

**Syntese av HBIW -  
2,4,6,8,10,12-heksabenzyl-2,4,6,8,10,12-heksaazaisowurtzitane**

Gunnar Ove Nevstad

Forsvarets forskningsinstitutt/Norwegian Defence Research Establishment (FFI)

11. desember 2008

FFI-rapport 2008/02303

873

P: ISBN 978-82-464-1475-1

E: ISBN 978-82-464-1476-8

## **Emneord**

Syntese

Krystallasjon

HBIW

## **Godkjent av**

Jan Ivar Botnan

Forskningsjef

## Sammendrag

HBIW (2,4,6,8,10,12-heksabenzyl-2,4,6,8,10,12-heksaazaisowurtzitane) som inngår i syntesen av CL-20 (2,4,6,8,10,12-heksanitro-2,4,6,8,10,12-heksaazaisowurtzitane) har vært syntetisert ut fra benzylamin og glyoksal. Vi har benyttet glyoksal i form av 40 % vannløsning. Glyoksalløsningen har vært dryppet til en acetonitrilløsning av benzylamin tilsatt salpetersyre som katalysator.

Reaksjonen er gjennomført ved romtemperatur hvor tildryppehastigheten har vært redusert slik at temperaturstigningen i reaksjonsblandingen var moderat og dermed kunne kjøling unngås.

Det er gjennomført 139 synteser med et samlet utbytte på 25.537 kg med et gjennomsnittlig utbytte på 81 %. Før HBIW benyttes i trinn 2 i syntesen av CL-20 har det vært krystallisert fra acetonitril.

## English summary

HBIW (2,4,6,8,10,12-hexabenzyl-2,4,6,8,10,12-hexaazaisowurtzitane) which is one of the compounds needed to produce CL-20 (2,4,6,8,10,12-hexanitro-2,4,6,8,10,12-hexaazaisowurtzitane) has been synthesized from benzyl amine and glyoxal. We have used glyoxal in form of 40 % water solution. The glyoxal solution has been dripped to an acetonitrile solution of benzylamine added nitric acid as catalyst. The reaction is carried out at room temperature with a dripping rate slow enough to only give a moderate temperature increase of the reaction solution. Therefore external cooling was not necessary.

It has been performed 139 syntheses of HBIW with a total yield of 25.537 kg with an average yield of approximately 81 %. Before the produced HBIW was used in step 2 of the CL-20 syntheses it was purified by crystallization from acetonitrile.

## Innhold

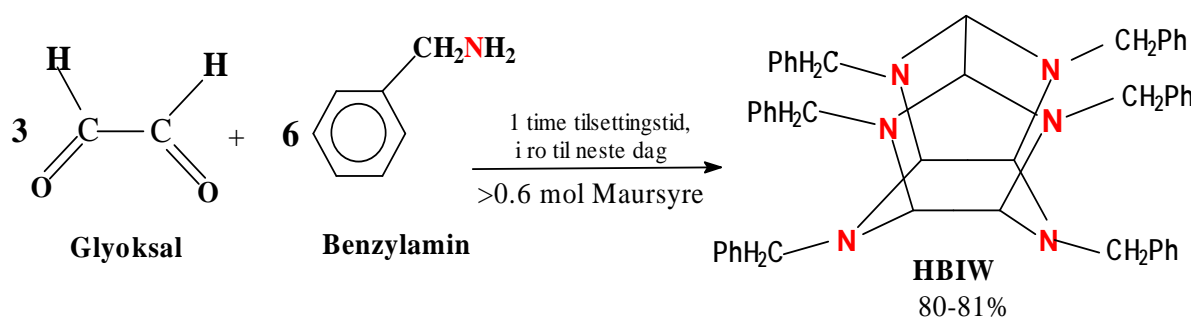
<b>1</b>	<b>Innledning</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Eksperimentelt</b>	<b>7</b>
<b>3</b>	<b>Resultat</b>	<b>9</b>
3.1	Innledende synteser av HBIW	9
3.1.1	Syntese nr 1	9
3.1.2	Syntese nr 2	9
3.1.3	Syntese nr 3	10
3.1.4	Syntese nr 4	10
3.1.5	Syntese nr 5	10
3.2	Optimalisering av prosess	11
3.2.1	Forsøk 1	11
3.2.2	Forsøk 2	12
3.2.3	Forsøk 3	12
3.2.4	Forsøk 4	12
3.2.5	Forsøk 5	12
3.2.6	Forsøk 6	13
3.3	Framstilling av HBIW i 200 g skala	14
	<b>Appendix A Råvarer</b>	<b>15</b>
A.1	Glyoksal	15
A.1.1	Data for glyoksal	15
A.1.2	HMS datablad for glyoksal	16
A.2	Benzylamin	21
A.2.1	Egenskaper til benzylamin	21
A.2.2	HMS datablad benzylamin	22
A.3	Salpetersyre 65 %	27
A.3.1	Egenskaper til salpetersyre	27
A.3.2	HMS datablad salpetersyre	28
A.4	Acetonitril	33
A.4.1	Informasjon fra leverandør	33
A.4.2	HMS datablad for acetonitril	34
	<b>Appendix B Utbytte HBIW</b>	<b>39</b>
B.1	Runde 1, august 2004	39
B.2	Runde 2, september 2005	39
B.3	Runde 3, april-juni 2006	40

B.4	Runde 4, november 2006 - januar 2007	41
B.5	Runde 5, mai - juni 2007	42
B.6	Runde 6, august 2007	43
B.7	Runde 7, februar - april 2008	44
	<b>Referanser</b>	<b>45</b>

## 1 Innledning

Prosjekt 873 er en del av et internasjonalt samarbeid på syntese av energirike forbindelser hvor 9 nasjoner har deltatt. Prosjektet ble startet i 2003 og vil bli fullført i 2008. FFI har i samarbeid med Chemring Nobel (tidligere Dyno Nobel) vært norske deltakere i prosjektet som opprinnelig var et WEU (Western European Union) prosjekt, EUCLID CEPA-14 RPT-10 "Synthesis of Nitrocompounds for use in Energetic Materials". Prosjektet har siden 2006 vært underlagt EDA (European Defence Agency). I utgangspunktet har de ulike deltakerne studert forskjellige forbindelser, men med noen få overlapp i tillegg til samarbeid under oppskalering. Norge har studert syntese av CL-20, 2,4,6,8,10,12-heksanitro-2,4,6,8,10,12-heksaazaisowurtzitane, en forbindelse med høy tetthet og høyt energiinnhold.

Isowurtzitan er grunnstrukturen i CL-20 og fremstilles normalt ved at glyksal og benzylamin reagerer i surt miljø. Arnold Nielsen (1) var den første til å fremstille 2,4,6,8,10,12-heksabenzyl-2,4,6,8,10,12-heksaazaisowurtzitane (HBIW) under betingelsen gitt i figur 1.1.



Figur 1.1 Reaksjonslikning for HBIW.

I denne rapporten vil fremstilling av 2,4,6,8,10,12-heksabenzyl-2,4,6,8,10,12-heksaazaisowurtzitane (HBIW) bli rapportert. Fremstillingen av HBIW er det første trinnet i en relativt omfattende prosess for å oppnå sluttproduktet CL-20 (2).

## 2 Eksperimentelt

På FFI har vi benyttet en 3-liters trehalset rundkolbe i fremstillingen av HBIW (2,4,6,8,10,12-heksabenzyl-2,4,6,8,10,12-heksaazaisowurtzitane). Glyksalløsningen har under mekanisk røring blitt dryppet til en løsning av acetonitril inneholdende benzylamin og salpetersyre i løpet av 1-2 timer ved bruk av en dryppetrakt. Figur 2.1 viser bilder av syntesen under tilsetning av glyksalløsningen samt av reaksjonsblanding før filtrering etter henstand natten over ved romtemperatur. Krystallinsk produkt ble filtrert fra i porselensfilter og etter tørking omkrystallisert i acetonitril før anvendelse i neste trinn i fremstilling av CL-20. Følgende råvarer er benyttet:

Glyksal, 40 wt. % løsning i vann: Cat.: 12,845-5 Lot.: 515476-054 3 kg  
CAS: 107-22-2 Mw: 58.04, EC 203-474-9 From ALDRICH.

Benzylamin Purum  $\geq 98\%$  (GC), Fluka 13190, 1 l glassflaske  
 $C_7H_9N$ , Mw.: 107.16 CAS: 100-46-9,  $bp_{10} = -70^\circ C$ ,  $d_4^{20} = 0.982 \text{ g/cm}^3$

Salpetersyre min 65% (1.40) Pro analysis MERCK: Mw.: 63.01

Acetonitril, Sigma-Aldrich  $\geq 99.5\%$  (GC),  $CH_3CN$ , Mw: 41.05, CAS: 75-05-8, kokepunkt  $81-82^\circ C$ .

Appendiks A gir mer informasjon om benyttet råvarer samt HMS (helse, miljø, sikkerhet)-datablad fra produsent.



Figur 2.1 Bilder av synteseoppsett for fremstilling av HBIW. Til venstre under tilsetning av glyksal, til høyre etter at reaksjonsblandingen har stått natten over.



Figur 2.2 Bilder av krystallisasjon av HBIW i acetonitril.



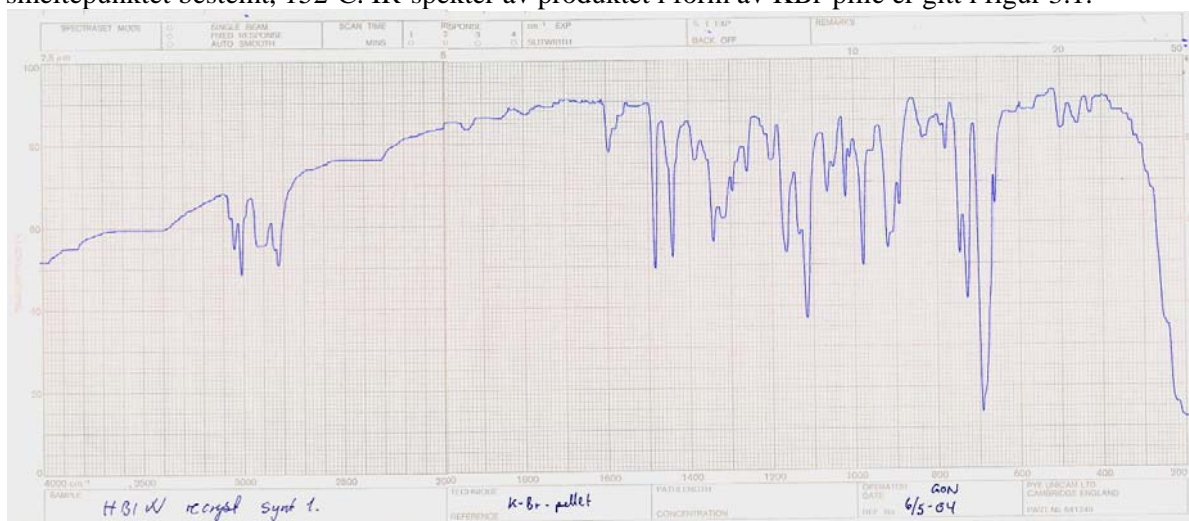
## 3 Resultat

### 3.1 Innledende synteser av HBIW

Flere forsøk på å fremstille HBIW (2,4,6,8,10,12-heksabenzyl-2,4,6,8,10,12,-heksaazaisowurtzitan) fra en vandig løsning av glyoksal (40 %) og benzylamin i acetonitril katalysert med salpetersyre ble gjennomført under ulike reaksjonsbetingelser. En beskrivelse av gjennomføring og resultater for de innledende forsøkene er gitt under.

#### 3.1.1 Syntese nr 1

Til en løsning av 117.9 g benzylamin og 5.1 g (0.11 mol) maursyre i 1100 ml acetonitril og 100 ml vann ble 72.5 g (40 % vannløsning) glyoksal dråpevis tilsatt under god røring. Ved start av glyoksal tilsetningen var temperaturen i reaksjonsblandingen 17°C. Etter at omlag 25 % av glyoksalen var tilsatt hadde temperaturen steget til 18°C. Et isbad ble så plassert rundt reaksjonskolben. Etter en time var all glyoksal tilsatt og temperaturen hadde sunket til 12°C. Etter en ny time hadde temperaturen sunket til 5°C og isbadet ble fjernet. Reaksjonsblandingen ble så forlatt til neste dag før den ble filtrert og produktet tørket. Utbytte 91.3 g. Etter omkrystallisering fra acetonitril ble smeltepunktet bestemt, 152°C. IR-spekter av produktet i form av KBr-pille er gitt i figur 3.1.



Figur 3.1 IR-spekter av HBIW fra syntese nr 1.

#### 3.1.2 Syntese nr 2

Til en løsning av 113.2 g benzylamin og 5.1 g (0.005 mol) 65 % salpetersyre i 1000 ml acetonitril ble 72.5 g (40 % vannløsning) glyoksal tilsatt dråpevis under god røring. I starten var temperaturen i reaksjonsblandingen 25°C. Utfelling av produkt startet etter omlag 5 minutter. All glyoksal var tilsatt etter 45 minutter og temperaturen i reaksjonsblandingen hadde da økt til 30°C. Etter ytterlige 3 timer med røring sank temperaturen til 22°C og reaksjonsblandingen var blitt gul. Etter henstand ved romtemperatur natten over ble reaksjonsblandingen filtrert og produktet vasket med acetonitril til det var fargeløst. Etter tørking var utbytte 96.0 g, smeltepunkt etter omkrystallisasjon i acetonitril 153 °C.

### 3.1.3 Syntese nr 3

Til en løsning av 112.5 g benzylamin og 5.1 g (0.005 mol) 65 % salpetersyre i 1000 ml acetonitril ble 72.5 g (40 % vannløsning) glyksal tilsatt dråpevis under god røring. Temperaturen i reaksjonsblandingen steg raskt til 30°C. Utfelling av produkt startet etter omlag 3-4 minutter. Røring fortsatt i ytterlige 4 timer før reaksjonsblandingen ble hensatt natten over ved romtemperatur. Det utfelte produktet ble filtrert fra den gul/oransje løsningen som etter filtrering ble rød. Utbytte 92.7 g. Smeltepunkt etter omkrystallisasjon 154°C.

### 3.1.4 Syntese nr 4

Til en løsning av 112.5 g benzylamin og 5.1 g (0.005 mol) 65 % salpetersyre i 1000 ml acetonitril ble 72.5 g (40 % vannløsning) glyksal tilsatt dråpevis under god røring. Temperaturen i reaksjonsblandingen ved start 22°C, pH= 7. Etter 20 minutter var 50 % av glyksalløsningen tilsatt, temperatur 26°C og pH= 6. Etter 50 minutter var all glyksal tilsatt og temperaturen hadde steget til 31°C og reaksjonsblandingen var blitt gul. Røring fortsatt i ytterlige 4 timer før reaksjonsblandingen (temperatur 22°C) ble hensatt natten over. Utbytte 99.7 g. Smeltepunkt etter omkrystallisasjon 152-154°C

### 3.1.5 Syntese nr 5

Til en løsning av 112.5 g benzylamin og 5.1 g (0.005 mol) 65 % salpetersyre i 1000 ml acetonitril ble 72.5 g (40 % vannløsning) glyksal tilsatt dråpevis under god røring. Temperaturen i reaksjonsblandingen ved start 21°C, pH= 7. Etter 25 minutter var 50 % av glyksal løsningen tilsatt, temperatur 25°C. Etter 55 minutter var all glyksal tilsatt og temperaturen hadde steget til 30°C og reaksjonsblandingen var blitt gul. Røring ble avsluttet etter 4 timer før reaksjonsblandingen ble hensatt natten over ved romtemperatur. Utbytte 99.5 g, smeltepunkt etter omkrystallisasjon 151-152°C. IR spekter av produktet i form av KBr-pille er gitt i figur 3.2.



Figur 3.2 IR-spekter av HBIE produkt fra syntese nr 5.

Tabell 3.1 oppsummerer noen av betingelsen benyttet for de innledende forsøkene i fremstilling av HBIW. Resultatene tyder på at salpetersyre gir ett bedre utbytte enn maursyre.

Forsøk nr	Benzylamin (g)	Glyoksal* (g)	Løsningsmiddel	Katalysator	Utbytte	
					(g)	(%)
FFI-1	117.9	72.5	1.1 l Acetonitril 100 ml vann	4.6 g HCOOH	91.3	77.3
FFI-2	113.2	72.5	1 l Acetonitril	5.1g 65 % HNO <sub>3</sub>	96.0	81.2
FFI-3	112.5	72.5	1 l Acetonitril	5.1g 65 % HNO <sub>3</sub>	92.7	78.4
FFI-4	112.5	72.5	1 l Acetonitril	5.1g 65 % HNO <sub>3</sub>	99.7	84.4
FFI-5	112.5	72.5	1 l Acetonitril	5.1g 65 % HNO <sub>3</sub>	99.5	84.2

\*40 % vannløsning

Tabell 3.1 Oppsummert betingelser for de første synteseforsøkene av HBIW

### 3.2 Optimalisering av prosess

Etter de innledende forsøkene ble nye forsøk gjennomført for å studere noen av parametrene som kan innvirkning på utbyttet av HBIW. Parametrene som ble variert var tilsetningstid for glyoksal, reaksjonstid før filtrering samt benyttet mengden løsemiddel.

Alle forsøkene ble gjennomført med et fast forhold på 0.5:1.05 mellom glyoksal og benzylamin: dvs. 72.5 g glyoksal til 112.5 g benzylamin eller 145 g glyoksal til 225 g benzylamin. Av katalysatoren salpetersyre (65 %) ble det enten benyttet 5.1 g eller 10.2 g. Katalysatoren samt benzylaminet ble tilsatt løsemiddelet acetonitril, mens glyoksaløsningen ble dryppet til under god røring (figur 2.1). Forsøkene er oppsummert i tabell 3.2 og nærmere omtalt i påfølgende avsnitt.

Forsøk Nr	Glyoksal (mol)	Løsemiddel Acetonitril (ml)	Tilsetningstid (min)	Temperatur (°C)	Reaksjonstid (h)	Utbytte (g)	Utbytte (%)
1	0.5	500	50	22 -33	20	94.19	79.7
2	0.5	500	40	18-32	5	93.90	79.5
3	1.0	1000	30	25-40	18	193.87	81.9
4	1.0	1000	90	24-33	6	188.17	79.7
5	1.0	900	60	25-36	21	195.46	82.7
6	1.0	900	65	24-31	20	191.79	81.2

\*HBIW = 708.94 g/mol

Tabell 3.2 Betingelser for optimalisering av syntese av HBIW.

#### 3.2.1 Forsøk 1

Temperaturen i reaksjonsblandingen var etter at benzylamin og salpetersyren var tilsatt 22°C og pH = 7-8. 17 minutter etter start av tilsetningen av glyoksal ble løsningen hvit og utfelling av produkt startet. Temperaturen hadde da steget til 29°C og pH var 10. Det tok 50 minutter før all glyoksal var tilsatt og temperaturen var da steget til 33°C. Røringen ble opprettholdt i 2 timer etter at siste dråpe glyoksal var tilsatt. Løsningen stod så i ro natten over ved romtemperatur. Før filtrering var løsningen gul og pH 8.5-9. Etter filtrering ble produktet vasket med acetonitril til det var fargeløst. Etter tørking var utbytte 94.19 g eller 79.7 %.

### 3.2.2 Forsøk 2

Etter at all benzylamin og salpetersyren var tilsatt hadde reaksjonsblandingen en temperatur på 18°C og pH var 6. Etter at glyoksalløsning var dryppet til i 11 minutter ble reaksjonsblandingen blakket og produkt startet å falle ut, temperatur 28°C. All glyoksalløsning var tilsatt etter 40 minutter og reaksjonsblandingen hadde da en temperatur på 32°C. Røring forsatt i tilsamen 5 timer før reaksjonsblandingen ble filtrert. Det krystallinske produktet ble vasket med acetonitril til det var fargeløst. Etter tørking var utbyttet 93.9 g eller 79.5 %.

### 3.2.3 Forsøk 3

Fra og med forsøk 3 ble mengden reagenser fordoblet. Etter at all benzylamin samt salpetersyre var tilsatt acetonitrilløsningen var temperaturen 25°C og pH 6. 10 minutter etter start av tilsetning av glyoksalløsning ble reaksjonsblandingen blakket og produkt startet å falle ut. Temperaturen var da økt til 32°C og pH var 10. All glyoksalløsningen var tilsatt etter 30 minutter og da var temperaturen i reaksjonsblandingen økt til 42°C. Røringen fortsatte imidlertid i ytterlige 2 timer før reaksjonsblandingen ble forlatt ved romtemperatur til neste dag. Før filtrering ble pH på den gule løsningen målt til 8, som var det samme som da røringen ble avsluttet dagen før. Reaksjonsblandingen ble så filtrert og det krystallinske produktet vasket med acetonitril til produktet var fargeløst. Etter tørking var utbyttet 193.87 g eller 81.9 %.

### 3.2.4 Forsøk 4

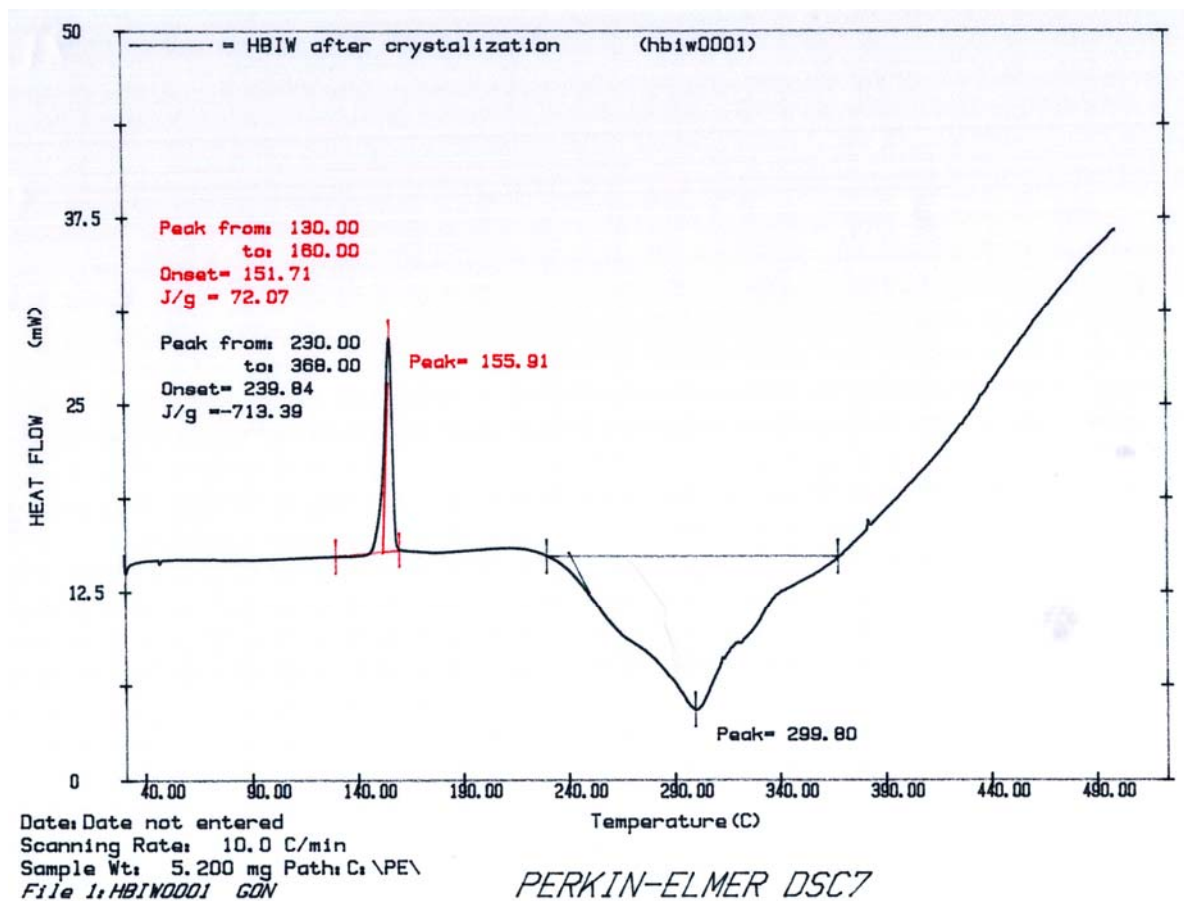
Etter at benzylamin og salpetersyren var tilsatt acetonitrilen hadde reaksjonsblandingen en temperatur på 24.5°C og en pH på 6. 23 minutter etter at tilsetningen av glyoksalløsningen startet var reaksjonsblandingen svakt gul og utfelling av produkt startet. Temperaturen i reaksjonsblandingen var nå økt til 30°C. All glyoksalløsningen var tilsatt i løpet av 90 minutter og temperaturen i reaksjonsblanding var da økt til 32-33°C. Røring ble avsluttet etter 5 timer før reaksjonsblandingen ble filtrert og produktet vasket med acetonitril til det var fargeløst. Før filtrering hadde den gule reaksjonsblandingen en pH på 8. Etter henstand natten over hadde det i reaksjonsblandingen falt ut mer produkt som etter filtrering ble veid til 15 g. Etter tørking var det samlede utbyttet 188.17 g eller 79.7 %.

### 3.2.5 Forsøk 5

Ved start hadde reaksjonsblandingen en pH på 6-7 og en temperatur på 24.5°C etter at salpetersyre og benzylamin var tilsatt. 12 minutter etter at tildrypping av glyoksalløsningen startet ble reaksjonsblandingen blakket og produkt startet å falle ut, temperatur 30°C. Det tok 60 minutter før all glyoksal var tilsatt og temperaturen hadde da steget til 36°C. Røring fortsatte i ytterlige 4 timer før reaksjonsblandingen ble forlatt natten over ved romtemperatur. Før filtrering ble pH på den gule løsningen målt til 8. Reaksjonsblandingen ble så filtrert og det krystallinske produktet ble vasket med acetonitril til det var fargeløst. Etter tørking veide produktet 195.46 g som gir et utbytte på 82.7 %.

### 3.2.6 Forsøk 6

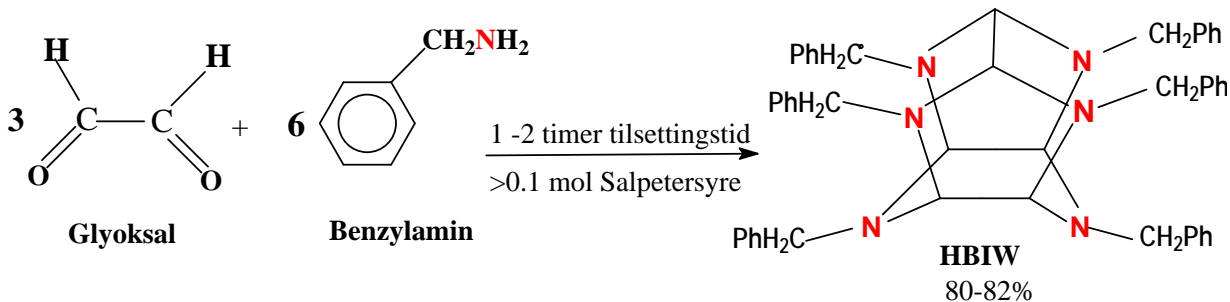
Før start på tilsetningen av glyksalløsningen hadde løsningen av acetonitril tilsatt salpetersyren og benzylaminet en temperatur på 24°C samt en pH på 7. Det tok så 14 minutter fra tildrypping av glyksalløsningen startet til reaksjonsblandingen ble blakket og utfelling av produkt inntraff. Temperaturen i reaksjonsblandingen hadde da økt til 31°C. Et kar med vann (10°C) ble så plassert under reaksjonskolben slik at kolben ble avkjølt. Vannet medført at temperaturen i reaksjonsblandingen ble stabilisert og delvis redusert til under 30°C. Tilsetningen av glyksalløsningen tok 65 minutter og etter fullføring var temperaturen i reaksjonsblandingen 28°C. Røring fortsatte imidlertid i totalt 4.5 timer før den ble stanset og reaksjonsblandingen ble hensatt natten over ved romtemperatur. Før filtrering ble pH på den gule løsningen målt til 8-9. Reaksjonsblandingen ble så filtrert og det krystallinske produktet ble vasket med acetonitril til det var fargeløst. Etter tørking veide produktet 191.79 g som tilsvarer et utbytte på 81.2 %. Figur 3.3 viser et DSC termogram av HBIW.



Figur 3.3 DSC termogram av HBIW omkrystallisert fra acetonitril.

### 3.3 Framstilling av HBIW i 200 g skala

Etter at vi følte vi hadde kontroll med reaksjonsbetingelsen for å oppnå et optimalt utbytte med tilfredsstillende renhet på produktet ble det ikke gjennomført flere analyser av produktet. Siden HBIW er utgangsstoffet for alle videre syntesetrinn og synteseveier for fremstilling av CL-20 trengs det relative mye HBIW. Ved FFI har vi benyttet en 3-liter kolbe med trehals for fremstilling av HBIW ((figur 2.1). Benyttede reaksjonsbetingelser er gitt i figur 3.4.



Figur 3.4 Reaksjonsbetingelser benyttet for fremstilling av HBIW.

Etter erfaringene fra innledende forsøk ble benyttet forhold mellom reagenser forsøkt holdt konstant med et lite overskudd av benzylamin i forhold til glyoksal. Appendiks B gir forbruk samt utbytte for alle synteser i 200 g skala. Tilsetningstid for glyoksaløsningen varierte mellom 1.5-2 timer. Maksimumtemperaturen i reaksjonsblandingen oversteg normalt ikke 30-32°C. Røring ble gjennomført i 5-6 timer etter at all glyoksal var tilsatt. Reaksjonsløsningen ble så forlatt i ro ved romtemperatur natten over før filtrering fant sted neste dag.

Antall synteser	Periode	Mengde HBIW (g)	Gjennomsnitt (g)	Utbytte (%)
5	August 2004	479.20	95.84 $\pm$ 3.83	81.1 $\pm$ 3.2
6	September 2005	957.38	192.32 $\pm$ 3.15	80.8 $\pm$ 1.3
15	2006	2969.69	195.78 $\pm$ 4.30	82.9 $\pm$ 1.8
28	21/11-06 19/1-07	5294.91	189.10 $\pm$ 7.80	80.1 $\pm$ 3.3
23	24/5-24/6 2007	4443.65	193.20 $\pm$ 6.32	81.4 $\pm$ 2.6
17	1/8-23/8 2007	3325.97	195.65 $\pm$ 2.97	82.2 $\pm$ 1.2
45	11/2-27/4 2008	8066.73	191.02 $\pm$ 4.15	80.7 $\pm$ 1.8
<b>139</b>	<b>Totalt</b>	<b>25 537.30</b>		

Tabell 3.3 Oppsummering av utbytte fra gjennomførte synteser av HBIW.

Til sammen har det ved FFI i de ulike fasene (Work Packages) (3-12) av prosjektet blitt produsert 25.537 kg HBIW som før videre anvendelse har vært omkrystallisert fra acetonitril, vasket og tørket. Omkrystallisering ble gjennomført i 3-liter begerglass (figur 2.2) ved koking til alt var løst, etterfulgt av avkjøling til romtemperatur til alt var utfelt. Løseligheten til HBIW er omlag 30 g per liter acetonitril ved kokepunktet. Ved koking vil løsningen gradvis bli gul/oransje. Før filtrering ble mesteparten av løsemiddelet dekantert av. Produktet i filteret ble vasket med acetonitril til det ikke var synlig farge på produkt eller løsemiddelet.

## Appendix A Råvarer

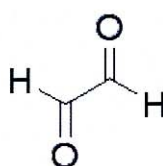
### A.1 Glyoksal

#### A.1.1 Data for glyoksal

© [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com)

#### 128465 Glyoxal solution

Aldrich 40 wt. % in H<sub>2</sub>O



Synonym	Ethanedial Oxalaldehyde
Molecular Formula	OHCCHO
Molecular Weight	58.04
CAS Number	107-22-2
Beilstein Registry Number	1732463
MDL number	MFCD00006957
PubChem Substance ID	<a href="#">24847859</a>
EG/EC Number	203-474-9

[Expand/Collapse All](#)

#### Price and Availability

No Pricing Availability Returned

#### Descriptions

Other Notes	This form of glyoxal is composed of 3 moles of glyoxal and 2 moles of water in a relatively stable configuration.
Packaging	1, 3 kg in poly btl 100 g in poly btl 22 kg in poly drum 5 g in glass btl

#### Properties

vapor density	>1 (vs air)
vapor pressure	18 mmHg ( 20 °C)
autoignition temp.	545 °F
concentration	40 wt. % in H <sub>2</sub> O
refractive index	<i>n</i> <sub>20/D</sub> 1.4087
density	1.265 g/mL at 25 °C

#### References

Reference	Salomaa, P. <i>Acta Chem. Scand.</i> <b>10</b> , 306, (1956)
Merck	<i>Merck</i> <b>13</b> ,4522
Beilstein	<i>Beil.</i> <b>1,IV</b> ,3625
Fieser	<i>Fieser</i> <b>1</b> ,413
reference	<i>Aldrich MSDS</i> <b>1</b> , 995:D / <i>Corp MSDS</i> <b>1</b> (1), 1797:A / <i>FT-IR</i> <b>2</b> (1), 752:D / <i>FT-IR</i> <b>1</b> (1), 480:D / <i>FT-NMR</i> <b>1</b> (1), 749:B / <i>RegBook</i> <b>1</b> (1), 527:C / <i>Sax</i> <b>6</b> , 1484

#### Safety

Hazard Codes	Xn
Risk Statements	20-36/38-43-68
Safety Statements	36/37
WGK Germany	1
RTECS	MD2700000

Figur App. 1 Viktige data for benyttet glyoksaløsning hentet fra leverandør.

## A.1.2 HMS datablad for glyoksal

### SIGMA-ALDRICH

Helse-, miljø- og sikkerhetsdatablad

Utskriftsdato: 08/AUG/2008

Revisjonsdato: 06/FEB/2006

Utgave 1.7

Forordning (EF) nr 1907/2006

## 1 - Identifikasjon av kjemikaliet og ansvarlig firma

Handelsnavn	GLYOXAL, 40 WT. % SOLUTION IN WATER
Produktnr.	128465
Leverandør	Sigma-Aldrich Norway AS Tevlingveien 23 1081 Oslo Norge
Telefon	47 23 17 60 00
Faks	47 23 17 60 10
E-post adresse	eurtechserv@sial.com
Nødtelefon	Giftinformasjonssentralen 22 59 13 00

## 2 - Viktigste faremomenter

VIKTIGSTE FAREMOMENTER FOR HELSE OG MILJØ.

Farlig ved innånding. Irriterer øynene og huden. Kan gi allergi ved hudkontakt. Mulig fare for varig helseskade.

## 3 - Opplysninger om kjemisk sammensetning

Handelsnavn	CAS nr.	EC nr.	Annex I	Indeksnr.
GLYOXAL 40% AQUEOUS SOLUTION	Ingen	203-474-9	605-016-00-7	
Innholdsstoffer Navn	Prosent	CAS nr.	EC nr.	Annex I
				Indeksnr.
GLYOXAL	40	107-22-2	203-474-9	605-016-00-7
Muta. Kat.3				
Symboler: Xn				
Risikosestninger: 20-36/38-43-68				
Farlig ved innånding. Irriterer øynene og huden. Kan gi allergi ved hudkontakt. Mulig fare for varig helseskade.				
WATER	60	7732-18-5	231-791-2	Ingen
Formel	C2H2O2			
Synonymer	Aerotex glyoxal 40			

## 4 – Førstehjelpstiltak

### INNÅNDING

Ved innånding, flytt straks den eksponerte til frisk luft. Ved pustevansker kontakt lege.

### HUDKONTAKT

Ved hudkontakt, vask straks huden med såpe og store mengder vann.

### ØYEKONTAKT

Ved øyekontakt, skyl med mye vann i minst 15 minutter mens øyelokket løftes. Kontakt lege.

### SVELGING

Ved svelging, skyl munnen med vann forutsatt at den tilskadekomne ikke er bevisstløs. Kontakt lege.



## 5 - Tiltak ved brannslukning

### BRANNSLUKNINGSMIDLER

Egnet: Vanndusj. Karbondioksid, pulver eller skum.

### SPESIELLE FARER

Spesielle faremomenter: Ved brann dannes giftig røyk.

### SPESIELT VERNEUTSTYR FOR BRANNMANNSKAP.

Bruk luftforsynt åndedrettsvern og verneklær for å unngå kontakt med hud og øyne.

## 6 - Tiltak ved utilsiktet utslipp

### PERSONLIGE FORHOLDSREGLER VED LEKKASJE ELLER SØL

Evakuer området.

### PERSONLIGE VERNETILTAK.

Bruk luftforsynt åndedrettsvern, gummistøvler og solide gummihansker.

### OPPRENSKNINGSMETODER

Absorber med sand eller vermikulitt og plasser i lukkede beholdere for destruksjon. Ventiler og vask området etter at produktet er samlet opp.

## 7 - Håndtering og oppbevaring

### HÅNTERING

Forholdsregler for sikker håndtering: Unngå innånding av damper. Unngå kontakt med øyne, hud og klær. Unngå langvarig eller gjentatt eksponering.

### OPPBEVARING

Forholdsregler ved lagring: Hold beholderen tett lukket.

## 8 - Eksponeringskontroll og personlig verneutstyr

### PROSESSFORHOLD

Nøddusj og øyedusj anbefales. Arbeid i avtrekkskap.

### GENERELLE HYGIENISKE RUTINER

Vask grundig etter bruk.

### PERSONLIG VERNEUTSTYR

Åndedrettsvern: Bruk åndedrettsvern og komponenter som er testet og godkjent etter standarder som NIOSH (US) or CEN (EU). Når risikovurdering viser at åndedrettsvern med filterapparat er hensiktsmessig, bruk helmaske med kombinasjonsfilter eller type AXBEK-filter (EN 14387) som støtte til eksterne ventilasjonssystemer. Dersom åndedrettsvern er den eneste beskyttelsen, bruk luftforsynt åndedrettsvern med helmaske.

Arbeidshansker: Bruk kjemikalieresistente vernehansker.

Øyevern: Kjemiske vernebriller.

## 9 - Fysiske og kjemiske egenskaper

### Fysikalsk tilstand

Form/konsistens: Klar væske

### Egenskaper

Farge: Fargeløs

### pH

Verdi Ved temperatur eller trykk

### Kokepunkt (intervall)

Ikke tilgjengelig

Ikke tilgjengelig

Smeltepunkt (intervall)	Ikke tilgjengelig
Flammepunkt	Ikke tilgjengelig
Brennbarhet	Ikke tilgjengelig
Selvantennelsestemperatur	Ikke tilgjengelig
Oksiderende egenskaper	Ikke tilgjengelig
Eksplosive egenskaper	Ikke tilgjengelig
Eksplosjonsgrenser	Ikke tilgjengelig
Damptrykk	Ikke tilgjengelig
Tetthet (g/m <sup>3</sup> )	1.27 g/cm <sup>3</sup>
Fordelingskoeffisient	
log Kow	Ikke tilgjengelig
Viskositet	Ikke tilgjengelig
Damptetthet	Ikke tilgjengelig
Mettet	
dampkonsentrasjon	Ikke tilgjengelig
Fordampningshastighet	Ikke tilgjengelig
Bulktetthet	Ikke tilgjengelig
Dekomponeringstemperatu	
r	Ikke tilgjengelig
Innhold av	
løsningsmiddel	Ikke tilgjengelig
Vanninnhold	Ikke tilgjengelig
Overflatespenning	Ikke tilgjengelig
Ledningsevne	Ikke tilgjengelig
Diverse data	Ikke tilgjengelig
Løselighet	Ikke tilgjengelig

## 10 - Stabilitet og reaktivitet

### STABILITET

Stabilitesforhold: Stabil.

Materialer som bør unngås: Sterke baser, Sterke oksidasjonsmidler.

### FARLIGE NEDBRYTNINGSPRODUKTER

Farlige nedbrytningsprodukter: Karbonmonoksid, karbondioksid.

### FARLIG POLYMERISERING

Farlig polymerisering: Vil ikke forekomme.

## 11 - Opplysninger om helsefare

RTECS-NR.: MD2700000

### AKUTT TOKSISITET

LD50

Oral

Rotte

2960 mg/kg

Merknader: Ernærings- og brutto metabolisme: Endringer i: Andre forandringer. Lunger, brystkasse eller åndedrett: Nedsatt åndedrett. Atferd: Søvnighet (generelt nedsatt aktivitet).

LC50

Innånding.

Rotte

2,410 mg/m<sup>3</sup>

4H

Merknader: Sansorganer og spesielle sanser (lukt, syn, hørsel og smak): Nese: Andre forandringer. Lunger, brystkasse eller åndedrett: Dyspne

LD50

Hud  
Rotte  
> 2000 mg/kg  
Merknader: Hud og annet: Hud: Etter systemisk eksponering:  
Hudbetennelse, andre.  
LD50  
Hud  
Kanin  
**10 ML/KG**

#### **RTECS IRRITASJONSDATA**

Hud  
Kanin  
258 mg  
Merknader: Åpen irritasjonstest

Øyne  
Kanin  
0.1 ml  
Merknader: mild irriterende effekt

#### **SENSIBILISERING**

Hud: Kan gi allergisk reaksjon ved hudkontakt.

#### **SYMPTOMER PÅ EKSPONERING**

Etter vår beste kjennskap er ikke de kjemiske, fysiske og toksikologiske egenskapene fullstendig undersøkt.

#### **OPPTAKSVEI**

Hudkontakt: Irriterer huden.  
Hudabsorpsjon: Kan være farlig ved hudkontakt.  
Øyekontakt: Irriterer øynene.  
Innånding: Farlig ved innånding. Kan irritere slimhinner og øvre luftveier.  
Svelging: Kan være farlig ved svelging.

#### **KRONISK EKSPONERING - ARVESTOFFSKADELIG STOFF**

Resultat: Laboratorieforsøk har vist arvestoffskadelige effekter.

## **12 - Opplysninger om miljøfare**

Ingen data tilgjengelig.

## **13 - Fjerning av kjemikalieavfall**

#### **AVFALLSHÅNDTERING**

Kontakt en godkjent behandlings- eller mottaksstasjon for farlig avfall for destruksjon av dette materialet. Løs opp eller bland materialet med et lettantennelig løsningsmiddel. Forbrenn i en kjemisk forbrenningsovn utstyrt med etterbrenningskammer og skrubber. Overhold alle statlige, kommunale og lokale miljøbestemmelser.

## **14 - Opplysninger om transport**

#### **RID/ADR**

Ikke farlig ved veitransport.

#### **IMDG**

Ikke farlig ved sjøtransport.

#### **IATA**

Ikke farlig ved lufttransport.

## 15 - Opplysninger om lover og forskrifter

KLASSIFISERING OG MERKING I HENHOLD TIL EU-DIREKTIVER

ANNEX I INDEKSNR.: 605-016-00-7

FAREMOMENTER: Xn

Helseskadelig

RISIKOSETNINGER: 20-36/38-43-68

Farlig ved innånding. Irriterer øynene og huden. Kan gi allergi ved hudkontakt. Mulig fare for varig helseskade.

SIKKERHETSSETNINGER: 36/37

Bruk egnede verneklær og vernehansker.

SPESIFIKK INFORMASJON FOR ET LAND

Tyskland

WGK: 1

Selvklassifisering

## 16 - Andre opplysninger av betydning for helse, miljø og sikkerhet

GARANTI

Informasjonen over antas å være korrekt, men inkluderer ikke nødvendigvis all informasjon om stoffet og skal derfor bare brukes som veiledning. Sigma-Aldrich Inc. skal ikke bli holdt ansvarlig for noen som helst skade som følge av håndtering eller kontakt med produktet over. Se baksiden på fakturaen eller pakkseddelen for ytterligere betingelser for salg. Copyright 2008 Sigma-Aldrich Co. Det er kun tillatt å lage ubegrenset papirkopier til internt bruk.

ANVENDELSE/REFERANSER

Kun til forskning og analyse. Ikke til medisinsk bruk, husholdning eller annet bruk. Forskrift om klassifisering, merking m.v. av farlige kjemikalier, Statens forurensningstilsyn, Direktoratet for arbeidstilsynet, Direktoratet for brann og eksplosjonsvern, Oljedirektoratet, Produktregisteret.

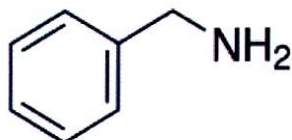
## A.2 Benzylamin

### A.2.1 Egenskaper til benzylamin

©[www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com)

#### 13190 Benzylamine

Fluka purum,  $\geq 98.0\%$  (GC)



<b>Synonym</b>	$\alpha$ -Aminotoluene
<b>Molecular Formula</b>	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>
<b>Molecular Weight</b>	107.15
<b>CAS Number</b>	100-46-9
<b>Beilstein Registry Number</b>	741984
<b>MDL number</b>	MFCD00008106
<b>EG/EC Number</b>	202-854-1

[Expand/Collapse All](#)

#### Price and Availability

#### Properties

<b>grade</b>	purum
<b>assay</b>	$\geq 98.0\%$ (GC)
<b>refractive index</b>	<i>n</i> <sub>20</sub> /D 1.543(lit.) <i>n</i> <sub>20</sub> /D 1.543
<b>bp</b>	184-185 °C(lit.)
<b>mp</b>	10 °C(lit.)
<b>density</b>	0.981 g/mL at 25 °C(lit.)

#### References

<b>Merck</b>	<i>Merck</i> 13,1127
<b>Beilstein</b>	<i>Beil.</i> 12,IV,2155
<b>Fieser</b>	<i>Fieser</i> 1,51 / <i>Fieser</i> 10,26
<b>reference</b>	<i>Aldrich MSDS</i> 1, 169:B / <i>Corp MSDS</i> 1 (1), 378:D / <i>FT-IR</i> 2 (2), 2145:C / <i>FT-IR</i> 1 (1), 1266:B / <i>FT-NMR</i> 1 (2), 565:B / <i>IR-Spectra</i> (3), 760:D / <i>IR-Spectra</i> (2), 669:A / <i>NMR-Reference</i> 2 (1), 1066:D / <i>RegBook</i> 1 (1), 1463:F / <i>Sax</i> 6, 400 / <i>Sigma FT-IR</i> 1 (2), 313:B / <i>Structure Index</i> 1, 228:B:6 / <i>Vapor Phase</i> 3, 1163:A

#### Safety

<b>Hazard Codes</b>	C
<b>Risk Statements</b>	21/22-34
<b>Safety Statements</b>	26-36/37/39-45
<b>RIDADR</b>	UN 2735 8/PG 2
<b>WGK Germany</b>	1
<b>RTECS</b>	DP1488500
<b>UEL</b>	8.20%
<b>LEL</b>	0.70%
<b>Flash Point(F)</b>	149 °F
<b>Flash Point(C)</b>	65 °C
<b>F</b>	34

#### Related Categories

... [Amines](#) > [C7](#)

Figur App. 2 Egenskaper til benzylamin hentet fra leverandøren Sigma-Aldrich.

## A.2.2 HMS datablad benzylamin

SIGMA-ALDRICH  
Helse-, miljø- og sikkerhetsdatablad  
Utskriftsdato: 08/AUG/2008  
Revisjonsdato: 11/FEB/2006  
Utgave 1.6  
Forordning (EF) nr 1907/2006

### 1 - Identifikasjon av kjemikaliet og ansvarlig firma

Handelsnavn	Benzylamin
Produktnr.	13190
Leverandør	Sigma-Aldrich Norway AS Tevlingveien 23 1081 Oslo Norge
Telefon	47 23 17 60 00
Faks	47 23 17 60 10
E-post adresse	eurtechserv@sial.com
Nødtelefon	Giftinformasjonssentralen 22 59 13 00

### 2 - Viktigste faremomenter

VIKTIGSTE FAREMOMENTER FOR HELSE OG MILJØ.  
Farlig ved hudkontakt og svelging. Etsende.

### 3 - Opplysninger om kjemisk sammensetning

Handelsnavn	CAS nr.	EC nr.	Annex I
Indeksnr.			
BENZYLAMINE	100-46-9	202-854-1	612-047-00-X
Formel C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N			
Molekylvekt 107.16 AMU			
Synonymer	(Aminomethyl)benzene * alpha-Aminotoluene * omega-Aminotoluene * Benzenemethanamine (9CI) *Monobenzylamine * (Phenylmethyl)amine * Sumine 2005 * Sumine 2006		

### 4 - Førstehjelpstiltak

#### INNÅNDING

Ved innånding, flytt straks den eksponerte til frisk luft. Ved åndedrettsstans, gi kunstig åndedrett. Ved pustevansker, gi oksygen.

#### HUDKONTAKT

Ved hudkontakt, skyll med mye vann i minst 15 minutter. Ta av forurensede klær og sko. Kontakt lege.

#### ØYEKONTAKT

Ved øyekontakt, skyll med mye vann i minst 15 minutter mens øyelokket løftes. Kontakt lege.

#### SVELGING

Ved svelging, skyll munnen med vann forutsatt at den tilskadekomne ikke er bevisstløs. Kontakt lege.  
Fremkall ikke brekning.

### 5 - Tiltak ved brannslukning

#### BRANNSLUKNINGSMIDLER

Egnet: Karbondioksid, pulver eller skum.

#### SPESIELLE FARER

Spesielle faremomenter: Ved brann dannes giftig røyk.  
Brennbar væske.  
SPESIELT VERNEUTSTYR FOR BRANNMANNSKAP.  
Bruk luftforsynt åndedrettsvern og verneklær for å  
unngå kontakt med hud og øyne.

## 6 - Tiltak ved utilsiktet utslipp

PERSONLIGE FORHOLDSREGLER VED LEKKASJE ELLER SØL

Evakuer området.

PERSONLIGE VERNETILTAK.

Bruk luftforsynt åndedrettsvern, gummistøvler og solide  
gummihansker.

OPPRENSKNINGSMETODER

Dekk med tørr kalk eller natriumkarbonat, saml opp og  
oppbevar i en lukket beholder og videresend til  
avfallshåndtering. Ventilert og vask området etter at  
produktet er samlet opp.

## 7 - Håndtering og oppbevaring

HÅNDTERING

Forholdsregler for sikker håndtering: Unngå innånding  
av damper. Unngå søl på klær, hud- og øyekontakt.  
Unngå langvarig eller gjentatt eksponering.

OPPBEVARING

Forholdsregler ved lagring: Hold beholderen tett  
lukket. Unngå varme og åpen ild. Myndighetenes  
retningslinjer og forskrifter for oppbevaring av  
brannfarlige varer skal nøye følges. Oppbevares på et  
tørt og kjølig sted.

## 8 - Eksponeringskontroll og personlig verneutstyr

PROSESSFORHOLD

Nøddusj og øyedusj anbefales. Må kun brukes i  
avtrekkskap.

GENERELLE HYGIENISKE RUTINER

Vask tilsølt tøy før det brukes igjen. Kast tilsølte  
sko. Vask grundig etter bruk.

PERSONLIG VERNEUTSTYR

Åndedrettsvern: Bruk åndedrettsvern og komponenter som  
er testet og godkjent etter standarder som NIOSH (US)  
or CEN (EU). Når risikovurdering viser at  
åndedrettsvern med filterapparat er hensiktsmessig,  
bruk helmaske med kombinasjonsfilter eller type  
ABEK-filter (EN 14387) som støtte til eksterne  
ventilasjonssystemer. Dersom åndedrettsvern er den eneste  
beskyttelsen, bruk luftforsynt åndedrettsvern med  
helmaske.

Arbeidshansker: Bruk kjemikalieresistente vernehansker.

Øyevern: Kjemiske vernebriller.

Spesielle vernetiltak: Ansiktsskjerm (minst 20 cm  
stort).

## 9 - Fysiske og kjemiske egenskaper

Fysikalsk tilstand  
Egenskaper  
trykk

Form/konsistens: Væske  
Verdi Ved temperatur eller

pH	11.4	20 °C Konsentrasjon:
100		g/l
Kokepunkt (intervall)	70.0 - 71.0 °C	10 mmHg
Smeltepunkt (intervall)	10 °C	
Flammepunkt	65 °C	Metode: Lukket kopp
Brennbarhet	Ikke tilgjengelig	
Selvantennelsestemperat	ur	
	405 °C	
Oksiderende egenskaper	Ikke tilgjengelig	
Eksplosive egenskaper	Ikke tilgjengelig	
Eksplosjonsgrenser	Nedre: 0.7 % Øvre: 8.2 %	
Damptrykk	0.6 mmHg	
Tetthet (g/m <sup>3</sup> )	0.982 g/cm <sup>3</sup>	
Fordelingskoeffisient	log Kow: 1	
Viskositet	1.82 Pas	20 °C
Damptetthet	Ikke tilgjengelig	
Mettet		
dampkonsentrasjon	Ikke tilgjengelig	
Fordampningshastighet	Ikke tilgjengelig	
Bulktetthet	Ikke tilgjengelig	
Dekomponeringstemperatur	Ikke tilgjengelig	
Innhold av		
løsningsmiddel	Ikke tilgjengelig	
Vanninnhold	Ikke tilgjengelig	
Overflatespenning	Ikke tilgjengelig	
Ledningsevne	Ikke tilgjengelig	
Diverse data	Ikke tilgjengelig	
Løselighet	Løselighet i vann: Løselig Andre løsningsmidler: BENZENE ALCOHOL, ETHER, ACETONE	

## 10 - Stabilitet og reaktivitet

### STABILITET

Stabilitetsforhold: Stabil.

Ustabilitetsforhold: Absorberer karbondioksid fra luft

Materialer som bør unngås: Sterke oksidasjonsmidler.

### FARLIGE NEDBRYTNINGSPRODUKTER

Farlige nedbrytningsprodukter: Termisk nedbrytning kan produsere karbonmonoksid, karbondioksid, og nitrogenoksider.

### FARLIG POLYMERISERING

Farlig polymerisering: Vil ikke forekomme.

## 11 - Opplysninger om helsefare

RTECS-NR.: DP1488500

### AKUTT TOKSISITET

LD50

Oral

Rotte

552 mg/kg

LD50

Hud

Rotte

1,350 mg/kg

LD50



Intraperitoneal  
Mus  
600 MG/KG

LD50  
Oral  
Pattedyr  
700 mg/kg

#### RTECS IRRITASJONSDATA

Hud

Kanin

Merknader: Sterk irriterende effekt

#### SYMPTOMER PÅ EKSPONERING

Stoffet er ekstremt ødeleggende for slimhinner, øvre luftveier, øyne og hud. Innånding kan forårsake kramper, inflammasjon og ødem i strupehodet og bronkiene, kjemisk lungebetennelse og lungeødem. Symptomer på eksponering kan være brennende følelse, hoste, pipende åndedrett, strupekatarr, kortpusthet, hodepine, kvalme og oppkast.

#### OPPTAKSVEI

Hudkontakt: Forårsaker etseskader.

Hudabsorpsjon: Farlig ved hudkontakt.

Øyekontakt: Forårsaker etseskader.

Innånding: Stoffet er ekstremt skadelig for slimhinner og øvre luftveier. Kan være farlig ved innånding.

Svelging: Farlig ved svelging.

## 12 - Opplysninger om miljøfare

#### ØKOTOKSIKOLOGISKE EFFEKTER

Testtype: EC50 Daphnia

Art: Daphnia magna

Tid: 48 h

Verdi: 60 mg/l

Testtype: LC50 Fisk

Art: Pimephales promelas

Tid: 96 h

Verdi: 102 mg/l

Testtype: LC50 Fisk

Art: Leuciscus idus

Tid: 96 h

Verdi: 22.0 - 46.0 mg/l

## 13 - Fjerning av kjemikalieavfall

#### AVFALLSHÅNDTERING

Dette brennbare materialet kan brennes i en kjemisk forbrenningsovn utstyrt med etterbrenningskammer og skrubber. Overhold alle statlige, kommunale og lokale miljøbestemmelser.

## 14 - Opplysninger om transport

#### RID/ADR

UN nr.: 2735

Klasse: 8

PG: II

Proper Shipping Name (int. nasj.): Amines, liquid,

corrosive, n.o.s.  
IMDG  
UN nr.: 2735  
Klasse: 8  
PG: II  
Proper Shipping Name (int. nasj.): AMINES, LIQUID,  
CORROSIVE, N.O.S.  
Forurenses akvatisk miljø: Nei  
Forurenses sterkt akvatisk miljø: Nei  
Teknisk navn: Required

IATA  
UN nr.: 2735  
Klasse: 8  
PG: II  
Proper Shipping Name (int. nasj.): Amines, liquid,  
corrosive, n.o.s.  
Innånding forpkningsgruppe I: Nei  
Teknisk navn: Required

## 15 - Opplysninger om lover og forskrifter

KLASSIFISERING OG MERKING I HENHOLD TIL EU-DIREKTIVER

ANNEX I INDEKSNR.: 612-047-00-X

FAREMOMENTER: C

Etsende

RISIKOSETNINGER: 21/22-34

Farlig ved hudkontakt og svelging. Etsende.

SIKKERHETSSETNINGER: 26-36/37/39-45

Får man stoffet i øynene, skylle straks grundig med store mengder vann og kontakt lege. Bruk egnede verneklær, vernehansker og vernebriller/ansiktsskjerm. Ved uhell eller illebefinnende, kontakt lege øyeblikkelig (vis etiketten om mulig).

SPESIFIKK INFORMASJON FOR ET LAND

Tyskland

WGK: 1

ID-nummer: 2324

Klassifisering i henhold til appendix 3.

## 16 - Andre opplysninger av betydning for helse, miljø og sikkerhet

GARANTI

Informasjonen over antas å være korrekt, men inkluderer ikke nødvendigvis all informasjon om stoffet og skal derfor bare brukes som veiledning. Sigma-Aldrich Inc. skal ikke bli holdt ansvarlig for noen som helst skade som følge av håndtering eller kontakt med produktet over. Se baksiden på fakturaen eller pakkseddelen for ytterligere betingelser for salg. Copyright 2008 Sigma-Aldrich Co. Det er kun tillatt å lage ubegrenset papirkopier til internt bruk.

ANVENDELSE/REFERANSER

Kun til forskning og analyse. Ikke til medisinsk bruk, husholdning eller annet bruk. Forskrift om klassifisering, merking m.v. av farlige kjemikalier, Statens forurensningstilsyn, Direktoratet for arbeidstilsynet, Direktoratet for brann og eksplosjonsvern, Oljedirektoratet, Produktregisteret.

## A.3 Salpetersyre 65 %

### A.3.1 Egenskaper til salpetersyre

© [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com)

#### 84378 Nitric acid

Fluka puriss. p.a., 65% (Hg  $\leq 0.000005\%$ ),  $\geq 65\%$  (T)

<b>HNO<sub>3</sub></b>	Molecular Formula	HNO <sub>3</sub>
	Molecular Weight	63.01
	CAS Number	7697-37-2
	MDL number	MFCD00011349
	PubChem Substance ID	<a href="#">24888196</a>
	EG/EC Number	231-714-2

[Expand/Collapse All](#)

#### Price and Availability

##### Descriptions

Application Used for the decomposition of organic and inorganic samples for det. of mercury

##### Properties

vapor pressure	8 mmHg ( 20 °C)
grade	puriss. p.a.
assay	$\geq 65\%$ (T)
Ign. residue	$\leq 0.0005\%$ (as SO <sub>4</sub> )
bp	120.5 °C(lit.)
anion traces	chloride (Cl <sup>-</sup> ): $\leq 0.5$ mg/kg phosphate (PO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ): $\leq 0.5$ mg/kg sulfate (SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ): $\leq 1$ mg/kg
cation traces	Ag: $\leq 0.01$ mg/kg Al: $\leq 0.05$ mg/kg As: $\leq 0.01$ mg/kg Ba: $\leq 0.01$ mg/kg Bi: $\leq 0.1$ mg/kg Ca: $\leq 0.5$ mg/kg Cd: $\leq 0.01$ mg/kg Co: $\leq 0.01$ mg/kg Cr: $\leq 0.02$ mg/kg Cu: $\leq 0.01$ mg/kg Fe: $\leq 0.2$ mg/kg Hg: $\leq 0.005$ mg/kg K: $\leq 0.05$ mg/kg Li: $\leq 0.01$ mg/kg Mg: $\leq 0.1$ mg/kg Mn: $\leq 0.01$ mg/kg Mo: $\leq 0.02$ mg/kg Na: $\leq 0.5$ mg/kg Ni: $\leq 0.02$ mg/kg Pb: $\leq 0.01$ mg/kg Sr: $\leq 0.01$ mg/kg Ti: $\leq 0.05$ mg/kg Zn: $\leq 0.05$ mg/kg

##### References

Merck	Merck 13,6608
Fieser	Fieser 1,733 / Fieser 3,212 / Fieser 4,356 / Fieser 5,474 / Fieser 6,284
reference	Aldrich MSDS 1, 1351:D / Corp MSDS 1 (2), 2546:C / Corp MSDS 1 (2), 2546:B / RegBook 1 (3), 3247:E / RegBook 1 (3), 3247:F / Sax 6, 2003 / Sax 6, 2002

##### Safety

Hazard Codes	C
Risk Statements	35
Safety Statements	23-26-36-45
RIDADR	UN 2031 8/PG 2
WGK Germany	1
F	8

##### Related Products

Replaced by [17078](#), Nitric acid

##### Related Categories

... [Digestion Reagents](#) > [Acids, Mercury-free and Arsenic-free](#)  
... [Puriss p.a.](#) > [I-N, Puriss p.a.](#)

Figur App. 3 Egenskaper til benyttet salpetersyre.

### A.3.2 HMS datablad salpetersyre

#### SIGMA-ALDRICH

Helse-, miljø- og sikkerhetsdatablad

Utskriftsdato: 08/AUG/2008

Revisjonsdato: 08/OCT/2007

Utgave 1.9

Forordning (EF) nr 1907/2006

## 1 - Identifikasjon av kjemikaliet og ansvarlig firma

Handelsnavn	Salpetersyre 65%
Produktnr.	84378
	Leverandør Sigma-Aldrich Norway AS
	Tevlingveien 23
	1081 Oslo
	Norge
Telefon	47 23 17 60 00
Faks	47 23 17 60 10
E-post adresse	eurtechserv@sial.com
Nødtelefon	Giftinformasjonssentralen 22 59 13 00

## 2 - Viktigste faremomenter

VIKTIGSTE FAREMOMENTER FOR HELSE OG MILJØ.  
Sterkt etsende.

## 3 - Opplysninger om kjemisk sammensetning

Handelsnavn	CAS nr.	EC nr.	Annex I Indeksnr.	
NITRIC ACID, 40%≤C<70%	7697-37-2	231-714-2	007-004-00-1	
Innholdsstoffer Navn	Prosent	CAS nr.	EC nr.	Annex I Indeksnr.
NITRIC ACID	>= 40 < 70	7697-37-2	231-714-2	Ingen
Symboler: O-C				
Risikosekvenser: 8-35				
Brannfarlig ved kontakt med brennbare stoffer. Sterkt etsende.				
WATER	>= 30 < 60	7732-18-5	231-791-2	Ingen
Formel	HNO3			
Molekylvekt	63.01 AMU			

## 4 - Førstehjelpstiltak

### INNÅNDING

Ved innånding, flytt straks den eksponerte til frisk luft. Ved åndedrettsstans, gi kunstig åndedrett. Ved puste vansker, gi oksygen.

### HUDKONTAKT

Ved hudkontakt, skylle med mye vann i minst 15 minutter. Ta av forurensede klær og sko. Kontakt lege.

### ØYEKONTAKT

Ved øyekontakt, skylle med mye vann i minst 15 minutter mens øyelokket løftes. Kontakt lege.

### SVELGING

Ved svelging, skylle munnen med vann forutsatt at den tilskadekomne ikke er bevisstløs. Kontakt lege øyeblikkelig. Fremkall ikke brekning.

## 5 - Tiltak ved brannslukning

### BRANNSLUKNINGSMIDLER

Egnet: Bruk brannslukningsmiddel egnet til omgivende brann. Slukk brannen med store mengder vann. Bruk vandusj for å kjøle beholdere ved brann.

### SPESEIELLE FARER

Spesielle faremomenter: Ved brann dannes giftig røyk.

### SPESEIELT VERNEUTSTYR FOR BRANNMANNSKAP.

Bruk luftforsynt åndedrettsvern og verneklær for å unngå kontakt med hud og øyne.

### SPESEIFIKKE METODER FOR BRANNBEKJEMPELSE

Retts ikke en vannstråle eller skum inn i brennende smeltet materiale; dette kan forårsake sprut og spre brannen.

## 6 - Tiltak ved utilsiktet utslipp

### PERSONLIGE FORHOLDSREGLER VED LEKKASJE ELLER SØL

Evakuer området.

### PERSONLIGE VERNETILTAK.

Bruk luftforsynt åndedrettsvern, gummistøvler og solide gummihansker.

### OPPRENSKNINGSMETODER

Absorber med sand eller vermikulitt og plasser i lukkede beholdere for destruksjon. Ventilert og vask området etter at produktet er samlet opp.

## 7 - Håndtering og oppbevaring

### HÅNTERING

Forholdsregler for sikker håndtering: Unngå innånding av damper. Unngå søl på klær, hud- og øyekontakt. Unngå langvarig eller gjentatt eksponering.

### OPPBEVARING

Forholdsregler ved lagring: Hold beholderen tett lukket.

## 8 - Eksponeringskontroll og personlig verneutstyr

### PROSESSFORHOLD

Nøddusj og øyedusj anbefales. Må kun brukes i avtrekkskap.

### GENERELLE HYGIENISKE RUTINER

Vask grundig etter bruk. Kast forurenset tøy og sko.

### GRENSEVERDIER-DANMARK

Kilde	Type	Verdi
AN	TWA	5 mg/m <sup>3</sup>

### GRENSEVERDIER-TYSKLAND

Kilde	Type	Verdi
TRGS	AN	5 mg/m <sup>3</sup>
		2 ppm

Merknader: =1=

### ADMINISTRATIVE NORMER - NORGE

Kilde	Type	Verdi
	AN	5 mg/m <sup>3</sup>
		2 ppm

### GRENSEVERDIER-SVERIGE

Kilde	Type	Verdi
	LLV (nivå)	5 mg/m <sup>3</sup>
		2 ppm

### GRENSEVERDIER-SVEITS

Kilde	Type	Verdi
AN	AN	5 mg/m <sup>3</sup> 2 ppm
GRENSEVERDIER-STORBRIANIA		
Kilde	Type	Verdi
AN	AN	5.2 mg/m <sup>3</sup> 2 ppm
AN	STEL	10 mg/m <sup>3</sup> 4 ppm

#### PERSONLIG VERNEUTSTYR

Åndedrettsvern: Bruk åndedrettsvern og komponenter som er testet og godkjent etter standarder som NIOSH (US) or CEN (EU). Bruk luftforsynt åndedrettsvern eller SCBA. I Europa anbefales bruk av helmaske med filtertype ABEK (EN 14387).  
Arbeidshansker: Bruk kraftige gummihansker.  
Øyevern: Kjemiske vernebriller.  
Spesielle vernetiltak: Gummiforkle.

## 9 - Fysiske og kjemiske egenskaper

Fysikalsk tilstand	Form/konsistens: Væske	
	Farge: Fargeløs	
Egenskaper	Verdi	Ved temperatur eller trykk
pH	< 1	
Kokepunkt (intervall)	122 °C	760 mmHg
Smeltepunkt (intervall)	Ikke tilgjengelig	
Flammepunkt	Ikke tilgjengelig	
Brennbarhet	Ikke tilgjengelig	
Selvantennelsestemperatur	Ikke tilgjengelig	
Oksiderende egenskaper	Ikke tilgjengelig	
Eksplosive egenskaper	Ikke tilgjengelig	
Eksplosjonsgrenser	Ikke tilgjengelig	
Damptrykk	37 mmHg	50 °C
Tetthet (g/m <sup>3</sup> )	1.4 g/cm <sup>3</sup>	25 °C
Fordelingskoeffisient		
log Kow	Ikke tilgjengelig	
Viskositet	Ikke tilgjengelig	
Damptetthet	Ikke tilgjengelig	
Mettet dampkonsentrasjon	Ikke tilgjengelig	
Fordampningshastighet	Ikke tilgjengelig	
Bulktetthet	Ikke tilgjengelig	
Dekomponeringstemperatur	Ikke tilgjengelig	
Innhold av løsningsmiddel	Ikke tilgjengelig	
Vanninnhold	Ikke tilgjengelig	
Overflatespenning	Ikke tilgjengelig	
Ledningsevne	Ikke tilgjengelig	
Diverse data	Ikke tilgjengelig	
Løselighet	Ikke tilgjengelig	

## 10 - Stabilitet og reaktivitet

#### STABILITET

Stabilitesforhold: Stabil.  
Ustabilitesforhold: Kan misfarges ved lyseksponering.  
Materialer som bør unngås: Alkalimetaller, Metaller, Fluor, Hexalithium disilicide, non-metal hydrides, non-

metal halides, phosphine derivatives, hydrazine and derivatives Salpetersyre og andre sterke oksidasjonsmidler kan forårsake eksplosive reaksjonstyper ved blanding med adsorptive harpikser.

**FARLIGE NEDBRYTNINGSPRODUKTER**

Farlige nedbrytningsprodukter: Nitrogenoksider.

**FARLIG POLYMERISERING**

Farlig polymerisering: Vil ikke forekomme.

## 11 - Opplysninger om helsefare

**SYMPTOMER PÅ EKSPONERING**

Høye doser kan forårsake: omdannelse av hemoglobin til methemoglobin, som gir cyanose; markert blodtrykksfall, som fører til kollaps, koma og muligens død.

Eksposering kan forårsake: Lungeødem. Effekter kan være forsinket. Etter vår beste kjennskap er ikke de kjemiske, fysiske og toksikologiske egenskapene fullstendig undersøkt. Stoffet er ekstremt ødeleggende for slimhinner, øvre luftveier, øyne og hud.

Innånding kan forårsake kramper, inflammasjon og ødem i strupehodet og bronkiene, kjemisk lungebetennelse og lungeødem. Symptomer på eksponering kan være brennende følelse, hoste, pipende åndedrett, strupekatarr, kortpusthet, hodepine, kvalme og oppkast.

**OPPTAKSVEI**

Hudkontakt: Sterkt etsende.

Hudabsorpsjon: Kan være farlig ved hudkontakt.

Øyekontakt: Sterkt etsende.

Innånding: Kan være farlig ved innånding. Stoffet er ekstremt skadelig for slimhinner og øvre luftveier.

Svelging: Kan være farlig ved svelging. Svelging kan forårsake umiddelbar brennende smerte i munn, hals magen; kraftig svelling av svelget og skjelettparalyse som berører pusteevne, sirkulasjonssjokk og kramper.

**MÅLORGAN**

Hjerte-karsystem. Lunger. Tenner.

## 12 - Opplysninger om miljøfare

Ingen data tilgjengelig.

## 13 - Fjerning av kjemikalieavfall

**AVFALLSHÅNDTERING**

Kontakt en godkjent behandlings- eller mottaksstasjon for farlig avfall for destruksjon av dette materialet. Overhold alle statlige, kommunale og lokale miljøbestemmelser.

## 14 - Opplysninger om transport

**RID/ADR**

UN nr.: 2031

Klasse: 8

PG: II

Proper Shipping Name (int. nasj.): Salpetersyre

**IMDG**

UN nr.: 2031

Klasse: 8

PG: II

Proper Shipping Name (int. nasj.): Nitric acid  
Forurensar akvatisk miljø: Nei  
Forurensar sterkt akvatisk miljø: Nei

IATA

UN nr.: 2031  
Klasse: 8  
PG: II  
Proper Shipping Name (int. nasj.): Nitric acid  
Innånding forpakningsgruppe I: Nei

## 15 - Opplysninger om lover og forskrifter

KLASSIFISERING OG MERKING I HENHOLD TIL EU-DIREKTIVER

ANNEX I INDEKSNR.: 007-004-00-1

FAREMOMENTER: C

Etsende

RISIKOSETNINGER: 35

Sterkt etsende.

SIKKERHETSSETNINGER: 23-26-36-45

Unngå innånding av damp. Får man stoffet i øynene, skyl straks grundig med store mengder vann og kontakt lege. Bruk egnede verneklær. Ved uhell eller illebefinnende, kontakt lege øyeblikkelig (vis etiketten om mulig).

SPESIFIKK INFORMASJON FOR ET LAND

Tyskland

WGK: 1

ID-nummer: 414

KBwS-Beslutning

NORGE

Deklarasjonsnummer: 67083

## 16 - Andre opplysninger av betydning for helse, miljø og sikkerhet

GARANTI

Informasjonen over antas å være korrekt, men inkluderer ikke nødvendigvis all informasjon om stoffet og skal derfor bare brukes som veiledning. Sigma-Aldrich Inc. skal ikke bli holdt ansvarlig for noen som helst skade som følge av håndtering eller kontakt med produktet over. Se baksiden på fakturaen eller pakkseddelen for ytterligere betingelser for salg. Copyright 2008 Sigma-Aldrich Co. Det er kun tillatt å lage ubegrenset papirkopier til internt bruk.

ANVENDELSE/REFERANSER

Kun til forskning og analyse. Ikke til medisinsk bruk, husholdning eller annet bruk. Forskrift om klassifisering, merking m.v. av farlige kjemikalier, Statens forurensningstilsyn, Direktoratet for arbeidstilsynet, Direktoratet for brann og eksplosjonsvern, Oljedirektoratet, Produktregisteret.



## A.4 Acetonitril

### A.4.1 Informasjon fra leverandør

© [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com)

#### 60004 Acetonitrile

Sigma-Aldrich ≥99.5% (GC)

<b>CH<sub>3</sub>CN</b> Synonym	ACN Methyl cyanide
<b>Molecular Formula</b>	CH <sub>3</sub> CN
<b>Molecular Weight</b>	41.05
<b>CAS Number</b>	75-05-8
<b>Beilstein Registry Number</b>	741857
<b>MDL number</b>	MFCD00001878
<b>PubChem Substance ID</b>	<a href="#">24881772</a>
<b>EG/EC Number</b>	200-835-2

[Expand/Collapse All](#)

#### Price and Availability

##### Descriptions

**Other Notes** This former Riedel-de Haën product is now being offered as Sigma-Aldrich brand. During the transition, you still may receive the Riedel product. The rebranding has no impact on product performance or quality. For further information see [www.sigma-aldrich.com/rebranding](http://www.sigma-aldrich.com/rebranding). Printing link to product [rebranding statement](#).

##### Properties

<b>vapor density</b>	1.41 (vs air)
<b>vapor pressure</b>	72.8 mmHg ( 20 °C)
<b>assay</b>	≥99.5% (GC)
<b>autoignition temp.</b>	973 °F
<b>expl. lim.</b>	16 %
<b>total impurities</b>	±0.1% water (Karl Fischer)
<b>refractive index</b>	<i>n</i> <sub>20</sub> /D 1.344(lit.)
<b>bp</b>	81-82 °C(lit.)
<b>mp</b>	-48 °C(lit.)
<b>density</b>	0.786 g/mL at 25 °C(lit.)

##### References

<b>Merck</b>	<i>Merck</i> 13,71
<b>Beilstein</b>	<i>Beil.</i> 2,IV,419
<b>Fieser</b>	<i>Fieser</i> 2,13
<b>reference</b>	<i>Aldrich MSDS</i> 1, 13:C / <i>Corp MSDS</i> 1 (1), 22:A / <i>FT-IR</i> 2 (1), 1422:A / <i>FT-IR</i> 1 (1), 837:A / <i>FT-NMR</i> 1 (1), 1351:A / <i>IR-Spectra</i> (3), 1527:A / <i>IR-Spectra</i> (3), 500:A / <i>IR-Spectra</i> (2), 444:A / <i>NMR-Reference</i> 2 (1), 695:A / <i>RegBook</i> 1 (1), 987:A / <i>Sax</i> 6, 90 / <i>Sigma FT-IR</i> 1 (2), 233:C / <i>Structure Index</i> 1, 154:A:1 / <i>Vapor Phase</i> 3, 795:A

##### Safety

<b>Hazard Codes</b>	F,Xn
<b>Risk Statements</b>	11-20/21/22-36
<b>Safety Statements</b>	16-36/37
<b>RIDADR</b>	UN1648 3 /PG 2
<b>WGK Germany</b>	2
<b>RTECS</b>	AL7700000
<b>UEL</b>	16.00%
<b>LEL</b>	4.40%
<b>Flash Point(F)</b>	35.6
<b>Flash Point(C)</b>	2

Figur App. 4 Viktig data for acetonitril

## A.4.2 HMS datablad for acetonitril

<b>SIGMA-ALDRICH</b>		<b>HMS-DATABLAD</b> Ifølge EF-direktiv 2001/58/EF Utgave 3.0 Revisjonsdato 23.03.2007 Trykkingsdato 08.08.2008		
<b>1. IDENTIFIKASJON AV KJEMIKALIET OG ANSVARLIG FIRMA</b>				
Produktnavn	:	<b>Acetonitrile</b>		
Produktnr.	:	60004		
Merke	:	Sigma-Aldrich		
Selskap	:	Sigma-Aldrich Norway AS Tevlingvn. 23 N-1081 OSLO		
Telefon	:	+47 23 176000		
Faks	:	+47 23 176010		
Nødtelefon	:	Giftnformasjonsentralen 22 59 13 00		
<b>2. STOFFBLANDINGERS SAMMENSETNING OG STOFFENES KLASSIFISERING</b>				
Formel	:	C2H3N		
Molekylvekt	:	41,05 g/mol		
CAS-Nr.	EF-Nr.	Indeks-Nr.	Klassifisering	Konsentrasjon [%]
Acetonitrile				
75-05-8	200-835-2	608-001-00-3	F, Xn, R11- R20/21/22- R36	-
<b>3. VIKTIGSTE FAREMOMENTER</b>				
<p><b>Sikkert råd for mennesker og for miljøet</b> Meget brannfarlig. Farlig ved innånding, hudkontakt og svelging. Irriterer øynene.</p>				
<b>4. FØRSTEHJELPSTILTAK</b>				
<p><b>Generelt råd</b> Konsulter lege. Vis dette produktdatablad til tilstedeværende lege.</p> <p><b>Dersom produktet inhaleres</b> Hvis pustet inn, fjern personen til frisk luft. Ved åndedrettsstans, gi kunstig åndedrett. Konsulter lege.</p> <p><b>I tilfelle hudkontakt</b> Vask med såpe og mye vann. Konsulter lege.</p> <p><b>I tilfelle øyeblikkontakt</b> Skyll grundig med rikelig med vann i minst 15 minutter og konsulter lege.</p> <p><b>Dersom produktet svelges</b> Fremkall IKKE brekninger. Gi aldri noe gjennom munnen til en bevisstløs person. Skyll munnen med vann. Konsulter lege.</p>				
Sigma-Aldrich - 60004		www.sigma-aldrich.com		Side 1 of 5

## 5. TILTAK VED BRANNSLUKKING

### Passende brannslukningsmiddel

For små begynnende branner, bruk brannslukkingsmiddel som "alkohol" skum, tørrkjemikalier eller karbondioksid. For større branner, overfyll med vann som tåke eller spray i veldig store mengder fra en avstand så langt unna som mulig. Solide vannstrømmer kan være ineffektive. Avkjøl alle berørte beholdere med overfylte mengder av vann. Karbondioksid (CO<sub>2</sub>)

### Spesielt beskyttelsesutstyr for brannmenn

Bruk om nødvendig trykkluftmaske ved brannslukning.

### Utfyllende opplysninger

Vannspray kan brukes for å avkjøle uåpnede beholdere.

## 6. TILTAK VED UTILSIKTET UTSLIPP

### Sikkerhetstiltak for å beskytte personer

Bruk eget verneutstyr. Unngå å puste inn damp/dugg/gass. Sørg for skikkelig ventilasjon. Fjern alle kilder til antennelse. Evakuer personalet til sikkert område. Vis forsiktighet for oppsamling av damper som danner eksplosive konsentrasjoner. Damper kan samles på lave områder.

### Sikkerhetstiltak for å beskytte ytre miljø

Forhindre ytterligere lekkasje eller søl dersom det er forsvarlig. La ikke produktet gå i avløpsystemet.

### Metoder til opprydding og rengjøring

Oppbevar og samle spill med absorberende materiale som ikke er brennbart, (f.eks. sand, jord, diatomejord, vermikulitt) og plasser i beholder for avskaffelse i henhold til lokale / nasjonale bestemmelser (se seksjon 13).

## 7. HÅNDTERING OG OPPBEVARING

### Håndtering

Unngå kontakt med huden og øynene. Unngå å puste inn damp eller tåkedis.

Holdes vekk fra antennelseskilder - Røyking forbudt. Ta forholdsregler for å forhindre oppbygging av elektrostatisk ladning.

### Oppbevaring

Lagre på en kjølig plass. Hold beholderen tett lukket på et tørt og godt ventilert sted. Åpne beholdere må forsegles på nytt med forsiktighet og oppbevares i loddrett stilling for å forhindre lekkasje.

## 8. EKSPONERINGSKONTROLL OG PERSONLIG VERNEUTSTYR

### Bestanddelene med arbeidsplassrelaterte, for overvåking

Komponenter	CAS-Nr.	Verdi	kontrollparametere	Oppdater	Bas
Acetonitril	75-05-8	TWA	30 ppm 50 mg/m <sup>3</sup>	1996-02-01	Norge. Administrative normer for forurensning i arbeidsatmosfære 2003. best. nr. 361

### Personlig beskyttelse

#### Åndedrettsvern

Når risikovurdering viser at åndedrettsvern med filterapparat er hensiktsmessig, bruk helmaske med kombinasjonsfilter eller type ABEK-filter (EN 14387) som støtte til eksterne ventilasjonssystemer. Dersom åndedrettsvern er den eneste beskyttelsen, bruk luftforsynt åndedrettsvern med helmaske. Bruk åndedrettsvern og komponenter som er testet og godkjent etter standarder som NIOSH (US) or CEN (EU).

#### Håndvern

Håndteres med vernehansker. De valgte vernehanskene må tilfredsstillende spesifikasjonene til EU Direktiv 89/689/EØF og standarden EN 374 derivert fra direktivet.

**Øyevern**  
Vernebriller

**Hud og kroppsbeskyttelse**  
ugjennomtrengelige klær, Velg kroppsbeskyttelse i henhold til mengden og konsentrasjonen av farlige stoffer på arbeidssstedet.

**Hygieniske forhåndsregler**  
Må behandles i henhold til alle forskrifter vedrørende industriell hygiene og sikkerhetstiltak. Vask hendene før arbeidspauser og etter arbeidstidens slutt.

## 9. FYSISKE OG KJEMISKE EGENSKAPER

### Utseende

Form	væske, klar
Farge	fargeløs
Lukt	påtrengende

### Sikkerhetsdata

pH	ingen data tilgjengelig
Smeltepunkt	-48,0 °C
Kokepunkt	81,0 - 82,0 °C
Flammepunkt	2,0 °C - lukket skål
Antennelsestemperatur	523 °C
Nedre eksplosjonsgrense	4,4 %(V)
Øvre eksplosjonsgrense	16 %(V)
Damptrykk	97,1 hPa ved 20,0 °C
Tetthet	0,78 g/cm <sup>3</sup>
Vannoppløselighet	oppløselig
Fordeleskoeffisient (n-oktanol/vann)	log Pow: -0,34

## 10. STABILITET OG REAKTIVITET

**Lagerstabilitet**  
Stabil under anbefalte lagringsforhold.

**Forhold som skal unngås**  
Varme, flammer og gnister.

**Materialer som skal unngås**  
syrer, Baser, Oksyderingsmidler, Reduksjonsmidler, Alkaliske metaller

**Farlige spaltningsprodukter**

Farlige nedbrytningsprodukter dannet under branntilstander.  
Karbonoksider, nitrogenoksider (NO<sub>x</sub>), Hydrogencyanid

## 11. OPPLYSNINGER OM HELSEFARE

### Akutt giftighet

LD50 Oral - rotte - 2.460 mg/kg

LC50 Innåndning - rotte - 8 t - 7551 ppm

Sigma-Aldrich - 60004

[www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com)

Side 3 of 5

Bemerkning: Atferd: Endret søvnrytme (inkludert forandring i stabilitetsrefleks). Atferd: Kramper eller effekt på terskelen for anfall. Blod: Blødning.

LD50 Hud - kanin - 2.000 mg/kg

#### Irritasjon og tæring

Hud - kanin - Lett hudirritasjon

Øyne - kanin - Alvorlig øyeirritasjon

#### Sensibilisering

Bemerkning: ingen data tilgjengelig

#### Kronisk eksponering

Dette produktet er eller inneholder en forbindelse som ikke kan klassifiseres med hensyn på kreftfremkallende egenskaper basert på dets IARC, ACGIH, NTP, eller EPA- klassifikasjon.

#### Symptomer på eksponering

Behandles som cyanid-forgiftning., Ha alltid for hånden et førstehjelp-utstyr for cyanide, sammen med korrekt instruksjon., Starten på symptomer er generelt forsinket avhengig av omdannelsen til cyanid., Kvalme, Kaster opp, Diare, Hodepine, Svimmelhet, Utslett, Cyanotisk, opphisselse, depresjon, Søvnighet, dårlig dømmekraft, Ukoordinasjon, sløvhets, død

#### Potensielle helsevirkninger

Innåndning	Skadelig hvis pustet inn. Kan føre til irritasjon av pusterøret.
Hud	Skadelig hvis absorbert gjennom huden. Kan forårsake hudirritasjon.
Øyne	Forårsaker øyenirritasjon.
Inntak	Farlig ved svelging.
Målorganer	Lunger, Blod, Nyre, Lever, Sentralnervesystem,

## 12. MILJØOPPLYSNINGER

#### Opplysninger om eliminering (persistanse og nedbrytbarhet)

Biologisk nedbrytbarhet	Bemerkning: ingen data tilgjengelig
-------------------------	-------------------------------------

#### Økotoksikologiske effekter

Giftighet for fisk	LC50 - Pimephales promelas (Storhodet ørekyte) - 1.640,00 mg/l - 96 t
Toksisitet til dafnia og andre virvelløse dyr som lever i vann.	EC50 - Daphnia magna - 3.600,00 mg/l - 48 t NOEC - Daphnia magna - 640 mg/l - 14 d

Videre informasjon om økologi  
ingen data tilgjengelig

## 13. FJERNING AV KJEMIKALIEAVFALL

#### Produkt

Kontakt en godkjent behandlings- eller mottaksstasjon for farlig avfall for destruksjon av dette materialet. Brennes i en kjemisk forbrenningssovn utstyrt med etterbrenningskammer og skrubber. Vær ekstra forsiktig ved antenning da dette materialet meget brannfarlig. Overhold alle statlige, kommunale og lokale miljøbestemmelser.

Forurenset emballasje  
Avhend på samme måte som ubrukt produkt.

#### 14. OPPLYSNINGER OM TRANSPORT

##### ADR/RID

UN-Nr.: 1648      Klasse: 3      Emballasjegruppe: II  
Varenavnet: ACETONITRILE

##### IMDG

UN-No.: 1648      Class: 3      Packing group: II      EMS-No: F-E, S-D  
Proper shipping name: ACETONITRILE  
Marine pollutant: No

##### IATA

UN-No.: 1648      Class: 3      Packing group: II  
Proper shipping name: Acetonitrile

#### 15. OPPLYSNINGER OM LOVER OG FORSKRIFTER

##### Merking i henhold til EF direktiver

##### EF merking

##### Faresymboler

F      Meget brannfarlig  
Xn      Helsekadelig

##### R-setning(er)

R11      Meget brannfarlig.  
R20/21/22      Farlig ved innånding, hudkontakt og svelging.  
R36      Irriterer øynene.

##### S-setning(er)

S16      Holdes vekk fra antenneskilder - Røyking forbudt.  
S36/37      Bruk egnede verneklær og vernehansker.

#### 16. ANDRE OPPLYSNINGER

##### Utfyllende opplysninger

Copyright (2007): Sigma-Aldrich. Det er kun tillatt å lage ubegrenset papirkopier til internt bruk. Informasjonen over antas å være korrekt, men inkluderer ikke nødvendigvis all informasjon om stoffet og skal derfor bare brukes som veiledning. Sigma-Aldrich skal ikke bli holdt ansvarlig for noen som helst skade som følge av håndtering eller kontakt med produktet over. Se baksiden på fakturaen eller pakkeseddelen for ytterligere betingelser for salg.

## Appendix B Utbytte HBIW

### B.1 Runde 1, august 2004

Mer informasjon inkludert analyser av produktene er gitt i referansene 4-7.

Forsøk nr.	Benzylamin (g)	Glyoksal* (g)	Løsningsmiddel	Katalysator	Utbytte	
					(g)	(%)
FFI-1	117.9	72.5	1.1 l Acetonitril 100 ml vann	4.6 g HCOOH	91.3	77.3
FFI-2	113.2	72.5	1.0 l Acetonitril	5.1 g 65 % HNO <sub>3</sub>	96.0	81.2
FFI-3	112.5	72.5	1.0 l Acetonitril	5.1 g 65 % HNO <sub>3</sub>	92.7	78.4
FFI-4	112.5	72.5	1.0 l Acetonitril	5.1 g 65 % HNO <sub>3</sub>	99.7	84.4
FFI-5	112.5	72.5	1.0 l Acetonitril	5.1 g 65 % HNO <sub>3</sub>	99.5	84.2
<b>Gjennomsnitt</b>					<b>95.84±3.83</b>	<b>81.1±3.2</b>
<b>Totalt</b>					<b>479.2</b>	

\*40% vannløsning

Tabell App 1 Benyttet råvarer og betingelse for fremstilling av HBIW i innledende forsøk

### B.2 Runde 2, september 2005

Referanse 6 og 7 gir mer informasjon om analyser av produktene.

Forsøk nr	Glyoksal (mol)	Acetonitril (ml)	Tilsetningstid (min)	Temperatur (°C)	Reaksjonstid (timer)	Utbytte	
						(g)	(%)
1	0.5	500	50	22 -33	20	94.19	79.7
2	0.5	500	40	18-32	5	93.90	79.5
3	1.0	1000	30	25-40	18	193.87	81.9
4	1.0	1000	90	24-33	6	188.17	79.7
5	1.0	900	60	25-36	21	195.46	82.7
6	1.0	900	65	24-31	20	191.79	81.2
<b>Gjennomsnitt</b>						<b>192.32±3.15</b>	<b>80.8±1.3</b>
<b>Totalt</b>						<b>957.38</b>	

\*HBIW = 708.94 g/mol.

Tabell App 2 Utbyttet for forsøkene på optimalisering av reaksjonsbetingelsene for fremstilling av HBIW.

### B.3 Runde 3, april-juni 2006

Syntese nr	Glyksal (g)	Benzylamin (g)	Salpetersyre (g)	Acetonitril (g)	Utbytte HBIW	
					(g)	(%)
1	145	225	10.2	1000	192.46	81.5
2	145	225	10.2	1000	187.42	79.4
3	145	225	10.4	950	193.36	81.8
4	145	225	10.2	1000	198.15	83.7
5	145	225	10.2	1000	188.23	79.7
6	145	225	10.2	1000	193.63	81.9
7	145	225	10.2	1000	202.69	85.8
8	145	225	10.2	1000	197.98	83.8
9	145	225	10.2	1000	199.89	84.6
10	145	225	10.2	1000	196.49	83.2
11	145	225	10.2	1000	198.31	83.9
12	145	225	10.2	1000	199.53	84.4
13	145	225	10.2	1000	199.17	84.3
14	145	225	10.2	1000	194.39	82.2
15	145	225	10.2	1000	194.99	82.5
	<b>Gjennomsnitt</b>				<b>195.78<sup>+4.30</sup></b>	<b>82.9<sup>+1.8</sup></b>
	<b>Totalt</b>				<b>2936.69</b>	

Tabell App 3 Tabellen viser benyttet mengder av inngående råvarer i produksjon av HBIW samt oppnådd utbyttet.



#### B.4 Runde 4, november 2006 - januar 2007

Syntesene av HBIW i tabell App 4 ble gjennomført med 145 g 40 % vannløsning av glyksal, 225 g benzylamin, 10.2 g salpetersyre og 1000 ml acetonitril som løsemiddel i en standard prosess (9).

Produksjonsdato	Glass + produkt (g)	Tomt glass (g)	Utbytte HBIW		
			(g)	(%) <sup>1</sup>	(%) <sup>2</sup>
21/11-06	295.72	112.29	183.43	73.94	77.70
22/11-06	284.74	104.10	180.64	72.81	76.52
24/11-06	306.95 <sup>*</sup>	112.26	194.69	78.48	82.47
27/11-06	312.08	112.29	199.79	80.53	84.63
28/11-06	302.78	104.20	198.58	80.04	84.12
29/11-06	297.55	112.26	185.29	74.69	78.49
30/11-06	297.65	104.10	193.55	78.02	81.98
5/12-06	299.87	102.34	197.53	79.62	83.67
6/12-06	300.05	104.20	195.85	78.94	82.96
7/12-06	309.60	112.54	197.06	79.43	83.47
11/12-06	294.39	109.19	185.20	74.65	78.45
12/12-06	296.39	109.19	187.20	75.46	79.30
13/12-06	301.78	111.30	190.48	76.78	80.68
14/12-06	297.26	104.10	193.16	77.86	81.82
15/12-06	290.27	102.34	187.93	75.75	79.60
16/12-06	292.99	109.54	183.45	73.94	77.71
17/12-06	291.47	104.40	187.07	75.40	79.24
3/1-07	296.13	112.54	183.59	74.00	77.77
5/1-07	295.66	109.50	186.16	75.04	78.85
6/1-07	299.82	109.19	190.63	76.84	80.75
7/1-07	304.89	112.51	192.38	77.54	81.49
10/1-07	305.78	111.30	194.48	78.39	82.38
11/1-07	293.86	108.70	185.16	74.63	78.43
15/1-07	311.17	109.53	201.64	81.28	85.41
16/1-07	283.31	102.34	180.97	72.95	76.66
17/1-07	274.82	104.10	170.72	68.81	72.31
18/1-07	284.27	112.54	171.73	69.22	72.74
19/1-07	300.95	104.40	196.55	79.23	83.26
<b>Totalt</b>			<b>5294.91</b>		
<b>Gjennomsnitt</b>			<b>189.10</b>	<b>76.22</b>	<b>80.10</b>
<b>Standard avvik</b>			<b>7.80</b>	<b>3.14</b>	<b>3.30</b>

<sup>1</sup>Beregnet ut fra 225 g benzylamin, <sup>2</sup> Beregnet ut fra Glyksal. <sup>\*</sup> Ny benzylamin.

Tabell App 4 Tabellen viser utbytte av HBIW for en serie synteser i samme skala.

## B.5 Runde 5, mai - juni 2007

Standard prosess for fremstilling (10) av HBIW for å kunne gjennomføre trinn 2 og 3 i fremstilling av CL-20.

Produksjonsdato	Benzylamin (g)	Salpetersyre (g)	40 wt.% Glyoksal (g)	Glass+ produkt (g)	Tomt glass (g)	Utbytte HBIW	
						(g)	(%)*
24-05-07	225.00	10.40	145.40	295.19	104.14	191.05	80.7
25-05-07	224.98	10.38	144.98	293.85	108.49	185.36	78.5
29-05-07	225.63	10.19	146.02	294.63	110.55	184.08	77.4
30-05-07	226.28	10.52	145.97	298.44	109.55	188.89	79.5
31-05-07	225.00	10.27	145.03	298.73	109.60	189.13	80.1
01-06-07	225.48	10.67	145.03	307.08	112.24	194.84	82.5
02-06-07	225.33	10.54	145.24	300.74	104.12	196.62	83.1
04-06-07	225.38	10.50	145.30	308.02	112.18	195.84	82.8
05-06-07	225.21	10.56	145.42	300.32	104.14	196.18	82.8
06-06-07	225.90	10.19	146.29	306.10	110.55	195.55	82.1
07-06-07	227.03	11.65	146.69	307.42	108.49	198.93	83.3
08-06-07	225.00	10.25	145.52	303.06	109.55	193.51	81.6
11-06-07	226.05	10.49	145.58	302.87	109.31	193.56	81.6
12-06-07	226.78	10.44	147.81	307.55	109.60	196.95	81.8
13-06-07	226.39	10.75	145.88	291.01	104.12	186.89	78.7
14-06-07	225.20	10.45	145.32	302.88	107.28	195.60	82.6
15-09-07	225.07	10.55	145.25	307.69	112.25	195.54	82.7
18-06-07	226.35	10.43	146.03	307.85	112.18	195.67	82.3
19-06-07	226.06	10.59	145.97	277.82	104.82	173.00	72.8
20-06-07	226.01	10.31	146.63	308.21	110.55	197.66	82.8
21-06-07	225.36	10.28	146.06	309.10	109.55	199.55	83.9
22-06-07	225.75	10.36	145.27	310.08	109.31	200.77	84.9
24-06-07	225.77	10.34	145.47	308.08	109.60	198.48	83.8
<b>Gjennomsnitt</b>						<b>193.20±6.32</b>	<b>81.4±2.6</b>
<b>Totalt</b>						<b>4443.65</b>	

\*Beregnet ut fra mengden glyoksal.

Tabell App 5 Tabellen viser benyttet mengder av inngående råvarer i produksjon av HBIW samt oppnådd utbyttet.

## B.6 Runde 6, august 2007

Produksjons- dato	Benzylamin (g)	Salpetersyre (g)	40 wt. % Glyoksal (g)	Glass+ produkt (g)	Tomt glass (g)	Utbytte HBIW	
						(g)	(%)*
01-08-07	225.84	10.41	146.10	304.90	108.50	196.40	82.5
02-08-07	225.16	10.40	146.22	302.58	102.38	200.20	84.1
03-08-07	227.00	10.54	146.38	303.50	108.73	194.77	81.7
06-08-07	226.71	10.42	145.76	300.57	112.24	188.33	79.3
07-08-07	226.60	10.65	146.21	302.39	109.56	192.83	81.0
08-08-07	225.57	10.12	145.94	300.96	109.28	191.68	80.6
09-08-07	225.45	10.26	145.70	305.97	109.54	196.43	82.8
10-08-07	229.83	10.27	147.73	305.55	107.46	198.09	82.3
13-08-07	225.40	10.69	146.31	309.16	109.60	199.56	83.7
14-08-07	225.64	10.62	145.85	303.03	104.14	198.89	83.7
15-08-07	225.62	10.41	146.50	302.73	109.00	193.73	81.2
16-08-07	226.68	10.24	146.06	301.51	107.26	194.25	81.7
17-08-07	225.17	10.45	145.10	307.92	110.56	197.36	83.5
20-08-07	225.75	10.69	146.42	305.48	109.25	196.23	82.3
21-08-07	225.92	10.38	145.58	305.83	109.51	196.32	82.8
22-08-07	225.95	10.51	145.73	302.89	107.40	195.49	82.4
23-08-07	225.44	10.60	145.57	307.70	112.29	195.41	82.4
<b>Gjennomsnitt</b>						<b>195.65<math>\pm</math>2.9</b>	<b>82.2<math>\pm</math>1.2</b>
<b>Totalt</b>						<b>3325.97</b>	

\*Beregnet ut fra 40 wt. % Glyoksal løsning.

*Tabell App 6 Tabellen viser benyttet mengder inngående råvarer i produksjon av HBIW samt oppnådd utbyttet.*

## B.7 Runde 7, februar - april 2008

Dato for produksjon	Benzylamin (g)	Salpetersyre (g)	40 wt% Glyksal (g)	Glass+ produkt (g)	Tomt glass (g)	Utbytte HBIW	
						(g)	(%)*
11-02-08	256.61	10.30	159.73	296.46	107.49	188.97	72.6
13-02-08	226.23	10.32	145.21	292.39	107.38	185.01	78.2
14-02-08	225.11	10.17	145.84	301.36	109.50	191.86	80.8
15-02-08	226.55	10.23	145.38	294.71	109.62	185.09	78.2
16-02-08	225.10	10.43	144.89	297.64	108.48	189.16	80.2
17-02-08	225.27	10.27	145.62	298.10	112.29	185.81	78.3
18-02-08	225.17	10.22	145.30	305.86	109.38	196.48	83.0
19-02-08	225.50	10.23	145.25	299.70	104.08	195.62	82.7
20-02-08	225.07	10.31	145.11	300.40	109.29	191.11	80.9
21-02-08	226.68	10.20	144.95	304.36	109.56	194.80	82.5
22-02-08	225.35	10.34	145.89	287.30	109.52	177.78	74.8
3-03-08	225.72	10.25	145.00	299.36	107.57	191.79	81.2
4-03-08	226.80	10.24	146.04	299.36	109.50	189.86	79.8
5-03-08	225.75	10.17	145.16	301.96	109.62	192.34	81.4
6-03-08	226.70	10.44	145.35	305.28	112.29	192.99	81.5
7-03-08	225.13	10.31	144.90	302.68	109.41	193.27	81.9
8-03-08	226.22	10.35	145.17	301.05	109.05	192.00	81.2
9-03-08	225.89	10.50	145.36	299.03	109.56	189.47	80.0
10-03-08	225.52	10.23	145.67	291.53	104.08	187.45	79.0
11-03-08	225.07	10.32	145.33	295.82	109.50	186.32	78.7
12-03-08	225.31	10.19	144.94	297.29	109.52	187.77	79.5
13-03-08	225.07	10.44	145.64	303.92	107.57	196.35	82.8
24-03-08	225.39	10.24	145.57	293.80	108.48	185.32	78.2
25-03-08	225.22	10.28	145.78	301.07	109.62	191.45	80.6
26-03-08	225.24	10.38	145.29	304.45	112.29	192.16	81.2
27-03-08	225.48	10.33	145.41	299.15	109.38	189.77	80.1
28-03-08	225.52	10.33	145.43	300.77	109.29	191.48	80.8
29-03-08	225.12	10.14	145.34	306.64	109.56	197.08	83.3
31-03-08	225.63	10.25	145.83	303.33	109.44	193.89	81.6
1-04-08	225.03	10.42	145.39	304.18	110.43	193.75	81.8
2-04-08	225.70	10.18	144.93	295.77	107.49	188.28	79.8
3-04-08	225.52	10.36	145.03	300.10	109.57	190.53	80.7
4-04-08	225.19	10.48	145.58	300.71	109.48	191.23	80.7
7-04-08	225.80	10.27	145.05	299.28	109.77	189.51	80.2
8-04-08	226.57	10.38	145.35	296.95	108.89	188.06	79.4
9-04-08	225.79	10.24	145.15	305.21	107.50	197.71	83.6
10-04-08	225.29	10.20	145.41	296.35	107.57	188.78	79.7
11-04-08	225.28	10.50	145.10	300.00	104.06	195.94	82.9
12-04-08	226.15	10.63	145.56	310.39	112.13	198.26	83.6
25-04-08	225.26	10.43	145.32	303.83	110.43	193.40	81.7
26-04-08	225.23	10.66	144.93	300.21	108.48	191.73	81.2
27-04-08	292.49	13.73	186.63	346.48	109.38	237.10	78.0
<b>Gjennomsnitt</b>						<b>191.02+4.15</b>	<b>80.7+1.8</b>
<b>Totalt</b>						<b>8066.73</b>	

\*Beregnet ut fra 40wt % Glyksal løsning.

Tabell App 7 Tabellen viser benyttet mengder inngående råvarer i produksjon av HBIW samt oppnådd utbyttet.

## Referanser

- 1) Arnold T. Nielsen, Caged polynitramine compound; US-A-5 693 794, patent granted Dec. 2, 1997, Filed Sep. 30, 1988.
- 2) Arnold T. Nielsen, Robin A. Nissan and David J. Vanderah, Clifford L. Coon, Richard D. Gilardi, Clifford F. George and Judith Flippen-Anderson (1990): Polyazapolycyclics by Condensation of Aldehydes with Amines. 2. Formation of 2,4,6,10,12-Hexabenzyl-2,4,6,8,10,12-hexaazatetracyclo[5.5.0.0<sup>59</sup>.0<sup>3,11</sup>]dodecanes from Glyoxal and Benzylamines. *J. Org. Chem.* **55**. 1459-1466.
- 3) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, DDP/FFI-WPR-04-01, 28 February 2004.
- 4) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, DDP/FFI-AR-04-01, 4 August 2004.
- 5) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, DDP/FFI-IR-05-01, 28 February 2005.
- 6) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, DDP/FFI-AR-05-01, 8 September 2005.
- 7) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, DDP/FFI-WPR-06-02, 1 March 2006.
- 8) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, DDP/FFI-WPR-06-03, 28 August 2006.
- 9) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, DDP/FFI-IR-07-02, 18 February 2007.
- 10) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, CN/FFI-AR-07-04, 3 September 2007.
- 11) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, CN/FFI-WPR-08-04, 12 March 2008.
- 12) Synthesis of Nitrocompounds for Use in Energetic Materials, EUCLID- CEPA 14- RTP14.10, CN/FFI-WPFR-08-05, 30 May 2008.