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

Isooctanoic acid

6-methylheptanoic acid

CAS 25103-52-0

$C_8H_{16}O_2$ | EC 246-617-0

MOLMASSE	LOGP
144.21	2.7

GEFAHRENKLASSIFIZIERUNG (GHS / CLP)



Achtung

H302 | H319

Nicht harmonisierte Einstufung (kein Eintrag in Anhang VI der CLP-Verordnung) — aus aggregierten ECHA-C&L-Meldungen abgeleitet; die H-Sätze sind anhand der offiziellen Quelle zu überprüfen (ECHA C&L / Herstellerdatenblatt).

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

1.1 Stoffname	Isooctanoic acid
1.1 IUPAC-Name	6-methylheptanoic acid
1.1 CAS-Nummer	25103-52-0
1.1 EG-Nummer	246-617-0
1.1 PubChem CID	90716
1.1 InChIKey	OEOIWYCWCDBOPA-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CC(C)CCCCC(=O)O
1.1 Summenformel	$C_8H_{16}O_2$ [7]
1.1 Molmasse	144.21 g/mol [7]
1.1 Exakte Masse	144.1150 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:



Achtung

Gefahrenhinweise (H) [3][4]

H302	Gesundheitsschädlich bei Verschlucken.
H319	Verursacht schwere Augenreizung.

Sicherheitshinweise (P) [3][4]

P264	Nach Gebrauch gründlich waschen.
P270	Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen.
P280	Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P301+P312	BEI VERSCHLUCKEN: Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/... anrufen.
P305+P351+P338	BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser ausspülen.; Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter ausspülen.
P330	Mund ausspülen.
P337+P313	Bei anhaltender Augenreizung: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P501	Inhalt/Behälter ... zuführen.

Nicht harmonisierte Einstufung (kein Eintrag in Anhang VI der CLP-Verordnung) — aus aggregierten ECHA-C&L-Meldungen abgeleitet; die H-Sätze sind anhand der offiziellen Quelle zu überprüfen (ECHA C&L / Herstellerdatenblatt).

WORKING DRAFT · 工作草案

3. Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen

Stofftyp	Reinstoff
CAS-Nummer	25103-52-0
EG-Nummer	246-617-0
Summenformel	$C_8H_{16}O_2$
Konzentration	≥99% (typische Reinheit in Reagenzienqualität — durch die Spezifikation des Lieferanten zu bestätigen)

4. Erste-Hilfe-Maßnahmen



Einatmen

Betroffene Person an die frische Luft bringen. Für Ruhe sorgen. Bei Atemstillstand: künstliche Beatmung (nur qualifiziertes Personal). [1][2][10]

Hautkontakt

Kontaminierte Kleidung ausziehen. Haut mit Wasser und Seife spülen (mind. 15 Minuten). [1][2][10]

Augenkontakt

Augen mit fließendem Wasser spülen (mind. 15 Minuten). Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Bei anhaltender Reizung — augenärztliche Untersuchung. [1][2][10]

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][10]

Symptome und Wirkungen

Übelkeit, Erbrechen, Durchfall; Augenreizung und Tränenfluss. [3]

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).

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. [11]
Hinweise für die Brandbekämpfung	Umluftunabhängiges Atemschutzgerät (SCBA) verwenden. Vollschutzanzug.

6. Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

Persönliche Vorsichtsmaßnahmen	Persönliche Schutzausrüstung verwenden (siehe Abschnitt 8). Einatmen von Dämpfen vermeiden. [1][2][10]
Umweltschutzmaßnahmen	Nicht in die Kanalisation, das Grundwasser oder Oberflächengewässer gelangen lassen. [1][2][10]
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][10]
Zugehörige Abschnitte	8; 13

WORKING DRAFT 工作草案

7. Handhabung und Lagerung

Vorsichtsmaßnahmen	Im Abzug oder mit ausreichender Belüftung arbeiten. Essen, Trinken und Rauchen am Arbeitsplatz verboten. [1][2][10]
Lagertemperatur	Bei Raumtemperatur (15-25°C) oder gemäß Etikett lagern. [1][2][10]
Luftfeuchtigkeit	An einem trockenen Ort lagern (<60 % rF). [1][2][10]
Licht	Vor direkter Sonneneinstrahlung schützen. [1][2][10]
Unverträgliche Materialien	Starke Oxidationsmittel, starke Basen, Unedle Metalle (Wasserstoffentwicklung). [11]

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][12]



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

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)	Keine Daten verfügbar.	
Schmelzpunkt	0°C (experimental data) [7]	
Siedepunkt	Keine Daten verfügbar.	
Flammpunkt	Keine Daten verfügbar.	
Entzündbarkeit	Keine Daten verfügbar.	
Untere und obere Explosionsgrenze	Keine Daten verfügbar.	
Dichte (20°C)	Keine Daten verfügbar.	
Dampfdruck	Keine Daten verfügbar.	

WORKING DRAFT 工作草稿

Eigenschaft (Pkt. 9.1)	Wert	Quelle
Relative Dampfdichte	4.98 [15]	
Kinematische Viskosität	Keine Daten verfügbar.	
Selbstentzündungstemperatur	Keine Daten verfügbar.	
Zersetzungstemperatur	Nicht zutreffend	
Wasserlöslichkeit	Keine Daten verfügbar.	
Partikeleigenschaften	Nicht zutreffend (REACH 9.1(r))	
Verteilungskoeffizient n-Oktanol/ Wasser (log-Wert)	2.7 [8]	
Molmasse	144.21 g/mol [7]	
Summenformel	$C_8H_{16}O_2$ [7]	
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, starke Basen, Unedle Metalle (Wasserstoffentwicklung).
Zersetzungsprodukte	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO2.

11. Toxikologische Angaben

LD50 (oral)	Keine Daten verfügbar.
LD50 (dermal)	Keine Daten verfügbar.
LC50 (inhalativ)	Keine Daten verfügbar.
Hautreizung	Keine Daten verfügbar.
Augenreizung	Kategorie 2 — Augenreizung.
Sensibilisierung	Keine Daten verfügbar.
Mutagenität	Keine Daten verfügbar.
Karzinogenität	Keine Daten verfügbar.
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	Keine Daten verfügbar.
STOT — einmalige Exposition	Keine Daten verfügbar.
STOT — wiederholte Exposition	Keine Daten verfügbar.
Aspirationsgefahr	Keine Daten verfügbar.

WORKING DRAFT 工作草案

12. Umweltbezogene Angaben

Gewässertoxizität	Keine Daten verfügbar.
Persistenz / biologische Abbaubarkeit	Keine Daten verfügbar.
Bioakkumulationspotenzial	log Kow = 2.7 [8]. Geringes Bioakkumulationspotenzial (log Kow < 4,5 — PBT/vPvB-Screening-Kriterium gemäß ECHA-Leitlinie R.11). [13][14]
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. [9]
Verpackungen	Gereinigte Verpackungen können recycelt werden. Kontaminierte Verpackungen sind als gefährlicher Abfall zu behandeln.

14. Angaben zum Transport

UN-Nummer	ÜBERPRÜFUNG ERFORDERLICH — keine verifizierte UN-Zuordnung.
Umweltgefahr	Umweltgefährdung für den Transport: nicht verifiziert. Nicht harmonisierte Einstufung (außerhalb CLP Anhang VI) — aquatische Toxizität (Abschnitt 12) prüfen und NICHT annehmen, dass keine Kennzeichnung als Meeresschadstoff erforderlich ist; gemäß ADR 2.2.9 / IMDG vor Versand bestätigen.
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	Transportklassifizierung nicht überprüft. Das Fehlen von Beschränkungen nicht voraussetzen — vor dem Versand ADR/IMDG/IATA 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: Selbsteinstufung des Lieferanten gemäß Art. 4(3) CLP — kein harmonisierter Eintrag in Anhang VI.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.).

Wissenschaftliche Zitate (8)

Synthesis of all the stereoisomers of statine (4-amino-3-hydroxy-6-methylheptanoic acid). Inhibition of pepsin activity by N-carbobenzoxy-L-valyl-L-valyl-statine derived from the four stereoisomers.. (1979). DOI: 10.1021/jm00191a023

Daniel H. Rich, Eric T. Sun, Amrit S. Boparai. *Synthesis of (3S,4S)-4-amino-3-hydroxy-6-methylheptanoic acid derivatives. Analysis of diastereomeric purity*. The Journal of Organic Chemistry (1978). DOI: 10.1021/jo00412a053

Preparation method of (3S, 4S)-4-amino-3-hydroxy-6-methylheptanoic acid and analogue thereof. (2009).

et al.. *Letter: X-ray structure determination of 4-amino-3-hydroxy-6-methylheptanoic acid, an amine component of pepstatin.*. (1973). DOI: 10.7164/antibiotics.26.255

WORKING DRAFT 工作草案

et al.. *Letter: Absolute configuration of 4-amino-3-hydroxy-6-methylheptanoic acid present in pepstatin A and stereospecific synthesis of all four isomers.*. (1973). DOI: 10.7164/antibiotics.26.249

Volltext der H-Sätze

H302	Gesundheitsschädlich bei Verschlucken.
H319	Verursacht schwere Augenreizung.

Volltext der P-Sätze

P264	Nach Gebrauch gründlich waschen.
P270	Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen.
P280	Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P301+P312	BEI VERSCHLUCKEN: Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt/… anrufen.
P305+P351+P338	BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser ausspülen.; Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter ausspülen.
P330	Mund ausspülen.
P337+P313	Bei anhaltender Augenreizung: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
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

WORKING DRAFT 工作版

Versionshistorie

v3 (18.10.2026)	Erstellt auf Grundlage der Selbsteinstufung des Lieferanten (ECHA-C&L-Meldungen; kein harmonisierter Eintrag in Anhang VI).

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/90716

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

[9] 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

[10] 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

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

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

[13] 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

[14] 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

[15] 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

[16] 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=25103-52-0

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 Selbsteinstufung des Lieferanten (ECHA-C&L-Meldungen) 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