



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3
Ersetzt Version 2.00

Bearbeitungsdatum 07-Mai-2020
Ausgabedatum 15-Mai-2020

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

1.1. Produktidentifikator

Bezeichnung des Stoffes oder der Zubereitung **Isopentansäure**

CAS-Nr. -
EG-Nr. -
Registrierungsnummer (REACH) -

1.2. Relevante identifizierte Verwendungen des Stoffs oder Gemischs und Verwendungen, von denen abgeraten wird

Identifizierte Verwendungen Zwischenprodukte
Verwendungen, von denen keine
abgeraten wird

1.3. Einzelheiten zum Lieferanten, der das Sicherheitsdatenblatt bereitstellt

Firmenbezeichnung **OQ Chemicals GmbH**
Rheinpromenade 4A
D-40789 Monheim
Deutschland

Produktinformation Product Stewardship
FAX: +49 (0)208 693 2053
email: sc.psq@oq.com

1.4. Notrufnummer

Notrufnummer +44 (0) 1235 239 670 (UK)
erreichbar 24/7
Lokale Notrufnummer +49 89 220 61012 (DE)
0800 000 7801 (DE)
erreichbar 24/7

ABSCHNITT 2: Mögliche Gefahren

2.1. Einstufung des Stoffs oder Gemischs

Dieses Gemisch ist nach Richtlinie 1272/2008/EG mit Nachträgen eingestuft und gekennzeichnet (CLP)

Ätzung/Reizung der Haut Kategorie 1B, H314
Schwere Augenschädigung/-reizung Kategorie 1, H318
Umweltgefahr Aquatic Chronic 3; H412

Zusätzliche Angaben



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

Den kompletten Wortlaut der Gefahrenhinweise und ergänzenden Gefahrenmerkmale finden Sie in Abschnitt 16.

2.2. Kennzeichnungselemente

Kennzeichnung gemäß Richtlinie 1272/2008/EG mit Nachträgen (CLP).

Gefahrenpiktogramme



Signalwort

Gefahr

Gefahrenhinweise

H314: Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden.
H412: Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.

Vorsorgliche Angaben

P280: Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P273: Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
P301 + P330 + P331: BEI VERSCHLUCKEN: Mund ausspülen. KEIN Erbrechen herbeiführen.
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 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 spülen. Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
P310: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM/Arzt anrufen.
P405: Unter Verschluss aufbewahren.
P501: Inhalt/Behälter in Übereinstimmung mit örtlichen Vorschriften entsorgen.

Enthält

n-Valeriansäure (CAS 109-52-4), 2-Methylbuttersäure (CAS 116-53-0)

2.3. Sonstige Gefahren

Bestandteile des Produkts können durch Einatmen und Verschlucken vom Körper absorbiert werden
Dampf/Luft-Gemische sind bei stärkerer Erwärmung explosionsfähig

Ermittlung der PBT- und vPvB-Eigenschaften

Dieser Stoff wird weder als persistent, bioakkumulierend oder toxisch (PBT), noch als sehr persistent oder als sehr bioakkumulativ (vPvB) betrachtet

ABSCHNITT 3: Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen

3.2. Gemische

Chemische Bezeichnung	CAS-Nr	REACH-No	1272/2008/EC	Konzentration (%)
n-Valeriansäure	109-52-4	01-2119448010-56	Skin Corr. 1B; H314 Eye Dam. 1; H318 Aquatic Chronic 3;	< 70



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

			H412	
2-Methylbuttersäure	116-53-0	01-2119959862-23	Acute Tox. 4; H302 Acute Tox. 4; H312 Skin Corr. 1B; H314 Eye Dam. 1; H318	20 - 40
Isovaleriansäure	503-74-2	01-2119959864-19	Skin Corr. 1B; H314 Eye Dam. 1; H318	< 1

Den kompletten Wortlaut der Gefahrenhinweise und ergänzenden Gefahrenmerkmale finden Sie in Abschnitt 16.

ABSCHNITT 4: Erste-Hilfe-Maßnahmen

4.1. Beschreibung der Erste-Hilfe-Maßnahmen

Einatmen

Ruhig stellen. Frische Luft zuführen. Wenn die Symptome anhalten oder falls irgendein Zweifel besteht, ärztlichen Rat einholen.

Haut

Sofort mit Seife und viel Wasser abwaschen. Wenn die Symptome anhalten oder falls irgendein Zweifel besteht, ärztlichen Rat einholen.

Augen

Sofort mit viel Wasser mindestens 15 Minuten lang ausspülen, auch unter den Augenlidern. Kontaktlinsen entfernen. Eine sofortige ärztliche Betreuung ist notwendig.

Verschlucken

Sofort Arzt hinzuziehen. Erbrechen nicht ohne ärztliche Anweisung herbeiführen.

4.2. Wichtigste akute und verzögert auftretende Symptome und Wirkungen

Wichtigste Symptome

Depression des Zentralnervensystems, Bewusstlosigkeit, Atemnot, Erbrechen, Husten, Schwindel, Brechreiz, Magen-Darm-Beschwerden.

Besondere Gefahr

Lungenreizung, Lungenödem, Dermatitis.

4.3. Hinweise auf ärztliche Soforthilfe oder Spezialbehandlung

Allgemeine Hinweise

Beschmutzte, getränkte Kleidung sofort ausziehen und sicher entfernen. Ersthelfer muss sich selbst schützen.

Symptomatische Behandlung. Bei Verschlucken Magenspülung mit Azidoseausgleich.

ABSCHNITT 5: Maßnahmen zur Brandbekämpfung

5.1. Löschmittel

Geeignete Löschmittel

Schaum, Trockenlöschmittel, Kohlendioxid (CO₂), Sprühwasser

Aus Sicherheitsgründen ungeeignete Löschmittel

Keinen Wasservollstrahl verwenden, um eine Zerstreuung und Ausbreitung des Feuers zu unterdrücken.



5.2. Besondere vom Stoff oder Gemisch ausgehende Gefahren

Gefährliche Gase, die im Brandfall bei unvollständiger Verbrennung entstehen, enthalten möglicherweise:

Kohlenmonoxid (CO)

Kohlendioxid (CO₂)

Brandgase von organischen Materialien sind grundsätzlich als Atmungsgifte einzustufen

Dämpfe sind schwerer als Luft und breiten sich über dem Boden aus

Dampf/Luft-Gemische sind bei stärkerer Erwärmung explosionsfähig

5.3. Hinweise für die Brandbekämpfung

Besondere Schutzausrüstung bei der Brandbekämpfung

Löschausrüstung sollte umgebungsluftunabhängiges Atemschutzgerät und komplette Löschausrüstung enthalten (entsprechend NIOSH oder EN 133).

Vorsichtsmaßnahmen bei der Brandbekämpfung

Container/Tanks mit Wassersprühstrahl kühlen. Personen vom Feuer fernhalten und auf windzugewandter Seite bleiben. Löschwasser eindämmen und auffangen. Kühlwasser und Dämpfe können korrosiv sein. Ablaufendes Wasser kann die Umwelt schädigen.

ABSCHNITT 6: Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

6.1. Personenbezogene Vorsichtsmaßnahmen, Schutzausrüstungen und in Notfällen anzuwendende Verfahren

Nicht für Notfälle geschultes Personal: Persönliche Schutzausrüstung siehe Abschnitt 8. Berührung mit der Haut und den Augen vermeiden. Einatmen von Dämpfen oder Nebel vermeiden. Personen fernhalten und auf windzugewandter Seite bleiben. Für ausreichende Belüftung sorgen, besonders in geschlossenen Räumen. Von Hitze- und Zündquellen fernhalten.

Für Rettungskräfte: Persönliche Schutzausrüstung siehe Abschnitt 8.

6.2. Umweltschutzmaßnahmen

Weiteres Auslaufen oder Verschütten verhindern. Das Produkt darf nicht ohne Vorbehandlung (biologische Kläranlage) in Gewässer gelangen. Ablaufendes Wasser kann die Umwelt schädigen.

6.3. Methoden und Material für Rückhaltung und Reinigung

Verfahren zur Eindämmung

Weiteres Auslaufen des Stoffes verhindern, wenn es gefahrlos möglich ist. Ausgetretenes Material möglichst eindämmen.

Verfahren zur Reinigung

Mit inertem Aufsaugmittel aufnehmen. Zur Entsorgung in geeignete und verschlossene Behälter geben. Wenn die Flüssigkeit in großer Menge verschüttet wurde, sofort mit einer Schaufel oder einem Sauger aufnehmen. Unter Beachtung der örtlichen behördlichen Bestimmungen beseitigen. Vorsorge zur Vermeidung elektrostatischer Entladungen treffen (diese könnten organische Dämpfe entzünden).

6.4. Verweis auf andere Abschnitte

Persönliche Schutzausrüstung siehe Abschnitt 8.

ABSCHNITT 7: Handhabung und Lagerung



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

7.1. Schutzmaßnahmen zur sicheren Handhabung

Hinweise zum sicheren Umgang

Kontakt mit Haut, Augen und Kleidung vermeiden. Hände vor Pausen und sofort nach der Handhabung des Produktes waschen. Für ausreichenden Luftaustausch und/oder Absaugung in den Arbeitsräumen sorgen.

Hygienemaßnahmen

Bei der Verwendung nicht essen, trinken oder rauchen. Beschmutzte, getränkte Kleidung sofort ausziehen. Hände vor Pausen und sofort nach der Handhabung des Produktes waschen.

Hinweise zum Umweltschutz

Siehe Kapitel 8: Begrenzung und Überwachung der Umweltexposition.

Unverträgliche Produkte

Basen
Amine
starke Oxidationsmittel

7.2. Bedingungen zur sicheren Lagerung unter Berücksichtigung von Unverträglichkeiten

Hinweise zum Brand- und Explosionsschutz

Von Zündquellen fernhalten - Nicht rauchen. Vorsorge zur Vermeidung elektrostatischer Entladungen treffen (diese könnten organische Dämpfe entzünden). Eine Notkühlung mit Sprühwasser ist für den Fall eines Umgebungsbrandes vorzusehen. Die Behälter beim Umfüllen des Stoffes erden und verbinden. Dampf/Luft-Gemische sind bei stärkerer Erwärmung explosionsfähig.

Technische Maßnahmen/Lagerungsbedingungen

Behälter dicht verschlossen an einem kühlen, gut belüfteten Ort aufbewahren. Behälter vorsichtig öffnen und handhaben.

Geeignetes Material

rostfreier Stahl

Ungeeignetes Material

kupfer, Nickel

Temperaturklasse

T2

7.3. Spezifische Endanwendungen

Zwischenprodukte

ABSCHNITT 8: Begrenzung und Überwachung der Exposition/ Persönliche Schutzausrüstungen

8.1. Zu überwachende Parameter

Expositionsgrenzwerte Europäische Union

Luftgrenzwerte nicht festgelegt



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

Expositionsgrenzwerte Deutschland

Luftgrenzwerte nicht festgelegt.

DNEL & PNEC

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Arbeitnehmer

Keine Daten verfügbar

Bevölkerung

Keine Daten verfügbar

Umwelt

Keine Daten verfügbar

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Arbeitnehmer

Keine Daten verfügbar

Bevölkerung

Keine Daten verfügbar

Umwelt

Keine Daten verfügbar

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Arbeitnehmer

Keine Daten verfügbar

Bevölkerung

Keine Daten verfügbar

Umwelt

PNEC Wasser - Süßwasser	29,3 µg/l
PNEC Wasser - Salzwasser	2,93 µg/l
PNEC Wasser - zeitweilige Freisetzung	0,293 mg/l
PNEC STP	22,4 mg/l
PNEC Sediment - Süßwasser	117,3 µg/kg
PNEC Sediment - Salzwasser	11,7 µg/kg
PNEC Luft	keine Gefahr identifiziert
PNEC Boden	6,25 µg/kg
Indirekte Vergiftung	kein Potential zur Bioakkumulation

8.2. Begrenzung und Überwachung der Exposition

Abweichungen von Standardprüfbedingungen (REACH)

Nicht zutreffend.

Geeignete technische Steuerungseinrichtungen

Diffuse Absaugung und Luftverdünnung sind häufig unzureichend, um die Exposition der Mitarbeiter zu begrenzen. Lokale Absaugung ist in der Regel vorzuziehen. Explosionsgeschützte Geräte (wie z.B. Ventilatoren, Schalter und Erdung) sollten in mechanischen Ventilationsystemen genutzt werden.



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

Persönliche Schutzausrüstung

Allgemein übliche Arbeitshygienemaßnahmen

Kontakt mit Haut, Augen und Kleidung vermeiden. Dämpfe und Sprühnebel nicht einatmen. Sicherstellen dass sich die Augenspülanlagen und Sicherheitsduschen nahe beim Arbeitsplatz befinden.

Hygienemaßnahmen

Bei der Verwendung nicht essen, trinken oder rauchen. Beschmutzte, getränkte Kleidung sofort ausziehen. Hände vor Pausen und sofort nach der Handhabung des Produktes waschen.

Augenschutz

dicht schließende Schutzbrille. Zusätzlich zur Schutzbrille Gesichtsschutz tragen, wenn die Entstehung von Spritzern möglich ist.

Ausrüstung sollte EN 166 entsprechen

Handschutz

Schutzhandschuhe tragen. Empfehlungen sind nachfolgend aufgeführt. Abhängig von den Begleitumständen können auch andere Schutzmaterialien verwandt werden, wenn Angaben zur Beständigkeit und Durchdringung vorliegen. Hierbei sollten auch Einflüsse anderer eingesetzter Chemikalien berücksichtigt werden.

Geeignetes Material

Nitrilkautschuk

Bewertung

gemäß EN 374: Stufe 6

Handschuhdicke

ca 0,55 mm

Durchdringungszeit

> 480 min

Geeignetes Material

Polyvinylchlorid

Bewertung

Angaben beruhen auf praktischen Erfahrungen

Handschuhdicke

ca 0,8 mm

Haut- und Körperschutz

undurchlässige Schutzkleidung. Bei Verarbeitungsschwierigkeiten Gesichtsschild und Schutzanzug tragen.

Atemschutz

Filterausrüstung mit A -Filter. Vollmaske mit o.g. Filter nach Gebrauchsvoraussetzung des Herstellers oder umluftunabhängiges Atemschutzgerät. Ausrüstung sollte EN 136, EN 140 oder EN 143 entsprechen.

Begrenzung und Überwachung der Umweltexposition

Möglichst geschlossene Apparaturen verwenden. Ist das Austreten des Stoffes nicht zu verhindern, ist dieser an der Austrittsstelle gefahrlos abzusaugen. Ist eine Wiederverwertung nicht möglich, unter Beachtung der örtlichen behördlichen Vorschriften entsorgen. Bei Austritt von großen Mengen in die Atmosphäre oder Eindringen in Gewässer, Boden oder Kanalisation zuständige Behörden benachrichtigen.

ABSCHNITT 9: Physikalische und chemische Eigenschaften

9.1. Angaben zu den grundlegenden physikalischen und chemischen Eigenschaften

Erscheinungsbild

flüssig

Farbe

farblos

Geruch

unangenehm

Geruchsschwelle

Keine Daten verfügbar

pH-Wert

2,7 (37,5 g/l in Wasser @ 20 °C (68 °F))

Schmelzpunkt/Schmelzbereich

< -34 °C (Stockpunkt)

Siedepunkt/Siedebereich

177 - 186 °C @ 1013 hPa

Flammpunkt

77 - 84 °C



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

Methode ASTM D-7094
Verdampfungsgeschwindigkeit Keine Daten verfügbar
Entzündlichkeit (fest, gasförmig) Trifft nicht zu, da die Substanz eine Flüssigkeit ist
untere Explosionsgrenze 1,6 Vol %
Obere Explosionsgrenze 7,3 Vol %

Dampfdruck

Werte [hPa]	Values [kPa]	Values [atm]	@ °C	@ °F	Methode
~ 2	~ 0,2	~ 0,002	20	68	
~ 9	~ 0,9	~ 0,009	50	122	

Dampfdichte ~ 3,5 (Luft=1) @20 °C (68 °F)

Relative Dichte

Werte	@ °C	@ °F	Methode
0,94	20	68	DIN 51757

Löslichkeit 37 - 45 g/l @ 20 °C, in Wasser, OECD 105

log Pow 1,8 (berechnet)

Zündtemperatur 410 - 435 °C

Methode DIN 51794

Zersetzungspunkt Keine Daten verfügbar

Viskosität 2,1 - 2,2 mPa*s @ 20 °C

Methode DIN 51562, dynamisch

Explosive Eigenschaften Trifft nicht zu, da die Substanz nicht explosiv ist und über keine entsprechenden funktionellen Gruppen verfügt

Brandfördernde Eigenschaften Trifft nicht zu, da die Substanz nicht oxidierend wirkt und über keine entsprechenden funktionellen Gruppen verfügt

9.2. Sonstige Angaben

Molekulargewicht 102,13
Molekülformel C5 H10 O2
Brechungsindex 1,405 - 1,408 @ 20 °C

ABSCHNITT 10: Stabilität und Reaktivität

10.1. Reaktivität

Das Reaktionsvermögen des Produkts entspricht dem der Substanzklasse, wie es typischerweise in Lehrbüchern der organischen Chemie beschrieben wird.

10.2. Chemische Stabilität

Stabil unter angegebenen Lagerungsbedingungen.

10.3. Möglichkeit gefährlicher Reaktionen

Eine gefährliche Polymerisation findet nicht statt.

10.4. Zu vermeidende Bedingungen

Kontakt mit Hitze, Funken, offenen Flammen oder elektrostatischer Aufladung vermeiden. Von Zündquellen fernhalten.



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

10.5. Unverträgliche Materialien

Basen, Amine, starke Oxidationsmittel.

10.6. Gefährliche Zersetzungsprodukte

Keine Zersetzung bei bestimmungsgemäßer Lagerung und Anwendung.

ABSCHNITT 11: Toxikologische Angaben

11.1. Angaben zu toxikologischen Wirkungen

Wahrscheinliche Expositionswegen: Verschlucken, Einatmen, Augenkontakt, Hautkontakt

Akute Toxizität				
n-Valeriansäure (109-52-4)				
Expositionswegen	Endpunkt	Werte	Spezies	Methode
Verschlucken	LD50	4600 mg/kg	Ratte, männlich/weiblich	OECD 401
Hautkontakt	LD50	> 2000 mg/kg (24 h)	Ratte, männlich/weiblich	OECD 402

2-Methylbuttersäure (116-53-0)				
Expositionswegen	Endpunkt	Werte	Spezies	Methode
Verschlucken	LD50	1750 mg/kg	Ratte, männlich/weiblich	OECD 401
Hautkontakt	LD50	2228 mg/kg	Kaninchen männlich	OECD 402
Hautkontakt	LD50	1367 mg/kg	Kaninchen weiblich	OECD 402
Inhalativ	LC0	8375 mg/m ³ (6 h)	Ratte, männlich/weiblich	OECD 403

Isovaleriansäure (503-74-2)				
Expositionswegen	Endpunkt	Werte	Spezies	Methode
Verschlucken	LD50	~ 2500 mg/kg	Ratte männlich weiblich	OECD 401
Hautkontakt	LD50	> 2000 mg/kg	Kaninchen männlich weiblich	OECD 402
Inhalativ	LC0	2060 mg/m ³ (7 h)	Ratte	OECD 403

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Bewertung

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

Akute Toxizität bei oraler Aufnahme

Akute Toxizität bei Aufnahme über die Haut

STOT SE

Die inhalative LC50 (Ratte/4Std) konnte nicht bestimmt werden, weil bei der maximalen Sättigungskonzentration keine Todesfälle bei den Ratten beobachtet worden sind

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Bewertung

Die vorhandenen Daten führen zu der angegebenen Klassifizierung in Abschnitt 2

Die inhalative LC50 (Ratte/4Std) konnte nicht bestimmt werden, weil bei der maximalen Sättigungskonzentration keine Todesfälle bei den Ratten beobachtet worden sind



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Bewertung

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

Akute Toxizität bei oraler Aufnahme

Akute Toxizität bei Aufnahme über die Haut

Akute Toxizität bei Inhalation

Reizung und Ätzwirkung

n-Valeriansäure (109-52-4)

Auswirkungen auf Zielorgan	Spezies	Ergebnis	Methode	
Haut	Kaninchen	Ätzend		3 min
Augen	Kaninchen	Ätzend		

2-Methylbuttersäure (116-53-0)

Auswirkungen auf Zielorgan	Spezies	Ergebnis	Methode	
Haut	Kaninchen	Ätzend	OECD 404	3 min

Isovaleriansäure (503-74-2)

Auswirkungen auf Zielorgan	Spezies	Ergebnis	Methode	
Haut	Kaninchen	Ätzend	OECD 404	1h

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Bewertung

Die vorhandenen Daten führen zu der angegebenen Klassifizierung in Abschnitt 2

Es liegen keine Daten zur Reizwirkung der Atemwege vor

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Bewertung

Die vorhandenen Daten führen zu der angegebenen Klassifizierung in Abschnitt 2

Die vorhandene Ätzwirkung auf der Haut rechtfertigt eine Klassifizierung als ätzend für die Augen ohne weitere Tests

Es liegen keine Daten zur Reizwirkung der Atemwege vor

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Bewertung

Die vorhandenen Daten führen zu der angegebenen Klassifizierung in Abschnitt 2

Sensibilisierung

Isovaleriansäure (503-74-2)

Auswirkungen auf Zielorgan	Spezies	Bewertung	Methode	
Haut	Erfahrung am Menschen	nicht sensibilisierend	OECD 406	1 %, in Petrolatum

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Bewertung

Sensibilisierung der Haut wurde aufgrund der korrosiven Eigenschaften dieser Substanz nicht getestet

Es liegen keine Daten zur Sensibilisierung der Haut vor

Es liegen keine Daten zur Sensibilisierung der Atemwege vor

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Bewertung

Sensibilisierung der Haut wurde aufgrund der korrosiven Eigenschaften dieser Substanz nicht getestet

Es liegen keine Daten zur Sensibilisierung der Atemwege vor



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Bewertung

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

Hautsensibilisierung

Es liegen keine Daten zur Sensibilisierung der Atemwege vor

Subakute-, subchronische- und Langzeittoxizität

n-Valeriansäure (109-52-4)

Typ	Dosis	Spezies	Methode	
Keine Daten verfügbar				

2-Methylbuttersäure (116-53-0)

Typ	Dosis	Spezies	Methode	
Subchronische Toxizität	NOAEL: 5000 mg/kg/d (90d)	Ratte, männlich	Verschlucken	Analogie

Isovaleriansäure (503-74-2)

Typ	Dosis	Spezies	Methode	
Subchronische Toxizität	NOAEL: 5000 mg/kg/d (90d)	Ratte, männlich		Verschlucken Analogie
Subchronische Toxizität	NOAEL: 1068 mg/kg/d (90d)	Ratte, männlich	OECD 408	Verschlucken Analogie
Subchronische Toxizität	NOAEL: 1431 mg/kg/d (90d)	Ratte, weiblich	OECD 408	Verschlucken Analogie

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Bewertung

Aufgrund fehlender Daten ist eine Klassifizierung nicht möglich für:

STOT RE

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Bewertung

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

STOT RE

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Bewertung

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

STOT RE

Cancerogenität, Mutagenität, Reproduktionstoxizität

n-Valeriansäure (109-52-4)

Typ	Dosis	Spezies	Bewertung	Methode	
Entwicklungsschädigung	NOAEL 50 mg/kg/d	Ratte		OECD 414, Oral	Entwicklungsschädigung
Mutagenität		Salmonella typhimurium	negativ	OECD 471 (Ames)	In-vitro Studie
Mutagenität		CHO (Chin. Hamster Ovar) Zellen	positiv	OECD 473 (Chromosomen Aberration)	In-vitro Studie
Mutagenität		CHO (Chin. Hamster Ovar) Zellen	positiv	OECD 479 (SCE)	In-vitro Studie
Mutagenität		CHO (Chin. Hamster Ovar)	negativ	OECD 476 (Mammalian)	In-vitro Studie



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

		Zellen		Gene Mutation)	
Mutagenität		Maus	negativ	OECD 474	in vivo

2-Methylbuttersäure (116-53-0)

Typ	Dosis	Spezies	Bewertung	Methode	
Mutagenität		Salmonella typhimurium	negativ	Ames test	Analogie
Entwicklungsschädigung	NOAEL 600 mg/kg/d	Ratte		OECD 414, Oral	Analogie

Isovaleriansäure (503-74-2)

Typ	Dosis	Spezies	Bewertung	Methode	
Mutagenität		Salmonella typhimurium	negativ	OECD 471 (Ames)	Analogie
Mutagenität		Maus	negativ	OECD 474	Analogie
Entwicklungsschädigung	NOAEL 600 mg/kg/d	Ratte		OECD 414, Oral	Toxwirkung beim Muttertier, Entwicklungsschädigend, Teratogenität

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

CMR Classification

Die vorhandenen Daten zu den CMR-Eigenschaften sind in obiger Tabelle zusammengefasst. Sie rechtfertigen keine Klassifizierung in die Kategorien 1A oder 1B

Bewertung

In-vitro-Tests zeigten keine erbgutverändernden Wirkungen

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

CMR Classification

Die vorhandenen Daten zu den CMR-Eigenschaften sind in obiger Tabelle zusammengefasst. Sie rechtfertigen keine Klassifizierung in die Kategorien 1A oder 1B

Bewertung

In-vitro-Tests zeigten keine erbgutverändernden Wirkungen

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

CMR Classification

Die vorhandenen Daten zu den CMR-Eigenschaften sind in obiger Tabelle zusammengefasst. Sie rechtfertigen keine Klassifizierung in die Kategorien 1A oder 1B

Bewertung

In-vitro-Tests zeigten keine erbgutverändernden Wirkungen

Zeigt keine reprotoxischen Effekte im Tierversuch

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Wichtigste Symptome

Depression des Zentralnervensystems, Bewusstlosigkeit, Atemnot, Erbrechen.

Zielorgan Systemischer Giftstoff - Einmalige Exposition

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

STOT SE

Zielorgan Systemischer Giftstoff - Wiederholte Exposition

Aufgrund fehlender Daten ist eine Klassifizierung nicht möglich für:

STOT RE

Aspirationstoxizität

Keine Daten verfügbar

Andere schädliche Wirkungen

Bestandteile des Produkts können durch Einatmen und Verschlucken vom Körper absorbiert werden.



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Wichtigste Symptome

Husten, Schwindel, Übelkeit, Atemnot, Bewusstlosigkeit, Magen-Darm-Beschwerden.

Zielorgan Systemischer Giftstoff - Einmalige Exposition

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

STOT SE

Zielorgan Systemischer Giftstoff - Wiederholte Exposition

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

STOT RE

Aspirationstoxizität

Keine Daten verfügbar

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Wichtigste Symptome

Husten, Schwindel, Übelkeit, Atemnot, Bewusstlosigkeit, Magen-Darm-Beschwerden.

Zielorgan Systemischer Giftstoff - Einmalige Exposition

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

STOT SE

Zielorgan Systemischer Giftstoff - Wiederholte Exposition

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

STOT RE

Aspirationstoxizität

Von diesem Produkt geht aufgrund seiner Viskosität keine Aspirationsgefahr aus

Bemerkung

Die beim Umgang mit Chemikalien üblichen Vorsichtsmaßnahmen sind zu beachten.

ABSCHNITT 12: Umweltbezogene Angaben

12.1. Toxizität

Akute aquatische Toxizität			
n-Valeriansäure (109-52-4)			
Spezies	Expositionsdauer	Dosis	Methode
Daphnia magna (Großer Wasserfloh)	48h	LC50: 88,1 mg/l	OECD 202 Analogie
Pseudokirchneriella subcapitata	72h	EC50: 29,3 mg/l	OECD 201
Pimephales promelas (fettköpfige Elritze)	96h	LC50: 39 mg/l	OECD 203

2-Methylbuttersäure (116-53-0)			
Spezies	Expositionsdauer	Dosis	Methode
Danio rerio (Zebrafisch)	96h	LC50: > 1000 mg/l	OECD 203
Bakterien / Abwasser	24h	TTC: 1250 mg/l	ETAD Fermentations-Röhren Test

Isovaleriansäure (503-74-2)			
Spezies	Expositionsdauer	Dosis	Methode
Pimephales promelas (fettköpfige Elritze)	96h	LC50: 77 mg/l	OECD 203 Analogie
Daphnia magna (Großer Wasserfloh)	48h	EC50: 51,25 mg/l	DIN 38412, part 11 Analogie
Pseudokirchneriella subcapitata	72h	EC50: 29,3 mg/l	OECD 201 Analogie
Tetrahymena pyriformis	40 h	IC50: 224 mg/l	



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

	(Wachstumshemmung)	
--	--------------------	--

Langzeittoxizität			
n-Valeriansäure (109-52-4)			
Typ	Spezies	Dosis	Methode
Aquatische Toxizität	Pseudokirchneriella subcapitata	NOAEC: 12,6 mg/l (3d)	OECD 201

12.2. Persistenz und Abbaubarkeit

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Biologischer Abbau

72 % (10 d), Belebtschlamm, nicht adaptiert, aerob.

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Biologischer Abbau

67,9 % (10 d), Abwasser, Haushalt, nicht adaptiert, Leicht biologisch abbaubar, OECD 301 D.

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Biologischer Abbau

58 - 66 % (8 d), Belebtschlamm, aerob, nicht adaptiert, OECD 301 C.

Abiotischer Abbau		
n-Valeriansäure (109-52-4)		
Typ	Ergebnis	Methode
Hydrolyse	nicht erwartet	
Photolyse	Keine Daten verfügbar	

12.3. Bioakkumulationspotenzial

n-Valeriansäure (109-52-4)		
Typ	Ergebnis	Methode
log Pow	1,8	gemessen, OECD 117

2-Methylbuttersäure (116-53-0)		
Typ	Ergebnis	Methode
log Pow	1,8	gemessen, OECD 117

Isovaleriansäure (503-74-2)		
Typ	Ergebnis	Methode
log Pow	1,7	gemessen, OECD 117
BCF	3,162	berechnet

12.4 Mobilität im Boden

n-Valeriansäure (109-52-4)		
Typ	Ergebnis	Methode
Oberflächenspannung	51,6 mN/m (1 g/l @ 20°C (68°F))	OECD 115
Adsorption/Desorption	Keine Daten verfügbar	
Verteilung auf Umweltkompartimente	Keine Daten verfügbar	

2-Methylbuttersäure (116-53-0)		
Typ	Ergebnis	Methode



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

Oberflächenspannung	64,2 mN/m (1 g/l @ 20°C (68°F))	OECD 115
---------------------	---------------------------------	----------

Isovaleriansäure (503-74-2)		
Typ	Ergebnis	Methode
Oberflächenspannung	63,3 mN/m (1 g/l @ 20°C (68°F))	OECD 115

12.5. Ergebnisse der PBT- und vPvB-Beurteilung

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Ermittlung der PBT- und vPvB-Eigenschaften

Dieser Stoff wird weder als persistent, bioakkumulierend oder toxisch (PBT), noch als sehr persistent oder als sehr bioakkumulativ (vPvB) betrachtet

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Ermittlung der PBT- und vPvB-Eigenschaften

Dieser Stoff wird weder als persistent, bioakkumulierend oder toxisch (PBT), noch als sehr persistent oder als sehr bioakkumulativ (vPvB) betrachtet

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Ermittlung der PBT- und vPvB-Eigenschaften

Dieser Stoff wird weder als persistent, bioakkumulierend oder toxisch (PBT), noch als sehr persistent oder als sehr bioakkumulativ (vPvB) betrachtet

12.6. Andere schädliche Wirkungen

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Keine Daten verfügbar

2-Methylbuttersäure, CAS: 116-53-0

Keine Daten verfügbar

Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

Keine Daten verfügbar

Bemerkung

Freisetzung in die Umwelt vermeiden.

ABSCHNITT 13: Hinweise zur Entsorgung

13.1. Verfahren der Abfallbehandlung

Produktinformation

Unter Beachtung abfallrechtlicher Gesetze und Verordnungen einer Entsorgung zuführen. Die Wahl des Entsorgungsverfahrens ist von der Zusammensetzung des Produktes zum Entsorgungszeitpunkt und den örtlichen Satzungen und Entsorgungsmöglichkeiten abhängig.
Gefährlicher Abfall gemäß EAK

Ungereinigte Verpackungen

Kontaminierte Verpackungen sind optimal zu entleeren, sie können dann nach entsprechender Reinigung einer Wiederverwendung zugeführt werden.

ABSCHNITT 14: Angaben zum Transport

ADR/RID



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

14.1. UN-Nummer	UN 3265
14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung	Ätzender saurer organischer flüssiger Stoff, n.a.g. (2-Methylbuttersäure / n-Valeriansäure)
14.3. Transportgefahrenklassen	8
14.4. Verpackungsgruppe	II
14.5. Umweltgefahren	Nein
14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender	
ADR Tunnelbeschränkungscode	(E)
Klassifizierungscode	C3
Kemler-Zahl	80

ADN

ADN Container

14.1. UN-Nummer	UN 3265
14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung	Ätzender saurer organischer flüssiger Stoff, n.a.g. (2-Methylbuttersäure / n-Valeriansäure)
14.3. Transportgefahrenklassen	8
14.4. Verpackungsgruppe	II
14.5. Umweltgefahren	Nein
14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender	
Klassifizierungscode	C3
Kemler-Zahl	80

ADN

ADN Tanker

14.1. UN-Nummer	UN 3265
14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung	Ätzender saurer organischer flüssiger Stoff, n.a.g. (2-Methylbuttersäure / n-Valeriansäure)
14.3. Transportgefahrenklassen	8
Nebengefahr	N3
14.4. Verpackungsgruppe	II
14.5. Umweltgefahren	Nein
14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender	
Klassifizierungscode	C3

ICAO-TI / IATA-DGR

14.1. UN-Nummer	UN 3265
14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung	Corrosive liquid, acidic, organic, n.o.s. (2-Methylbutyric acid / n-Valeric acid)
14.3. Transportgefahrenklassen	8
14.4. Verpackungsgruppe	II
14.5. Umweltgefahren	Nein
14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender	Keine Daten verfügbar



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

den Verwender

IMDG

14.1. UN-Nummer	UN 3265
14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung	Corrosive liquid, acidic, organic, n.o.s. (2-Methylbutyric acid / n-Valeric acid)
14.3. Transportgefahrenklassen	8
14.4. Verpackungsgruppe	II
14.5. Umweltgefahren	Nein
14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender	
EmS	F-A, S-B
14.7. Massengutbeförderung gemäß Anhang II des MARPOL-Übereinkommens und gemäß IBC-Code	nicht anwendbar

ABSCHNITT 15: Rechtsvorschriften

15.1. Vorschriften zu Sicherheit, Gesundheits- und Umweltschutz/spezifische Rechtsvorschriften für den Stoff oder das Gemisch

Verordnung 1272/2008, Anhang VI

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

Einstufung	Skin Corr. 1B; H314 Aquatic Chronic 3; H412
Gefahrenpiktogramme	GHS05 Ätzwirkung
Signalwort	Gefahr
Gefahrenhinweise	H314, H412

DI 2012/18/EU (Seveso III)

Kategorie	nicht unterstellt
------------------	-------------------

RL 1999/13/EG (VOC-Richtlinie)

Chemische Bezeichnung	Status
n-Valeriansäure CAS: 109-52-4	unterstellt
2-Methylbuttersäure CAS: 116-53-0	unterstellt
Isovaleriansäure CAS: 503-74-2	unterstellt

Internationale Bestandsverzeichnisse

n-Valeriansäure, CAS: 109-52-4

AICS (AU)
DSL (CA)



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3

Chemikalienverbotsverordnung (ChemVerbotsV)

Chemische Bezeichnung	Status
n-Valeriansäure CAS: 109-52-4	nicht unterstellt
2-Methylbuttersäure CAS: 116-53-0	nicht unterstellt
Isovaleriansäure CAS: 503-74-2	nicht unterstellt

Für Details und weitere Informationen sehen Sie bitte ins jeweilige Regelwerk

15.2. Stoffsicherheitsbeurteilung

Der Stoffsicherheitsbericht (Chemical Safety Report - CSR) ist nicht erforderlich.

ABSCHNITT 16: Sonstige Angaben

Vollständiger Wortlaut der in Kapitel 2 und 3 aufgeführten H-Statements

H302: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken.

H312: Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt.

H314: Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden.

H318: Verursacht schwere Augenschäden.

H412: Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.

Abkürzungen

Eine Liste von Begriffen und Abkürzungen ist unter folgendem Link zu finden:

http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r20_en.pdf

Schulungshinweise

Spezielle Ausbildung für Erste Hilfe erforderlich.

Quellen der wichtigsten Daten, die zur Erstellung des Datenblatts verwendet wurden

Die in diesem Sicherheitsdatenblatt enthaltenen Angaben basieren auf OQ eigenen Daten und allgemein zugänglichen, validen Quellen. Die Abwesenheit von Daten, die von OSHA, ANSI oder Anhang II der Verordnung 1907/2006/EG gefordert werden, weist darauf hin, dass uns keine Angaben vorliegen.

Weitere Informationen für das Sicherheitsdatenblatt

Änderungen gegenüber der Vorversion sind durch *** markiert. Die nationalen und lokalen gesetzlichen Vorschriften sind zu beachten. Für weitere Informationen, andere Sicherheitsdatenblätter und technische Datenblätter konsultieren Sie bitte die OQ Homepage (www.chemicals.oq.com).

Haftungsausschluss

Nur für industrielle Zwecke. Die hier wiedergegebenen Informationen entsprechen unserem Stand des Wissens, stellen jedoch keine Garantie auf Vollständigkeit dar. OQ übernimmt keinerlei Garantie für die sichere Handhabung dieses Produktes in der Anwendung unserer Kunden oder in Gegenwart anderer Substanzen. Der Anwender trägt die volle Verantwortung dafür, die Eignung dieses Produktes für die jeweilige Verwendung festzustellen und alle anwendbaren oder notwendigen Sicherheitsstandards zu erfüllen.

Ende des Sicherheitsdatenblatts

SICHERHEITSDATENBLATT



Isopentansäure
11560

Version / Revision 3
