VEILIGHEIDSINFORMATIEBLAD / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conform Verord. (EG) nr. 1907/2006 (REACH), Bijlage II — Verord. (EU) 2020/878 Datum: 18.10.2026 | Versie: 3 | NL

Octadecyl DI-tert-butyl-4-hydroxyhydrocinnamate

octadecyl 3-(3,5-ditert-butyl-4-hydroxyphenyl)propanoate

CAS 2082-79-3

$C_{35}H_{62}O_3$ | EC 218-216-0

MOLAIRE MASSA	LOGP
530.90	13.8

TPSA: 46.5 Å²

GEVARENCLASSIFICATIE (GHS / CLP)



Waarschuwing

H361 | H411

Niet-geharmoniseerde indeling (geen vermelding in bijlage VI bij de CLP-verordening) — toegekend op basis van geaggregeerde ECHA C&L-kennisgevingen; de H-zinnen moeten worden geverifieerd aan de hand van de officiële bron (ECHA C&L / gegevensblad van de fabrikant).

1. Identificatie van de stof/het mengsel en van de vennootschap/onderneming

1.1 Naam van de stof	Octadecyl DI-tert-butyl-4-hydroxyhydrocinnamate
1.1 IUPAC-naam	octadecyl 3-(3,5-ditert-butyl-4-hydroxyphenyl)propanoate
1.1 CAS-nummer	2082-79-3
1.1 EG-nummer	218-216-0
1.1 PubChem CID	16386
1.1 InChIKey	SSDSCDGVMJFTEQ-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CCCCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)CCC1=CC(=C(C(=C1)C(C)(C)C)O)C(C)(C)C
1.1 Molecuulformule	$C_{35}H_{62}O_3$ [7]
1.1 Molmassa	530.9 g/mol [7]
1.1 Exacte massa	530.4699 Da [7]

1.2 Toepassingen

Voor laboratorium- en onderzoeksdoeleinden. Niet voor gebruik bij de productie van levensmiddelen, geneesmiddelen of cosmetica zonder de juiste vergunningen.

1.3 Gegevens van de leverancier

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 Telefoonnummer voor noodgevallen

Noodtelefoon	112 (EU-wide emergency number)

Contact the poison centre designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).

2. Identificatie van de gevaren

GHS:



PBM:



Waarschuwing

Gevarenaanduidingen (H) [3][4]

H361	Kan mogelijk de vruchtbaarheid of het ongeboren kind schaden.
H411	Giftig voor in het water levende organismen, met langdurige gevolgen.

Voorzorgsmaatregelen (P) [3][4]

P201	Vóór gebruik speciale aanwijzingen raadplegen.
P202	Pas gebruiken nadat u alle veiligheidsvoorschriften gelezen en begrepen heeft.
P261	Inademing van stof/rook/gas/nevel/dampen/spuitnevel vermijden.
P273	Voorkom lozing in het milieu.
P280	Beschermende handschoenen/beschermende kleding/oogbescherming/ gelaatsbescherming dragen.
P308+P313	NA (mogelijke) blootstelling: Een arts raadplegen.
P391	Gelekte/gemorste stof opruimen.
P405	Achter slot bewaren.
P501	Inhoud/verpakking afvoeren naar ...

Niet-geharmoniseerde indeling (geen vermelding in bijlage VI bij de CLP-verordening) — toegekend op basis van geaggregeerde ECHA C&L-kennisgevingen; de H-zinnen moeten worden geverifieerd aan de hand van de officiële bron (ECHA C&L / gegevensblad van de fabrikant).

WORKING DRAFT · 工作版

3. Samenstelling en informatie over de bestanddelen

Type stof	zuivere stof
CAS-nummer	2082-79-3
EG-nummer	218-216-0
Molecuulformule	$C_{35}H_{62}O_3$
Concentratie	≥99% (typische zuiverheid van reagenskwaliteit — te bevestigen door de specificatie van de leverancier)

4. Eerstehulpmaatregelen



Inademing

Breng de getroffen persoon in de frisse lucht. Houd de persoon in rust. Als de persoon niet ademt: kunstmatige beademing (uitsluitend gekwalificeerd personeel). [1][2][10]

Huidcontact

Verontreinigde kleding uittrekken. Huid spoelen met water en zeep (min. 15 minuten). [1][2][10]

Oogcontact

Ogen spoelen met stromend water (min. 15 minuten). Contactlenzen indien mogelijk verwijderen. Als de irritatie aanhoudt — raadpleeg een oogarts. [1][2][10]

Inslikken

Do NOT induce vomiting (unless directed by a physician). Rinse mouth with water. Never give anything by mouth to an unconscious person. Emergency number: 112 (EU-wide). Contact the poison centre designated in your country (CLP Art. 45). [1][2][10]

Symptomen en effecten

Geen specifieke symptomen beschreven in de literatuur. [3]

Informatie voor de arts

Verificatie vereist

Noodnummers: Noodgeval: 112 (EU-wide). Poison centre: as designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).

5. Brandbestrijdingsmaatregelen

Geschikte blusmiddelen	Blusmiddelen aanpassen aan de omgeving. CO2, poeder, schuim.
Ongeschikte blusmiddelen	Geen specifieke beperkingen.
Specifieke gevaren	Producten van thermische ontleding: CO, CO2. [11]
Advies voor brandweerlieden	Gebruik onafhankelijke ademluchtapparatuur (SCBA). Volledig beschermend pak.

6. Maatregelen bij het accidenteel vrijkomen van de stof

Persoonlijke voorzorgsmaatregelen	Gebruik persoonlijke beschermingsmiddelen (zie rubriek 8). Inademen van stof/damp vermijden. [1][2][10]
Milieuvoorzorgsmaatregelen	Voorkom dat het in het riool, het grondwater en het oppervlaktewater terechtkomt. [1][2][10]
Methoden voor insluiting en reiniging	Absorberen met inert materiaal (zand, vermiculiet, diatomeeënaarde) en verzamelen in afgesloten, geëtiketteerde containers. Niet in het riool laten lopen. [1][2][10]
Gerelateerde rubrieken	8; 13

WORKING DRAFT 工作草案

7. Hantering en opslag

Voorzorgsmaatregelen	Werk in een zuurkast of met voldoende ventilatie. Verboden te eten, drinken en roken op de werkplek. [1][2][10]
Opslagtemperatuur	Bewaren bij kamertemperatuur (15-25°C) of zoals aangegeven op het etiket. [1][2][10]
Watergehalte	Bewaren op een droge plaats (<60% RH). [1][2][10]
Licht	Beschermen tegen direct zonlicht. [1][2][10]
Onverenigbare materialen	Sterke oxidatiemiddelen. [11]

8. Maatregelen ter beheersing van blootstelling/persoonlijke bescherming

8.1 Controleparameters

NDS (Polen)	Geen NDS-waarde (grenswaarde) in de beschikbare werklijst — vóór gebruik controleren in de actuele MRPiPS-verordening; ga niet uit van het ontbreken van een grenswaarde.
OEL (EU)	EU-OEL-waarde niet geverifieerd in de beschikbare dataset — raadpleeg de IOELV/BOELV-richtlijnen; ga niet uit van de afwezigheid van een waarde.
DNEL	Geen gegevens beschikbaar.
PNEC	Geen gegevens beschikbaar.

8.2 Persoonlijke beschermingsmiddelen (PBM) [5][6][14]



Chemicaliënbestendige beschermende handschoenen
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
nitril (min. 0.11 mm)

Gesloten veiligheidsbril of ruimzichtbril
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001

Gesloten veiligheidsschoenen met teenbescherming
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. Fysische en chemische eigenschappen

Eigenschap (punt 9.1)	Waarde	Bron
Fysische toestand	Geen gegevens beschikbaar.	
Kleur	Geen gegevens beschikbaar.	
Geur	Geen gegevens beschikbaar.	
pH (1% waterige oplossing)	Geen gegevens beschikbaar.	
Smeltpunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Kookpunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Vlampunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Ontvlambaarheid	Geen gegevens beschikbaar.	
Onderste en bovenste explosiegrens	Geen gegevens beschikbaar.	
Dichtheid (20°C)	Geen gegevens beschikbaar.	
Dampspanning	Geen gegevens beschikbaar.	
Relatieve dampdichtheid	Geen gegevens beschikbaar.	

WORKING DRAFT 工作稿

Eigenschap (punt 9.1)	Waarde	Bron
Kinematische viscositeit	Geen gegevens beschikbaar.	
Zelfontbrandingstemperatuur	Geen gegevens beschikbaar.	
Ontledingstemperatuur	Niet van toepassing	
Oplosbaarheid in water	Geen gegevens beschikbaar.	
Deeltjeskenmerken	Geen gegevens beschikbaar.	
Verdelingscoëfficiënt n-octanol/water (logwaarde)	13.8 [8]	
Molaire massa	530.9 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Molecuulformule	$C_{35}H_{62}O_3$ [7] ✓86%	*PubChem*
Lipinski-regel (RO5)	**FAIL**	

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. Stabiliteit en reactiviteit

Reactiviteit	Stabiel onder normale opslag- en hanteringsomstandigheden.
Chemische stabiliteit	Thermisch stabiel onder de aanbevolen omstandigheden.
Gevaarlijke reacties	Geen gevaarlijke reacties bekend onder normale omstandigheden.
Te vermijden omstandigheden	Hoge temperaturen, direct zonlicht, vocht.
Onverenigbare materialen	Sterke oxidatiemiddelen.
Ontledingsproducten	Producten van thermische ontleding: CO, CO2.

11. Toxicologische informatie

LD50 (oraal)	Geen gegevens beschikbaar.
LD50 (dermaal)	Geen gegevens beschikbaar.
LC50 (inhalatie)	Geen gegevens beschikbaar.
Huidirritatie	Geen gegevens beschikbaar.
Oogirritatie	Geen gegevens beschikbaar.
Sensibilisatie	Geen gegevens beschikbaar.
Mutageniteit	Geen gegevens beschikbaar.
Carcinogeniteit	Geen gegevens beschikbaar.
IARC-classificatie (carcinogeniteit)	Geen individuele IARC-monografie voor deze CAS — dit is geen bevestiging van de afwezigheid van kankerverwekkendheid (vgl. CLP/GHS-indeling in sectie 2).
Reproductietoxiciteit	Indeling op basis van geaggregeerde ECHA C&L-kennisgevingen (niet-geharmoniseerd) — verificatie vereist; geen vermelding in bijlage VI bij CLP.
STOT (eenmalige blootstelling)	Geen gegevens beschikbaar.
STOT (herhaalde blootstelling)	Geen gegevens beschikbaar.
Aspiratiegevaar	Geen gegevens beschikbaar.

WORKING DRAFT 工作草稿

12. Ecologische informatie

Aquatische toxiciteit	Indeling volgens ECHA C&L-kennisgevingen (zelfindeling, art. 4(3)): H411 — Giftig voor in het water levende organismen, met langdurige gevolgen (Aquatisch chronisch 2). Numerieke LC_{50}/EC_{50}-gegevens niet geverifieerd in de beschikbare dataset — ga niet uit van het ontbreken van toxiciteit.
Persistentie / biologische afbreekbaarheid	Geen gegevens beschikbaar.
Bioaccumulatiepotentieel	log Kow = 13.8 [8]. Verhoogd bioaccumulatiepotentieel (log Kow ≥ 4,5 — PBT/zPzB-screeningsdrempel volgens ECHA R.11); een definitieve beoordeling vereist de bioconcentratiefactor BCF (REACH Bijlage XIII: B bij BCF > 2000). [15][16]
Mobiliteit in de bodem	Geen gegevens beschikbaar.
PBT/vPvB-beoordeling	Onvoldoende gegevens om PBT/vPvB te beoordelen.
Hormoonontregelende eigenschappen	Geen informatie.

13. Instructies voor verwijdering

Verwijderingsmethode	Ter verwijdering overdragen aan erkende bedrijven overeenkomstig de nationale en lokale voorschriften. Niet in het riool lozen.
Afvalcode (EURAL)	16 05 06* — Laboratorium- en analysechemicaliën (bijv. chemische reagentia) die gevaarlijke stoffen bevatten. Verificatie van de EWC-code vereist. [9]
Verpakking	Gereinigde verpakkingen kunnen worden gerecycled. Verontreinigde verpakkingen moeten als gevaarlijk afval worden behandeld.

14. Informatie met betrekking tot het vervoer

UN-nummer	VERIFICATIE VEREIST — geen geverifieerde UN-toewijzing.
Milieugevaar	CLP-indeling (H411) wijst op gevaar voor het aquatisch milieu — markering MARIENE VERONTREINIGING mogelijk; bevestigen volgens ADR 2.2.9 / IMDG [3]
Bijzondere voorzorgsmaatregelen	Als gevaarlijke goederen behandelen volgens de toegewezen klasse (ADR/IMDG/IATA); de bij die klasse behorende voorzorgsmaatregelen toepassen.
GN/GS-code	GN/GS-code: verificatie vereist in de gecombineerde nomenclatuur van Eurostat.
Opmerkingen	Transportclassificatie niet geverifieerd. Ga niet uit van het ontbreken van beperkingen — controleer ADR/IMDG/IATA vóór verzending.
Milieugevaarlijk (symbool: vis en boom)	Ja

15. Regelgeving

SVHC-status	SVHC-status niet geverifieerd aan de hand van de beschikbare dataset — raadpleeg de actuele ECHA-kandidaatslijst; ga niet uit van afwezigheid. [1]
REACH Bijlage XIV	Niet geverifieerd aan de hand van de ECHA-autorisatielijst — controleer REACH Bijlage XIV. [1]
REACH Bijlage XVII	Niet bevestigd in de beschikbare dataset van Bijlage XVII — verifieer aan de hand van de actuele ECHA-lijst vóór het in de handel brengen; ga niet uit van de afwezigheid van een beperking. [1]

WORKING DRAFT · 工作草案

16. Overige informatie

Juridische status van de indeling: zelfindeling door de leverancier volgens art. 4(3) CLP — geen geharmoniseerde vermelding in bijlage VI.Vermeldingen met een datum van inwerkingtreding na 18.10.2026 weggelaten als toekomstig (nog niet van toepassing).

Gegevens automatisch geaggregeerd uit openbare referentiedatabanken (PubChem, ECHA, NIST e.a.).

Wetenschappelijke citaten (4)

Neal-Kluever AP, Bailey AB, Hatwell KR. *Safety assessment for octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate (CAS Reg. No. 2082-79-3) from use in food contact applications.*. Food and chemical toxicology : an international journal published for the British Industrial Biological Research Association (2015). DOI: 10.1016/j.fct.2015.10.004

Sayed E. El-Sayed, Neveen A. Abdelaziz, Ghadir S. El-Housseiny et al.. *Nanosponge hydrogel of octadecyl 3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl) propanoate of Alcaligenes faecalis*. Applied Microbiology and Biotechnology (2024). DOI: 10.1007/s00253-023-12819-3

Sayed E. El-Sayed, Neveen A. Abdelaziz, Ghadir S. El-Housseiny et al.. *Octadecyl 3-(3, 5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl) propanoate, an antifungal metabolite of Alcaligenes faecalis strain MT332429 optimized through response surface methodology*. Applied Microbiology and Biotechnology (2020). DOI: 10.1007/s00253-020-10962-9

Sayed E. El-Sayed, Khaled M. Aboshanab, Hesham Ali El Enshasy et al.. *Octadecyl 3-(3, 5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl) propanoate nanosponges: enhanced antibacterial and antibiofilm activity against multidrug-resistant Klebsiella pneumoniae with synergistic ceftriaxone combination*. Frontiers in Cellular and Infection Microbiology (2026). DOI: 10.3389/fcimb.2026.1867536

Volledige tekst van de H-zinnen

H361	Kan mogelijk de vruchtbaarheid of het ongeboren kind schaden.
H411	Giftig voor in het water levende organismen, met langdurige gevolgen.

Volledige tekst van de P-zinnen

P201	Vóór gebruik speciale aanwijzingen raadplegen.
P202	Pas gebruiken nadat u alle veiligheidsvoorschriften gelezen en begrepen heeft.
P261	Inademing van stof/rook/gas/nevel/dampen/spuitnevel vermijden.
P273	Voorkom lozing in het milieu.
P280	Beschermende handschoenen/beschermende kleding/oogbescherming/gelaatsbescherming dragen.
P308+P313	NA (mogelijke) blootstelling: Een arts raadplegen.
P391	Gelekte/gemorste stof opruimen.
P405	Achter slot bewaren.
P501	Inhoud/verpakking afvoeren naar ...

Afkortingen

ADR	Europese Overeenkomst betreffende het internationale vervoer van gevaarlijke goederen over de weg
ATE	Schatting van de acute toxiciteit (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (Verord. 1272/2008)
CMR	Kankerverwekkend, mutageen, giftig voor de voortplanting
DNEL	Afgeleide dosis zonder effect (Derived No-Effect Level)
EC	European Community number
EPI	Persoonlijke beschermingsmiddelen
GHS	Wereldwijd geharmoniseerd systeem (Globally Harmonized System)
IATA	Internationale Luchtvervoersvereniging
IMDG	Internationale Code voor het vervoer van gevaarlijke goederen over zee
VIB	Veiligheidsinformatieblad (Safety Data Sheet)
LC50	Letale concentratie 50% (Lethal Concentration)
LD50	Letale dosis 50% (Lethal Dose)
NDS	Maximaal toelaatbare concentratie (werkplek, PL)

WORKING DRAFT 工作草稿

NDSCh	NDS kortetermijn (PL)
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistent, bioaccumulerend en toxisch
PNEC	Voorspelde concentratie zonder effect (Predicted No-Effect Concentration)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Verord. (EG) 1907/2006)
SDS	Safety Data Sheet
STOT	Specifieke doelorgaantoxiciteit (Specific Target Organ Toxicity)
SVHC	Zeer zorgwekkende stof (Substance of Very High Concern)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Zeer persistent en zeer bioaccumulerend

Versiegeschiedenis

v3 (18.10.2026)	Opgesteld op basis van zelfindeling door de leverancier (ECHA C&L-kennisgevingen; geen geharmoniseerde vermelding in bijlage VI).

Referenties

[1] EP en Raad. Verord.(EG) nr. 1907/2006 (REACH). Art.31, Bijlage II. PB EU L 396/2006. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-18.

[2] Europese Commissie. Verord.(EU) 2020/878 — wijziging van Bijlage II REACH. PB EU L 203/2020. Vanaf 01.01.2023. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-18.

[3] EP en Raad. Verord.(EG) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. PB EU L 353/2008. (2026-07-07) URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/oj Accessed: 2026-10-18.

[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: 2026-10-18.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-10-18.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-10-18.

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/16386

[8] Rumble, J.R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 105th ed. Boca Raton: CRC Press, 2024. URL: https://hbcp.chemnetbase.com

[9] 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

[10] 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

[11] Urben, P.G., ed. Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards. 8th ed. Oxford: Academic Press.

[12] Act of 26 June 1974 — Labour Code (Poland), Art. 176 § 1. Journal of Laws 2023 item 1465. URL: https://isap.sejm.gov.pl

[13] Council of Ministers of the Republic of Poland. Regulation of 3 April 2017 on the list of arduous, hazardous or health-harmful work for pregnant and breastfeeding women. Journal of Laws 2017 item 796. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20170000796

[14] CEN. Personal protective equipment standards (EN ISO 374-1, EN 166, EN 149, EN 14387, EN ISO 20345). Brussels: European Committee for Standardization.

[15] 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

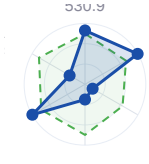
[16] European Parliament and Council. Regulation (EC) No 1907/2006 (REACH), Annex XIII — Criteria for the identification of PBT and vPvB substances. OJ EU L 396/2006 (consolidated). URL: https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:02006R1907-20140410

[17] MRiPS-verordening van 12.06.2018 — NDS/NDN. Staatsblad 2024 pos. 1017. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-18.

Externe links

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=2082-79-3

ADMET / Drug-likeness



NFPA 704 (aanvullende informatie — NFPA/VS-systeem; geen verplicht onderdeel van een EU-veiligheidsinformatieblad volgens REACH Bijlage II)



WORKING DRAFT 工作草稿

Juridische kennisgeving: Dit document is automatisch gegenereerd op basis van gegevens van PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) en andere openbare databanken. Het VERVANGT GEEN goedgekeurd veiligheidsinformatieblad (VIB) conform Verordening (EG) nr. 1907/2006 (REACH). Controleer de gegevens vóór gebruik van de stof aan de hand van het actuele VIB van de fabrikant.
Generator: Document automatisch gegenereerd op basis van zelfindeling door de leverancier (ECHA C&L-kennisgevingen) en openbare fysisch-chemische databanken.
Auteur: www.MolGod.org — platform voor geautomatiseerde veiligheidsinformatiebladen (VIB).
Datum van uitgifte: 18.10.2026 | Documentversie: 3

WORKING DRAFT · 工作草案