

**Sicherheitsdatenblatt**  
gemäß 1907/2006/EG, Artikel 31

Druckdatum: 19.07.2021

überarbeitet am: 19.07.2021

**ABSCHNITT 1: Bezeichnung des Stoffs beziehungsweise des Gemischs und des Unternehmens**

- **1.1 Produktidentifikator**
- **Handelsname:** ((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylborate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>PThrePHOX]
- **Artikelnummer:** 77-5020
- **CAS-Nummer:**  
405235-55-4
- **1.2 Relevante identifizierte Verwendungen des Stoffs oder Gemischs und Verwendungen, von denen abgeraten wird**  
Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **1.3 Einzelheiten zum Lieferanten, der das Sicherheitsdatenblatt bereitstellt**
- **Hersteller/Lieferant:**  
Strem Chemicals, Inc.  
7 Mulliken Way  
NEWBURYPORT, MA 01950  
USA  
info@strem.com
- **Auskunftgebender Bereich:** Technical Department
- **1.4 Notrufnummer:**  
EMERGENCY: CHEMTREC: +1 (800) 424-9300  
During normal opening times: +1 (978) 499-1600

**ABSCHNITT 2: Mögliche Gefahren**

- **2.1 Einstufung des Stoffs oder Gemischs**
- **Einstufung gemäß Verordnung (EG) Nr. 1272/2008**



GHS07

Skin Irrit. 2 H315 Verursacht Hautreizungen.  
Eye Irrit. 2 H319 Verursacht schwere Augenreizung.  
STOT SE 3 H335 Kann die Atemwege reizen.

- **2.2 Kennzeichnungselemente**
- **Kennzeichnung gemäß Verordnung (EG) Nr. 1272/2008**  
Der Stoff ist gemäß CLP-Verordnung eingestuft und gekennzeichnet.
- **Gefahrenpiktogramme**



GHS07

- **Signalwort** Achtung
- **Gefahrbestimmende Komponenten zur Etikettierung:**  
((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylborate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>PThrePHOX]
- **Gefahrenhinweise**  
H315 Verursacht Hautreizungen.  
H319 Verursacht schwere Augenreizung.

(Fortsetzung auf Seite 2)

**Sicherheitsdatenblatt**  
gemäß 1907/2006/EG, Artikel 31

Druckdatum: 19.07.2021

überarbeitet am: 19.07.2021

**Handelsname:** ((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylborate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>PThrePHOX])

(Fortsetzung von Seite 1)

H335 Kann die Atemwege reizen.

· **Sicherheitshinweise**

- P101 Ist ärztlicher Rat erforderlich, Verpackung oder Kennzeichnungsetikett bereithalten.
- P102 Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.
- P103 Vor Gebrauch Kennzeichnungsetikett lesen.
- P231 Unter inertem Gas handhaben.
- P222 Keinen Kontakt mit Luft zulassen.
- P305+P351+P338 **BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN:** Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
- P403+P233 An einem gut belüfteten Ort aufbewahren. Behälter dicht verschlossen halten.
- P422 Inhalte unter Inertgas aufbewahren.
- P501 Entsorgung des Inhalts / des Behälters gemäß den örtlichen / regionalen / nationalen / internationalen Vorschriften.

· **2.3 Sonstige Gefahren**

· **Ergebnisse der PBT- und vPvB-Beurteilung**

- **PBT:** Nicht anwendbar.
- **vPvB:** Nicht anwendbar.

**ABSCHNITT 3: Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen**

· **3.1 Chemische Charakterisierung: Stoffe**

· **CAS-Nr. Bezeichnung**

405235-55-4 ((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylborate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>PThrePHOX])

**ABSCHNITT 4: Erste-Hilfe-Maßnahmen**

· **4.1 Beschreibung der Erste-Hilfe-Maßnahmen**

- **Nach Einatmen:** Bei Bewußtlosigkeit Lagerung und Transport in stabiler Seitenlage.
- **Nach Hautkontakt:** Sofort mit Wasser und Seife abwaschen und gut nachspülen.
- **Nach Augenkontakt:**  
Augen mehrere Minuten bei geöffnetem Lidspalt unter fließendem Wasser spülen. Bei anhaltenden Beschwerden Arzt konsultieren.
- **Nach Verschlucken:** Bei anhaltenden Beschwerden Arzt konsultieren.
- **4.2 Wichtigste akute und verzögert auftretende Symptome und Wirkungen**  
Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **4.3 Hinweise auf ärztliche Soforthilfe oder Spezialbehandlung**  
Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.

**ABSCHNITT 5: Maßnahmen zur Brandbekämpfung**

· **5.1 Löschmittel**

- **Geeignete Löschmittel:** Feuerlöschmaßnahmen auf die Umgebung abstimmen.

· **5.2 Besondere vom Stoff oder Gemisch ausgehende Gefahren**

Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.

(Fortsetzung auf Seite 3)

**Sicherheitsdatenblatt**  
gemäß 1907/2006/EG, Artikel 31

Druckdatum: 19.07.2021

überarbeitet am: 19.07.2021

**Handelsname:** ((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylborate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>PThrePHOX])

(Fortsetzung von Seite 2)

- **5.3 Hinweise für die Brandbekämpfung**
- **Besondere Schutzausrüstung:** Keine besonderen Maßnahmen erforderlich.

**ABSCHNITT 6: Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung**

- **6.1 Personenbezogene Vorsichtsmaßnahmen, Schutzausrüstungen und in Notfällen anzuwendende Verfahren**  
Nicht erforderlich.
- **6.2 Umweltschutzmaßnahmen:** Keine besonderen Maßnahmen erforderlich.
- **6.3 Methoden und Material für Rückhaltung und Reinigung:**  
Kontaminiertes Material als Abfall nach Abschnitt 13 entsorgen.  
Für ausreichende Lüftung sorgen.
- **6.4 Verweis auf andere Abschnitte**  
Informationen zur sicheren Handhabung siehe Abschnitt 7.  
Informationen zur persönlichen Schutzausrüstung siehe Abschnitt 8.  
Informationen zur Entsorgung siehe Abschnitt 13.

**ABSCHNITT 7: Handhabung und Lagerung**

- **7.1 Schutzmaßnahmen zur sicheren Handhabung** Behälter mit Vorsicht öffnen und handhaben.
- **Handhabung:** Unter inertem Gas handhaben.
- **Hinweise zum Brand- und Explosionsschutz:** Keine besonderen Maßnahmen erforderlich.
- **7.2 Bedingungen zur sicheren Lagerung unter Berücksichtigung von Unverträglichkeiten**
- **Lagerung:** Inhalte unter Inertgas aufbewahren.
- **Anforderung an Lagerräume und Behälter:** Keine besonderen Anforderungen.
- **Zusammenlagerungshinweise:** Nicht erforderlich.
- **Weitere Angaben zu den Lagerbedingungen:** Behälter dicht geschlossen halten.
- **Lagerklasse:**
- **Klassifizierung nach Betriebssicherheitsverordnung (BetrSichV):** -
- **7.3 Spezifische Endanwendungen** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.

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

- **Zusätzliche Hinweise zur Gestaltung technischer Anlagen:** Keine weiteren Angaben, siehe Abschnitt 7.
- **8.1 Zu überwachende Parameter**
- **Bestandteile mit arbeitsplatzbezogenen, zu überwachenden Grenzwerten:** Entfällt.
- **Zusätzliche Hinweise:** Als Grundlage dienen die bei der Erstellung gültigen Listen.
- **8.2 Begrenzung und Überwachung der Exposition**
- **Persönliche Schutzausrüstung:**
- **Allgemeine Schutz- und Hygienemaßnahmen:**  
Von Nahrungsmitteln, Getränken und Futtermitteln fernhalten.  
Beschmutzte, getränkte Kleidung sofort ausziehen.  
Vor den Pausen und bei Arbeitsende Hände waschen.  
Berührung mit den Augen und der Haut vermeiden.
- **Atemschutz:**  
Bei kurzzeitiger oder geringer Belastung Atemfiltergerät; bei intensiver bzw. längerer Exposition umluftunabhängiges Atemschutzgerät verwenden.

(Fortsetzung auf Seite 4)

**Sicherheitsdatenblatt**  
gemäß 1907/2006/EG, Artikel 31

Druckdatum: 19.07.2021

überarbeitet am: 19.07.2021

**Handelsname:** ((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)borate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>ThrePHOX]

(Fortsetzung von Seite 3)

· **Handschutz:**



Schutzhandschuhe

Das Handschuhmaterial muss undurchlässig und beständig gegen das Produkt / den Stoff / die Zubereitung sein. Aufgrund fehlender Tests kann keine Empfehlung zum Handschuhmaterial für das Produkt / die Zubereitung / das Chemikaliengemisch abgegeben werden.

Auswahl des Handschuhmaterials unter Beachtung der Durchbruchzeiten, Permeationsraten und der Degradation.

· **Handschuhmaterial**

Die Auswahl eines geeigneten Handschuhs ist nicht nur vom Material, sondern auch von weiteren Qualitätsmerkmalen abhängig und von Hersteller zu Hersteller unterschiedlich.

· **Durchdringungszeit des Handschuhmaterials**

Die genaue Durchbruchzeit ist beim Schutzhandschuhhersteller zu erfahren und einzuhalten.

· **Augenschutz:**



Dichtschließende Schutzbrille

**ABSCHNITT 9: Physikalische und chemische Eigenschaften**

· **9.1 Angaben zu den grundlegenden physikalischen und chemischen Eigenschaften**

· **Allgemeine Angaben**

· **Aussehen:**

<b>Form:</b>	Pulver
<b>Farbe:</b>	Orange
· <b>Geruch:</b>	Geruchlos
· <b>Geruchsschwelle:</b>	Nicht bestimmt.

· **pH-Wert:** Nicht anwendbar.

· **Zustandsänderung**

<b>Schmelzpunkt/Gefrierpunkt:</b>	Nicht bestimmt.
<b>Siedebeginn und Siedebereich:</b>	Nicht bestimmt.

· **Flammpunkt:** Nicht anwendbar.

· **Entzündbarkeit (fest, gasförmig):** Nicht bestimmt.

· **Zündtemperatur:**

**Zersetzungstemperatur:** Nicht bestimmt.

· **Selbstentzündungstemperatur:** Nicht bestimmt.

· **Explosive Eigenschaften:** Das Produkt ist nicht explosionsgefährlich.

· **Explosionsgrenzen:**

<b>Untere:</b>	Nicht bestimmt.
<b>Obere:</b>	Nicht bestimmt.

· **Dampfdruck:** Nicht anwendbar.

(Fortsetzung auf Seite 5)

**Sicherheitsdatenblatt**  
gemäß 1907/2006/EG, Artikel 31

Druckdatum: 19.07.2021

überarbeitet am: 19.07.2021

**Handelsname:** ((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylborate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>ThrePHOX]

(Fortsetzung von Seite 4)

· <b>Dichte:</b>	Nicht bestimmt.
· <b>Relative Dichte</b>	Nicht bestimmt.
· <b>Dampfdichte</b>	Nicht anwendbar.
· <b>Verdampfungsgeschwindigkeit</b>	Nicht anwendbar.
· <b>Löslichkeit in / Mischbarkeit mit Wasser:</b>	Unlöslich.
· <b>Verteilungskoeffizient: n-Octanol/Wasser:</b>	Nicht bestimmt.
· <b>Viskosität:</b>	
<b>Dynamisch:</b>	Nicht anwendbar.
<b>Kinematisch:</b>	Nicht anwendbar.
· <b>Lösemittelgehalt:</b>	
<b>Organische Lösemittel:</b>	0,0 %
<b>VOC (EU)</b>	0,00 %
· <b>Festkörpergehalt:</b>	100,0 %
· <b>9.2 Sonstige Angaben</b>	Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.

### ABSCHNITT 10: Stabilität und Reaktivität

- **10.1 Reaktivität** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **10.2 Chemische Stabilität**
- **Thermische Zersetzung / zu vermeidende Bedingungen:**  
Keine Zersetzung bei bestimmungsgemäßer Verwendung.
- **10.3 Mögliche gefährliche Reaktionen** Keine gefährlichen Reaktionen bekannt.
- **10.4 Zu vermeidende Bedingungen** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **10.5 Unverträgliche Materialien:** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **10.6 Gefährliche Zersetzungsprodukte:** Keine gefährlichen Zersetzungsprodukte bekannt.

### ABSCHNITT 11: Toxikologische Angaben

- **11.1 Angaben zu toxikologischen Wirkungen**
- **Akute Toxizität** Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.
- **Primäre Reizwirkung:**
- **Ätz-/Reizwirkung auf die Haut**  
Verursacht Hautreizungen.
- **Schwere Augenschädigung/-reizung**  
Verursacht schwere Augenreizung.
- **Sensibilisierung der Atemwege/Haut** Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.
- **CMR-Wirkungen (krebserzeugende, erbgutverändernde und fortpflanzungsgefährdende Wirkung)**
- **Keimzell-Mutagenität** Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.
- **Karzinogenität** Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.
- **Reproduktionstoxizität** Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.
- **Spezifische Zielorgan-Toxizität bei einmaliger Exposition**  
Kann die Atemwege reizen.
- **Spezifische Zielorgan-Toxizität bei wiederholter Exposition**  
Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

(Fortsetzung auf Seite 6)

**Sicherheitsdatenblatt**  
gemäß 1907/2006/EG, Artikel 31

Druckdatum: 19.07.2021

überarbeitet am: 19.07.2021

**Handelsname:** ((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylborate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>PThrePHOX]

(Fortsetzung von Seite 5)

· **Aspirationsgefahr** Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

**ABSCHNITT 12: Umweltbezogene Angaben**

- **12.1 Toxizität**
- **Aquatische Toxizität:** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **12.2 Persistenz und Abbaubarkeit** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **12.3 Bioakkumulationspotenzial** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **12.4 Mobilität im Boden** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.
- **Weitere ökologische Hinweise:**
- **Allgemeine Hinweise:** Keine Wassergefährdung bekannt.
- **12.5 Ergebnisse der PBT- und vPvB-Beurteilung**
- **PBT:** Nicht anwendbar.
- **vPvB:** Nicht anwendbar.
- **12.6 Andere schädliche Wirkungen** Keine weiteren relevanten Informationen verfügbar.

**ABSCHNITT 13: Hinweise zur Entsorgung**

- **13.1 Verfahren der Abfallbehandlung**
- **Empfehlung:** Darf nicht zusammen mit Hausmüll entsorgt werden. Nicht in die Kanalisation gelangen lassen.
- **Ungereinigte Verpackungen:**
- **Empfehlung:** Entsorgung gemäß den behördlichen Vorschriften.

**ABSCHNITT 14: Angaben zum Transport**

- |   |                  |
|---|------------------|
| · <b>14.1 UN-Nummer</b>   |                  |
| · <b>ADR, ADN, IMDG, IATA</b>   | entfällt         |
| · <b>14.2 Ordnungsgemäße UN-Versandbezeichnung</b>  |                  |
| · <b>ADR, ADN, IMDG, IATA</b>   | entfällt         |
| · <b>14.3 Transportgefahrenklassen</b>  |                  |
| · <b>ADR, ADN, IMDG, IATA</b>   |                  |
| · <b>Klasse</b>   | entfällt         |
| · <b>14.4 Verpackungsgruppe</b>   |                  |
| · <b>ADR, IMDG, IATA</b>  | entfällt         |
| · <b>14.5 Umweltgefahren:</b>   |                  |
| · <b>Marine pollutant:</b>  | Nein             |
| · <b>14.6 Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender</b>                                    | Nicht anwendbar. |
| · <b>14.7 Massengutbeförderung gemäß Anhang II des MARPOL-Übereinkommens und gemäß IBC-Code</b> | Nicht anwendbar. |
| · <b>UN "Model Regulation":</b>   | entfällt         |

DE

(Fortsetzung auf Seite 7)

**Sicherheitsdatenblatt**  
gemäß 1907/2006/EG, Artikel 31

Druckdatum: 19.07.2021

überarbeitet am: 19.07.2021

**Handelsname:** ((4S,5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4,5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-diphenylphosphinite)(1,5-COD)iridium(I) tetrakis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylborate, min. 97% (S,S)-[COD]Ir[Ph<sub>2</sub>PThrePHOX])

(Fortsetzung von Seite 6)

### ABSCHNITT 15: Rechtsvorschriften

- **15.1 Vorschriften zu Sicherheit, Gesundheits- und Umweltschutz/spezifische Rechtsvorschriften für den Stoff oder das Gemisch**
- **Richtlinie 2012/18/EU**
- **Namentlich aufgeführte gefährliche Stoffe - ANHANG I** Der Stoff ist nicht enthalten.
- **15.2 Stoffsicherheitsbeurteilung:** Eine Stoffsicherheitsbeurteilung wurde nicht durchgeführt.

### ABSCHNITT 16: Sonstige Angaben

Die Angaben stützen sich auf den heutigen Stand unserer Kenntnisse, sie stellen jedoch keine Zusicherung von Produkteigenschaften dar und begründen kein vertragliches Rechtsverhältnis.

- **Datenblatt ausstellender Bereich:** Technical Department.
- **Ansprechpartner:** Technical Director
- **Abkürzungen und Akronyme:**  
 ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)  
 IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods  
 IATA: International Air Transport Association  
 GHS: Globally Harmonised System of Classification and Labelling of Chemicals  
 CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)  
 GefStoffV: Gefahrstoffverordnung (Ordinance on Hazardous Substances, Germany)  
 VOC: Volatile Organic Compounds (USA, EU)  
 PBT: Persistent, Bioaccumulative and Toxic  
 vPvB: very Persistent and very Bioaccumulative  
 Skin Irrit. 2: Hautreizende/-ätzende Wirkung – Kategorie 2  
 Eye Irrit. 2: Schwere Augenschädigung/Augenreizung – Kategorie 2  
 STOT SE 3: Spezifische Zielorgan-Toxizität (einmalige Exposition) – Kategorie 3