

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



## 3-Methylbuttersäure 10170

Version / Revision 7.01  
Ersetzt Version 7.00\*\*\*

Bearbeitungsdatum 25-Jan-2023  
Ausgabedatum 25-Jan-2023

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

### 1.1. Produktidentifikator

Bezeichnung des Stoffes oder der Zubereitung **3-Methylbuttersäure**

CAS-Nr 503-74-2  
EG-Nr. 207-975-3  
Registrierungsnummer (REACH) 01-2119959864-19

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

Identifizierte Verwendungen Transportiertes isoliertes Zwischenprodukt (1907/2006)  
Verwendungen, von denen abgeraten wird keine

### 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

Nationale Notrufnummer Tox Info Suisse  
145  
erreichbar 24/7

## ABSCHNITT 2: Mögliche Gefahren

### 2.1. Einstufung des Stoffs oder Gemischs

Dieser Stoff 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

#### Zusätzliche Angaben

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

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

## 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.

#### Vorsorgliche Angaben

P280: Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.  
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.

## 2.3. Sonstige Gefahren

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

#### Bewertung endokrine Disruptoren

Der Stoff steht nicht auf der Kandidatenliste gemäß Art. 59(1), REACH. Der Stoff wurde nicht als endokrinschädigend gemäß der Verordnung 2017/2100/EU oder 2018/605/EU bewertet.

## ABSCHNITT 3: Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen

### 3.1. Stoffe

Chemische Bezeichnung	CAS-Nr	REACH-No	1272/2008/EC	Konzentration (%)
Isovaleriansäure	503-74-2	01-2119959864-19	Skin Corr. 1B; H314 Eye Dam. 1; H318	> 99,0

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

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

## **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**

Husten, Schwindel, Brechreiz, Atemnot, Bewusstlosigkeit, 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. Bei Lungenreizung Erstbehandlung mit Cortison-Spray.

## **ABSCHNITT 5: Maßnahmen zur Brandbekämpfung**

### **5.1. Löschmittel**

#### **Geeignete Löschmittel**

Schaum, Trockenlöschmittel, Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>), 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 (CO<sub>2</sub>)

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).

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

## Vorsichtsmaßnahmen bei der Brandbekämpfung

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

## 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.

### 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

### 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  
Oxidationsmittel

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

## 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. Bei Temperaturen zwischen 0 und 38 °C aufbewahren (32 und 100 °F).

### Geeignetes Material

rostfreier Stahl, Aluminium

### Ungeeignetes Material

Nickel, Kupfer

### Temperaturklasse

T2

## 7.3. Spezifische Endanwendungen

Transportiertes isoliertes Zwischenprodukt (1907/2006)

## ABSCHNITT 8: Begrenzung und Überwachung der Exposition/ Persönliche Schutzausrüstungen

### 8.1. Zu überwachende Parameter

#### Expositionsgrenzwerte Europäische Union

Luftgrenzwerte nicht festgelegt

#### Arbeitsplatzgrenzwerte Schweiz

Luftgrenzwerte nicht festgelegt.

#### DNEL & PNEC

Die Substanz wurde als transportiertes isoliertes Zwischenprodukt, das nur unter streng kontrollierten Bedingungen gehandhabt wird, registriert.

#### Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

##### Arbeitnehmer

Keine Daten verfügbar

##### Bevölkerung

Keine Daten verfügbar

##### Umwelt

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

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

## 8.2. Begrenzung und Überwachung der Exposition

### Abweichungen von Standardprüfbedingungen (REACH)

Die Substanz wurde als transportiertes isoliertes Zwischenprodukt registriert und muß über den gesamten Lebenszyklus unter streng kontrollierten Bedingungen gemäß Artikel 18.4, REACH gehandhabt werden.

### 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 Ventilationssystemen genutzt werden.

### 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.

<b>Geeignetes Material</b>	Nitrilkautschuk
<b>Bewertung</b>	gemäß EN 374: Stufe 6
<b>Handschuhdicke</b>	ca 0,55 mm
<b>Durchdringungszeit</b>	> 480 min

<b>Geeignetes Material</b>	Polyvinylchlorid
<b>Bewertung</b>	Angaben beruhen auf praktischen Erfahrungen
<b>Handschuhdicke</b>	ca 0,8 mm

#### Haut- und Körperschutz

undurchlässige Schutzkleidung. Bei Verarbeitungsschwierigkeiten Gesichtsschild und Schutzanzug tragen.

#### Atemschutz

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

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.

## Zusätzliche Hinweise

Weitere Details zu dieser Substanz sind im Registrierungsdossier unter folgendem Link zu finden:  
<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>.

## ABSCHNITT 9: Physikalische und chemische Eigenschaften

### 9.1. Angaben zu den grundlegenden physikalischen und chemischen Eigenschaften

<b>Aggregatzustand</b>	flüssig				
<b>Farbe</b>	farblos				
<b>Geruch</b>	unangenehm				
<b>Geruchsschwelle</b>	0,02 mg/m <sup>3</sup>				
<b>Schmelzpunkt/Gefrierpunkt</b>	- 31 °C (Stockpunkt)				
<b>Methode</b>	DIN ISO 3016				
<b>Siedepunkt oder Siedebeginn und Siedebereich</b>	178,5 °C @ 1013 hPa				
<b>Methode</b>	OECD 103				
<b>Entzündbarkeit</b>	Auch wenn keine Einstufung wegen Entzündbarkeit vorliegt, kann das Produkt in Brand geraten oder in Brand gesetzt werden.***				
<b>untere Explosionsgrenze</b>	1,4 Vol %				
<b>Obere Explosionsgrenze</b>	7,3 Vol %				
<b>Flammpunkt</b>	80 °C @ 1013 hPa				
<b>Methode</b>	EN 22719				
<b>Zündtemperatur</b>	420 °C @ 988 hPa				
<b>Methode</b>	DIN 51794				
<b>Zersetzungstemperatur</b>	Keine Daten verfügbar				
<b>pH-Wert</b>	3,1 (1 % in Wasser @ 25 °C (77 °F)) DIN 19268				
<b>Kinematische Viskosität</b>	2,632 mm <sup>2</sup> /s @ 20 °C				
<b>Methode</b>	DIN 51562				
<b>Löslichkeit</b>	48 g/l @ 20 °C, in Wasser, OECD 105				
<b>Verteilungskoeffizient n-Oktanol/Wasser (log-Wert)</b>	1,7 @ 25 °C (77 °F) OECD 117				
<b>Dampfdruck</b>					
Werte [hPa]	Values [kPa]	Values [atm]	@ °C	@ °F	Methode
1	0,1	0,001	20	68	DIN EN 13016-2
6,6	0,66	0,007	50	122	DIN EN 13016-2
<b>Dichte und/oder relative Dichte</b>					
Werte	@ °C	@ °F	Methode		
0,9258	20	68	DIN 51757		
<b>Relative Dampfdichte</b>	3,5 (Luft=1) @20 °C (68 °F)				
<b>Partikeleigenschaften</b>	nicht anwendbar				

### 9.2. Sonstige Angaben



# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

<b>Explosive Eigenschaften</b>	Trifft nicht zu, da die Substanz nicht explosiv ist und über keine entsprechenden funktionellen Gruppen verfügt
<b>Brandfördernde Eigenschaften</b>	Trifft nicht zu, da die Substanz nicht oxidierend wirkt und über keine entsprechenden funktionellen Gruppen verfügt
<b>Molekulargewicht</b>	102,13
<b>Molekülformel</b>	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>
<b>log Koc</b>	0,6045 berechnet
<b>Dissoziationskonstante</b>	pKa 4,7 @ 20 °C (68 °F) OECD 112
<b>Brechungsindex</b>	1,403 @ 20 °C
<b>Oberflächenspannung</b>	63,3 mN/m (1 g/l @ 20°C (68°F)), OECD 115
<b>Verdampfungsgeschwindigkeit</b>	Keine Daten verfügbar

## 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.

### 10.5. Unverträgliche Materialien

Basen, Amine, Oxidationsmittel.

### 10.6. Gefährliche Zersetzungsprodukte

Keine Zersetzung bei bestimmungsgemäßer Lagerung und Anwendung.

## ABSCHNITT 11: Toxikologische Angaben

### 11.1. Angaben zu den Gefahrenklassen im Sinne der Verordnung (EG) Nr. 1272/2008

**Wahrscheinliche Expositionswege** Augenkontakt, Hautkontakt, Einatmen, Verschlucken

Akute Toxizität				
Isovaleriansäure (503-74-2)				
Expositionswege	Endpunkt	Werte	Spezies	Methode
Verschlucken	LD50	~ 2500 mg/kg	Ratte männlich weiblich	OECD 401
Hautkontakt	LD50	> 2000 mg/kg	Kaninchen männlich weiblich	OECD 402



# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

Inhalativ	LC0	2060 mg/m <sup>3</sup> (7 h)	Ratte	OECD 403
-----------	-----	------------------------------	-------	----------

## 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**

#### **Isovaleriansäure (503-74-2)**

Auswirkungen auf Zielorgan	Spezies	Ergebnis	Methode	
Haut	Kaninchen	Ätzend	OECD 404	1h
Atemwege	Ratte	slight irritation	OECD 403	7h

## 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

## 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**

#### **Isovaleriansäure (503-74-2)**

Typ	Dosis	Spezies	Methode	
Subchronische Toxizität	NOAEL: 4100 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

## Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2

### **Bewertung**

Aufgrund uns vorliegender Daten ist eine Klassifizierung nicht erforderlich für:

STOT RE

### **Cancerogenität, Mutagenität, Reproduktionstoxizität**

#### **Isovaleriansäure (503-74-2)**

Typ	Dosis	Spezies	Bewertung	Methode	
Mutagenität		Salmonella typhimurium	negativ	OECD 471 (Ames)	Analogie
Mutagenität		Maus	negativ	OECD 474	Analogie

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

Entwicklungs-schädigung	NOAEL 600 mg/kg/d	Ratte		OECD 414, Oral	Toxwirkung beim Muttertier, Entwicklungsschädigend, Teratogenität
Mutagenität		V79 Zellen, chines. Hamster	negativ	OECD 476 (Mammalian Gene Mutation)	Analogie

## **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

## **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

## **11.2. Angaben über sonstige Gefahren**

### **Endokrinschädliche Eigenschaften**

Es wurde nicht festgestellt, dass der Stoff endokrinschädigende Eigenschaften gemäß Abschnitt 2.3 hat.

### **Bemerkung**

Die beim Umgang mit Chemikalien üblichen Vorsichtsmaßnahmen sind zu beachten. Weitere Details zu dieser Substanz sind im Registrierungsdossier unter folgendem Link zu finden:

<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>.

## **ABSCHNITT 12: Umweltbezogene Angaben**

### **12.1. Toxizität**

<b>Akute aquatische Toxizität</b>			
<b>Isovaleriansäure (503-74-2)</b>			
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 (Wachstumsrate)	OECD 201 Analogie
Tetrahymena pyriformis	40 h	IC50: 224 mg/l (Wachstumshemmung)	

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

Langzeittoxizität				
Isovaleriansäure (503-74-2)				
Typ	Spezies	Dosis	Methode	
Aquatische Toxizität	Pseudokirchneriella subcapitata	NOEC: 12,6 mg/l (3d) Wachstumsrate	OECD 201 Analogie	

## 12.2. Persistenz und Abbaubarkeit

**Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2**

### Biologischer Abbau

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

Abiotischer Abbau			
Isovaleriansäure (503-74-2)			
Typ	Ergebnis	Methode	
Hydrolyse	nicht erwartet		
Photolyse	Halbwertszeit (DT50): 31,287 h	berechnet SRC AOP v1.92	

## 12.3. Bioakkumulationspotenzial

Isovaleriansäure (503-74-2)		
Typ	Ergebnis	Methode
log Pow	1,7 @ 25 °C (77 °F)	gemessen, OECD 117
BCF	3,162 l/kg	berechnet

## 12.4. Mobilität im Boden

Isovaleriansäure (503-74-2)		
Typ	Ergebnis	Methode
Oberflächenspannung	63,3 mN/m (1 g/l @ 20°C (68°F))	OECD 115
Adsorption/Desorption	Koc: 4,022	berechnet SRC PCKOCWIN v2.00
Verteilung auf Umweltkompartimente	Luft: 5,27% Boden: 57,1% Wasser: 37,6% Sediment: 0,0708%	Berechnung gemäß Mackay, Level III

## 12.5. Ergebnisse der PBT- und vPvB-Beurteilung

**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. Endokrinschädliche Eigenschaften

Es wurde nicht festgestellt, dass der Stoff endokrinschädigende Eigenschaften gemäß Abschnitt 2.3 hat.

## 12.7. Andere schädliche Wirkungen

**Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2**

Keine Daten verfügbar

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision 7.01

## 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

<b>14.1. UN-Nummer oder ID-Nummer</b>	UN 3265
<b>14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung</b>	Ätzender saurer organischer flüssiger Stoff, n.a.g. (3-Methylbuttersäure)
<b>14.3. Transportgefahrenklassen</b>	8
<b>14.4. Verpackungsgruppe</b>	II
<b>14.5. Umweltgefahren</b>	Nein
<b>14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender</b>	
ADR Tunnelbeschränkungscode	(E)
Klassifizierungscode	C3
Kemler-Zahl	80

### ADN

ADN Container

<b>14.1. UN-Nummer oder ID-Nummer</b>	UN 3265
<b>14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung</b>	Ätzender saurer organischer flüssiger Stoff, n.a.g. (3-Methylbuttersäure)
<b>14.3. Transportgefahrenklassen</b>	8
<b>14.4. Verpackungsgruppe</b>	II
<b>14.5. Umweltgefahren</b>	Nein
<b>14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender</b>	
Klassifizierungscode	C3
Kemler-Zahl	80

### ICAO-TI / IATA-DGR

<b>14.1. UN-Nummer oder ID-Nummer</b>	UN 3265
<b>14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung</b>	Corrosive liquid, acidic, organic, n.o.s. (3-Methylbutyric acid)

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
10170

Version / Revision 7.01

<b>14.3. Transportgefahrenklassen</b>	8
<b>14.4. Verpackungsgruppe</b>	II
<b>14.5. Umweltgefahren</b>	Nein
<b>14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender</b>	Keine Daten verfügbar

## IMDG

<b>14.1. UN-Nummer oder ID-Nummer</b>	UN 3265
<b>14.2. Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung</b>	Corrosive liquid, acidic, organic, n.o.s. (3-Methylbutyric acid)
<b>14.3. Transportgefahrenklassen</b>	8
<b>14.4. Verpackungsgruppe</b>	II
<b>14.5. Umweltgefahren</b>	Nein
<b>14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender</b>	
EmS	F-A, S-B
<b>14.7. Massengutbeförderung auf dem Seeweg gemäß IMO-Instrumenten</b>	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

Nicht eingetragen

#### DI 2012/18/EU (Seveso III)

Kategorie nicht unterstellt

#### RL 1999/13/EG (VOC-Richtlinie)

Chemische Bezeichnung	Status
Isovaleriansäure CAS: 503-74-2	unterstellt

### Internationale Bestandsverzeichnisse

#### **Isovaleriansäure, CAS: 503-74-2**

AICS (AU)  
DSL (CA)  
IECSC (CN)  
EC-No. 2079753 (EU)  
ENCS (2)-608 (JP)  
ISHL (2)-608 (JP)  
KECI KE-23545 (KR)  
INSQ (MX)  
PICCS (PH)  
TSCA (US)

# SICHERHEITSDATENBLATT

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31, Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision

7.01

NZIoC (NZ)  
TCSI (TW)

## Nationale Bestimmungen Schweiz

### **Schweizer Giftliste 1**

nicht reguliert

### **Schweizer VOC-Substanzen**

Nicht eingetragen

### **Störfallverordnung (StFV)**

nicht reguliert

### **Chemikalien-Risikoreduktions-Verordnung (ChemRRV)**

nicht reguliert

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**

H314: Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden.

H318: Verursacht schwere Augenschäden.

### **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](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](http://www.chemicals.oq.com)).

Der Anhang ist nicht erforderlich, da die Substanz unter REACH als Zwischenprodukt registriert wurde

### **Haftungsausschluss**

**Nur für industrielle Zwecke.** Die hier wiedergegebenen Informationen entsprechen unserem Stand des Wissens, stellen jedoch keine Garantie auf Vollständigkeit dar. OQ Chemicals 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

gemäß der geänderten Fassung Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH) Artikel 31,  
Anhang II



**3-Methylbuttersäure**  
**10170**

Version / Revision

7.01

---