# SCHEDA DI DATI DI SICUREZZA / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conforme al Reg. (CE) n. 1907/2006 (REACH), All. II — Reg. (UE) 2020/878 | Data: 18.10.2026 | Versione: 2 | IT

## Pentanoic acid, 2,2,4-trimethyl-3-hydroxy-, isobutyl ester

*2-methylpropyl 3-hydroxy-2,2,4-trimethylpentanoate*

**CAS 244074-78-0**

$C_{12}H_{24}O_3$

| MASSA MOLARE | LOGP | TPSA |
|---|---|---|
| 216.32 | 3 | 46.5 Å² |

### CLASSIFICAZIONE DEI PERICOLI (GHS / CLP)

*Classificazione CLP non stabilita — nessuna voce armonizzata (Allegato VI), provenienza dell'autoclassificazione non stabilita. È necessaria la verifica nell'inventario C&L dell'ECHA / nella scheda di dati di sicurezza del produttore. NON presumere l'assenza di pericolo.*

## 1. Identificazione della sostanza/miscela e della società/impresa

| | |
|---|---|
| **1.1 Nome della sostanza** | Pentanoic acid, 2,2,4-trimethyl-3-hydroxy-, isobutyl ester |
| **1.1 Nome IUPAC** | 2-methylpropyl 3-hydroxy-2,2,4-trimethylpentanoate |
| **1.1 Numero CAS** | 244074-78-0 |
| **1.1 Numero EC** | Nessun dato |
| **1.1 PubChem CID** | 536397 |
| **1.1 InChIKey** | JKGWJYJTOABBAJ-UHFFFAOYSA-N |
| **1.1 SMILES** | CC(C)COC(=O)C(C)(C)C(C(C)C)O |
| **1.1 Formula molecolare** | $C_{12}H_{24}O_3$ [7] |
| **1.1 Massa molare** | 216.32 g/mol [7] |
| **1.1 Massa esatta** | 216.1725 Da [7] |

### 1.2 Usi

Per scopi di laboratorio e di ricerca. Non destinato all'uso nella produzione di alimenti, medicinali o cosmetici senza le opportune autorizzazioni.

### 1.3 Informazioni sul fornitore

| | |
|---|---|
| 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 Numero telefonico di emergenza

| | |
|---|---|
| **Telefono di emergenza** | 112 (EU-wide emergency number) |

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

## 2. Identificazione dei pericoli

**Classificazione CLP non stabilita — nessuna voce armonizzata (Allegato VI), provenienza dell'autoclassificazione non stabilita. È necessaria la verifica nell'inventario C&L dell'ECHA / nella scheda di dati di sicurezza del produttore. NON presumere l'assenza di pericolo.**

## 3. Composizione/informazioni sugli ingredienti

| | |
|---|---|
| **Tipo di sostanza** | sostanza pura |
| **Numero CAS** | 244074-78-0 |
| **Formula molecolare** | $C_{12}H_{24}O_3$ |
| **Concentration** | ≥99% (purezza tipica di grado reagente — da confermare con la specifica del fornitore) |

## 4. Misure di primo soccorso



### Inalazione

Spostare la persona colpita all'aria fresca. Mantenere a riposo. Se la persona non respira: respirazione artificiale (solo personale qualificato). [1][2]

### Contatto con la pelle

Togliere gli indumenti contaminati. Sciacquare la pelle con acqua e sapone (min. 15 minuti). [1][2]

### Contatto con gli occhi

Sciacquare gli occhi con acqua corrente (min. 15 minuti). Rimuovere le lenti a contatto se possibile. Se l'irritazione persiste — consultare un oculista. [1][2]

### Ingestione

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]

### Sintomi ed effetti

Nessun sintomo specifico descritto in letteratura. [1][2]

### Note per il medico

Verifica richiesta

**Numeri di emergenza: Emergenza: 112 (EU-wide). Poison centre: as designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).**

## 5. Misure antincendio

| | |
|---|---|
| **Mezzi di estinzione idonei** | Adattare i mezzi di estinzione all'ambiente circostante. CO2, polvere, schiuma. |
| **Mezzi di estinzione non idonei** | Nessuna restrizione particolare. |
| **Pericoli specifici** | Prodotti di decomposizione termica: CO, CO2. |
| **Raccomandazioni per gli addetti antincendio** | Utilizzare un autorespiratore (SCBA). Tuta protettiva completa. |

## 6. Misure in caso di rilascio accidentale

| | |
|---|---|
| **Precauzioni personali** | Utilizzare dispositivi di protezione individuale (vedere sezione 8). Evitare di respirare le polveri/i vapori. [1][2] |
| **Precauzioni ambientali** | Impedire la penetrazione nelle fognature, nelle acque sotterranee e superficiali. [1][2] |
| **Metodi di contenimento e bonifica** | Assorbire con materiale inerte (sabbia, vermiculite, farina fossile) e raccogliere in contenitori a tenuta ed etichettati. Non immettere nelle fognature. [1][2] |
| **Sezioni correlate** | 8; 13 |

WORKING DRAFT 工作草案

## 7. Manipolazione e immagazzinamento

| | |
|---|---|
| **Precauzioni** | Lavorare sotto cappa aspirante o con ventilazione adeguata. Vietato mangiare, bere e fumare sul luogo di lavoro. [1][2] |
| **Temperatura di conservazione** | Conservare a temperatura ambiente (15-25°C) o secondo quanto indicato sull'etichetta. [1][2] |
| **Umidità** | Conservare in luogo asciutto (<60% RH). [1][2] |
| **Luce** | Proteggere dalla luce solare diretta. [1][2] |
| **Materiali incompatibili** | Ossidanti forti. |

## 8. Controllo dell'esposizione/protezione individuale

### 8.1 Parametri di controllo

| | |
|---|---|
| **NDS (Polonia)** | Nessun valore NDS (OEL) nell'elenco di lavoro disponibile — verificare nell'attuale regolamento MRPiPS prima dell'uso; non presumere l'assenza di un valore limite. |
| **OEL (UE)** | Valore OEL-UE non verificato nel set disponibile — controllare le direttive IOELV/BOELV; non presumere l'assenza di un valore. |
| **DNEL** | Nessun dato disponibile. |
| **PNEC** | Nessun dato disponibile. |

### 8.2 Dispositivi di protezione individuale (DPI)



**Guanti protettivi resistenti agli agenti chimici**

EN ISO 374-1:2016+A1:2018

La scelta dei DPI richiede che la classificazione dei pericoli sia stabilita — non vi è alcuna base per indicare un materiale dei guanti. Utilizzare i DPI secondo la scheda di dati di sicurezza del fornitore e la valutazione dei rischi sul posto di lavoro.



**Occhiali di sicurezza chiusi o occhiali a maschera**

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



**Calzature di sicurezza chiuse con protezione delle dita**

EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

## 9. Proprietà fisiche e chimiche

| Proprietà (punto 9.1) | Valore | Source |
|---|---|---|
| **Stato fisico** | Nessun dato disponibile. | |
| **Colore** | Nessun dato disponibile. | |
| **Odore** | Nessun dato disponibile. | |
| **pH (soluzione acquosa 1%)** | Nessun dato disponibile. | |
| **Temp. di fusione** | Nessun dato disponibile. | |
| **Punto di ebollizione** | Nessun dato disponibile. | |
| **Punto di infiammabilità** | Nessun dato disponibile. | |
| **Infiammabilità** | Nessun dato disponibile. | |

WORKING DRAFT 工作样本

| Proprietà (punto 9.1) | Valore | Source |
|---|---|---|
| **Limite inferiore e superiore di esplosività** | Nessun dato disponibile. | |
| **Densità (20°C)** | Nessun dato disponibile. | |
| **Tensione di vapore** | Nessun dato disponibile. | |
| **Densità di vapore relativa** | Nessun dato disponibile. | |
| **Viscosità cinematica** | Nessun dato disponibile. | |
| **Temperatura di autoaccensione** | Nessun dato disponibile. | |
| **Temperatura di decomposizione** | Non applicabile | |
| **Idrosolubilità** | Nessun dato disponibile. | |
| **Caratteristiche delle particelle** | Nessun dato disponibile. | |
| **Coefficiente di ripartizione n-ottanolo/acqua (valore logaritmico)** | 3 [8] | |
| **Massa molare** | 216.32 g/mol [7] ✓86% | *PubChem* |
| **Formula molecolare** | $C_{12}H_{24}O_3$ [7] ✓86% | *PubChem* |
| **Regola di 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. Stabilità e reattività

| | |
|---|---|
| **Reattività** | Stabile in condizioni normali di conservazione e manipolazione. |
| **Stabilità chimica** | Termicamente stabile nelle condizioni raccomandate. |
| **Reazioni pericolose** | Nessuna reazione pericolosa nota in condizioni normali. |
| **Condizioni da evitare** | Temperature elevate, luce solare diretta, umidità. |
| **Materiali incompatibili** | Ossidanti forti. |
| **Prodotti di decomposizione** | Prodotti di decomposizione termica: CO, CO2. |

## 11. Informazioni tossicologiche

| | |
|---|---|
| **LD50 (orale)** | Nessun dato disponibile. |
| **LD50 (cutanea)** | Nessun dato disponibile. |
| **LC50 (inalatoria)** | Nessun dato disponibile. |
| **Irritazione cutanea** | Nessun dato disponibile. |
| **Irritazione oculare** | Nessun dato disponibile. |
| **Sensibilizzazione** | Nessun dato disponibile. |
| **Mutagenicità** | Nessun dato disponibile. |
| **Cancerogenicità** | Nessun dato disponibile. |
| **Classificazione IARC (cancerogenicità)** | Nessuna monografia individuale IARC per questo CAS — ciò non conferma l'assenza di cancerogenicità (cfr. classificazione CLP/GHS nella sezione 2). |
| **Tossicità riproduttiva** | Nessun dato disponibile. |
| **STOT (esposizione singola)** | Nessun dato disponibile. |
| **STOT (esposizione ripetuta)** | Nessun dato disponibile. |
| **Pericolo in caso di aspirazione** | Nessun dato disponibile. |

WORKING DRAFT · 工作草稿

## 12. Informazioni ecologiche

| | |
|---|---|
| **Tossicità acquatica** | Nessun dato disponibile. |
| **Persistenza / biodegradabilità** | Nessun dato disponibile. |
| **Potenziale di bioaccumulo** | log Kow = 3 [8]. Basso potenziale di bioaccumulo (log Kow < 4,5 — criterio di screening PBT/vPvB secondo la guida ECHA R.11). [10][11] |
| **Mobilità nel suolo** | Nessun dato disponibile. |
| **Valutazione PBT/ vPvB** | Dati insufficienti per la valutazione PBT/vPvB. |
| **Proprietà di interferenza endocrina** | Nessuna informazione. |

## 13. Considerazioni sullo smaltimento

| | |
|---|---|
| **Metodo di smaltimento** | Conferire allo smaltimento ad aziende autorizzate secondo le normative nazionali e locali. Non immettere nella rete fognaria. |
| **Codice rifiuto (EWC)** | Il codice del rifiuto (CER) non può essere determinato senza una classificazione dei pericoli — la provenienza della classificazione non è stabilita. NON presumere né la pericolosità (16 05 06*) né la sua assenza (16 05 09); determinarlo dopo la verifica della classificazione presso l'ECHA. [9] |
| **Imballaggio** | Gli imballaggi puliti possono essere riciclati. Gli imballaggi contaminati devono essere trattati conformemente alla classificazione del rifiuto (vedere il codice CER sopra); in assenza di una classificazione stabilita, non presumere l'assenza di pericolo. |

## 14. Informazioni sul trasporto

| | |
|---|---|
| **Numero UN** | VERIFICA RICHIESTA — nessuna attribuzione UN verificata. |
| **Pericolo per l'ambiente** | Pericolo per l'ambiente ai fini del trasporto: non verificato. Provenienza della classificazione indeterminata — NON presumere assenza di pericolo né che il marchio di inquinante marino non sia richiesto; verificare secondo allegato VI CLP, sezione 12 e ADR 2.2.9 / IMDG prima della spedizione. |
| **Precauzioni speciali** | Trattare come merce pericolosa secondo la classe assegnata (ADR/IMDG/ IATA); applicare le precauzioni proprie di tale classe. |
| **Codice CN/HS** | Codice CN/HS: verifica richiesta nella Nomenclatura combinata Eurostat. |
| **Note** | Classificazione di trasporto non verificata. Non presumere l'assenza di restrizioni — verificare ADR/IMDG/IATA prima della spedizione. |

## 15. Informazioni sulla regolamentazione

| | |
|---|---|
| **Stato SVHC** | Stato SVHC non verificato rispetto al set di dati disponibile — consultare l'attuale elenco delle sostanze candidate dell'ECHA; non presumere l'assenza. [1] |
| **REACH Allegato XIV** | Non verificato rispetto all'elenco delle autorizzazioni ECHA — verificare l'Allegato XIV di REACH. [1] |
| **REACH Allegato XVII** | Non confermato nel set di dati disponibile dell'Allegato XVII — verificare nell'elenco ECHA aggiornato prima dell'immissione sul mercato; non presumere l'assenza di restrizioni. [1] |

## 16. Altre informazioni

Stato giuridico della classificazione: origine non registrata — richiede verifica in ECHA.Le voci con data di entrata in vigore successiva al 18.10.2026 omessi in quanto futuri (non ancora applicabili).

**Dati aggregati automaticamente da banche dati di riferimento pubbliche (PubChem, ECHA, NIST e altri).**

### Abbreviazioni

| | |
|---|---|
| **ADR** | Accordo europeo relativo al trasporto internazionale di merci pericolose su strada |

WORKING DRAFT · 工作草案

| | |
|---|---|
| **ATE** | Stima della tossicità acuta (Acute Toxicity Estimate) |
| **CAS** | Chemical Abstracts Service |
| **CLP** | Classification, Labelling and Packaging (Reg. (CE) 1272/2008) |
| **CMR** | Cancerogenicità, mutagenicità, tossicità per la riproduzione |
| **DNEL** | Livello derivato senza effetto (Derived No-Effect Level) |
| **EC** | European Community number |
| **EPI** | Dispositivi di protezione individuale |
| **GHS** | Sistema mondiale armonizzato (Globally Harmonized System) |
| **IATA** | Associazione internazionale del trasporto aereo |
| **IMDG** | Codice marittimo internazionale delle merci pericolose |
| **SDS** | Scheda di Dati di Sicurezza (Safety Data Sheet) |
| **LC50** | Concentrazione letale 50% (Lethal Concentration) |
| **LD50** | Dose letale 50% (Lethal Dose) |
| **NDS** | Concentrazione massima ammissibile (sul luogo di lavoro) |
| **NDSCh** | NDS a breve termine (PL) |
| **OEL** | Occupational Exposure Limit |
| **PBT** | Persistente, bioaccumulabile e tossico |
| **PNEC** | Concentrazione prevedibile priva di effetti (Predicted No-Effect Concentration) |
| **REACH** | Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Reg. 1907/2006) |
| **STOT** | Tossicità specifica per organi bersaglio (Specific Target Organ Toxicity) |
| **SVHC** | Sostanza estremamente preoccupante (Substance of Very High Concern) |
| **TPSA** | Topological Polar Surface Area |
| **vPvB** | Molto persistente e molto bioaccumulabile |

## Cronologia delle versioni

| | |
|---|---|
| **v2 (18.10.2026)** | Origine della classificazione non registrata nel canone — verificare la fonte in ECHA (allegato VI / C&L). |

## Riferimenti


[1] PE e Consiglio. Reg.(CE) n. 1907/2006 (REACH). Art.31, Allegato II. GU UE L 396/2006. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-18.

[2] Commissione europea. Reg.(UE) 2020/878 — modifica dell'Allegato II REACH. GU UE L 203/2020. Dal 01.01.2023. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-18.

[3] PE e Consiglio. Reg.(CE) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. GU UE 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/536397

[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] 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

[11] 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

[12] Regolamento MRiPS del 12.06.2018 — NDS/NDN. Gazzetta Ufficiale 2024 pos. 1017. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-18.


## Collegamenti esterni

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=244074-78-0

WORKING DRAFT · 工作草案

**ADMET / Drug-likeness**




**Nota legale:** Il presente documento è stato generato automaticamente a partire da dati di PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) e altre banche dati pubbliche. NON SOSTITUISCE una scheda di dati di sicurezza (SDS) approvata conforme al regolamento (CE) n. 1907/2006 (REACH). Prima di utilizzare la sostanza, verificare i dati con la SDS aggiornata del produttore.
**Generatore:** Documento generato automaticamente da una classificazione di origine non registrata (da verificare in ECHA) e da banche dati fisico-chimiche pubbliche.
**Autore:** www.MolGod.org — piattaforma di schede di dati di sicurezza automatizzate (SDS).
Data di emissione: 18.10.2026 | Versione del documento: 2

WORKING DRAFT · 工作草案