# SICHERHEITSDATENBLATT / SAFETY DATA SHEET (SDS)

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

Datum: 18.10.2026 | Version: 3 | DE

## hexamethylenediamine

*hexane-1,6-diamine*

**CAS 124-09-4**

$C_6H_{16}N_2$ | EC 204-679-6

| MOLMASSE | LOGP |
|---|---|
| 116.20 | -0.2 |
| **TPSA** | **T. WRZ.** |
| 52 Å² | 204.7308°C |

### GEFAHRENKLASSIFIZIERUNG (GHS / CLP)



**Gefahr**

H312 | H302 | H335 | H314

*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** | hexamethylenediamine |
| **1.1 IUPAC-Name** | hexane-1,6-diamine |
| **1.1 CAS-Nummer** | 124-09-4 |
| **1.1 EG-Nummer** | 204-679-6 |
| **1.1 PubChem CID** | 16402 |
| **1.1 InChIKey** | NAQMVNRVTILPCV-UHFFFAOYSA-N |
| **1.1 SMILES** | C(CCCN)CCN |
| **1.1 Summenformel** | $C_6H_{16}N_2$ [7] |
| **1.1 Molmasse** | 116.20 g/mol [7] |
| **1.1 Exakte Masse** | 116.1313 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** | 112 (EU-wide emergency number) |

Contact the poison centre designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).

## 2. Mögliche Gefahren

**GHS:**



**PSA:**



**Verbote:**



**Gefahr**

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

| | |
|---|---|
| **H312** | Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt. |
| **H302** | Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. |
| **H335** | Kann die Atemwege reizen. |
| **H314** | Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden. |

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

| | |
|---|---|
| **P260** | Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen. |
| **P264** | Nach Gebrauch gründlich waschen. |
| **P270** | Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen. |
| **P271** | Nur im Freien oder in gut belüfteten Räumen verwenden. |
| **P280** | Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen. |
| **P301+P312** | BEI VERSCHLUCKEN: Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/… anrufen. |
| **P301+P330+P331** | BEI VERSCHLUCKEN: Mund ausspülen.; KEIN Erbrechen herbeiführen. |
| **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. |
| **P305+P351+P338** | BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser ausspülen.; Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter ausspülen. |
| **P310** | Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/… anrufen. |
| **P312** | Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/… anrufen. |
| **P321** | Besondere Behandlung (siehe … auf diesem Kennzeichnungsetikett). |
| **P330** | Mund ausspülen. |
| **P363** | Kontaminierte Kleidung vor erneutem Tragen waschen. |
| **P403+P233** | An einem gut belüfteten Ort aufbewahren.: Behälter dicht verschlossen halten. |

WORKING DRAFT · 工作草案

| | |
|---|---|
| **P405** | Unter Verschluss aufbewahren. |
| **P501** | Inhalt/Behälter … zuführen. |

**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** | 124-09-4 |
| **EG-Nummer** | 204-679-6 |
| **Summenformel** | $C_6H_{16}N_2$ |
| **Konzentration** | ≥99% (typische Reinheit in Reagenzienqualität — durch die Spezifikation des Lieferanten zu bestätigen) |
| **Clp index no** | 612-104-00-9 |

## 4. Erste-Hilfe-Maßnahmen



### Einatmen

Betroffene Person an die frische Luft bringen. Für Ruhe sorgen. Bei Atemstillstand: künstliche Beatmung (nur qualifiziertes Personal). [1][2][12]

### Hautkontakt

Kontaminierte Kleidung ausziehen. Haut mit Wasser und Seife spülen (mind. 15 Minuten). Sofort einen Arzt rufen. [1][2][12]

### Augenkontakt

Augen mit fließendem Wasser spülen (mind. 15 Minuten). Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Bei anhaltender Reizung — augenärztliche Untersuchung. [1][2][12]

### Verschlucken

Do NOT induce vomiting (unless directed by a physician). Rinse mouth with water. Never give anything by mouth to an unconscious person. Emergency number: 112 (EU-wide). Contact the poison centre designated in your country (CLP Art. 45). [1][2][12]

### Symptome und Wirkungen

Übelkeit, Erbrechen, Durchfall; Husten, Atemnot, Kopfschmerzen, Schwindel; Rötung und Reizung der Haut. [3][10]

### Hinweise für den Arzt

Überprüfung erforderlich

**Notrufnummern: Notruf: 112 (EU-wide). Poison centre: as designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).**

WORKING DRAFT 工作草案

## 5. Maßnahmen zur Brandbekämpfung

| | |
|---|---|
| **Geeignete Löschmittel** | Löschmittel an die Umgebung anpassen. CO2, Pulver, Schaum. |
| **Ungeeignete Löschmittel** | Keine besonderen Einschränkungen. |
| **Besondere Gefahren** | Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO2, NOx. [13] |
| **Hinweise für die Brandbekämpfung** | Umluftunabhängiges Atemschutzgerät (SCBA) verwenden. Vollschutzanzug. |
| **Flammpunkt** | 85°C [7] |
| **Selbstentzündungstemperatur** | 420°C [7] |

## 6. Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

| | |
|---|---|
| **Persönliche Vorsichtsmaßnahmen** | Persönliche Schutzausrüstung verwenden (siehe Abschnitt 8). Einatmen von Staub vermeiden. [1][2][12] |
| **Umweltschutzmaßnahmen** | Nicht in die Kanalisation, das Grundwasser oder Oberflächengewässer gelangen lassen. [1][2][12] |
| **Methoden für Rückhaltung und Reinigung** | Mechanisch in geeignete Behälter aufnehmen. Absorption: Sand, Vermiculit, Kieselgur. Nicht trocken kehren (Staubbildung). [1][2][12] |
| **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][12] |
| **Lagertemperatur** | Bei Raumtemperatur (15-25°C) oder gemäß Etikett lagern. [1][2][12] |
| **Luftfeuchtigkeit** | An einem trockenen Ort lagern (<60 % rF). [1][2][12] |
| **Licht** | Vor direkter Sonneneinstrahlung schützen. [1][2][12] |
| **Unverträgliche Materialien** | Starke Oxidationsmittel. [13] |

## 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. |

WORKING DRAFT 工作草稿

### 8.2 Persönliche Schutzausrüstung (PSA) [5][6][14]



**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)



**Gesichtsschutz (bei Spritzgefahr)**
EN ISO 16321-1:2022



**Chemikalienbeständige Schutzkleidung**
EN 13034:2005+A1:2009 (typ 6) / EN 14126:2003 (bio)



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

## 9. Physikalische und chemische Eigenschaften

| Eigenschaft (Pkt. 9.1) | Wert | Quelle |
|---|---|---|
| **Aggregatzustand** | Feststoff | |
| **Farbe** | Farblose Blättchen [7] | |
| **Geruch** | Geruch nach Piperidin [7] | |
| **pH-Wert (1%ige wässrige Lösung)** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Schmelzpunkt** | 42 °C (experimental data) [7] | *PubChem (experimentelle Daten)* |
| **Siedepunkt** | 204.7308 °C [8] [7] ✓94% | *NIST WebBook + Quellenkonsens, PubChem (experimentelle Daten)* |
| **Flammpunkt** | 85 °C (experimental data) [7] | *PubChem (experimentelle Daten)* |
| **Entzündbarkeit** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Untere und obere Explosionsgrenze** | Nicht zutreffend (REACH 9.1(g)) | |
| **Dichte (20 °C)** | 0.799 g/cm³ [7] ✓86% | *Quellenkonsens, PubChem (experimentelle Daten)* |
| **Dampfdruck** | 0.147 kPa (1.1 mmHg, 50 °C) (experimental data) [7] | *PubChem (experimentelle Daten)* |
| **Relative Dampfdichte** | Nicht zutreffend (REACH 9.1(q)) | |
| **Kinematische Viskosität** | Nicht zutreffend (REACH 9.1(l)) | |
| **Selbstentzündungstemperatur** | 420 °C (experimental data) [7] | |
| **Zersetzungstemperatur** | Nicht zutreffend | |
| **Wasserlöslichkeit** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Partikeleigenschaften** | Die Partikelgrößenverteilung wurde für diese Handelsform nicht bestimmt – gemäß Anhang II 9.1(r) erforderlich; anhand der Lieferantenspezifikation zu ergänzen. | |
| **Verteilungskoeffizient n-Oktanol/ Wasser (log-Wert)** | -0.2 [9] | |
| **Molmasse** | 116.20 g/mol [7] ✓86% | *PubChem* |

WORKING DRAFT 工作草稿

| Eigenschaft (Pkt. 9.1) | Wert | Quelle |
|---|---|---|
| **Summenformel** | $C_6H_{16}N_2$ [7] ✓86% | *PubChem* |
| **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. |
| **Zersetzungsprodukte** | Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO2, NOx. |

## 11. Toxikologische Angaben

| | |
|---|---|
| **LD50 (oral)** | Keine Daten verfügbar. |
| **LD50 (dermal)** | Keine Daten verfügbar. |
| **LC50 (inhalativ)** | Keine Daten verfügbar. |
| **Hautreizung** | Kategorie 1 (H314) — ätzend; Unterkategorie (1A/1B/1C) gemäß CLP-Anhang-VI-Eintrag. [3][10] |
| **Augenreizung** | Schwere Augenschäden — durch die ätzende Einstufung abgedeckt (H314; CLP Anhang I 3.3.2.1). [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 (H335): Kann die Atemwege reizen. [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** | Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) [3][10] |

WORKING DRAFT 工作草案

## 12. Umweltbezogene Angaben

| | |
|---|---|
| **Gewässertoxizität** | Keine Daten verfügbar. |
| **Persistenz / biologische Abbaubarkeit** | Keine Daten verfügbar. |
| **Bioakkumulationspotenzial** | log Kow = -0.2 [9]. Geringes Bioakkumulationspotenzial (log Kow < 4,5 — PBT/vPvB-Screening-Kriterium gemäß ECHA-Leitlinie R.11). [15][16] |
| **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 (z. B. chemische Reagenzien), die gefährliche Stoffe enthalten. Überprüfung des EWC-Codes erforderlich. [11] |
| **Verpackungen** | Gereinigte Verpackungen können recycelt werden. Kontaminierte Verpackungen sind als gefährlicher Abfall zu behandeln. |

## 14. Angaben zum Transport




Klasse 8 — Ätzende Stoffe

| | |
|---|---|
| **UN-Nummer** | ÜBERPRÜFUNG ERFORDERLICH — keine verifizierte UN-Zuordnung. |
| **Transportgefahrenklasse** | Aus der GHS-Einstufung abgeleitet — ÜBERPRÜFUNG ERFORDERLICH. |
| **Umweltgefahr** | Nicht als umweltgefährdend für den Transport eingestuft (kein H400/H410/H411 in CLP Anhang VI; keine Kennzeichnung als Meeresschadstoff erforderlich) [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** | HINWEIS: Die GHS-Einstufung deutet darauf hin, dass der Stoff den Gefahrgutvorschriften (ADR/IMDG/IATA) unterliegen kann. NICHT vom Fehlen von Beschränkungen ausgehen — UN-Nummer vor dem Versand prüfen. |

## 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 18.10.2026 wurden als zukünftig weggelassen (noch nicht anwendbar).

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

WORKING DRAFT 工作草稿

## Wissenschaftliche Zitate (6)


Oh HN, Yoo D, Park S et al.. *Assessment of poly(hexamethylenebicyanoguanide-hexamethylenediamine) hydrochloride-induced developmental neurotoxicity via oxidative stress mechanism: Integrative approaches with neuronal cells and zebrafish.*. Journal of hazardous materials (2024). DOI: 10.1016/j.jhazmat.2023.133146

Shi K, Li JM, Zhang ZJ et al.. *Virtual screening of carboxylic acid reductases for biocatalytic synthesis of 6-aminocaproic acid and 1,6-hexamethylenediamine.*. Biotechnology and bioengineering (2023). DOI: 10.1002/bit.28408

Alfieri ML, Riccucci G, Ferraris S et al.. *Deposition of Antioxidant and Cytocompatible Caffeic Acid-Based Thin Films onto Ti6Al4V Alloys through Hexamethylenediamine-Mediated Crosslinking.*. ACS applied materials & interfaces (2023). DOI: 10.1021/acsami.3c05564

Fedorchuk TP, Khusnutdinova AN, Evdokimova E et al.. *One-Pot Biocatalytic Transformation of Adipic Acid to 6-Aminocaproic Acid and 1,6-Hexamethylenediamine Using Carboxylic Acid Reductases and Transaminases.*. Journal of the American Chemical Society (2020). DOI: 10.1021/jacs.9b11761

Kennedy GL Jr. *Toxicity of hexamethylenediamine.*. Drug and chemical toxicology (2005). DOI: 10.1081/dct-39681


## Volltext der H-Sätze

| | |
|---|---|
| **H312** | Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt. |
| **H302** | Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. |
| **H335** | Kann die Atemwege reizen. |
| **H314** | Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden. |

## Volltext der P-Sätze

| | |
|---|---|
| **P260** | Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen. |
| **P264** | Nach Gebrauch gründlich waschen. |
| **P270** | Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen. |
| **P271** | Nur im Freien oder in gut belüfteten Räumen verwenden. |
| **P280** | Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen. |
| **P301+P312** | BEI VERSCHLUCKEN: Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/… anrufen. |
| **P301+P330+P331** | BEI VERSCHLUCKEN: Mund ausspülen.; KEIN Erbrechen herbeiführen. |
| **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. |
| **P305+P351+P338** | BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser ausspülen.; Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter ausspülen. |
| **P310** | Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/… anrufen. |
| **P312** | Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/… anrufen. |
| **P321** | Besondere Behandlung (siehe … auf diesem Kennzeichnungsetikett). |
| **P330** | Mund ausspülen. |
| **P363** | Kontaminierte Kleidung vor erneutem Tragen waschen. |
| **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 |

WORKING DRAFT · 工作草案

| | |
|---|---|
| **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

| | |
|---|---|
| **v3 (18.10.2026)** | 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: 2026-10-18.

[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: 2026-10-18.

[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: 2026-10-18.

[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: 2026-10-18.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-10-18.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-10-18.

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/16402

[8] NIST. Chemistry WebBook, SRD 69. National Institute of Standards and Technology. URL: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=124-09-4

[9] Rumble, J.R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 105th ed. Boca Raton: CRC Press, 2024. URL: https://hbcp.chemnetbase.com

[10] ECHA. European Chemicals Agency — harmonised classification inventory (CLP Annex VI). URL: https://echa.europa.eu

[11] 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

[12] 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

[13] Urben, P.G., ed. Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards. 8th ed. Oxford: Academic Press.

[14] CEN. Personal protective equipment standards (EN ISO 374-1, EN 166, EN 149, EN 14387, EN ISO 20345). Brussels: European Committee for Standardization.

[15] 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

[16] 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

[17] 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: 2026-10-18.


## Externe Links

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=124-09-4

WORKING DRAFT 工作草稿

**ADMET / Drug-likeness**

116.2



**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) 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: 18.10.2026 | Dokumentversion: 3

WORKING DRAFT · 工作草案