

SICHERHEITSDATENBLATT / SAFETY DATA SHEET (SDS)

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH), Anhang II — Verordnung (EU) 2020/878

Datum: 22.09.2026 | Version: 2 | DE

methylpropanediol

2-methylpropane-1,3-diol

MOLMASSE
90.12LOGP
-0.3

CAS 2163-42-0

 $C_4H_{10}O_2$

EC 606-809-0

GEFAHRENKLASSIFIZIERUNG (GHS / CLP)

CLP-Einstufung nicht ermittelt — kein harmonisierter Eintrag (Anhang VI), Herkunft der Selbsteinstufung nicht geklärt. Überprüfung im ECHA-C&L-Verzeichnis / im Sicherheitsdatenblatt des Herstellers erforderlich. Das Fehlen einer Gefahr NICHT annehmen.

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

1.1 Stoffname	methylpropanediol
1.1 IUPAC-Name	2-methylpropane-1,3-diol
1.1 CAS-Nummer	2163-42-0
1.1 EG-Nummer	606-809-0
1.1 PubChem CID	75103
1.1 InChIKey	QWGRWMMWNDWRQN-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CC(CO)CO
1.1 Summenformel	$C_4H_{10}O_2$ ^[7]
1.1 Molmasse	90.12 g/mol ^[7]
1.1 Exakte Masse	90.0681 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 +48 42 631 47 24

Toxikologisches Informationszentrum (CIT), Łódź — rund um die Uhr erreichbar

2. Mögliche Gefahren

CLP-Einstufung nicht ermittelt — kein harmonisierter Eintrag (Anhang VI), Herkunft der Selbsteinstufung nicht geklärt. Überprüfung im ECHA-C&L-Verzeichnis / im Sicherheitsdatenblatt des Herstellers erforderlich. Das Fehlen einer Gefahr NICHT annehmen.

3. Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen

Stofftyp	Reinstoff
CAS-Nummer	2163-42-0
EG-Nummer	606-809-0
Summenformel	$C_4H_{10}O_2$
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]}

Hautkontakt

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

Augenkontakt

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

Verschlucken

KEIN Erbrechen herbeiführen (sofern nicht ärztlich angeordnet). Mund mit Wasser ausspülen. Einer bewusstlosen Person niemals etwas oral verabreichen. Giftnotruf Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7). Notruf: 112. ^{[1][2]}

Symptome und Wirkungen

Keine spezifischen Symptome in der Literatur beschrieben. ^{[1][2]}

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. CO ₂ , Pulver, Schaum.
Ungeeignete Löschmittel	Keine besonderen Einschränkungen.
Besondere Gefahren	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO ₂ .
Hinweise für die Brandbekämpfung	Umluftunabhängiges Atemschutzgerät (SCBA) verwenden. Vollschutzanzug.
Flammpunkt	127°C ^[7]

6. Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

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

7. Handhabung und Lagerung

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

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)



Chemikalienbeständige Schutzhandschuhe

EN ISO 374-1:2016+A1:2018

Die Auswahl der PSA setzt eine ermittelte

Gefahrenklassifizierung voraus – es besteht keine Grundlage für die Angabe eines Handschuhmaterials. PSA gemäß dem Sicherheitsdatenblatt des Lieferanten und der Gefährdungsbeurteilung am Arbeitsplatz verwenden.



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	-91°C (experimental data) ^[7]	
Siedepunkt	211°C (experimental data) ^[7]	
Flammpunkt	127°C (experimental data) ^[7]	
Entzündbarkeit	Keine Daten verfügbar.	

Eigenschaft (Pkt. 9.1)	Wert	Quelle
Untere und obere Explosionsgrenze	Keine Daten verfügbar.	
Dichte (20°C)	1.015 g/cm ³ ^[7]	
Dampfdruck	0.003 kPa (0.021 mmHg, 25°C) (experimental data) ^[7]	
Relative Dampfdichte	3.11 ^[11]	
Kinematische Viskosität	Keine Daten verfügbar.	
Brechungsindex nD ²⁰	1.445 (experimental data) ^[7]	
Selbstentzündungstemperatur	Keine Daten verfügbar.	
Zersetzungstemperatur	Nicht zutreffend	
Rozpuszcz. w wodzie	3 g/L, 25°C ^[7]	
Partikeleigenschaften	Nicht zutreffend (REACH 9.1(r))	
Verteilungskoeffizient n-Oktanol/ Wasser (log-Wert)	-0.3 ^[7]	
Molmasse	90.12 g/mol ^[7]	
Summenformel	C ₄ H ₁₀ 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.
Zersetzungsprodukte	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO ₂ .

11. Toxikologische Angaben

LD50 (oral)	LD50 >5000 mg/kg (Ratte, oral) ^[7]
LD50 (dermal)	LD50 >2000 mg/kg (Kaninchen) ^[7]
LC50 (inhalativ)	LC50 >5.1 mg/L (4 h) (Ratte) ^[7]
Hautreizung	Keine Daten verfügbar.
Augenreizung	Keine Daten verfügbar.
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.

12. Umweltbezogene Angaben

Gewässertoxizität	Keine Daten verfügbar.
Persistenz / biologische Abbaubarkeit	Keine Daten verfügbar.
Bioakkumulationspotenzial	$\log K_{ow} = -0.3$ ^[7] . Geringes Bioakkumulationspotenzial ($\log K_{ow} < 4,5$ — PBT/vPvB-Screening-Kriterium gemäß ECHA-Leitlinie R.11). ^{[9][10]}
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)	Der Abfallschlüssel (AVV/EWC) kann ohne Gefahrenklassifizierung nicht bestimmt werden — die Herkunft der Einstufung ist nicht geklärt. Weder Gefährlichkeit (16 05 06*) noch deren Fehlen (16 05 09) annehmen; nach Überprüfung der Einstufung bei der ECHA festlegen. ^[8]
Verpackungen	Gereinigte Verpackungen können recycelt werden. Kontaminierte Verpackungen sind entsprechend der Abfalleinstufung zu behandeln (siehe AVV-Schlüssel oben); liegt keine Einstufung vor, ist das Fehlen einer Gefahr nicht anzunehmen.

14. Angaben zum Transport

UN-Nummer	ÜBERPRÜFUNG ERFORDERLICH — keine verifizierte UN-Zuordnung.
Umweltgefahr	Umweltgefährdung für den Transport: nicht verifiziert. Herkunft der Einstufung ungeklärt — NICHT annehmen, dass keine Umweltgefahr besteht oder keine Kennzeichnung als Meeresschadstoff erforderlich ist; anhand CLP Anhang VI, Abschnitt 12 und ADR 2.2.9 / IMDG prüfen.
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: Herkunft nicht erfasst — Überprüfung in ECHA erforderlich. Einträge mit einem Datum des Inkrafttretens nach 22.09.2026 wurden als zukünftig weggelassen (noch nicht anwendbar).

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

Wissenschaftliche Zitate (9)

- P. Pavitha, J. Prashanth, G. Ramu et al.. Synthesis, structural, spectroscopic, anti-cancer and molecular docking studies on novel 2-[(Anthracene-9-ylmethylene)amino]-2-methylpropane-1,3-diol using XRD, FTIR, NMR, UV-Vis spectra and DFT. *Journal of Molecular Structure* (2017). DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.06.095
- Dong-Yue Wang, Min Liu, Jing-Jun Ma. 2-[(5-Chloro-2-oxidobenzylidene)azaniumyl]-2-methylpropane-1,3-diol. *Acta Crystallographica Section E* (2012). DOI: 10.1107/S1600536811055784
- Istikhar A. Ansari, Farasha Sama, Mukul Raizada et al.. Synthesis and spectral characterization of 2-((2-hydroxybenzylidene)amino)-2-methylpropane-1,3-diol derived complexes: Molecular docking and antimicrobial studies. *Journal of Molecular Structure* (2017). DOI: 10.1016/j.molstruc.2016.07.079
- Francisco Chenlo, Ramón Moreira, Gerardo Pereira et al.. Viscosities of Binary and Ternary Aqueous Solutions of 2-Amino-2-methylpropan-1-ol, 2-Amino-2-methylpropane-1,3-diol, and 2-Amino-2-methylpropan-1-ol Hydrochloride. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications* (2002). DOI: 10.1135/cccc20020293
- Enzo Santaniello, Silvana Casati, Pierangela Ciuffreda et al.. Lipase-catalyzed alcoholysis of diol dibenzoates: selective enzymatic access to the 2-benzoyl ester of 1,2-propanediol and preparation of the enantiomerically pure (R)-1-O-benzoyl-2-methylpropane-1,3-diol. *Tetrahedron: Asymmetry* (2005). DOI: 10.1016/j.tetasy.2005.03.019

Abkürzungen

ADR	Europäisches Übereinkommen über die internationale Beförderung gefährlicher Güter auf der Straße
ATE	Schätzwert Akuter Toxizität (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (Verordnung (EG) 1272/2008)
CMR	Karzinogen, mutagen, reproduktionstoxisch
DNEL	Abgeleitete Expositionshöhe ohne Beeinträchtigung (DNEL)
EC	European Community number
EPI	Persönliche Schutzausrüstung
GHS	Global Harmonisiertes System (GHS)
IATA	Internationaler Luftverkehrsverband (IATA)
IMDG	Internationaler Code für die Beförderung gefährlicher Güter mit Seeschiffen (IMDG)
SDB	Sicherheitsdatenblatt (Safety Data Sheet)
LC50	Letale Konzentration, 50 % (Lethal Concentration)
LD50	Letale Dosis, 50 % (Lethal Dose)
NDS	Maximal zulässige Konzentration (Arbeitsplatz, PL)
NDSch	Kurzzeitgrenzwert (PL)
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistent, bioakkumulierbar und toxisch
PNEC	Abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (PNEC)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Verordnung (EG) 1907/2006)
SDS	Safety Data Sheet
STOT	Spezifische Zielorgan-Toxizität (STOT)
SVHC	Besonders besorgniserregender Stoff (SVHC)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Sehr persistent und sehr bioakkumulierbar

Versionshistorie

v2 (22.09.2026)	Herkunft der Einstufung nicht im Kanon erfasst — Quelle in ECHA (Anhang VI / C&L) überprüfen.
------------------------	---

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: 2026-09-22.
- [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: 2026-09-22.
- [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: 2026-09-22.
- [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: 2026-09-22.

- [5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/72424.html> Accessed: 2026-09-22.
- [6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/51021.html> Accessed: 2026-09-22.
- [7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/75103>
- [8] 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>
- [9] 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>
- [10] 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>
- [11] 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>
- [12] 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: 2026-09-22.

Externe Links

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=2163-42-0>

Wikidata: <https://www.wikidata.org/wiki/Q27284705>

ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL3183047

Rechtlicher Hinweis: Dieses Dokument wurde automatisch aus Daten von PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC), Wikidata 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 einer Einstufung unbekannter Herkunft (in ECHA zu überprüfen) und öffentlicher physikalisch-chemischer Datenbanken.

Autor: www.MolGod.org — Plattform für automatisierte Sicherheitsdatenblätter (SDB).

Ausgabedatum: 22.09.2026 | Dokumentversion: 2