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

xylenol

2,3-dimethylphenol

CAS 1300-71-6

$C_8H_{10}O$ | EC 215-089-3

MOLMASSE	LOGP
122.16	2.6
TPSA	**T. WRZ.**
20.2 Å²	203°C

GEFAHRENKLASSIFIZIERUNG (GHS / CLP)



Gefahr

H311 | H301 | H314 | 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	xylenol
1.1 IUPAC-Name	2,3-dimethylphenol
1.1 CAS-Nummer	1300-71-6
1.1 EG-Nummer	215-089-3
1.1 PubChem CID	10687
1.1 InChIKey	QWBBPBRQALCEIZ-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CC1=C(C(=CC=C1)O)C
1.1 Summenformel	$C_8H_{10}O$ [7]
1.1 Molmasse	122.16 g/mol [7]
1.1 Exakte Masse	122.0732 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][9]

H311	Giftig bei Hautkontakt.
H301	Giftig bei Verschlucken.
H314	Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden.
H411	Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.

Sicherheitshinweise (P) [3][4][9]

P260	Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen.
P264	Nach Gebrauch gründlich waschen.
P270	Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen.
P273	Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
P280	Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P301+P310	BEI VERSCHLUCKEN: Sofort 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.
P391	Verschüttete Mengen aufnehmen.
P405	Unter Verschluss aufbewahren.

WORKING DRAFT · 工作草稿

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	1300-71-6
EG-Nummer	215-089-3
Summenformel	$C_8H_{10}O$
Konzentration	≥99% (typische Reinheit in Reagenzienqualität — durch die Spezifikation des Lieferanten zu bestätigen)
Clp index no	604-006-00-X

4. Erste-Hilfe-Maßnahmen



Einatmen

Betroffene Person an die frische Luft bringen. Für Ruhe sorgen. Bei Atemstillstand: künstliche Beatmung (nur qualifiziertes Personal). [1][2][11]

Hautkontakt

Kontaminierte Kleidung ausziehen. Haut mit Wasser und Seife spülen (mind. 15 Minuten). Sofort einen Arzt rufen. [1][2][11]

Augenkontakt

Augen mit fließendem Wasser spülen (mind. 15 Minuten). Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Bei anhaltender Reizung — augenärztliche Untersuchung. [1][2][11]

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][11]

Symptome und Wirkungen

Übelkeit, Erbrechen, Durchfall; Rötung und Reizung der Haut. [3][9]

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. [12]
Hinweise für die Brandbekämpfung	Umluftunabhängiges Atemschutzgerät (SCBA) verwenden. Vollschutzanzug.
Flammpunkt	-95°C [7]
Selbstentzündungstemperatur	598.9°C [7]

6. Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

Persönliche Vorsichtsmaßnahmen	Persönliche Schutzausrüstung verwenden (siehe Abschnitt 8). Einatmen von Dämpfen vermeiden. [1][2][11]
Umweltschutzmaßnahmen	Nicht in die Kanalisation, das Grundwasser oder Oberflächengewässer gelangen lassen. [1][2][11]
Methoden für Rückhaltung und Reinigung	Auslauf eindämmen. Mit inertem Material aufnehmen (Sand, Vermiculit, Kieselgur). In dichte, gekennzeichnete Behälter sammeln. Nicht in die Kanalisation einleiten. [1][2][11]
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][11]
Lagertemperatur	Bei Raumtemperatur (15-25°C) oder gemäß Etikett lagern. [1][2][11]
Luftfeuchtigkeit	An einem trockenen Ort lagern (<60 % rF). [1][2][11]
Licht	Vor direkter Sonneneinstrahlung schützen. [1][2][11]
Unverträgliche Materialien	Starke Oxidationsmittel. [12]

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][13]



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



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)

WORKING DRAFT 工作草案

9. Physikalische und chemische Eigenschaften

HINWEIS: Der Stoff kann unterhalb von 20.0°C erstarren.

Eigenschaft (Pkt. 9.1)	Wert	Quelle
Aggregatzustand	Flüssigkeit	
Farbe	Weißer kristalliner Feststoff [7]	
Geruch	Süßlicher, teerartiger Geruch [7]	
pH-Wert (1%ige wässrige Lösung)	Keine Daten verfügbar.	
Schmelzpunkt	20°C (experimental data) [7]	*PubChem (experimentelle Daten)*
Siedepunkt	203°C (experimental data) [7]	*PubChem (experimentelle Daten)*
Flammpunkt	-95°C (experimental data) [7]	*PubChem (experimentelle Daten)*
Entzündbarkeit	Keine Daten verfügbar.	
Untere und obere Explosionsgrenze	Keine Daten verfügbar.	
Dichte (20°C)	1.0345 g/cm³ [7] ✓86%	*Quellenkonsens, PubChem (experimentelle Daten)*
Dampfdruck	0.012 kPa (0.089 mmHg, 25°C) (experimental data) [7]	*PubChem (experimentelle Daten)*
Relative Dampfdichte	4.22 [16]	
Dynamische Viskosität	1.845 mPa·s [7]	
Kinematische Viskosität	Keine Daten verfügbar.	
Brechungsindex nD^{20}	1.542 (experimental data) [7]	
Selbstentzündungstemperatur	598.9°C (experimental data) [7]	
Zersetzungstemperatur	Nicht zutreffend	
Wasserlöslichkeit	4.57 g/L, 25°C [7]	
Partikeleigenschaften	Nicht zutreffend (REACH 9.1(r))	
Verteilungskoeffizient n-Oktanol/ Wasser (log-Wert)	2.6 [8]	
Molmasse	122.16 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Summenformel	$C_8H_{10}O$ [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.

WORKING DRAFT 工作草案

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][9]
Augenreizung	Schwere Augenschäden — durch die ätzende Einstufung abgedeckt (H314; CLP Anhang I 3.3.2.1). [3][9]
Sensibilisierung	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) [3][9]
Mutagenität	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) [3][9]
Karzinogenität	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) [3][9]
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][9]
STOT — einmalige Exposition	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) [3][9]
STOT — wiederholte Exposition	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) [3][9]
Aspirationsgefahr	Nicht eingestuft für diese Gefahr (außerhalb des Geltungsbereichs der harmonisierten Einstufung in CLP Anhang VI; Selbsteinstufung des Lieferanten prüfen) [3][9]

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 Kow = 2.6 [8]. Geringes Bioakkumulationspotenzial (log Kow < 4,5 — PBT/vPvB-Screening-Kriterium gemäß ECHA-Leitlinie R.11). [14][15]
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. [10]
Verpackungen	Gereinigte Verpackungen können recycelt werden. Kontaminierte Verpackungen sind als gefährlicher Abfall zu behandeln.

WORKING DRAFT 工作草案

14. Angaben zum Transport



Klasse 6.1 — Giftige Stoffe



Klasse 8 — Ätzende Stoffe

UN-Nummer	UN 2261 [7]
Transportgefahrenklasse	Aus der GHS-Einstufung abgeleitet — ÜBERPRÜFUNG ERFORDERLICH.
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	UN-Nummer gemäß angegebener Quelle. Transportklasse und Verpackungsgruppe vor dem Versand in ADR Tabelle A / UN-Modellvorschriften prüfen. [7]
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 17.10.2026 wurden als zukünftig weggelassen (noch nicht anwendbar).

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

Volltext der H-Sätze

H311	Giftig bei Hautkontakt.
H301	Giftig bei Verschlucken.
H314	Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden.
H411	Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.

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.
P273	Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
P280	Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P301+P310	BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/… anrufen.
P301+P330+P331	BEI VERSCHLUCKEN: Mund ausspülen.; KEIN Erbrechen herbeiführen.
P302+P352	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit viel Wasser waschen.

WORKING DRAFT 工作版

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.
P391	Verschüttete Mengen aufnehmen.
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

v3 (17.10.2026)	Erstellt auf Grundlage der harmonisierten ECHA-Einstufung (Anhang VI zur CLP, ATP 23).

WORKING DRAFT 工作草稿

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: 2026-10-17.

[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: 2026-10-17.

[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: 2026-10-17.

[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: 2026-10-17.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-10-17.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-10-17.

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/10687

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

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

[10] 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

[11] 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

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

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

[14] 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

[15] 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

[16] 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

[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: 2026-10-17.

Externe Links

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=1300-71-6

ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL1490403

WORKING DRAFT

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) 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