

TOXIKOLOGISCHE BEWERTUNGEN

ISBN 0937-4248



3-Methylbutanol-1

Nr. 95

Ausgabe 01/1997

1 Stoffname

1.1	Gebrauchsname	3-Methylbutanol-1
1.2	IUPAC-Name	3-Methylbutanol-1
1.3	CAS-Nr.	123-51-3
1.4	EINECS-Nr.	204-633-5

2 Synonyme, Trivial- und Handelsnamen

iso-Amylalkohol
Isoamyl alcohol
Isoamylol
Isobutyl carbinol
Isopentanol
Isopentyl alcohol
3-Methylbutanol
3-Methylbutan-1-ol

3 Struktur- und Summenformel

3.1	Strukturformel	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \diagdown \\ \text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \\ \diagup \\ \text{H}_3\text{C} \end{array}$
3.2	Summenformel	$\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$

4 Physikalisch-chemische Eigenschaften

4.1	Molekularmasse	88,15
4.2	Schmelzpunkt, °C	- 117,2
4.3	Siedepunkt, °C	131,1 (bei 1013 hPa)
4.4	Dampfdruck, hPa	3,07 (bei 20 °C) 6,40 (bei 30 °C)
4.5	Dichte, g/cm ³	0,8104 (bei 20 °C)
4.6	Löslichkeit in Wasser	20 g/l (bei 14 °C) 30 g/l (bei 20 °C)
4.7	Löslichkeit in organischen Lösemitteln	löslich in Ethanol, Diethylether, Aceton, Benzol, Chloroform, Petrolether, Eisessig
4.8	Löslichkeit in Fett	Verteilungskoeffizient n-Octanol/Wasser, log P _{ow} : 1,16 log P _{ow} : 1,29 log P _{ow} : 1,30 log P _{ow} : 1,42 (experimentell)
4.9	pH-Wert	keine Information vorhanden
4.10	Umrechnungsfaktor	1 ml/m ³ (ppm) \triangleq 3,60 mg/m ³ 1 mg/m ³ \triangleq 0,28 ml/m ³ (ppm) (bei 1013 hPa und 25 °C)

5 Herstellung und Verwendung

5.1 Herstellung

Durch Hydroformylierung von Buten-Isomeren.

5.2 Verwendung

Als Lösungsmittel; zur Herstellung von Di(3-methylbutyl)ether sowie anderen Estern und Ethern, die als Duft- und Geschmacksstoffe verwendet werden; Zwischenprodukt zur Herstellung von Herbiziden.

6 Zusammenfassung und Bewertung

3-Methylbutanol-1 wird von Ratten nach intraperitonealer bzw. oraler Gabe resorbiert. Maximale Blutspiegel werden nach einer Stunde erreicht. Als Metaboliten werden Isovalerianaldehyd und Isovaleriansäure nachgewiesen. Nur geringe Mengen des unmetabolisierten Alkohols werden bei der Ratte über den Harn und die Expirationsluft ausgeschieden. Nach oraler Gabe an Kaninchen enthält der 24-Stunden-Harn ca. 9 % der Dosis in Form des Glukuronids von Triacetyl- β -isoamylmethylester.

Bei akuter oraler Applikation ist 3-Methylbutanol-1 gesundheitsschädlich bis gering toxisch (LD_{50} Ratte oral 1300 bis 5720 mg/kg Körpergewicht). Die akute dermale Toxizität ist gering (LD_{50} Kaninchen dermal 3212 bis > 5000 mg/kg Körpergewicht). Die akute inhalative Toxizität ist ebenfalls gering. Im Inhalations-Risiko-Test werden bei 7- bzw. 8-stündiger Exposition in einer bei 20 °C angereicherten Atmosphäre bei Ratten keine Todesfälle beobachtet. An Symptomen zeigen sich Atemstörungen und ausgefallener Schmerzreflex. Im akuten Versuch werden bei oraler und dermaler Zufuhr an Vergiftungssymptomen Apathie, Atonie, Parese der hinteren Extremitäten, Narkose, Reizerscheinungen an den Schleimhäuten und Verlust des Cornealreflexes beobachtet. An histologischen Befunden werden Anzeichen für degenerative Veränderungen in Leber und Niere mitgeteilt.

An der intakten und skarifizierten Haut von Kaninchen wirkt 3-Methylbutanol-1 bei okklusiver Applikation mäßig reizend, am Kaninchenauge kommt es zu deutlichen Reizeffekten.

In einem 13-Wochen-Versuch wird für 3-Methylbutanol-1 nach oraler Gabe im Trinkwasser ein no observed adverse effect level von ca. 340 mg/kg Körpergewicht/Tag für männliche Ratten und von 1250 mg/kg Körpergewicht/Tag für weibliche Ratten ermittelt. Bei subchronischer oraler Gabe an Ratten über 17 Wochen wird 3-Methylbutanol-1 in Dosen bis 1000 mg/kg Körpergewicht/Tag ohne nachweisbare Schädigungen vertragen. Als Befunde zeigen sich bei diesen Studien marginale hämatologische Veränderungen und eine Körpergewichtsretardierung bei reduziertem Futterverbrauch.

Untersuchungen zur Gentoxizität von 3-Methylbutanol-1 nach den heutigen Anforderungen liegen nicht vor. An Escherichia coli wird die Transposition eines Chloramphenicol-resistenten Phagen nicht beeinflusst. Bei HeLa-Zel-

len wird der Uridin-Einbau konzentrationsabhängig gehemmt. In vivo scheint es nach oraler Gabe von 3-Methylbutanol-1 im Knochenmark von Ratten zu geringgradigen Chromosomenaberrationen zu kommen.

Die in der Literatur mitgeteilten Versuchsergebnisse zur kanzerogenen Wirkung von 3-Methylbutanol-1 nach oraler und subkutaner Gabe bei Ratten sind qualitativ und quantitativ unzureichend und zur Beurteilung des kanzerogenen Potenzials von 3-Methylbutanol-1 nicht geeignet.

Bei der Ratte bzw. beim Kaninchen ergeben sich nach Inhalation von 510 bis 9800 mg 3-Methylbutanol-1/m³ Luft vom 6. bis 15. bzw. 7. bis 19. Tag der Trächtigkeit maternaltoxische Effekte, gekennzeichnet durch leichte Körpergewichtsretardierung und geringgradige Reizeffekte. Der no effect level für die maternaltoxische Wirkung liegt für Ratten und Kaninchen bei ca. 2500 mg/kg Körpergewicht. Weder bei den Ratten noch bei den Kaninchen sind bis zur obersten geprüften Konzentration von 9800 mg/m³ Hinweise auf eine embryotoxische, fetotoxische bzw. teratogene Wirkung festgestellt worden.

Beim Menschen kommt es ab einer Konzentration von > 100 ppm (entsprechend 360 mg/m³) 3-Methylbutanol-1 in der Luft zu Irritationen der Augen, der Nase und des Rachens. Bei oraler Zufuhr von Ethanol und 3-Methylbutanol-1 (als Gärungsprodukt in alkoholischen Getränken enthalten) kommt es in der Alkoholisierungsphase zu Leistungsverschlechterungen, die mit dem Ethanol-Gehalt im Blut korrelieren; in der postalkoholischen Phase nehmen durch 3-Methylbutanol-1 die Fehlerzahlen in standardisierten Testverfahren erheblich zu. 50 bis 100 ml 3-Methylbutanol-1 sollen bei oraler Aufnahme beim Menschen innerhalb von 1 bis 2 Tagen tödlich wirken.

Zurzeit wird im Rahmen des „Programms zur Verhütung von Gesundheitsschädigungen durch Arbeitsstoffe“ der Berufsgenossenschaft der chemischen Industrie ein Mikrokerntest in vivo mit 3-Methylbutanol-1 durchgeführt.

Im Rahmen des U.S. National Toxicology Program (NTP) ist die Durchführung einer Toxikokinetikstudie mit 3-Methylbutanol-1 geplant.

7 Einstufungen und Grenzwerte

In der Bundesrepublik Deutschland beträgt der MAK-Wert für 3-Methylbutanol-1 100 ppm, entsprechend 360 mg/m³. Darüber hinaus wurde 3-Methylbutanol-1 in die Schwangerschaftsgruppe C eingestuft.

Der gleiche TLV-Wert von 100 ppm, entsprechend 360 mg/m³, gilt in den USA.

8 Arbeitsmedizinische Empfehlungen

Nach der derzeitigen Datenlage empfehlen sich regelmäßige arbeitsmedizinische Vorsorgeuntersuchungen bei Mitarbeitern an gefährdenden Arbeitsplätzen in Anlehnung an die BG-Vorschrift „Arbeitsmedizinische Vorsorge“ (BGV A4, bisherige VBG 100).

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: praevention@bgchemie.de
Internet: www.bgchemie.de