

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

Hexane

hexane

CAS 110-54-3

 C_6H_{14}

EC 203-777-6

MOLMASSE
86.18LOGP
3.9TPSA
0 Å²T. WRZ.
68.7771°C

GEFAHRENKLASSIFIZIERUNG (GHS / CLP)



Gefahr

H225 H361f H304 H373 H315 H336 H411

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	Hexane
1.1 IUPAC-Name	hexane
1.1 CAS-Nummer	110-54-3
1.1 EG-Nummer	203-777-6
1.1 PubChem CID	8058
1.1 InChIKey	VLKZOEYOYAKHREP-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CCCCC
1.1 Summenformel	C_6H_{14} ^[7]
1.1 Molmasse	86.18 g/mol ^[7]
1.1 Exakte Masse	86.1096 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

GHS:



PSA:



Verbote:



Gefahr

Gefahrenhinweise (H) [3][4][12]

H225	Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar.
H361f	Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.
H304	Kann bei Verschlucken und Eindringen in die Atemwege tödlich sein.
H336	Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen.
H373	Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition.
H315	Verursacht Hautreizungen.
H411	Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.

Sicherheitshinweise (P) [3][4][12]

P201	Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.
P202	Vor Gebrauch alle Sicherheitshinweise lesen und verstehen.
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.
P260	Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen.
P264	Nach Gebrauch gründlich waschen.
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.
P302+P352	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit viel Wasser waschen.
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.
P308+P313	BEI Exposition oder falls betroffen: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.

P312	Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/... anrufen.
P314	Bei Unwohlsein ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P331	KEIN Erbrechen herbeiführen.
P332+P313	Bei Hautreizung: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
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.

HINWEIS: CMR-Stoff — die Beschäftigung schwangerer und stillender Frauen mit gesundheitsschädlichen Arbeiten ist verboten (polnisches Arbeitsgesetzbuch Art. 176 § 1; Verordnung des Ministerrats vom 3. April 2017, GBl. 2017 Pos. 796). ^{[17][18]}

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	110-54-3
EG-Nummer	203-777-6
Summenformel	C ₆ H ₁₄
Konzentration	≥99% (typische Reinheit in Reagenzienqualität — durch die Spezifikation des Lieferanten zu bestätigen)
Clp index no	601-037-00-0
Specyficzne stężenia graniczne / M-współczynnik (CLP Zał. VI Tab.3)	SCL: H373: C ≥ 5 % ^[3]

4. Erste-Hilfe-Maßnahmen



Einatmen

Betroffene Person an die frische Luft bringen. Für Ruhe sorgen. Bei Atemstillstand: künstliche Beatmung (nur qualifiziertes Personal). ^{[1][2][15]}

Hautkontakt

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

Augenkontakt

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

Verschlucken

KEIN Erbrechen herbeiführen (sofern nicht ärztlich angeordnet). Mund mit Wasser ausspülen. Einer bewussten Person niemals etwas oral verabreichen. Giftnotruf Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7). Notruf: 112. ^{[1][2][15]}

Symptome und Wirkungen

Husten, Atemnot, Kopfschmerzen, Schwindel; Rötung und Reizung der Haut. ^{[3][12]}

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/Wassernebel. ^{[1][2][15]}
Ungeeignete Löschmittel	Voller/kompakter Wasserstrahl (verspritzt und verteilt die brennende Flüssigkeit, die auf Wasser schwimmt). ^{[1][2][15]}
Besondere Gefahren	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO ₂ . ^[16]
Hinweise für die Brandbekämpfung	Umluftunabhängiges Atemschutzgerät (SCBA) verwenden. Vollschutzanzug. ^{[1][2][15]}
Flammpunkt	-22°C ^[7]
Selbstentzündungstemperatur	225°C ^[7]

6. Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

Persönliche Vorsichtsmaßnahmen	Persönliche Schutzausrüstung verwenden (siehe Abschnitt 8). Einatmen von Dämpfen vermeiden. ^{[1][2][15]}
Umweltschutzmaßnahmen	Nicht in die Kanalisation, das Grundwasser oder Oberflächengewässer gelangen lassen. ^{[1][2][15]}
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][15]}
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][15]}
Lagertemperatur	Bei Raumtemperatur (15-25°C) oder gemäß Etikett lagern. ^{[1][2][15]}
Luftfeuchtigkeit	An einem trockenen Ort lagern (<60 % rF). ^{[1][2][15]}
Licht	Vor direkter Sonneneinstrahlung schützen. ^{[1][2][15]}
Unverträgliche Materialien	Starke Oxidationsmittel, Zündquellen, offene Flammen. ^[16]

8. Begrenzung und Überwachung der Exposition/Persönliche Schutzausrüstung

8.1 Zu überwachende Parameter

Arbeitsplatzgrenzwert — NDS (Polen)	NDS = 72 mg/m ³ (TWA) — Rozp. MRiPS Dz.U.2024 poz.1017 ^[26]
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.
PNEL	Keine Daten verfügbar.

8.2 Persönliche Schutzausrüstung (PSA) ^{[5][6][19]}



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 A2 (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	-95.32°C [8] [7][24] ✓94%	nist+consensus, cache, pubchem_exp
Siedepunkt	68.7771°C [8] [7][24] ✓94%	nist+consensus, cache, pubchem_exp
Flammpunkt	-22°C (experimental data) [7]	pubchem_exp
Entzündbarkeit	Flam. Liq. 2 (H225) [3][12]	
Untere und obere Explosionsgrenze	1–8.9 % obj. [24]	
Dichte (20°C)	0.6595 g/cm ³ [7][24] ✓86%	cache+consensus, pubchem_exp
Dampfdruck	15.999 kPa (120 mmHg, 20°C) [7][24]	pubchem_exp
Relative Dampfdichte	2.97 [23]	
Dynamische Viskosität	0.377 mPa·s [7]	
Kinematische Viskosität	Keine Daten verfügbar.	
Brechungsindex n_D²⁰	1.3727 (experimental data) [7]	
Selbstentzündungstemperatur	225°C [7]	
Zersetzungstemperatur	Nicht zutreffend	
Oberflächenspannung	17.89 mN/m [9]	
Rozpuszcz. w wodzie	0.013 g/L, 20°C [7]	
Partikeleigenschaften	Nicht zutreffend (REACH 9.1(r))	
Verteilungskoeffizient n-Oktanol/Wasser (log-Wert)	3.9 [25]	
Molmasse	86.18 g/mol [7] ✓86%	pubchem, cache
Summenformel	C ₆ H ₁₄ [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)	25000 mg/kg (Ratte) ^[10]
LD50 (dermal)	Keine Daten verfügbar.
LC50 (inhalativ)	LC50 169000 mg/m ³ (Ratte) ^{[11][12]}
Hautreizung	Kategorie 2 — Hautreizung.
Augenreizung	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][12]}
Sensibilisierung	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][12]}
Mutagenität	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][12]}
Karzinogenität	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) ^{[3][12]}
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	Kategorie 2 (harmonisierte Einstufung, Anhang VI zur CLP).
STOT — einmalige Exposition	Kategorie 3 (H336): Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen. ^{[3][12]}
STOT — wiederholte Exposition	Kategorie 2 (H373): Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. ^{[3][12]}
Aspirationsgefahr	Kategorie 1 (H304): Kann bei Verschlucken und Eindringen in die Atemwege tödlich sein. ^{[3][12]}

12. Umweltbezogene Angaben

Gewässertoxizität	Harmonisierte Einstufung (CLP Anhang VI): H411 — Giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung (Gewässergefährdend – chronisch 2). LC ₅₀ (Fische): 2.5 mg/L (Pimephales promelas, 96 h) ^[22]
Persistenz / biologische Abbaubarkeit	Keine Daten verfügbar.
Bioakkumulationspotenzial	log K _{ow} = 3.9. Geringes Bioakkumulationspotenzial (log K _{ow} < 4,5 — PBT/vPvB-Screening-Kriterium gemäß ECHA-Leitlinie R.11). ^{[20][21]}
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. ^[14]
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 1208 ^[13]
Richtiger Versandname	Hexanes ^[13]
Transportgefahrenklasse	3 ^[13]
Verpackungsgruppe	II ^[13]
Umweltgefahr	CLP-Einstufung (H411) weist auf Gewässergefährdung hin — Kennzeichnung als MEERECSCHADSTOFF 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. ^[13]
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)

et al.. Assessment of CPME as Sustainable Low VOC Alternative to Hexane: Optimization of Extraction Efficiency and Bioactive Compound Yield from Fenugreek Seed Oil Using Computational and Experimental Methods.. (2024). DOI: 10.3390/foods13233899

et al.. Confined growth of UiO-66 into ultrahigh-loading membranes for efficient hexane isomer separation.. (2025). DOI: 10.1039/d5sc04212g

Api AM, Belsito D, Botelho D et al.. RIFM fragrance ingredient safety assessment, n-hexane, CAS Registry Number 110-54-3.. Food and chemical toxicology : an international journal published for the British Industrial Biological Research Association (2022). DOI: 10.1016/j.fct.2022.112973

et al.. Comparative metabolic profiling, enzyme inhibitory activities, and in-silico analysis of the hexane extract and the hydrodistilled oil of Boswellia serrata.. (2026). DOI: 10.1371/journal.pone.0348178

et al.. Extraction of Phospholipids From Crude Rapeseed Oil by *n*-Hexane/Alcohol System: Effects of Solvent Composition on Extraction Performance and Oil Quality.. (2026). DOI: 10.1002/fsn3.71866

Volltext der H-Sätze

H225	Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar.
H361f	Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.
H304	Kann bei Verschlucken und Eindringen in die Atemwege tödlich sein.
H336	Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen.
H373	Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition.
H315	Verursacht Hautreizungen.
H411	Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.

Volltext der P-Sätze

P201	Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.
------	--

P202	Vor Gebrauch alle Sicherheitshinweise lesen und verstehen.
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.
P260	Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen.
P264	Nach Gebrauch gründlich waschen.
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.
P302+P352	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit viel Wasser waschen.
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.
P308+P313	BEI Exposition oder falls betroffen: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P312	Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/... anrufen.
P314	Bei Unwohlsein ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P331	KEIN Erbrechen herbeiführen.
P332+P313	Bei Hautreizung: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
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/8058>
- [8] NIST. Chemistry WebBook, SRD 69. National Institute of Standards and Technology. URL: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=110-54-3>
- [9] Reid, R.C., Prausnitz, J.M., Poling, B.E. The Properties of Gases and Liquids. 4th ed. New York: McGraw-Hill, 1987.
- [10] NIOSH. Registry of Toxic Effects of Chemical Substances (RTECS). Cincinnati: NIOSH. URL: <https://www.cdc.gov/niosh/rtecs>
- [11] ECHA. REACH Registration Dossier (registered substance, acute toxicity study record). Helsinki: European Chemicals Agency. URL: <https://echa.europa.eu/registration-dossier>
- [12] ECHA. European Chemicals Agency — harmonised classification inventory (CLP Annex VI). URL: <https://echa.europa.eu>
- [13] 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>
- [14] 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>
- [15] 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
- [16] Urben, P.G., ed. Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards. 8th ed. Oxford: Academic Press.
- [17] Act of 26 June 1974 — Labour Code (Poland), Art. 176 § 1. Journal of Laws 2023 item 1465. URL: <https://isap.sejm.gov.pl>
- [18] Council of Ministers of the Republic of Poland. Regulation of 3 April 2017 on the list of arduous, hazardous or health-harmful work for pregnant and breastfeeding women. Journal of Laws 2017 item 796. URL: <https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20170000796>
- [19] CEN. Personal protective equipment standards (EN ISO 374-1, EN 166, EN 149, EN 14387, EN ISO 20345). Brussels: European Committee for Standardization.
- [20] 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>
- [21] 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>
- [22] U.S. EPA. ECOTOX Knowledgebase. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. URL: <https://cfpub.epa.gov/ecotox/>
- [23] 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>
- [24] DECHEMA, PTB, and BAM. CHEMSAFE - Database of Evaluated Safety Characteristics for the Avoidance of Explosions. Frankfurt am Main: DECHEMA e.V.; Braunschweig/Berlin: Physikalisch-Technische Bundesanstalt and Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung. URL: <https://www.chemsafe.ptb.de>
- [25] Sangster, J. "Octanol-Water Partition Coefficients of Simple Organic Compounds." Journal of Physical and Chemical Reference Data 18, no. 3 (1989): 1111-1229. URL: <https://doi.org/10.1063/1.555833>
- [26] 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=110-54-3>
 Wikidata: <https://www.wikidata.org/wiki/Q150440>
 ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL15939

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