

SICHERHEITSDATENBLATT / SAFETY DATA SHEET (SDS)

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH), Anhang II — Verordnung (EU) 2020/878

Datum: 02.09.2026 | Version: 4 | DE

pentan

pentane

CAS 109-66-0

 C_5H_{12}

EC 203-692-4

MOLMASSE
72.15LOGP
3.4TPSA
0 Å²T. WRZ.
36.0869°C

GEFAHRENKLASSIFIZIERUNG (GHS / CLP)



Gefahr

H225 H304 H336 H411 EUH066

Umfang der Gefahrenklassen auf die harmonisierte Einstufung (CLP Anhang VI) beschränkt; Klassen außerhalb des harmonisierten Eintrags können eine Selbsteinstufung des Lieferanten erfordern (CLP Art. 4(3)) — mit dem Sicherheitsdatenblatt des Lieferanten prüfen.

1. Bezeichnung des Stoffs bzw. des Gemischs und des Unternehmens

1.1 Stoffname	pentan
1.1 IUPAC-Name	pentane
1.1 CAS-Nummer	109-66-0
1.1 EG-Nummer	203-692-4
1.1 PubChem CID	8003
1.1 InChIKey	OFBQJSOFQDEBGM-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CCCCC
1.1 Summenformel	C_5H_{12} ^[7]
1.1 Molmasse	72.15 g/mol ^[7]
1.1 Exakte Masse	72.0939 Da ^[7]

1.2 Verwendungen

Für Labor- und Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei der Herstellung von Lebensmitteln, Arzneimitteln oder Kosmetika ohne entsprechende Genehmigungen.

1.3 Angaben zum Lieferanten

REFERENCE COPY — NO
SUPPLIER DETAILS — NOT FOR
DISTRIBUTION

Supplier details are not included in this reference copy. The supplier placing the substance on the market must complete this section and remains responsible for the sheet under REACH. MolGod.org prepares documentation and is not the supplier of this substance.

1.4 Notrufnummer

Notruftelefon

+48 42 631 47 24

The number above is the Polish poison centre (CIT, Lodz, 24/7). It is NOT the poison centre designated for your country. Under Article 45 of Regulation (EC) No 1272/2008 the competent body is the centre designated in the country of placing on the market — consult it before use.

2. Mögliche Gefahren



Gefahr

Gefahrenhinweise (H) [3][4][10]

H225	Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar.
H304	Kann bei Verschlucken und Eindringen in die Atemwege tödlich sein.
H336	Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen.
H411	Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
EUH066	Wiederholter Kontakt kann zu spröder oder rissiger Haut führen.

Sicherheitshinweise (P) [3][4][10]

P210	Von Hitze, heißen Oberflächen, Funken, offenen Flammen und anderen Zündquellenarten fernhalten. Nicht rauchen.
P233	Behälter dicht verschlossen halten.
P240	Behälter und zu befüllende Anlage erden und Potentialausgleich herstellen.
P261	Einatmen von Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol vermeiden.
P271	Nur im Freien oder in gut belüfteten Räumen verwenden.
P273	Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
P280	Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P301+P310	BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/... anrufen.
P303+P361+P353	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT (oder dem Haar): Alle kontaminierten Kleidungsstücke sofort ausziehen.; Haut mit Wasser abwaschen oder duschen.
P304+P340	BEI EINATMEN: Die betroffene Person an die frische Luft bringen und für ungehinderte Atmung sorgen.
P312	Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/... anrufen.
P331	KEIN Erbrechen herbeiführen.
P370+P378	Bei Brand: ... zum Löschen verwenden.
P391	Verschüttete Mengen aufnehmen.
P403+P235	An einem gut belüfteten Ort aufbewahren.: Kühl halten.
P403+P233	An einem gut belüfteten Ort aufbewahren.: Behälter dicht verschlossen halten.
P405	Unter Verschluss aufbewahren.

Umfang der Gefahrenklassen auf die harmonisierte Einstufung (CLP Anhang VI) beschränkt; Klassen außerhalb des harmonisierten Eintrags können eine Selbsteinstufung des Lieferanten erfordern (CLP Art. 4(3)) — mit dem Sicherheitsdatenblatt des Lieferanten prüfen.

3. Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen

Stofftyp	Reinstoff
CAS-Nummer	109-66-0
EG-Nummer	203-692-4
Summenformel	C_5H_{12}
Konzentration	≥99% (typische Reinheit in Reagenzienqualität — durch die Spezifikation des Lieferanten zu bestätigen)
Clp index no	601-006-00-1

4. Erste-Hilfe-Maßnahmen



Einatmen

Betroffene Person an die frische Luft bringen. Für Ruhe sorgen. Bei Atemstillstand: künstliche Beatmung (nur qualifiziertes Personal). ^{[1][2][13]}

Hautkontakt

Kontaminierte Kleidung ausziehen. Haut mit Wasser und Seife spülen (mind. 15 Minuten). ^{[1][2][13]}

Augenkontakt

Augen mit fließendem Wasser spülen (mind. 15 Minuten). Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Bei anhaltender Reizung — augenärztliche Untersuchung. ^{[1][2][13]}

Verschlucken

KEIN Erbrechen herbeiführen (sofern nicht ärztlich angeordnet). Mund mit Wasser ausspülen. Einer bewusstlosen Person niemals etwas oral verabreichen. Giftnotruf Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7). Notruf: 112. ^{[1][2][13]}

Symptome und Wirkungen

Husten, Atemnot, Kopfschmerzen, Schwindel. ^{[3][10]}

Hinweise für den Arzt

Überprüfung erforderlich

Notrufnummern: CIT Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7) | Notruf: 112

5. Maßnahmen zur Brandbekämpfung

Geeignete Löschmittel	Alkoholbeständiger Schaum, Kohlendioxid (CO ₂), Löschpulver, Sprühwasser/Wasserdampf. ^{[1][2][13]}
Ungeeignete Löschmittel	Voller/kompakter Wasserstrahl (verspritzt und verteilt die brennende Flüssigkeit, die auf Wasser schwimmt). ^{[1][2][13]}
Besondere Gefahren	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO ₂ . ^[14]
Hinweise für die Brandbekämpfung	Umluftunabhängiges Atemschutzgerät (SCBA) verwenden. Vollschutzanzug. ^{[1][2][13]}
Flammpunkt	-49°C ^[7]
Selbstentzündungstemperatur	260°C ^[7]

6. Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

Persönliche Vorsichtsmaßnahmen	Persönliche Schutzausrüstung verwenden (siehe Abschnitt 8). Einatmen von Dämpfen vermeiden. ^{[1][2][13]}
Umweltschutzmaßnahmen	Nicht in die Kanalisation, das Grundwasser oder Oberflächengewässer gelangen lassen. ^{[1][2][13]}
Methoden für Rückhaltung und Reinigung	Auslauf eindämmen. Mit inertem Material aufnehmen (Sand, Vermiculit, Kieselgur). In dichte, gekennzeichnete Behälter sammeln. Nicht in die Kanalisation einleiten. Zündquellen entfernen; funkenfreies Werkzeug verwenden. ^{[1][2][13]}
Zugehörige Abschnitte	8; 13

7. Handhabung und Lagerung

Vorsichtsmaßnahmen	Im Abzug oder mit ausreichender Belüftung arbeiten. Essen, Trinken und Rauchen am Arbeitsplatz verboten. ^{[1][2][13]}
Lagertemperatur	Bei Raumtemperatur (15-25°C) oder gemäß Etikett lagern. ^{[1][2][13]}
Luftfeuchtigkeit	An einem trockenen Ort lagern (<60 % rF). ^{[1][2][13]}
Licht	Vor direkter Sonneneinstrahlung schützen. ^{[1][2][13]}
Unverträgliche Materialien	Starke Oxidationsmittel, Zündquellen, offene Flammen. ^[14]

8. Begrenzung und Überwachung der Exposition/Persönliche Schutzausrüstung

8.1 Zu überwachende Parameter

Arbeitsplatzgrenzwert — NDS (Polen)	Kein NDS-Wert (Arbeitsplatzgrenzwert) im verfügbaren Verzeichnis — vor Verwendung in der aktuellen MRPIPS-Verordnung überprüfen; nicht vom Fehlen eines Grenzwerts ausgehen.
OEL (EU)	Der EU-OEL-Wert wurde anhand des verfügbaren Datenbestands nicht überprüft — die IOELV/BOELV-Richtlinien prüfen; das Fehlen eines Wertes nicht voraussetzen.
DNEL	Keine Daten verfügbar.
PNEC	Keine Daten verfügbar.

8.2 Persönliche Schutzausrüstung (PSA) ^{[5][6][15]}



**Chemikalienbeständige
Schutzhandschuhe**
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
Nitril (min. 0.11 mm)



**Geschlossene
Schutzbrille oder
Korbbrille**
EN ISO 16321-1:2022 / EN
166:2001



Atemschutz
EN 14387:2004+A1:2008
Filter Typ AX
(niedrigsiedende
organische Dämpfe)



**Geschlossene
Sicherheitsschuhe mit
Zehenschutz**
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. Physikalische und chemische Eigenschaften

Eigenschaft (Pkt. 9.1)	Wert	Quelle
Aggregatzustand	Flüssigkeit	
Farbe	Keine Daten verfügbar.	
Geruch	Keine Daten verfügbar.	
pH-Wert (1%ige wässrige Lösung)	Nicht zutreffend	
Schmelzpunkt	-129.8°C [8] [7] ✓94%	nist+consensus, cache, pubchem_exp
Siedepunkt	36.0869°C [8] [7] ✓94%	nist+consensus, cache, pubchem_exp
Flammpunkt	-49°C (experimental data) [7]	pubchem_exp
Entzündbarkeit	Flam. Liq. 2 (H225) [3] [10]	
Untere und obere Explosionsgrenze	Keine Daten verfügbar.	
Dichte (20°C)	0.627 g/cm ³ [7] ✓86%	cache+consensus, pubchem_exp
Dampfdruck	56.795 kPa (426 mmHg, 20°C) (experimental data) [7]	pubchem_exp
Relative Dampfdichte	2.49 [18]	
Dynamische Viskosität	0.2224 mPa·s [7]	
Kinematische Viskosität	Keine Daten verfügbar.	
Brechungsindex n _D ²⁰	1.3575 (experimental data) [7]	
Selbstentzündungstemperatur	260°C (experimental data) [7]	
Zersetzungstemperatur	Nicht zutreffend	
Rozpuszcz. w wodzie	0.038 g/L, 25°C [7]	
Partikeleigenschaften	Nicht zutreffend (REACH 9.1(r))	
Verteilungskoeffizient n-Oktanol/Wasser (log-Wert)	3.4 [9]	
Molmasse	72.15 g/mol [7] ✓86%	pubchem, cache
Summenformel	C ₅ H ₁₂ [7] ✓86%	pubchem, cache
Lipinski-Regel (RO5)	PASS	

Where a property above reads "No data available", no measured value was found in the public sources consulted for this substance. The property has not been determined by MolGod.org and no value is inferred. "Not applicable" means the property has no meaning for this substance in the form supplied.

10. Stabilität und Reaktivität

Reaktivität	Stabil unter normalen Lager- und Handhabungsbedingungen.
Chemische Stabilität	Thermisch stabil unter empfohlenen Bedingungen.
Gefährliche Reaktionen	Keine gefährlichen Reaktionen unter normalen Bedingungen bekannt.
Zu vermeidende Bedingungen	Hohe Temperaturen, direkte Sonneneinstrahlung, Feuchtigkeit.
Unverträgliche Materialien	Starke Oxidationsmittel, Zündquellen, offene Flammen.
Zersetzungsprodukte	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO ₂ .

11. Toxikologische Angaben

LD50 (oral)	Keine Daten verfügbar.
-------------	------------------------

LD50 (dermal)	Keine Daten verfügbar.
LC50 (inhalativ)	LC50 364000 mg/m ³ (4 h) (Ratte) ^[7]
Hautreizung	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][10]}
Augenreizung	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][10]}
Sensibilisierung	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][10]}
Mutagenität	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][10]}
Karzinogenität	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][10]}
IARC-Einstufung (Karzinogenität)	Keine individuelle IARC-Monographie für diese CAS — dies ist keine Bestätigung des Fehlens von Karzinogenität (vgl. CLP/GHS-Einstufung in Abschnitt 2).
Reproduktionstoxizität	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][10]}
STOT — einmalige Exposition	Kategorie 3 (H336): Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen. ^{[3][10]}
STOT — wiederholte Exposition	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][10]}
Aspirationsgefahr	Kategorie 1 (H304): Kann bei Verschlucken und Eindringen in die Atemwege tödlich sein. ^{[3][10]}

12. Umweltbezogene Angaben

Gewässertoxizität	Harmonisierte Einstufung (CLP Anhang VI): H411 — Giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung (Gewässergefährdend – chronisch 2). Zahlenwerte LC ₅₀ /EC ₅₀ im verfügbaren Datenbestand nicht verifiziert — kein Fehlen von Toxizität annehmen.
Persistenz / biologische Abbaubarkeit	Keine Daten verfügbar.
Bioakkumulationspotenzial	log K _{ow} = 3.4 ^[9] . Geringes Bioakkumulationspotenzial (log K _{ow} < 4,5 — PBT/vPvB-Screening-Kriterium gemäß ECHA-Leitlinie R.11). ^{[16][17]}
Mobilität im Boden	Keine Daten verfügbar.
PBT-/vPvB-Beurteilung	Unzureichende Daten zur Bewertung von PBT/vPvB.
Endokrinschädliche Eigenschaften	Keine Informationen.

13. Hinweise zur Entsorgung

Entsorgungsverfahren	Zur Entsorgung an zugelassene Unternehmen gemäß nationalen und lokalen Vorschriften übergeben. Nicht in die Kanalisation einleiten.
Abfallschlüssel (EWC)	16 05 06* — Labor- und Analysechemikalien (np. chemische Reagenzien) zawierające substancje niebezpieczne. EWC-Code-Überprüfung erforderlich. ^[12]
Verpackungen	Gereinigte Verpackungen können recycelt werden. Kontaminierte Verpackungen sind als gefährlicher Abfall zu behandeln.

14. Angaben zum Transport



Klasse 3 — Entzündbare flüssige Stoffe

UN-Nummer	UN 1265 ^[11]
Richtiger Versandname	Pentanes ^[11]
Transportgefahrenklasse	3 ^[11]
Verpackungsgruppe	II ^[11]
Umweltgefahr	CLP-Einstufung (H411) weist auf Gewässergefährdung hin — Kennzeichnung als MEERESSCHADSTOFF möglich; nach ADR 2.2.9 / IMDG bestätigen ^[3]
Besondere Vorsichtsmaßnahmen	Als Gefahrgut gemäß der zugewiesenen Klasse behandeln (ADR/IMDG/IATA); die für diese Klasse geltenden Vorsichtsmaßnahmen anwenden.
KN/HS-Code	CN/HS-Code: Überprüfung in der Eurostat Combined Nomenclature erforderlich.
Anmerkungen	Transporteinstufung gemäß ADR / UN-Modellvorschriften (UN-Nummer, Klasse und Verpackungsgruppe oben). Die zum Versandzeitpunkt geltende Ausgabe von ADR/IMDG/IATA prüfen. ^[11]
Umweltgefährdend (Kennzeichen: Fisch und Baum)	Ja

15. Rechtsvorschriften

SVHC-Status	SVHC-Status anhand des verfügbaren Datensatzes nicht geprüft — aktuelle ECHA-Kandidatenliste prüfen; kein Fehlen annehmen. ^[1]
REACH Anhang XIV	Nicht gegen die ECHA-Zulassungsliste verifiziert — REACH Anhang XIV prüfen. ^[1]
REACH Anhang XVII	Im verfügbaren Anhang-XVII-Datensatz nicht bestätigt — vor dem Inverkehrbringen anhand der aktuellen ECHA-Liste prüfen; nicht vom Fehlen einer Beschränkung ausgehen. ^[1]

16. Sonstige Angaben

Rechtsstatus der Einstufung: harmonisiert gemäß CLP-Anhang VI — Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 (Stand: Ausstellungsdatum). Einträge mit einem Datum des Inkrafttretens nach 27.08.2026 wurden als zukünftig weggelassen (noch nicht anwendbar).

Daten automatisch aus öffentlichen Referenzdatenbanken aggregiert (PubChem, ECHA, NIST u. a.).

Wissenschaftliche Zitate (10)

- McKee R, Frank E, Heath J et al.. Toxicology of n-pentane (CAS no. 109-66-0).. Journal of applied toxicology : JAT (1998). DOI: 10.1002/(sici)1099-1263(199811/12)18:6<431::aid-jat524>3.0.co;2-l
- Joseph M. Anderson, Nicholas D. Measom, John A. Murphy et al.. Bridge Functionalisation of Bicyclo[1.1.1]pentane Derivatives. Angewandte Chemie International Edition (2021). DOI: 10.1002/anie.202106352
- n-Pentane 109-66-0. Wiley (2012). DOI: 10.1002/0471701343.sdp19947.pub2
- Vasyl Ripenko, Vadym Sham, Vitalina Levchenko et al.. Light-enabled scalable synthesis of bicyclo[1.1.1]pentane halides and their functionalizations. Nature Synthesis (2024). DOI: 10.1038/s44160-024-00637-y
- Marjan Goodarzi, Iskander Tlili, Hazim Moria et al.. Boiling heat transfer characteristics of graphene oxide nanoplatelets nano-suspensions of water-perfluorohexane (C6F14) and water-n-pentane. Alexandria Engineering Journal (2020). DOI: 10.1016/j.aej.2020.08.003

Volltext der H-Sätze

H225	Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar.
H304	Kann bei Verschlucken und Eindringen in die Atemwege tödlich sein.
H336	Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen.
H411	Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.

Volltext der P-Sätze

P210	Von Hitze, heißen Oberflächen, Funken, offenen Flammen und anderen Zündquellenarten fernhalten. Nicht rauchen.
P233	Behälter dicht verschlossen halten.
P240	Behälter und zu befüllende Anlage erden und Potentialausgleich herstellen.
P261	Einatmen von Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol vermeiden.
P271	Nur im Freien oder in gut belüfteten Räumen verwenden.
P273	Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
P280	Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P301+P310	BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/... anrufen.
P303+P361+P353	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT (oder dem Haar): Alle kontaminierten Kleidungsstücke sofort ausziehen.; Haut mit Wasser abwaschen oder duschen.
P304+P340	BEI EINATMEN: Die betroffene Person an die frische Luft bringen und für ungehinderte Atmung sorgen.
P312	Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/... anrufen.
P331	KEIN Erbrechen herbeiführen.
P370+P378	Bei Brand: ... zum Löschen verwenden.
P391	Verschüttete Mengen aufnehmen.
P403+P235	An einem gut belüfteten Ort aufbewahren.: Kühl halten.
P403+P233	An einem gut belüfteten Ort aufbewahren.: Behälter dicht verschlossen halten.
P405	Unter Verschluss aufbewahren.
P501	Inhalt/Behälter ... zuführen.

Abkürzungen

ADR	Europäisches Übereinkommen über die internationale Beförderung gefährlicher Güter auf der Straße
ATE	Schätzwert Akuter Toxizität (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (Verordnung (EG) 1272/2008)
CMR	Karzinogen, mutagen, reproduktionstoxisch
DNEL	Abgeleitete Expositionshöhe ohne Beeinträchtigung (DNEL)
EC	European Community number
EPI	Persönliche Schutzausrüstung
GHS	Global Harmonisiertes System (GHS)
IATA	Internationaler Luftverkehrsverband (IATA)
IMDG	Internationaler Code für die Beförderung gefährlicher Güter mit Seeschiffen (IMDG)
SDB	Sicherheitsdatenblatt (Safety Data Sheet)
LC50	Letale Konzentration, 50 % (Lethal Concentration)
LD50	Letale Dosis, 50 % (Lethal Dose)
NDS	Maximal zulässige Konzentration (Arbeitsplatz, PL)
NDSch	Kurzzeitgrenzwert (PL)
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistent, bioakkumulierbar und toxisch
PNEC	Abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (PNEC)

REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Verordnung (EG) 1907/2006)
SDS	Safety Data Sheet
STOT	Spezifische Zielorgan-Toxizität (STOT)
SVHC	Besonders besorgniserregender Stoff (SVHC)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Sehr persistent und sehr bioakkumulierbar

Versionshistorie

v4 (27.08.2026)	Erstellt auf Grundlage der harmonisierten ECHA-Einstufung (Anhang VI zur CLP, ATP 23).
------------------------	--

Referenzen

- [1] EP und Rat. Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH). Art.31, Anhang II. ABl. EU L 396/2006. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj> Accessed: 2026-08-27.
- [2] Europäische Kommission. Verordnung (EU) 2020/878 — Änderung von Anhang II REACH. ABl. EU L 203/2020. Ab 01.01.2023. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj> Accessed: 2026-08-27.
- [3] EP und Rat. Verordnung (EG) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. ABl. EU L 353/2008. (2026-07-07) URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/oj> Accessed: 2026-08-27.
- [4] United Nations. GHS Rev.9. ST/SG/AC.10/30/Rev.9. New York and Geneva: United Nations, 2021. URL: <https://unece.org/transport/dangerous-goods/ghs-rev9-2021> Accessed: 2026-08-27.
- [5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/72424.html> Accessed: 2026-08-27.
- [6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/51021.html> Accessed: 2026-08-27.
- [7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/8003>
- [8] NIST. Chemistry WebBook, SRD 69. National Institute of Standards and Technology. URL: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=109-66-0>
- [9] Rumble, J.R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 105th ed. Boca Raton: CRC Press, 2024. URL: <https://hbcpc.chemnetbase.com>
- [10] ECHA. European Chemicals Agency — harmonised classification inventory (CLP Annex VI). URL: <https://echa.europa.eu>
- [11] UNECE. European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road (ADR), 2025 edition (ECE/TRANS/352). Geneva: United Nations. URL: <https://unece.org/adr>
- [12] European Commission. Decision 2000/532/EC establishing a list of wastes (European Waste Catalogue). OJ EU L 226/3. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dec/2000/532/oj>
- [13] European Chemicals Agency (ECHA). Guidance on the Compilation of Safety Data Sheets. Version 4.0. Helsinki: European Chemicals Agency, 2020. URL: https://echa.europa.eu/documents/10162/2324906/sds_en.pdf
- [14] Urben, P.G., ed. Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards. 8th ed. Oxford: Academic Press.
- [15] CEN. Personal protective equipment standards (EN ISO 374-1, EN 166, EN 149, EN 14387, EN ISO 20345). Brussels: European Committee for Standardization.
- [16] ECHA. Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment, Chapter R.11: PBT/vPvB Assessment. Helsinki: European Chemicals Agency. URL: <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment>
- [17] European Parliament and Council. Regulation (EC) No 1907/2006 (REACH), Annex XIII — Criteria for the identification of PBT and vPvB substances. OJ EU L 396/2006 (consolidated). URL: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:02006R1907-20140410>
- [18] MOL-GOD. Value obtained by calculation from the molecular formula/molecular weight (the specific quantity and its formula are indicated at the respective field). Calculated value, not an experimental measurement. URL: <https://www.nist.gov/pml/atomic-weights-and-isotopic-compositions-relative-atomic-masses>
- [19] Verordnung MRiPS vom 12.06.2018 — NDS/NDN. GBl. 2024 Pos. 1017. URL: <https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017> Accessed: 2026-08-27.

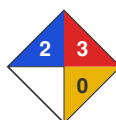
Externe Links

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=109-66-0>
 Wikidata: <https://www.wikidata.org/wiki/Q150429>
 ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL16102

ADMET / Drug-likeness



NFPA 704 (ergänzende Information — NFPA/USA-System; kein vorgeschriebener Bestandteil eines EU-Sicherheitsdatenblatts nach REACH Anhang II)



Rechtlicher Hinweis: Dieses Dokument wurde automatisch aus Daten von PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC), Wikidata und anderen öffentlichen Datenbanken erstellt. Es ERSETZT KEIN zugelassenes Sicherheitsdatenblatt (SDB) gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH). Überprüfen Sie die Daten vor der Verwendung des Stoffes anhand des aktuellen SDB des Herstellers.

Generator: Dokument automatisch erstellt auf Grundlage der harmonisierten ECHA-Einstufung (Anhang VI zur CLP) und öffentlicher physikalisch-chemischer Datenbanken.

Autor: www.MolGod.org — Plattform für automatisierte Sicherheitsdatenblätter (SDB).

Ausgabedatum: 02.09.2026 | Dokumentversion: 4

WORKING
DRAFT
工作草案