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

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

Date : 18.10.2026 | Version : 3 | FR

Methyl 4-(cyanomethyl)benzoate

methyl 4-(cyanomethyl)benzoate

CAS 76469-88-0

$C_{10}H_9NO_2$ | EC 616-338-2

MASSE MOLAIRE	LOGP
175.18	2

TPSA: 50.1 Å²

CLASSIFICATION DES DANGERS (GHS / CLP)



Attention

H302 | H312 | H315 | H319 | H332 | H412

Classification issue des notifications agrégées ECHA C&L (PubChem PUG-View) ; consensus des déclarants <75 % — approche conservatoire (tous les dangers déclarés). Vérification requise par rapport à la source officielle (ECHA C&L / fiche du fabricant).

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

1.1 Nom de la substance	Methyl 4-(cyanomethyl)benzoate
1.1 Nom IUPAC	methyl 4-(cyanomethyl)benzoate
1.1 Numéro CAS	76469-88-0
1.1 Numéro CE	616-338-2
1.1 PubChem CID	848548
1.1 InChIKey	XRZGMNGGCZTNGE-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	COC(=O)C1=CC=C(C=C1)CC#N
1.1 Formule brute	$C_{10}H_9NO_2$ [7]
1.1 Masse molaire	175.18 g/mol [7]
1.1 Masse exacte	175.0633 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	112 (EU-wide emergency number)

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

2. Identification des dangers

GHS:



EPI :



Interdictions :



Attention

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

H302	Nocif en cas d'ingestion.
H312	Nocif par contact cutané.
H315	Provoque une irritation cutanée.
H319	Provoque une sévère irritation des yeux.
H332	Nocif par inhalation.
H412	Nocif pour les organismes aquatiques, entraîne des effets néfastes à long terme.

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

P261	Éviter de respirer les poussières/fumées/gaz/brouillards/vapeurs/aérosols.
P264	Se laver ... soigneusement après manipulation.
P270	Ne pas manger, boire ou fumer en manipulant ce produit.
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+P312	EN CAS D'INGESTION: Appeler un CENTRE ANTIPOISON/un médecin/.../en cas de malaise.
P302+P352	EN CAS DE CONTACT AVEC LA PEAU: Laver abondamment à l'eau/...
P304+P340	EN CAS D'INHALATION: Transporter la personne à l'extérieur et la maintenir dans une position où elle peut confortablement respirer.
P305+P351+P338	EN CAS DE CONTACT AVEC LES YEUX: Rincer avec précaution à l'eau pendant plusieurs minutes.; Enlever les lentilles de contact si la victime en porte et si elles peuvent être facilement enlevées. Continuer à rincer.
P312	Appeler un CENTRE ANTIPOISON/un médecin/.../en cas de malaise.
P330	Rincer la bouche.
P332+P313	En cas d'irritation cutanée: Consulter un médecin.
P337+P313	Si l'irritation oculaire persiste: Consulter un médecin.
P391	Recueillir le produit répandu.
P501	Éliminer le contenu/récipient dans ...

WORKING DRAFT · 工作草案

Classification issue des notifications agrégées ECHA C&L (PubChem PUG-View) ; consensus des déclarants <75 % — approche conservatoire (tous les dangers déclarés). Vérification requise par rapport à la source officielle (ECHA C&L / fiche du fabricant).

3. Composition/informations sur les composants

Type de substance	substance pure
Numéro CAS	76469-88-0
Numéro CE	616-338-2
Formule brute	$C_{10}H_9NO_2$
Concentration	≥99% (pureté typique de qualité réactif — à confirmer par la spécification du fournisseur)

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][11]

Contact cutané

Retirer les vêtements contaminés. Rincer la peau à l'eau et au savon (min. 15 minutes). Appeler immédiatement un médecin. [1][2][11]

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][11]

Ingestion

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][11]

Symptômes et effets

nausées, vomissements, diarrhée; toux, essoufflement, maux de tête, vertiges; rougeur et irritation cutanée; irritation et larmoiement des yeux. [3]

Informations destinées au médecin

Vérification requise

Numéros d'urgence : Urgence : 112 (EU-wide). Poison centre: as designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).

WORKING DRAFT 工作草稿

5. Mesures de lutte contre l'incendie

Moyens d'extinction appropriés	Adapter les moyens d'extinction à l'environnement. CO2, poudre, mousse.
Moyens d'extinction inappropriés	Aucune restriction particulière.
Dangers spécifiques	Produits de décomposition thermique : CO, CO2, NOx. [12]
Conseils aux pompiers	Utiliser un appareil respiratoire isolant (SCBA). Tenue de protection intégrale.

6. Mesures à prendre en cas de dispersion accidentelle

Précautions individuelles	Utiliser un équipement de protection individuelle (voir rubrique 8). Éviter de respirer les poussières/vapeurs. [1][2][11]
Précautions pour l'environnement	Empêcher la pénétration dans les égouts, les eaux souterraines et les eaux de surface. [1][2][11]
Méthodes de confinement et de nettoyage	Absorber avec un matériau inerte (sable, vermiculite, terre de diatomées) et recueillir dans des récipients étanches et étiquetés. Ne pas rejeter à l'égout. [1][2][11]
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][11]
Température de stockage	Conserver à température ambiante (15-25°C) ou conformément à l'étiquette. [1][2][11]
Teneur en eau	Conserver dans un endroit sec (<60% HR). [1][2][11]
Lumière	Protéger de la lumière directe du soleil. [1][2][11]
Matières incompatibles	Oxydants forts. [12]

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][13]



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
La protection respiratoire NE PEUT PAS être sélectionnée à partir des données disponibles — état physique indéterminé. Adjudication requise avant utilisation. Ne pas supposer qu'un filtre suffit : pour les gaz inertes et l'oxygène, un appareil filtrant NE PROTÈGE PAS.



Vêtements de protection résistants aux produits chimiques
EN 13034:2005+A1:2009 (typ 6) / EN 14126:2003 (bio)



Chaussures de sécurité fermées avec protection des orteils
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

WORKING DRAFT 工作草稿

9. Propriétés physiques et chimiques

Propriété (point 9.1)	Valeur	Source
État physique	Aucune donnée disponible.	
Couleur	Aucune donnée disponible.	
Odeur	Aucune donnée disponible.	
pH (solution aqueuse à 1%)	Aucune donnée disponible.	
Temp. de fusion	Aucune donnée disponible.	
Point d'ébullition	Aucune donnée disponible.	
Point d'éclair	Aucune donnée disponible.	
Inflammabilité	Aucune donnée disponible.	
Limites inférieure et supérieure d'explosion	Aucune donnée disponible.	
Densité (20°C)	Aucune donnée disponible.	
Pression de vapeur	Aucune donnée disponible.	
Densité de vapeur relative	Aucune donnée disponible.	
Viscosité cinématique	Aucune donnée disponible.	
Température d'auto-inflammation	Aucune donnée disponible.	
Température de décomposition	Sans objet	
Hydrosolubilité	Aucune donnée disponible.	
Caractéristiques des particules	Aucune donnée disponible.	
Coefficient de partage n-octanol/eau (valeur log)	2 [8]	
Masse molaire	175.18 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Formule brute	$C_{10}H_9NO_2$ [7] ✓86%	*PubChem*
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.
Produits de décomposition	Produits de décomposition thermique : CO, CO2, NOx.

11. Informations toxicologiques

DL50 (voie orale)	Aucune donnée disponible.
DL50 (voie cutanée)	Aucune donnée disponible.
CL50 (inhalation)	Aucune donnée disponible.

WORKING DRAFT · 工作草稿

Irritation cutanée	Catégorie 2 — irritation cutanée.
Irritation oculaire	Catégorie 2 — irritation oculaire.
Sensibilisation	Aucune donnée disponible.
Mutagénicité	Aucune donnée disponible.
Cancérogénicité	Aucune donnée disponible.
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	Aucune donnée disponible.
STOT (exposition unique)	Aucune donnée disponible.
STOT (exposition répétée)	Aucune donnée disponible.
Danger par aspiration	Aucune donnée disponible.

12. Informations écologiques

Toxicité aquatique	Classification selon les notifications ECHA C&L (auto-classification, art. 4(3)): H412 — Nocif pour les organismes aquatiques, entraîne des effets néfastes à long terme (cat. chronique 3). 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 = 2 [8]. Faible potentiel de bioaccumulation (log Kow < 4,5 — critère de présélection PBT/vPvB selon le guide ECHA R.11). [14][15]
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 (par ex. réactifs chimiques) contenant des substances dangereuses. Vérification du code CED requise. [10]
Emballages	Les emballages nettoyés peuvent être recyclés. Les emballages contaminés doivent être traités comme des déchets dangereux.

14. Informations relatives au transport

Numéro ONU	VÉRIFICATION REQUISE — aucune attribution ONU vérifiée.
Danger pour l'environnement	Danger pour l'environnement pour le transport : non vérifié. Classification non harmonisée (hors annexe VI CLP) — vérifier la toxicité aquatique (section 12) et ne PAS supposer qu'aucune marque de polluant marin n'est requise ; confirmer selon ADR 2.2.9 / IMDG avant expédition.
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 non vérifiée. Ne pas présumer l'absence de restrictions — vérifier ADR/IMDG/IATA avant l'expédition.

WORKING DRAFT 工作草案

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 : auto-classification du fournisseur selon l'art. 4(3) du CLP — aucune entrée harmonisée à l'annexe VI.Les entrées dont la date d'entrée en vigueur est postérieure au 17.10.2026 omis comme futurs (pas encore applicables).

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

Citations scientifiques (5)

Manapragada V. Rathnam, Sharad Mankumare, M. S. S. Kumar. *Density, Viscosity, and Speed of Sound of (Methyl Benzoate + Cyclohexane), (Methyl Benzoate + n-Hexane), (Methyl Benzoate + Heptane), and (Methyl Benzoate + Octane) at Temperatures of (303.15, 308.15, and 313.15) K*. Journal of Chemical & Engineering Data (2009). DOI: 10.1021/je9006597

Methyl Benzoate. Dictionary of Toxicology (2024). DOI: 10.1007/978-981-99-9283-6_1700

SHUJIRO GOYA, AKIRA TAKADATE, TOSHIAKI TANAKA et al.. *Synthesis of 6-and 7-Substituted 3-Aminoisocarbostyril Derivatives. I. Reactions of Methyl (2-Cyanomethyl) benzoate Derivatives with Amines*. YAKUGAKU ZASSHI (1980). DOI: 10.1248/yakushi1947.100.8_819

Methyl Benzoate. DOI: 10.31003/fcc_f101358_02_01

S. GOYA, A. TAKADATE, T. TANAKA et al.. *ChemInform Abstract: SYNTHESIS OF 6- AND 7-SUBSTITUTED 3-AMINOISOCARBOSTYRIL DERIVATIVES. I. REACTIONS OF METHYL (2-CYANOMETHYL)BENZOATE DERIVATIVES WITH AMINES*. Chemischer Informationsdienst (1981). DOI: 10.1002/chin.198108229

Texte intégral des mentions H

H302	Nocif en cas d'ingestion.
H312	Nocif par contact cutané.
H315	Provoque une irritation cutanée.
H319	Provoque une sévère irritation des yeux.
H332	Nocif par inhalation.
H412	Nocif pour les organismes aquatiques, entraîne des effets néfastes à long terme.

Texte intégral des conseils P

P261	Éviter de respirer les poussières/fumées/gaz/brouillards/vapeurs/aérosols.
P264	Se laver ... soigneusement après manipulation.
P270	Ne pas manger, boire ou fumer en manipulant ce produit.
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+P312	EN CAS D'INGESTION: Appeler un CENTRE ANTIPOISON/un médecin/.../en cas de malaise.
P302+P352	EN CAS DE CONTACT AVEC LA PEAU: Laver abondamment à l'eau/...
P304+P340	EN CAS D'INHALATION: Transporter la personne à l'extérieur et la maintenir dans une position où elle peut confortablement respirer.
P305+P351+P338	EN CAS DE CONTACT AVEC LES YEUX: Rincer avec précaution à l'eau pendant plusieurs minutes.; Enlever les lentilles de contact si la victime en porte et si elles peuvent être facilement enlevées. Continuer à rincer.
P312	Appeler un CENTRE ANTIPOISON/un médecin/.../en cas de malaise.

WORKING DRAFT 工作草稿

P330	Rincer la bouche.
P332+P313	En cas d'irritation cutanée: Consulter un médecin.
P337+P313	Si l'irritation oculaire persiste: Consulter un médecin.
P391	Recueillir le produit répandu.
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	Persistant, 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 (17.10.2026)	Établi sur la base de l'auto-classification du fournisseur (notifications ECHA C&L ; aucune entrée harmonisée à l'annexe VI).

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: 2026-10-17.

[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: 2026-10-17.

[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: 2026-10-17.

[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: 2026-10-17.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-10-17.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-10-17.

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/848548

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

[9] ECHA. European Chemicals Agency — harmonised classification inventory (CLP Annex VI). URL: https://echa.europa.eu

WORKING DRAFT · 工作草稿

[10] 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

[11] 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

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

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

[14] 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

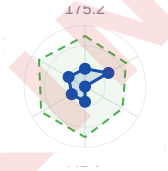
[15] European Parliament and Council. Regulation (EC) No 1907/2006 (REACH), Annex XIII — Criteria for the identification of PBT and vPvB substances. OJ EU L 396/2006 (consolidated). URL: https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:02006R1907-20140410

[16] 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: 2026-10-17.

Liens externes

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=76469-88-0

ADMET / Drug-likeness



NFPA 704 (information complémentaire — système NFPA/USA ; n'est pas un élément requis d'une fiche de données de sécurité de l'UE selon l'annexe II de REACH)



Mention légale : Ce document a été généré automatiquement à partir de données de PubChem (NIH), l'ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) 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 l'auto-classification du fournisseur (notifications ECHA C&L) et de bases de données physico-chimiques publiques.
Auteur : www.MolGod.org — plateforme de fiches de données de sécurité automatisées (FDS).
Date d'émission : 18.10.2026 | Version du document : 3