

TOXIKOLOGISCHE BEWERTUNGEN

ISBN 0937-4248



Acetessigsäureethylester

Nr. 246

Ausgabe 06/2000

1 Stoffname

1.1	Gebrauchsname	Acetessigsäureethylester
1.2	IUPAC-Name	3-Oxobutansäureethylester
1.3	CAS-Nr.	141-97-9
1.4	EINECS-Nr.	205-516-1

2 Synonyme, Trivial- und Handelsnamen

Acetessigester
Acetoacetic acid ethyl ester
Acetoacetic ester
Acetylessigsäureethylester
Active acetyl acetate
Active acetylacetate
Butanoic acid, 3-oxo-, ethyl ester
Diacetic ester
EAA
1-Ethoxybutane-1,3-dione
Ethylacetacetat
Ethylacetoacetat
Ethyl acetoacetate
Ethyl acetonecarboxylate
Ethylacetylacetat
Ethyl acetyl acetate
Ethyl acetylacetate
Ethyl acetyl acetonate
Ethyl β -ketobutyrate

Ethyl 3-oxobutanoate
 Ethyl 3-oxobutyrate
 β-Ketobuttersäureethylester
 3-Oxobutanoic acid ethyl ester

3 Struktur- und Summenformel

3.1	Strukturformel	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{O} \\ \parallel \quad \parallel \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}-\text{O}-\text{C}_2\text{H}_5 \end{array}$
3.2	Summenformel	$\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_3$

4 Physikalisch-chemische Eigenschaften

4.1	Molekularmasse, g/mol	130,14
4.2	Schmelzpunkt, °C	- 44 bis - 39 - 45
4.3	Siedepunkt, °C	178 - 187 (bei 1013 hPa) 180,8
4.4	Dampfdruck, hPa	1 (bei 20 °C)
4.5	Dichte, g/cm ³	1,0368 (bei 10 °C) 1,0325 (bei 15 °C) 0,9958 (bei 50 °C)
4.6	Löslichkeit in Wasser	125 g/l (bei 16 °C)
4.7	Löslichkeit in organischen Lösemitteln	löslich in Benzol, mischbar mit Ethanol und Diethylether
4.8	Löslichkeit in Fett	Verteilungskoeffizient n-Octanol/Wasser log P _{ow} : - 0,25 (gemessen)
4.9	pH-Wert	4 (110 g/l bei 20 °C)
4.10	Umrechnungsfaktor	1 ml/m ³ (ppm) \triangleq 5,31 mg/m ³ 1 mg/m ³ \triangleq 0,19 ml/m ³ (ppm) (bei 1013 hPa und 25 °C)

5 Herstellung, Produktionsmenge und Verwendung

5.1 Herstellung

Alkoholyse von Diketen mit Ethanol.

5.2 Hergestellte oder eingeführte Menge

> 1000 t/Jahr.

5.3 Verwendung

Zur Herstellung von Farbstoffen, Pflanzenschutzmitteln, Pharmazeutika, Stabilisatoren, Fotochemikalien; als Bestandteil von Lacken und als Löse-mittel; Zusatz in Duftstoffen.

6 Zusammenfassung und Bewertung

Zur Toxikokinetik und zum Metabolismus von Acetessigsäureethylester sind kaum Daten vorhanden. Es kann angenommen werden, dass der Ester vom Körper aufgenommen, dort durch Esterasen zu einem erheblichen Teil in Acetessigsäure und Ethanol gespalten und schließlich zu CO₂ und Wasser verstoffwechselt wird. Toxische Wirkungen sollten, wenn überhaupt, vom ungespaltenen Ester oder von sehr hohen Dosen des Stoffes ausgehen, da die bei der Ester-Spaltung entstehenden Ethanol-Mengen bei mäßiger Exposition mit Acetessigsäureethylester weit unterhalb des toxischen Bereiches für Ethanol liegen und Acetessigsäure als natürliches Zwischenprodukt des normalen Fettsäureabbaus als toxisch nicht relevant angesehen werden kann.

So ist Acetessigsäureethylester auch beim Tier nach einmaliger oraler, der-maler und inhalativer Verabreichung wenig toxisch (LD₅₀ Ratte oral 3980 bis 12000 mg/kg Körpergewicht; LD₅₀ Maus oral 3200 bis 6400 mg/kg Körpergewicht; LD₅₀ Kaninchen dermal > 10300 mg/kg Körpergewicht; LD₅₀ Meerschweinchen dermal > 20 ml/kg Körpergewicht; LC₅₀ Ratte (6 Stunden) > 1129 ppm (entsprechend 5995 mg/m³)). Spezifische Vergiftungs-symptome wurden nicht beobachtet.

Nach 4-wöchiger oraler Zufuhr an Ratten bewirkt Acetessigsäureethylester bis zur höchsten geprüften Dosis von 1000 mg/kg Körpergewicht in zwei Versuchen keine behandlungsbedingten Effekte.

In Abhängigkeit von der Expositionsdauer und der Dosierung wirkt Acetessigsäureethylester an der Haut nicht bis leicht reizend und am Auge leicht reizend. Es werden keine sensibilisierenden Wirkungen der Substanz an der Haut von Meerschweinchen und Mensch berichtet, allerdings liegen nur unzureichend dokumentierte und ein wenig aussagekräftiger Befund vor.

Im Salmonella/Mikrosomen-Test ist Acetessigsäureethylester nicht mutagen. In vitro konnte in einer methodisch eingeschränkten Untersuchung keine chromosomenschädigende Wirkung nachgewiesen werden. Dagegen liegen in zwei Prüfungen mit *Escherichia coli* zwei sich widersprechende Befunde zur genmutagenen Wirkung vor. Auch in zwei DNA-Reparaturtesten mit *Bacillus subtilis* sind widersprüchliche Befunde zur DNA-schädigenden Wirkung des Acetessigsäureethylesters gefunden worden. Bei *Saccharomyces cerevisiae* induziert Acetessigsäureethylester keine mitotischen Rekombinationen. Die vorliegenden Untersuchungen sprechen für kein relevantes genotoxisches Potenzial der Verbindung.

7 Einstufungen und Grenzwerte

Die Senatskommission zur Prüfung gesundheitsschädlicher Arbeitsstoffe der Deutschen Forschungsgemeinschaft (MAK-Kommission) wird die Möglichkeit der Aufstellung eines MAK-Wertes überprüfen.

8 Arbeitsmedizinische Empfehlungen

Allgemeine arbeitsmedizinische Vorsorgeuntersuchungen 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