

FICHE DE DONNÉES DE SÉCURITÉ / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conforme au Règl. (CE) n° 1907/2006 (REACH), Ann. II — Règl. (UE) 2020/878

Date : 02.09.2026 | Version : 3 | FR

pentan

pentane

CAS 109-66-0

 C_5H_{12}

EC 203-692-4



MASSE MOLAIRE

72.15

LOGP

3.4

TPSA

0 Å²

T. WRZ.

36.0869°C

CLASSIFICATION DES DANGERS (GHS / CLP)



Danger

H225 H304 H336 H411 EUH066

Portée des classes de danger limitée à la classification harmonisée (annexe VI CLP) ; les classes hors de l'entrée harmonisée peuvent nécessiter une auto-classification du fournisseur (art. 4, §3 CLP) — vérifier avec la fiche de données de sécurité du fournisseur.

1. Identification de la substance/du mélange et de la société/l'entreprise

1.1 Nom de la substance	pentan
1.1 Nom IUPAC	pentane
1.1 Numéro CAS	109-66-0
1.1 Numéro CE	203-692-4
1.1 PubChem CID	8003
1.1 InChIKey	OFBQJSOFQDEBGM-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CCCCC
1.1 Formule brute	C_5H_{12} ^[7]
1.1 Masse molaire	72.15 g/mol ^[7]
1.1 Masse exacte	72.0939 Da ^[7]

1.2 Utilisations

À des fins de laboratoire et de recherche. Ne pas utiliser dans la production d'aliments, de médicaments ou de cosmétiques sans les autorisations appropriées.

1.3 Renseignements concernant le fournisseur

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 Numéro d'appel d'urgence

Téléphone d'urgence

+48 42 631 47 24

The number above is the Polish poison centre (CIT, Lodz, 24/7). It is NOT the poison centre designated for your country. Under Article 45 of Regulation (EC) No 1272/2008 the competent body is the centre designated in the country of placing on the market — consult it before use.

2. Identification des dangers



Danger

Mentions de danger (H) [3][4][10]

H225	Liquide et vapeurs très inflammables.
H304	Peut être mortel en cas d'ingestion et de pénétration dans les voies respiratoires.
H336	Peut provoquer somnolence ou vertiges.
H411	Toxique pour les organismes aquatiques, entraîne des effets néfastes à long terme.
EUH066	L'exposition répétée peut provoquer dessèchement ou gerçures de la peau.

Conseils de prudence (P) [3][4][10]

P210	Tenir à l'écart de la chaleur, des surfaces chaudes, des étincelles, des flammes nues et de toute autre source d'inflammation. Ne pas fumer.
P233	Maintenir le récipient fermé de manière étanche.
P240	Mise à la terre/liaison équipotentielle du récipient et du matériel de réception.
P261	Éviter de respirer les poussières/fumées/gaz/brouillards/vapeurs/aérosols.
P271	Utiliser seulement en plein air ou dans un endroit bien ventilé.
P273	Éviter le rejet dans l'environnement.
P280	Porter des gants de protection/des vêtements de protection/un équipement de protection des yeux/du visage.
P301+P310	EN CAS D'INGESTION: Appeler immédiatement un CENTRE ANTIPOISON/un médecin/...
P303+P361+P353	EN CAS DE CONTACT AVEC LA PEAU (ou les cheveux): Enlever immédiatement tous les vêtements contaminés.; Rincer la peau à l'eau/se doucher.
P304+P340	EN CAS D'INHALATION: Transporter la personne à l'extérieur et la maintenir dans une position où elle peut confortablement respirer.
P312	Appeler un CENTRE ANTIPOISON/un médecin/.../en cas de malaise.
P331	NE PAS faire vomir.
P370+P378	En cas d'incendie: Utiliser... pour l'extinction.
P391	Recueillir le produit répandu.
P403+P235	Stocker dans un endroit bien ventilé.: Tenir au frais.

P403+P233

Stocker dans un endroit bien ventilé.: Maintenir le récipient fermé de manière étanche.

P405

Garder sous clef.

P501

Éliminer le contenu/récipient dans ...

Portée des classes de danger limitée à la classification harmonisée (annexe VI CLP) ; les classes hors de l'entrée harmonisée peuvent nécessiter une auto-classification du fournisseur (art. 4, §3 CLP) — vérifier avec la fiche de données de sécurité du fournisseur.

3. Composition/informations sur les composants

Type de substance	substance pure
Numéro CAS	109-66-0
Numéro CE	203-692-4
Formule brute	C ₅ H ₁₂
Concentration	≥99% (pureté typique de qualité réactif — à confirmer par la spécification du fournisseur)
Clp index no	601-006-00-1

4. Premiers secours



Inhalation

Transporter la personne affectée à l'air frais. Assurer le repos. Si la personne ne respire pas : respiration artificielle (personnel qualifié uniquement). ^{[1][2][13]}

Contact cutané

Retirer les vêtements contaminés. Rincer la peau à l'eau savonneuse (min. 15 minutes). ^{[1][2][13]}

Contact avec les yeux

Rincer les yeux à l'eau courante (min. 15 minutes). Retirer les lentilles de contact si possible. Si l'irritation persiste — consultation ophtalmologique. ^{[1][2][13]}

Ingestion

NE PAS faire vomir (sauf avis médical contraire). Rincer la bouche à l'eau. Ne rien administrer par voie orale à une personne inconsciente. Centre antipoison Łódź : +48 42 631 47 24 (24/7). Numéro d'urgence : 112. ^{[1][2][13]}

Symptômes et effets

toux, essoufflement, maux de tête, vertiges. ^{[3][10]}

Informations destinées au médecin

Vérification requise

Numéros d'urgence : CIT Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7) | Urgence : 112

5. Mesures de lutte contre l'incendie

Moyens d'extinction appropriés	Mousse anti-alcool, dioxyde de carbone (CO ₂), poudre chimique sèche, eau pulvérisée/brouillard d'eau. [1][2][13]
Moyens d'extinction inappropriés	Jet d'eau plein/compact (projette et propage le liquide en feu, qui flotte sur l'eau). [1][2][13]
Dangers spécifiques	Produits de décomposition thermique :CO, CO ₂ . [14]
Conseils aux pompiers	Utiliser un appareil respiratoire isolant (SCBA). Tenue de protection intégrale. [1][2][13]
Point d'éclair	-49°C [7]
Température d'auto-inflammation	260°C [7]

6. Mesures à prendre en cas de dispersion accidentelle

Précautions individuelles	Utiliser un équipement de protection individuelle (voir rubrique 8). Éviter de respirer les vapeurs. [1][2][13]
Précautions pour l'environnement	Empêcher la pénétration dans les égouts, les eaux souterraines et les eaux de surface. [1][2][13]
Méthodes de confinement et de nettoyage	Endiguer la fuite. Absorber avec un matériau inerte (sable, vermiculite, terre de diatomées). Recueillir dans des récipients étanches et étiquetés. Ne pas rejeter à l'égout. Éliminer les sources d'inflammation ; utiliser des outils antidéflagrants. [1][2][13]
Sections associées	8; 13

7. Manipulation et stockage

Précautions	Travailler sous une hotte aspirante ou avec une ventilation adéquate. Interdiction de manger, boire et fumer sur le lieu de travail. [1][2][13]
Température de stockage	Conserver à température ambiante (15-25°C) ou conformément à l'étiquette. [1][2][13]
Teneur en eau	Conserver dans un endroit sec (<60% HR). [1][2][13]
Lumière	Protéger de la lumière directe du soleil. [1][2][13]
Matières incompatibles	Oxydants forts, Sources d'inflammation, flammes nues. [14]

8. Contrôle de l'exposition/protection individuelle

8.1 Paramètres de contrôle

NDS (Pologne)	Aucune valeur NDS (VLEP) dans la liste de travail disponible — vérifier dans le règlement MRPiPS en vigueur avant utilisation ; ne pas présumer l'absence de valeur limite.
OEL (UE)	Valeur OEL-UE non vérifiée dans le jeu de données disponible — consulter les directives IOELV/BOELV ; ne pas supposer l'absence de valeur.
DNEL	Aucune donnée disponible.
PNEC	Aucune donnée disponible.

8.2 Équipements de protection individuelle (EPI) [5][6][15]



Gants de protection résistants aux produits chimiques

EN ISO 374-1:2016+A1:2018
nitrile (min. 0.11 mm)



Lunettes de protection fermées ou lunettes-masque

EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001



Protection respiratoire
EN 14387:2004+A1:2008
filtre type AX (vapeurs organiques à bas point d'ébullition)



Chaussures de sécurité fermées avec protection des orteils

EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. Propriétés physiques et chimiques

Propriété (point 9.1)	Valeur	Source
État physique	Liquide	
Couleur	Aucune donnée disponible.	
Odeur	Aucune donnée disponible.	
pH (solution aqueuse à 1%)	Sans objet	
Temp. de fusion	-129.8°C [8] [7] ✓94%	nist+consensus, cache, pubchem_exp
Point d'ébullition	36.0869°C [8] [7] ✓94%	nist+consensus, cache, pubchem_exp
Point d'éclair	-49°C (experimental data) [7]	pubchem_exp
Inflammabilité	Flam. Liq. 2 (H225) [3][10]	
Limites inférieure et supérieure d'explosion	Aucune donnée disponible.	
Densité (20°C)	0.627 g/cm³ [7] ✓86%	cache+consensus, pubchem_exp
Pression de vapeur	56.795 kPa (426 mmHg, 20°C) (experimental data) [7]	pubchem_exp
Densité de vapeur relative	2.49 [18]	
Viscosité dynamique	0.2224 mPa·s [7]	
Viscosité cinématique	Aucune donnée disponible.	
Indice de réfraction nD²⁰	1.3575 (experimental data) [7]	
Température d'auto-inflammation	260°C (experimental data) [7]	
Température de décomposition	Sans objet	
Rozpuszcz. w wodzie	0.038 g/L, 25°C [7]	
Caractéristiques des particules	Sans objet (REACH 9.1(r))	
Coefficient de partage n-octanol/eau (valeur log)	3.4 [9]	
Masse molaire	72.15 g/mol [7] ✓86%	pubchem, cache
Formule brute	C₅H₁₂ [7] ✓86%	pubchem, cache
Règle de Lipinski (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. Stabilité et réactivité

Réactivité	Stable dans des conditions normales de stockage et de manipulation.
Stabilité chimique	Thermiquement stable dans les conditions recommandées.
Réactions dangereuses	Aucune réaction dangereuse connue dans des conditions normales.
Conditions à éviter	Températures élevées, exposition directe au soleil, humidité.
Matières incompatibles	Oxydants forts, Sources d'inflammation, flammes nues.
Produits de décomposition	Produits de décomposition thermique :CO, CO2.

11. Informations toxicologiques

DL50 (voie orale)	Aucune donnée disponible.
DL50 (voie cutanée)	Aucune donnée disponible.
CL50 (inhalation)	LC50 364000 mg/m3 (4 h) (rat) ^[7]
Irritation cutanée	Non classé pour ce danger (hors du champ de la classification harmonisée à l'annexe VI CLP ; vérifier l'auto-classification du fournisseur) ^{[3][10]}
Irritation oculaire	Non classé pour ce danger (hors du champ de la classification harmonisée à l'annexe VI CLP ; vérifier l'auto-classification du fournisseur) ^{[3][10]}
Sensibilisation	Non classé pour ce danger (hors du champ de la classification harmonisée à l'annexe VI CLP ; vérifier l'auto-classification du fournisseur) ^{[3][10]}
Mutagénicité	Non classé pour ce danger (hors du champ de la classification harmonisée à l'annexe VI CLP ; vérifier l'auto-classification du fournisseur) ^{[3][10]}
Cancérogénicité	Non classé pour ce danger (hors du champ de la classification harmonisée à l'annexe VI CLP ; vérifier l'auto-classification du fournisseur) ^{[3][10]}
Classification CIRC (cancérogénicité)	Aucune monographie IARC individuelle pour ce CAS — ce n'est pas une confirmation de l'absence de cancérogénicité (cf. classification CLP/GHS à la section 2).
Toxicité pour la reproduction	Non classé pour ce danger (hors du champ de la classification harmonisée à l'annexe VI CLP ; vérifier l'auto-classification du fournisseur) ^{[3][10]}
STOT (exposition unique)	Catégorie 3 (H336) : Peut provoquer somnolence ou vertiges. ^{[3][10]}
STOT (exposition répétée)	Non classé pour ce danger (hors du champ de la classification harmonisée à l'annexe VI CLP ; vérifier l'auto-classification du fournisseur) ^{[3][10]}
Danger par aspiration	Catégorie 1 (H304) : Peut être mortel en cas d'ingestion et de pénétration dans les voies respiratoires. ^{[3][10]}

12. Informations écologiques

Toxicité aquatique	Classification harmonisée (CLP annexe VI): H411 — Toxique pour les organismes aquatiques, entraîne des effets néfastes à long terme (Aquatique chronique 2). Données numériques LC ₅₀ /EC ₅₀ non vérifiées dans le jeu de données disponible — ne pas présumer l'absence de toxicité.
Persistance / biodégradabilité	Aucune donnée disponible.
Potentiel de bioaccumulation	log Kow = 3.4 ^[9] . Faible potentiel de bioaccumulation (log Kow < 4,5 — critère de présélection PBT/vPvB selon le guide ECHA R.11). ^{[16][17]}
Mobilité dans le sol	Aucune donnée disponible.
Évaluation PBT/vPvB	Données insuffisantes pour évaluer PBT/vPvB.
Propriétés perturbant le système endocrinien	Aucune information.

13. Traitement des déchets

Méthode d'élimination	Confier l'élimination à des entreprises agréées conformément aux réglementations nationales et locales. Ne pas rejeter dans les égouts.
Code déchet (CED)	16 05 06* — Produits chimiques de laboratoire et d'analyse (np. réactifs chimiques) zawierajace substancje niebezpieczne. Vérification du code EWC requise. ^[12]
Emballages	Les emballages nettoyés peuvent être recyclés. Les emballages contaminés doivent être traités comme des déchets dangereux.

14. Informations relatives au transport



Classe 3 — Liquides inflammables

Numéro ONU	UN 1265 ^[11]
Désignation officielle de transport	Pentanes ^[11]
Classe de danger pour le transport	3 ^[11]
Groupe d'emballage	II ^[11]
Danger pour l'environnement	La classification CLP (H411) indique un danger pour le milieu aquatique — marque POLLUANT MARIN possible ; confirmer selon les critères ADR 2.2.9 / IMDG ^[3]
Précautions particulières	Traiter comme marchandise dangereuse selon la classe attribuée (ADR/IMDG/ IATA) ; appliquer les précautions propres à cette classe.
Code NC/SH	Code NC/SH : vérification requise dans la nomenclature combinée Eurostat.
Remarques	Classification de transport selon l'ADR / le Règlement type de l'ONU (numéro ONU, classe et groupe d'emballage ci-dessus). Vérifier l'édition ADR/IMDG/ IATA en vigueur à la date d'expédition. ^[11]
Dangereux pour l'environnement (symbole : poisson et arbre)	Oui

15. Informations réglementaires

Statut SVHC	Statut SVHC non vérifié par rapport à l'ensemble de données disponible — consulter la liste actuelle des substances candidates de l'ECHA ; ne pas présumer l'absence. ^[1]
REACH Annexe XIV	Non vérifié par rapport à la liste d'autorisation de l'ECHA — vérifier l'Annexe XIV de REACH. ^[1]
REACH Annexe XVII	Non confirmé dans le jeu de données disponible de l'annexe XVII — vérifier dans la liste actuelle de l'ECHA avant la mise sur le marché ; ne pas supposer l'absence de restriction. ^[1]

16. Autres informations

Statut juridique de la classification : harmonisée selon l'annexe VI du CLP — règlement (CE) n° 1272/2008 (à la date d'émission). Les entrées dont la date d'entrée en vigueur est postérieure au 27.08.2026 omises comme futurs (pas encore applicables).

Données agrégées automatiquement à partir de bases de données de référence publiques (PubChem, ECHA, NIST, etc.).

Citations scientifiques (10)

- McKee R, Frank E, Heath J et al.. Toxicology of n-pentane (CAS no. 109-66-0).. Journal of applied toxicology : JAT (1998). DOI: 10.1002/(sici)1099-1263(199811/12)18:6<431::aid-jat524>3.0.co;2-l
- Joseph M. Anderson, Nicholas D. Measom, John A. Murphy et al.. Bridge Functionalisation of Bicyclo[1.1.1]pentane Derivatives. Angewandte Chemie International Edition (2021). DOI: 10.1002/anie.202106352
- n-Pentane 109-66-0. Wiley (2012). DOI: 10.1002/0471701343.sdp19947.pub2
- Vasyil Ripenko, Vadym Sham, Vitalina Levchenko et al.. Light-enabled scalable synthesis of bicyclo[1.1.1]pentane halides and their functionalizations. Nature Synthesis (2024). DOI: 10.1038/s44160-024-00637-y
- Marjan Goodarzi, Iskander Tilili, Hazim Moria et al.. Boiling heat transfer characteristics of graphene oxide nanoplatelets nano-suspensions of water-perfluorohexane (C6F14) and water-n-pentane. Alexandria Engineering Journal (2020). DOI: 10.1016/j.aej.2020.08.003

Texte intégral des mentions H

H225	Liquide et vapeurs très inflammables.
H304	Peut être mortel en cas d'ingestion et de pénétration dans les voies respiratoires.
H336	Peut provoquer somnolence ou vertiges.

H411 Toxique pour les organismes aquatiques, entraîne des effets néfastes à long terme.

EUH066 L'exposition répétée peut provoquer dessèchement ou gerçures de la peau.

Texte intégral des conseils P

P210 Tenir à l'écart de la chaleur, des surfaces chaudes, des étincelles, des flammes nues et de toute autre source d'inflammation. Ne pas fumer.

P233 Maintenir le récipient fermé de manière étanche.

P240 Mise à la terre/liaison équipotentielle du récipient et du matériel de réception.

P261 Éviter de respirer les poussières/fumées/gaz/brouillards/vapeurs/aérosols.

P271 Utiliser seulement en plein air ou dans un endroit bien ventilé.

P273 Éviter le rejet dans l'environnement.

P280 Porter des gants de protection/des vêtements de protection/un équipement de protection des yeux/du visage.

P301+P310 EN CAS D'INGESTION: Appeler immédiatement un CENTRE ANTIPOISON/un médecin/...

P303+P361+P353 EN CAS DE CONTACT AVEC LA PEAU (ou les cheveux): Enlever immédiatement tous les vêtements contaminés.; Rincer la peau à l'eau/se doucher.

P304+P340 EN CAS D'INHALATION: Transporter la personne à l'extérieur et la maintenir dans une position où elle peut confortablement respirer.

P312 Appeler un CENTRE ANTIPOISON/un médecin/.../en cas de malaise.

P331 NE PAS faire vomir.

P370+P378 En cas d'incendie: Utiliser... pour l'extinction.

P391 Recueillir le produit répandu.

P403+P235 Stocker dans un endroit bien ventilé.: Tenir au frais.

P403+P233 Stocker dans un endroit bien ventilé.: Maintenir le récipient fermé de manière étanche.

P405 Garder sous clef.

P501 Éliminer le contenu/récipient dans ...

Abréviations

ADR	Accord européen relatif au transport international des marchandises dangereuses par route
ATE	Estimation de la toxicité aiguë (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (règl. 1272/2008)
CMR	Cancérogénicité, mutagénicité, toxicité pour la reproduction
DNEL	Niveau dérivé sans effet (Derived No-Effect Level)
EC	European Community number
EPI	Équipement de protection individuelle
GHS	Système général harmonisé (Globally Harmonized System)
IATA	Association du transport aérien international
IMDG	Code maritime international des marchandises dangereuses
FDS	Fiche de données de sécurité (Safety Data Sheet)
LC50	Concentration létale 50% (Lethal Concentration)
LD50	Dose létale 50% (Lethal Dose)
NDS	Concentration maximale admissible (au poste de travail)
NDSch	NDS à court terme (PL)

OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistent, bioaccumulable et toxique
PNEC	Concentration prédite sans effet (Predicted No-Effect Concentration)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Règl. (CE) 1907/2006)
SDS	Safety Data Sheet
STOT	Toxicité spécifique pour certains organes cibles (Specific Target Organ Toxicity)
SVHC	Substance extrêmement préoccupante (Substance of Very High Concern)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Très persistant et très bioaccumulable

Historique des versions

v3 (27.08.2026)	Établi sur la base de la classification harmonisée de l'ECHA (annexe VI du CLP, ATP 23).
------------------------	--

Références

- [1] PE et Conseil. Regl.(CE) n° 1907/2006 (REACH). Art.31, Annexe II. JO UE L 396/2006. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj> Accessed: 2026-08-27.
- [2] Commission européenne. Regl.(UE) 2020/878 — modifiant l'Annexe II REACH. JO UE L 203/2020. À partir du 01.01.2023. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj> Accessed: 2026-08-27.
- [3] PE et Conseil. Regl.(CE) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. JO UE L 353/2008. (2026-07-07) URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/oj> Accessed: 2026-08-27.
- [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: 2026-08-27.
- [5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/72424.html> Accessed: 2026-08-27.
- [6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/51021.html> Accessed: 2026-08-27.
- [7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/8003>
- [8] NIST. Chemistry WebBook, SRD 69. National Institute of Standards and Technology. URL: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=109-66-0>
- [9] Rumble, J.R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 105th ed. Boca Raton: CRC Press, 2024. URL: <https://hbcpc.chemnetbase.com>
- [10] ECHA. European Chemicals Agency — harmonised classification inventory (CLP Annex VI). URL: <https://echa.europa.eu>
- [11] UNECE. European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road (ADR), 2025 edition (ECE/TRANS/352). Geneva: United Nations. URL: <https://unece.org/adr>
- [12] 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>
- [13] European Chemicals Agency (ECHA). Guidance on the Compilation of Safety Data Sheets. Version 4.0. Helsinki: European Chemicals Agency, 2020. URL: https://echa.europa.eu/documents/10162/2324906/sds_en.pdf
- [14] Urben, P.G., ed. Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards. 8th ed. Oxford: Academic Press.
- [15] CEN. Personal protective equipment standards (EN ISO 374-1, EN 166, EN 149, EN 14387, EN ISO 20345). Brussels: European Committee for Standardization.
- [16] 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>
- [17] 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>
- [18] 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>
- [19] Règlement MRiPS du 12.06.2018 — NDS/NDN. Journal des Lois 2024 pos. 1017. URL: <https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017> Accessed: 2026-08-27.

Liens externes

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=109-66-0>
Wikidata: <https://www.wikidata.org/wiki/Q150429>
ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL16102

ADMET / Drug-likeness





Mention légale : Ce document a été généré automatiquement à partir de données de PubChem (NIH), l'ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC), Wikidata et d'autres bases de données publiques. Il NE REMPLACE PAS une fiche de données de sécurité (FDS) approuvée conforme au règlement (CE) n° 1907/2006 (REACH). Avant d'utiliser la substance, vérifiez les données par rapport à la FDS actuelle du fabricant.

Générateur : Document généré automatiquement à partir de la classification harmonisée de l'ECHA (annexe VI du CLP) et de bases de données physico-chimiques publiques.

Auteur : www.MolGod.org — plateforme de fiches de données de sécurité automatisées (FDS).

Date d'émission : 02.09.2026 | Version du document : 3

WORKING
DRAFT
工作草案