liegen auch TOXIKOLOGISCHE BEWERTUNGEN zum Methyl- und Ethylester, Nr. 76 Chloressigsäuremethylester und Nr. 190 Chloressigsäureethylester, vor, die in wässriger Lösung zu Nr. 23 Monochloressigsäure und den entsprechenden Alkoholen hydrolysierbar sind.

1 Stoffname

1.1	Gebrauchsname	Monochloressigsäure
1.2	IUPAC-Name	Monochloressigsäure
1.3	CAS-Nr.	79-11-8
1.4	EINECS-Nr.	201-178-4

2 Synonyme, Trivial- und Handelsnamen

Chloressigsäure
Chlorethansäure
Chloroacetic acid
Chloroethanoic acid
MCA
MCAA
Monochloroacetic acid

3 Struktur- und Summenformel

3.1	Strukturformel	$\text{Cl-CH}_2\text{-COOH}$
3.2	Summenformel	$\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2\text{Cl}$

4 Physikalisch-chemische Eigenschaften

4.1	Molekularmasse, g/mol	94,50
4.2	Schmelzpunkt, °C	handelsübliche α -Form: 62,3 - 62,8 β -Form (instabil): 56,5 γ -Form (instabil): 50,6
4.3	Siedepunkt, °C	189,4
4.4	Dampfdruck, hPa	0,2 (bei 20 °C) 2,0 (bei 50 °C)
4.5	Dichte, g/cm ³	1,3703 (bei 65 °C)
4.6	Löslichkeit in Wasser	86,0 g/100 g Lösung (bei 30 °C)
4.7	Löslichkeit in organischen Lösemitteln	gut löslich in Methanol, Ethanol, Aceton, Ether, Dioxan, Dimethylformamid, Dimethylsulfoxid; wenig löslich in Kohlenwasserstoffen und chlorierten Kohlenwasserstoffen
4.8	Löslichkeit in Fett	keine Information vorhanden
4.9	pH-Wert	ca. 1 (10 g/l Wasser)
4.10	Umrechnungsfaktor	1 ml/m ³ (ppm) \triangleq 3,92 mg/m ³ 1 mg/m ³ \triangleq 0,26 ml/m ³ (ppm) (bei 1013 hPa und 25 °C)

5 Herstellung, Produktionsmenge und Verwendung

5.1 Herstellung

Chlorierung von Essigsäure oder Hydrolyse von Trichlorethen.

5.2 Hergestellte oder eingeführte Menge

> 1000 t/Jahr.

5.3 Verwendung

Verwendung für die Herstellung von Carboxymethylcellulose; Zwischenprodukt für die Herstellung von Pestiziden und anderen Produkten.

6 Zusammenfassung und Bewertung

Monochloressigsäure wird nach Resorption schnell im Organismus verteilt und in einer schnellen Eliminationsphase (Ratte subkutan Halbwertszeit 90 Minuten) unverändert und in einer verzögerten Phase (Halbwertszeit 500 Minuten) an Glutathion, Cystein oder Protein gebunden bzw. als CO₂ ausgeschieden. Nach 17 Stunden werden etwa 50 % der Radioaktivität im Harn (Ratte), nach 72 Stunden etwa 82 bis 88 % der Radioaktivität im Harn (Maus) ausgeschieden. Bei Hautkontamination mit ¹⁴C-markierter Monochloressigsäure beim Menschen wird eine Halbwertszeit für die schnell im Harn ausgeschiedene Monochloressigsäure von ca. 15 Stunden gefunden, für die langsame Phase fehlt eine entsprechende Angabe. Nach 6 Tagen werden nur noch kleinste Mengen im Vollblut nachgewiesen. Monochloressigsäure wird nach in vivo-Untersuchungen an Mäusen über S-Carboxymethyl-Glutathion und S-Carboxymethylcystein zu Thiodiessigsäure metabolisiert und in geringerem Umfang auch nach enzymatischer Hydrolyse der C-Cl-Bindung zu Glykolsäure und CO₂.

Monochloressigsäure ist als giftig (LD₅₀ Ratte oral ca. 90 mg/kg Körpergewicht) zu bezeichnen. Systemisch kommt es nach oraler Gabe nicht nur bei Laboratoriumstieren, sondern auch bei Nutztieren (Rind, Schaf, Geflügel) zu Gewichtsverlust, Tremor, Krämpfen, Lähmung der Extremitäten und zu histologisch nachweisbaren Veränderungen im Zentralnervensystem sowie zu Blutungen in Lungen und Herzmuskel. Monochloressigsäure wird leicht durch die Haut in toxischen Mengen resorbiert. Bei 20 °C entstehende Dämpfe scheinen keine auffallende toxische Wirkung zu haben. Bei hoher Temperatur entstehende Monochloressigsäure-Aerosole können tödlich wirken.

Monochloressigsäure wirkt ätzend bzw. reizend auf Haut und Augen.

Hinweise auf eine hautsensibilisierende Wirkung von Monochloressigsäure liegen nicht vor.

Subchronische Verabreichung von Monochloressigsäure per Schlundsonde in Dosen bis zu 200 mg/kg Körpergewicht an Ratten und Mäuse oder Gabe im Trinkwasser an Ratten führen bei Ratten zu Veränderungen in den klinisch-chemischen Parametern, die auf eine Nephro- und Lebertoxizität hinweisen. Histologisch treten Schäden in Leber, Nieren und Lungen auf. Bei Mäusen dagegen werden keine substanzbedingten Effekte auf

hämatologische und klinisch-chemische Parameter beobachtet. 30-wöchige Gabe im Futter in einer Konzentration von 100 mg/kg Körpergewicht führt bei Ratten mit Ausnahme einer Gewichtsreduzierung zu keinen pathologischen Befunden. In einem ungenügend beschriebenen Inhalationsversuch über 4 Monate zeigen Ratten und Meerschweinchen bei Konzentrationen von 20,8 mg/m³ u. a. verminderte Gewichtszunahme, Hämoglobinabfall, Hämoglobinämie und histologisch nachweisbare entzündliche Veränderungen im Respirationstrakt. 5,8 mg/m³ werden ohne nachweisbare Schädigungen vertragen.

Bei der Untersuchung auf mutagene Wirkung an Bakterien mit und ohne S9-Mix finden sich keine Hinweise auf ein gentoxisches Potenzial. Bei Verwendung von Säugerzellen in vitro sind die Ergebnisse bei der Prüfung auf mutagene Wirkung nicht einheitlich. Bei Mäusen wird nach intraperitonealer Applikation eine Zunahme von Chromosomenaberrationen beobachtet.

In Langzeitversuchen mit verschiedenen Mäuse-Stämmen bei dermalen, subkutaner und oraler Applikation ergeben sich keine Hinweise auf eine kanzerogene Wirkung von Monochloressigsäure. Eine im Rahmen des NTP durchgeführte 2-Jahres-Studie ergibt keinen Hinweis auf eine kanzerogene Wirkung bei Ratten und Mäusen. Gegen eine kanzerogene Wirkung sprechen auch die Befunde einer fehlenden kovalenten Bindung von Monochloressigsäure an zelluläre Strukturen.

Nach Gabe von Monochloressigsäure in Dosen bis zu 140 mg/kg Körpergewicht an trächtige Rattenweibchen ist die Anzahl und das Gewicht der Feten mit denen der Kontrolltiere vergleichbar. Missbildungen des kardiovaskulären Systems sind in der höchsten Dosis signifikant erhöht, Skelettmisbildungen werden dagegen nicht beobachtet. Intraperitoneale Applikation von bis zu 50 mg/kg Körpergewicht verursacht bei männlichen Mäusen eine erhöhte Anzahl abnormaler Spermien.

Nach in vitro-Untersuchungen hemmt Monochloressigsäure die Acetatoxidation und die Glukoneogenese. Die Leber-Glutathion-S-Transferase wird durch eine direkte Bindung von Monochloressigsäure dosisabhängig inhibiert.

Monochloressigsäure bewirkt an der menschlichen Haut Reizerscheinungen, Verbrennungen mit Blasenbildung sowie Ätzwunden. Ähnliche Schäden sind nach Einwirkung auf die Augen zu erwarten. Monochloressigsäu-

re wird schnell durch die Haut resorbiert und kann bei Kontamination genügend großer Hautflächen unter Atemnot, Krämpfen, Erbrechen und allgemeinem Schockzustand zum Tod führen.

7 Einstufungen und Grenzwerte

Validierte Grenzwerte liegen nicht vor.

8 Arbeitsmedizinische Empfehlungen

Im Vordergrund stehen Reizwirkungen an Haut und Schleimhäuten (Auge, Atemtrakt). Es werden arbeitsmedizinische Vorsorgeuntersuchungen in Anlehnung an den Berufsgenossenschaftlichen Grundsatz G 23 unter besonderer Berücksichtigung des Hautbefundes empfohlen.

Die Erstellung der TOXIKOLOGISCHEN BEWERTUNGEN ist nach bestmöglicher Sorgfalt erfolgt, jedoch ist eine Haftung bei fehlerhaften Angaben oder Bewertungen ausgeschlossen.

© Berufsgenossenschaft der chemischen Industrie, Heidelberg

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung, vorbehalten. Nachdrucke - auch auszugsweise - nur mit ausdrücklicher Genehmigung der Berufsgenossenschaft der chemischen Industrie.

Berufsgenossenschaft der chemischen Industrie
Postfach 10 14 80, 69004 Heidelberg
Telefon: 06221 523 (0) 400
E-Mail: ToxikologischeBewertungen@bgchemie.de
Internet: www.bgchemie.de/toxikologischebewertungen

Monochloressigsäure

Aktuelle Einstufungen und Grenzwerte

Zwischenzeitlich wurde Monochloressigsäure in den Abschnitt IIb (Stoffe, für die derzeit keine MAK-Werte aufgestellt werden können) der MAK- und BAT-Werte-Liste 2008 eingeordnet.

In der Grenzwerteliste 2008 (BGIA-Report 6/2008) wird ein Grenzwert von 4 mg/m^3 (entsprechend 1 ml/m^3 (ppm)), Spitzenbegrenzung 1(I), H (hautresorptive Wirkung) angegeben.

In den USA beträgt der TLV-TWA-Wert der ACGIH (2009) $1,96 \text{ mg/m}^3$ (entsprechend $0,5 \text{ ml/m}^3$ (ppm)) mit dem Hinweis „Skin“ (hautresorptive Wirkung) und A4 (nicht klassifizierbar als krebserzeugend aufgrund Datenmangels).