VEILIGHEIDSINFORMATIEBLAD / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conform Verord. (EG) nr. 1907/2006 (REACH), Bijlage II — Verord. (EU) 2020/878 Datum: 18.10.2026 | Versie: 3 | NL

2-Amino-5-chloro-3-methylbenzoic acid

2-amino-5-chloro-3-methylbenzoic acid

CAS 20776-67-4

$C_8H_8ClNO_2$ EC 629-058-0

MOLAIRE MASSA	LOGP
185.61	2.3

TPSA
63.3 Å²

WORKING DRAFT · 工作草案

GEVARENCLASSIFICATIE (GHS / CLP)



Waarschuwing

H317 H412

Indeling op basis van geaggregeerde ECHA C&L-kennisgevingen (PubChem PUG-View); consensus van kennisgevers <75% — conservatieve benadering (alle gemelde gevaren). Verificatie aan de hand van de officiële bron vereist (ECHA C&L / gegevensblad van de fabrikant).

1. Identificatie van de stof/het mengsel en van de vennootschap/onderneming

1.1 Naam van de stof	2-Amino-5-chloro-3-methylbenzoic acid
1.1 IUPAC-naam	2-amino-5-chloro-3-methylbenzoic acid
1.1 CAS-nummer	20776-67-4
1.1 EG-nummer	629-058-0
1.1 PubChem CID	11644044
1.1 InChIKey	KOPXCQUAFDWYOE-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CC1=CC(=CC(=C1N)C(=O)O)Cl
1.1 Molecuulformule	$C_8H_8ClNO_2$ [7]
1.1 Molmassa	185.61 g/mol [7]
1.1 Exacte massa	185.0244 Da [7]

1.2 Toepassingen

Voor laboratorium- en onderzoeksdoeleinden. Niet voor gebruik bij de productie van levensmiddelen, geneesmiddelen of cosmetica zonder de juiste vergunningen.

1.3 Gegevens van de leverancier

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 Telefoonnummer voor noodgevallen

Noodtelefoon	112 (EU-wide emergency number)

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

2. Identificatie van de gevaren

GHS:



PBM:



Waarschuwing

Gevarenaanduidingen (H) [3][4]

H317	Kan een allergische huidreactie veroorzaken.
H412	Schadelijk voor in het water levende organismen, met langdurige gevolgen.

Voorzorgsmaatregelen (P) [3][4]

P261	Inademing van stof/rook/gas/nevel/dampen/spuitnevel vermijden.
P272	Verontreinigde werkkleding mag de werkruimte niet verlaten.
P273	Voorkom lozing in het milieu.
P280	Beschermende handschoenen/beschermende kleding/oogbescherming/ gelaatsbescherming dragen.
P302+P352	BIJ CONTACT MET DE HUID: Met veel water/... wassen.
P321	Specifieke behandeling vereist (zie ... op dit etiket).
P333+P313	Bij huidirritatie of uitslag: Een arts raadplegen.
P362+P364	Verontreinigde kleding uittrekken.
P391	Gelekte/gemorste stof opruimen.
P501	Inhoud/verpakking afvoeren naar ...

Indeling op basis van geaggregeerde ECHA C&L-kennisgevingen (PubChem PUG-View); consensus van kennisgevers <75% — conservatieve benadering (alle gemelde gevaren). Verificatie aan de hand van de officiële bron vereist (ECHA C&L / gegevensblad van de fabrikant).

WORKING DRAFT · 工作草稿

3. Samenstelling en informatie over de bestanddelen

Type stof	zuivere stof
CAS-nummer	20776-67-4
EG-nummer	629-058-0
Molecuulformule	$C_8H_8ClNO_2$
Concentratie	≥99% (typische zuiverheid van reagenskwaliteit — te bevestigen door de specificatie van de leverancier)

4. Eerstehulpmaatregelen



Inademing

Breng de getroffen persoon in de frisse lucht. Houd de persoon in rust. Als de persoon niet ademt: kunstmatige beademing (uitsluitend gekwalificeerd personeel). [1][2][11]

Huidcontact

Verontreinigde kleding uittrekken. Huid spoelen met water en zeep (min. 15 minuten). [1][2][11]

Oogcontact

Ogen spoelen met stromend water (min. 15 minuten). Contactlenzen indien mogelijk verwijderen. Als de irritatie aanhoudt — raadpleeg een oogarts. [1][2][11]

Inslikken

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]

Symptomen en effecten

Geen specifieke symptomen beschreven in de literatuur. [3]

Informatie voor de arts

Verificatie vereist

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

5. Brandbestrijdingsmaatregelen

Geschikte blusmiddelen	Blusmiddelen aanpassen aan de omgeving. CO2, poeder, schuim.
Ongeschikte blusmiddelen	Geen specifieke beperkingen.
Specifieke gevaren	Producten van thermische ontleding: CO, CO2, NOx, HCl (waterstofchloride). [12]
Advies voor brandweerlieden	Gebruik onafhankelijke ademluchtapparatuur (SCBA). Volledig beschermend pak.

6. Maatregelen bij het accidenteel vrijkomen van de stof

Persoonlijke voorzorgsmaatregelen	Gebruik persoonlijke beschermingsmiddelen (zie rubriek 8). Inademen van stof/damp vermijden. [1][2][11]
Milieuvoorzorgsmaatregelen	Voorkom dat het in het riool, het grondwater en het oppervlaktewater terechtkomt. [1][2][11]
Methoden voor insluiting en reiniging	Absorberen met inert materiaal (zand, vermiculiet, diatomeeënaarde) en verzamelen in afgesloten, geëtiketteerde containers. Niet in het riool laten lopen. [1][2][11]
Gerelateerde rubrieken	8; 13

WORKING DRAFT 工作草案

7. Hantering en opslag

Voorzorgsmaatregelen	Werk in een zuurkast of met voldoende ventilatie. Verboden te eten, drinken en roken op de werkplek. [1][2][11]
Opslagtemperatuur	Bewaren bij kamertemperatuur (15-25°C) of zoals aangegeven op het etiket. [1][2][11]
Watergehalte	Bewaren op een droge plaats (<60% RH). [1][2][11]
Licht	Beschermen tegen direct zonlicht. [1][2][11]
Onverenigbare materialen	Sterke oxidatiemiddelen, Sterke basen, Onedele metalen (waterstofontwikkeling). [12]

8. Maatregelen ter beheersing van blootstelling/persoonlijke bescherming

8.1 Controleparameters

NDS (Polen)	Geen NDS-waarde (grenswaarde) in de beschikbare werklijst — vóór gebruik controleren in de actuele MRPiPS-verordening; ga niet uit van het ontbreken van een grenswaarde.
OEL (EU)	EU-OEL-waarde niet geverifieerd in de beschikbare dataset — raadpleeg de IOELV/BOELV-richtlijnen; ga niet uit van de afwezigheid van een waarde.
DNEL	Geen gegevens beschikbaar.
PNEC	Geen gegevens beschikbaar.

8.2 Persoonlijke beschermingsmiddelen (PBM) [5][6][13]



Chemicaliënbestendige beschermende handschoenen
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
fluorelastomeer FKM (Viton), min. 0,4 mm — GEEN nitril (doorbraak binnen enkele minuten)

Gesloten veiligheidsbril of ruimzichtbril
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001

Gesloten veiligheidsschoenen met teenbescherming
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. Fysische en chemische eigenschappen

Eigenschap (punt 9.1)	Waarde	Bron
Fysische toestand	Geen gegevens beschikbaar.	
Kleur	Geen gegevens beschikbaar.	
Geur	Geen gegevens beschikbaar.	
pH (1% waterige oplossing)	Geen gegevens beschikbaar.	
Smeltpunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Kookpunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Vlampunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Ontvlambaarheid	Geen gegevens beschikbaar.	
Onderste en bovenste explosiegrens	Geen gegevens beschikbaar.	
Dichtheid (20°C)	Geen gegevens beschikbaar.	

WORKING DRAFT 工作稿

Eigenschap (punt 9.1)	Waarde	Bron
Dampspanning	Geen gegevens beschikbaar.	
Relatieve dampdichtheid	Geen gegevens beschikbaar.	
Kinematische viscositeit	Geen gegevens beschikbaar.	
Zelfontbrandingstemperatuur	Geen gegevens beschikbaar.	
Ontledingstemperatuur	Niet van toepassing	
Oplosbaarheid in water	Geen gegevens beschikbaar.	
Deeltjeskenmerken	Geen gegevens beschikbaar.	
Verdelingscoëfficiënt n-octanol/water (logwaarde)	2.3 [8]	
Molaire massa	185.61 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Molecuulformule	$C_8H_8ClNO_2$ [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. Stabiliteit en reactiviteit

Reactiviteit	Stabiel onder normale opslag- en hanteringsomstandigheden.
Chemische stabiliteit	Thermisch stabiel onder de aanbevolen omstandigheden.
Gevaarlijke reacties	Geen gevaarlijke reacties bekend onder normale omstandigheden.
Te vermijden omstandigheden	Hoge temperaturen, direct zonlicht, vocht.
Onverenigbare materialen	Sterke oxidatiemiddelen, Sterke basen, Onedele metalen (waterstofontwikkeling).
Ontledingsproducten	Producten van thermische ontleding: CO, CO2, NOx, HCl (waterstofchloride).

11. Toxicologische informatie

LD50 (oraal)	Geen gegevens beschikbaar.
LD50 (dermaal)	Geen gegevens beschikbaar.
LC50 (inhalatie)	Geen gegevens beschikbaar.
Huidirritatie	Geen gegevens beschikbaar.
Oogirritatie	Geen gegevens beschikbaar.
Sensibilisatie	Huid, Categorie 1 (H317): Kan een allergische huidreactie veroorzaken. [3]
Mutageniteit	Geen gegevens beschikbaar.
Carcinogeniteit	Geen gegevens beschikbaar.
IARC-classificatie (carcinogeniteit)	Geen individuele IARC-monografie voor deze CAS — dit is geen bevestiging van de afwezigheid van kankerverwekkendheid (vgl. CLP/GHS-indeling in sectie 2).
Reproductietoxiciteit	Geen gegevens beschikbaar.
STOT (eenmalige blootstelling)	Geen gegevens beschikbaar.
STOT (herhaalde blootstelling)	Geen gegevens beschikbaar.
Aspiratiegevaar	Geen gegevens beschikbaar.

WORKING DRAFT 工作稿

12. Ecologische informatie

Aquatische toxiciteit	Indeling volgens ECHA C&L-kennisgevingen (zelfindeling, art. 4(3)): H412 — schadelijk voor in het water levende organismen, met langdurige gevolgen (chronisch cat. 3). Numerieke LC_{50}/EC_{50}-gegevens niet geverifieerd in de beschikbare dataset — ga niet uit van het ontbreken van toxiciteit.
Persistentie / biologische afbreekbaarheid	Geen gegevens beschikbaar.
Bioaccumulatiepotentieel	log Kow = 2.3 [8]. Laag bioaccumulatiepotentieel (log Kow < 4,5 — PBT/zPzB-screeningscriterium volgens ECHA-richtsnoer R.11). [14][15]
Mobiliteit in de bodem	Geen gegevens beschikbaar.
PBT/vPvB-beoordeling	Onvoldoende gegevens om PBT/vPvB te beoordelen.
Hormoonontregelende eigenschappen	Geen informatie.

13. Instructies voor verwijdering

Verwijderingsmethode	Ter verwijdering overdragen aan erkende bedrijven overeenkomstig de nationale en lokale voorschriften. Niet in het riool lozen.
Afvalcode (EURAL)	16 05 06* — Laboratorium- en analysechemicaliën (bijv. chemische reagentia) die gevaarlijke stoffen bevatten. Verificatie van de EWC-code vereist. [10]
Verpakking	Gereinigde verpakkingen kunnen worden gerecycled. Verontreinigde verpakkingen moeten als gevaarlijk afval worden behandeld.

14. Informatie met betrekking tot het vervoer

UN-nummer	VERIFICATIE VEREIST — geen geverifieerde UN-toewijzing.
Milieugevaar	Milieugevaar voor transport: niet geverifieerd. Niet-geharmoniseerde indeling (buiten CLP bijlage VI) — verifieer aquatische toxiciteit (rubriek 12) en ga er NIET van uit dat markering als mariene verontreiniging niet vereist is; bevestig volgens ADR 2.2.9 / IMDG vóór verzending.
Bijzondere voorzorgsmaatregelen	Als gevaarlijke goederen behandelen volgens de toegewezen klasse (ADR/IMDG/IATA); de bij die klasse behorende voorzorgsmaatregelen toepassen.
GN/GS-code	GN/GS-code: verificatie vereist in de gecombineerde nomenclatuur van Eurostat.
Opmerkingen	Transportclassificatie niet geverifieerd. Ga niet uit van het ontbreken van beperkingen — controleer ADR/IMDG/IATA vóór verzending.

15. Regelgeving

SVHC-status	SVHC-status niet geverifieerd aan de hand van de beschikbare dataset — raadpleeg de actuele ECHA-kandidaatslijst; ga niet uit van afwezigheid. [1]
REACH Bijlage XIV	Niet geverifieerd aan de hand van de ECHA-autorisatielijst — controleer REACH Bijlage XIV. [1]
REACH Bijlage XVII	Niet bevestigd in de beschikbare dataset van Bijlage XVII — verifieer aan de hand van de actuele ECHA-lijst vóór het in de handel brengen; ga niet uit van de afwezigheid van een beperking. [1]

16. Overige informatie

Juridische status van de indeling: zelfindeling door de leverancier volgens art. 4(3) CLP — geen geharmoniseerde vermelding in bijlage VI.Vermeldingen met een datum van inwerkingtreding na 17.10.2026 weggelaten als toekomstig (nog niet van toepassing).

Gegevens automatisch geaggregeerd uit openbare referentiedatabanken (PubChem, ECHA, NIST e.a.).

WORKING DRAFT · 工作草稿

Wetenschappelijke citaten (10)

Mochen Jia, Zhen Sun, Mingxuan Zhang et al.. *What determines the performance of lanthanide-based ratiometric nanothermometers?*. Nanoscale (2020). DOI: 10.1039/d0nr05035k

David J. Wales, Tetyana V. Bogdan. *Potential Energy and Free Energy Landscapes*. The Journal of Physical Chemistry B (2006). DOI: 10.1021/jp0680544

I.A. Mkhalid, Ahmed Shawky. *Visible light-active CdSe/rGO heterojunction photocatalyst for improved oxidative desulfurization of thiophene*. Ceramics International (2020). DOI: 10.1016/j.ceramint.2020.05.033

Cheng-Xi Wei, Ming Bian, Guo-Hua Gong. *Current Research on Antiepileptic Compounds*. Molecules (2015). DOI: 10.3390/molecules201119714

David Harrison. *Brain Penetrant NLRP3 Inhibitors: The Discovery of a Panacea?*. Journal of Medicinal Chemistry (2024). DOI: 10.1021/acs.jmedchem.4c02846

Volledige tekst van de H-zinnen

H317	Kan een allergische huidreactie veroorzaken.
H412	Schadelijk voor in het water levende organismen, met langdurige gevolgen.

Volledige tekst van de P-zinnen

P261	Inademing van stof/rook/gas/nevel/dampen/spuitnevel vermijden.
P272	Verontreinigde werkkleding mag de werkruimte niet verlaten.
P273	Voorkom lozing in het milieu.
P280	Beschermende handschoenen/beschermende kleding/oogbescherming/ gelaatsbescherming dragen.
P302+P352	BIJ CONTACT MET DE HUID: Met veel water/... wassen.
P321	Specifieke behandeling vereist (zie ... op dit etiket).
P333+P313	Bij huidirritatie of uitslag: Een arts raadplegen.
P362+P364	Verontreinigde kleding uittrekken.
P391	Gelekte/gemorste stof opruimen.
P501	Inhoud/verpakking afvoeren naar ...

Afkortingen

ADR	Europese Overeenkomst betreffende het internationale vervoer van gevaarlijke goederen over de weg
ATE	Schatting van de acute toxiciteit (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (Verord. 1272/2008)
CMR	Kankerverwekkend, mutageen, giftig voor de voortplanting
DNEL	Afgeleide dosis zonder effect (Derived No-Effect Level)
EC	European Community number
EPI	Persoonlijke beschermingsmiddelen
GHS	Wereldwijd geharmoniseerd systeem (Globally Harmonized System)
IATA	Internationale Luchtvervoersvereniging
IMDG	Internationale Code voor het vervoer van gevaarlijke goederen over zee
VIB	Veiligheidsinformatieblad (Safety Data Sheet)
LC50	Letale concentratie 50% (Lethal Concentration)
LD50	Letale dosis 50% (Lethal Dose)
NDS	Maximaal toelaatbare concentratie (werkplek, PL)
NDSCh	NDS kortetermijn (PL)
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistent, bioaccumulerend en toxisch
PNEC	Voorspelde concentratie zonder effect (Predicted No-Effect Concentration)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Verord. (EG) 1907/2006)
SDS	Safety Data Sheet

WORKING DRAFT 工作草稿

STOT	Specifieke doelorgaantoxiciteit (Specific Target Organ Toxicity)
SVHC	Zeer zorgwekkende stof (Substance of Very High Concern)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Zeer persistent en zeer bioaccumulerend

Versiegeschiedenis

v3 (17.10.2026)	Opgesteld op basis van zelfindeling door de leverancier (ECHA C&L-kennisgevingen; geen geharmoniseerde vermelding in bijlage VI).

Referenties

[1] EP en Raad. Verord.(EG) nr. 1907/2006 (REACH). Art.31, Bijlage II. PB EU L 396/2006. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-17.

[2] Europese Commissie. Verord.(EU) 2020/878 — wijziging van Bijlage II REACH. PB EU L 203/2020. Vanaf 01.01.2023. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-17.

[3] EP en Raad. Verord.(EG) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. PB 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/11644044

[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

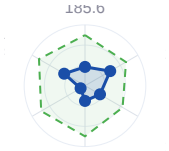
[16] MRiPS-verordening van 12.06.2018 — NDS/NDN. Staatsblad 2024 pos. 1017. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-17.

Externe links

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=20776-67-4

WORKING DRAFT

ADMET / Drug-likeness



Juridische kennisgeving: Dit document is automatisch gegenereerd op basis van gegevens van PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) en andere openbare databanken. Het VERVANGT GEEN goedgekeurd veiligheidsinformatieblad (VIB) conform Verordening (EG) nr. 1907/2006 (REACH). Controleer de gegevens vóór gebruik van de stof aan de hand van het actuele VIB van de fabrikant.
Generator: Document automatisch gegenereerd op basis van zelfindeling door de leverancier (ECHA C&L-kennisgevingen) en openbare fysisch-chemische databanken.
Auteur: www.MolGod.org — platform voor geautomatiseerde veiligheidsinformatiebladen (VIB).
Datum van uitgifte: 18.10.2026 | Documentversie: 3