

# TOXIKOLOGISCHE BEWERTUNGEN

**ISBN 0937-4248**



# **Chlorameisensäurebutylester**

**Nr. 160**

Ausgabe 02/05

Neben Chlorameisensäurebutylester (Nr. 160) existieren noch TOXIKOLOGISCHE BEWERTUNGEN zu den Chlorameisensäureestern Chlorameisensäuremethylester (Nr. 36), Chlorameisensäureethylester (Nr. 77) und Chlorameisensäurepropylester (Nr. 159), die zum Vergleich herangezogen werden können.

## **1 Stoffname**

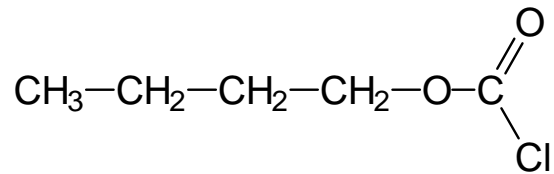
1.1	Gebrauchsname	Chlorameisensäurebutylester
1.2	IUPAC-Name	Chlorameisensäure-n-butylester
1.3	CAS-Nr.	592-34-7
1.4	EINECS-Nr.	209-750-5

## **2 Synonyme, Trivial- und Handelsnamen**

Butoxycarbonyl chloride  
Butylchlorformiat  
n-Butylchlorformiat  
n-Butylchlorkohlensäureester  
Butyl chlorocarbonate  
Butyl chloroformate  
n-Butyl chloroformate  
Carbonochloridic acid, butyl ester  
Chloroformic acid butyl ester  
Chloroformic acid n-butylester  
Formic acid, chloro-, butyl ester

### 3 Struktur- und Summenformel

3.1 Strukturformel



3.2 Summenformel  $\text{C}_5\text{H}_9\text{O}_2\text{Cl}$

### 4 Physikalisch-chemische Eigenschaften

4.1	Molekularmasse, g/mol	136,58
4.2	Schmelzpunkt, °C	< - 70
4.3	Siedepunkt, °C	35 (bei 17 hPa) 44 (bei 26,7 hPa) 77,6 (bei 133 hPa) 138 138 - 144,5 (bei 1013 hPa) 142 (bei 1013 hPa)
4.4	Dampfdruck, hPa	7 (bei 20 °C) ca. 15 (bei 20 °C) 36 (bei 50 °C) ca. 53 (bei 50 °C) ca. 64 (bei 55 °C)
4.5	Dichte, g/cm <sup>3</sup>	1,0513 (bei 20 °C) ca. 1,053 (bei 20 °C) 1,0585 (bei 20 °C) 1,06 (bei 20 °C) 1,074 (bei 25 °C)
4.6	Löslichkeit in Wasser	nicht mischbar, Hydrolyse unlöslich, Hydrolyse schwer löslich, langsame Hydrolyse zu 1-Butanol, Salzsäure und Kohlensäure
4.7	Löslichkeit in organischen Lösemitteln	mischbar mit Ether, löslich in Aceton, schwach löslich in Tetrachlorkohlenstoff löslich in Ethanol
4.8	Löslichkeit in Fett	sauer
4.9	pH-Wert	keine Information vorhanden

4.10	Umrechnungsfaktor	1 ml/m <sup>3</sup> (ppm) $\triangleq$ 5,67 mg/m <sup>3</sup> 1 mg/m <sup>3</sup> $\triangleq$ 0,18 ml/m <sup>3</sup> (ppm) (bei 1013 hPa und 25 °C)
------	-------------------	--

## 5 Herstellung und Verwendung

### 5.1 Herstellung

Aus Phosgen und wasserfreiem n-Butanol.

### 5.2 Verwendung

Vielseitiges Zwischenprodukt für die chemische Industrie, insbesondere zur Herstellung von Peroxydicarbonaten und Pflanzenschutzmitteln.

## 6 Zusammenfassung und Bewertung

Chlorameisensäurebutylester ist bei akuter oraler Aufnahme gering toxisch (LD<sub>50</sub> Ratte oral für den in Öl formulierten Stoff: 2610 mg/kg Körpergewicht). Die Verwendung von wässrigen Formulierungen des Stoffes zur Bestimmung der LD<sub>50</sub> hat niedrigere orale LD<sub>50</sub>-Werte für die Ratte von ca. 1325 und ca. 2120 mg/kg Körpergewicht ergeben. Deutlich giftig ist Chlorameisensäurebutylester bei akuter inhalativer Aufnahme; es sind nach einer 1-stündigen Exposition gegenüber 200 ppm (ca. 1134 mg/m<sup>3</sup>) 4/10 Ratten und in Inhalations-Risiko-Testen nach einer 3- bzw. 10-minütigen Exposition gegenüber einer bei 20 °C angereicherten bzw. gesättigten Dampf-atmosphäre alle eingesetzten Ratten verendet. Dyspnoe, Apathie, anormale Lage, Taumeln, spastischer Gang, struppiges Fell, Diarrhö, Zyanose und schlechter Allgemeinzustand sind als Vergiftungssymptome nach oraler Aufnahme beschrieben worden. Bei inhalativer Exposition wird die Symptomatik mit starken Schleimhautreizungen, Schnappatmung und Atemnot durch die Ätzwirkung der Verbindung bestimmt. Auch bei den Sektionsbefunden sind insbesondere Veränderungen, die auf die ätzenden Eigenschaften der Verbindung zurückzuführen sind, festgestellt worden: nach inhalativer Aufnahme erhebliche Blutfülle, Emphysem und Ödem der Lungen mit Hydrothorax und nach oraler Aufnahme letaler Dosen weiße Darmschleimhaut (Nekrosen) sowie blutige Verschorfungen im Drüsen- und im

Vormagen (Ätzgastritis). Des Weiteren sind als Sektionsbefunde nach oraler Aufnahme letaler Dosen noch akute Dilatation der Herzvorhöfe und akute Stauungshyperämie des Herzens befundet worden. Nach oraler Aufnahme subletaler Dosen > 681 mg/kg Körpergewicht sind die Vormägen der Ratten verhärtet und verdickt gewesen, haben einzelne Ausstülpungen aufgewiesen und die Vormagenschleimhaut ist krustig abziehbar gewesen.

Die toxische Wirkung von Chlorameisensäurebutylester (Reinheit 98,9 %) bei subakuter inhalativer Aufnahme ist in einer Inhalationsstudie, die den Anforderungen der OECD-Richtlinie Nr. 412 genügt, an Sprague-Dawley-Ratten untersucht worden. In der 5-Tage-Konzentrationsfindungsstudie zu dieser Studie haben alle Tiere die täglich 6-stündige Ganzkörperexposition gegenüber nominal 0 (Kontrolle), 15, 50 bzw. 150 mg Chlorameisensäurebutylester/m<sup>3</sup> (analytisch 0 (Kontrolle), 16, 55 bzw. 158 mg/m<sup>3</sup>) überlebt. Die Ratten der beiden oberen Konzentrationsgruppen haben an klinischen Symptomen konzentrationsabhängig Niesen, Schnauzenwischen, geschlossene oder halbgeschlossene Augen, beschleunigte Atmung, Lecken der Schnauzeninnenseiten sowie zwischen den Expositionen Schniefen und geräuschvolle Respiration und die der oberen Konzentrationsgruppe außerdem noch Bauchlage, fehlende Reaktionen auf akustische Reize und nach der ersten Exposition Hypoaktivität gezeigt. Die männlichen Tiere der oberen Konzentrationsgruppe haben während der gesamten Versuchszeit an Körpergewicht verloren und die Weibchen dieser Konzentrationsgruppe haben nach einem anfänglichen Körpergewichtsverlust eine stark retardierte Körpergewichtsentwicklung aufgewiesen. Auch in der mittleren Konzentrationsgruppe ist die Körpergewichtsentwicklung retardiert gewesen. Der Futterverbrauch ist konzentrationsabhängig in allen Konzentrationsgruppen vermindert gewesen. Nach anfänglicher Reduzierung haben die Tiere der oberen Konzentrationsgruppe zu Versuchsende einen erhöhten Wasserverbrauch gehabt. Die Lungengewichte sind bei beiden Geschlechtern der oberen Konzentrationsgruppe und den weiblichen Tieren der mittleren Konzentrationsgruppe erhöht gewesen und die Lungen der Tiere der oberen Konzentrationsgruppe und eines Männchens der mittleren Konzentrationsgruppe sind nach Öffnung der Brusthöhle nicht kollabiert. In der 28-Tage-Studie haben alle Tiere die Ganzkörperexposition gegenüber Zielkonzentrationen von 0 (Kontrolle), 3, 15 bzw. 30 mg Chlorameisensäurebutylester/m<sup>3</sup> (analytisch 0 (Kontrolle), 2,8, 10,0 bzw. 28,2 mg/m<sup>3</sup>) überlebt. Als einziges klinisches Symptom ist in der oberen Konzentrationsgruppe Pilo-

arrektion aufgetreten. Toxikologisch relevante Befunde im Vergleich zur Kontrolle sind ausschließlich in der oberen Konzentrationsgruppe festgestellt worden. Die Lungengewichte sind erhöht gewesen, wobei dieser Befund nur bei den Männchen signifikant gewesen ist, und bei der histologischen Befundung der Lungen sind pathologische Veränderungen der Carina tracheae in Form einer minimalen fokalen epithelialen Hyperplasie bei 1/5 Männchen und 3/5 Weibchen sowie einer minimalen fokalen Anhäufung epithelialer Zellen bei weiteren 3/5 Männchen dieser Konzentrationsgruppe festgestellt worden. Die Konzentration von 10 mg Chlorameisensäurebutylester/m<sup>3</sup> ist in dieser 28-Tage-Inhalationsstudie für beide Geschlechter der no observed adverse effect level (NOAEL) gewesen.

An der Haut und an den Augen von Kaninchen wirkt Chlorameisensäurebutylester stark reizend und ätzend. Eine 5-minütige Applikation führt an der Haut bereits zu leichten Nekrosen.

Im als Präinkubationstest durchgeführten Salmonella/Mikrosomen-Test an den Salmonella typhimurium-Stämmen TA 98, TA 100, TA 1535 und TA 1537 zeigt sich weder ohne noch mit metabolischer Aktivierung ein mutagenes Potenzial von Chlorameisensäurebutylester. Ohne metabolische Aktivierung wirkt Chlorameisensäurebutylester im Chromosomenaberrationstest an V79-Zellen des chinesischen Hamsters nicht klastogen. Eine nicht reproduzierbare erhöhte Aberrationsrate in der obersten mit metabolischer Aktivierung geprüften Konzentration ist als Folge der stark zytotoxischen Wirkung dieser Konzentration auf das genetische Material der Zellen und nicht als Ausdruck eines gentoxischen Potenzials der Verbindung an sich gewertet worden. Chlorameisensäurebutylester-Konzentrationen, die die Zellüberlebensraten um mehr als 50 %, aber nicht auf Werte unter 30 % reduziert haben, haben mit metabolischer Aktivierung keine Chromosomenaberrationen induziert.

## **7 Einstufungen und Grenzwerte**

Die Senatskommission zur Prüfung gesundheitsschädlicher Arbeitsstoffe der Deutschen Forschungsgemeinschaft (MAK-Kommission) hat auf Anregung der BG Chemie für Chlorameisensäurebutylester einen MAK-Wert abgeleitet. Er wurde in der MAK- und BAT-Werte-Liste 2004 auf 0,2 ml/m<sup>3</sup> (ppm, entsprechend 1,1 mg/m<sup>3</sup>) festgesetzt. Außerdem hat die MAK-Kom-

mission Chlorameisensäurebutylester in die Schwangerschaftsgruppe C „Ein Risiko der Fruchtschädigung braucht bei Einhaltung des MAK-Wertes und des BAT-Wertes nicht befürchtet zu werden.“ eingeteilt.

In Australien und Großbritannien wurde für Chlorameisensäurebutylester ein Luftgrenzwert von 5,6 mg/m<sup>3</sup> festgelegt.

## **8 Arbeitsmedizinische Empfehlungen**

Allgemeine arbeitsmedizinische Vorsorgeuntersuchungen in Anlehnung an die BG-Vorschrift „Arbeitsmedizinische Vorsorge“ (BGV A4, bisherige VBG 100) unter Beachtung von G 23 (obstruktive Atemwegserkrankungen) der berufsgenossenschaftlichen Grundsätze für arbeitsmedizinische Vorsorgeuntersuchungen. Bei einer akuten Vergiftung sollten diagnostische und gegebenenfalls therapeutische Maßnahmen wie nach Phosgen-Inhalation ergriffen werden (siehe auch Merkblatt M 015 „Phosgen“ der BG Chemie).

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](mailto:ToxikologischeBewertungen@bgchemie.de)  
Internet: [www.bgchemie.de/toxikologischebewertungen](http://www.bgchemie.de/toxikologischebewertungen)