安全数据表 / SAFETY DATA SHEET (SDS)

符合法规 (EC) 1907/2006 (REACH) 附件 II——法规 (EU) 2020/878

日期： 18.10.2026 | 版本： 3 | ZH

Methyl 4-(cyanomethyl)benzoate

methyl 4-(cyanomethyl)benzoate

CAS 76469-88-0

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

摩尔质量	LOGP
175.18	2

TPSA
50.1 Å²

危险分类（**GHS/CLP**）



警告

H302 H312 H315 H319 H332 H412

分类来自 *ECHA C&L* 汇总通报（*PubChem PUG-View*）；通报者一致性 *<75%*——采取保守做法（列出所有已通报危害）。需依据官方来源（*ECHA C&L* / 制造商数据表）核实。

WORKING DRAFT · 工作草案

1. 物质/混合物和公司/企业的标识

1.1 物质名称	Methyl 4-(cyanomethyl)benzoate
1.1 IUPAC名称	methyl 4-(cyanomethyl)benzoate
1.1 CAS号	76469-88-0
1.1 EC号	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 分子式	$C_{10}H_9NO_2$ [7]
1.1 摩尔质量	175.18 g/mol [7]
1.1 精确质量	175.0633 Da [7]

1.2 用途

用于实验室和研究目的。未经适当授权，不得用于食品、药品或化妆品的生产。

1.3 供应商信息

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 应急电话号码

应急电话	112 (EU-wide emergency number)

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

2. 危险性识别

GHS:



个人防护装备：



禁止事项：



警告

危险说明（H） [3][4]

H302	吞咽有害
H312	皮肤接触有害
H315	造成皮肤刺激
H319	造成严重眼刺激
H332	吸入有害
H412	对水生生物有害并具有长期持续影响

防范说明（P） [3][4]

P261	避免吸入粉尘/烟/气体/气雾/蒸气/喷雾。
P264	作业后彻底清洗手部[和……]。
P270	使用本产品时不要进食、饮水或吸烟。
P271	只能在室外或充分通风的情况下使用。
P273	避免释放到环境中。
P280	戴防护手套/穿防护服/戴防护眼罩/戴防护面具/戴听力保护装置……
P301+P312	如误吞咽：：如感觉不适，呼叫中毒急救中心/医生/……
P302+P352	如皮肤沾染：：用水充分清洗/……
P304+P340	如误吸入：：将人转移到空气新鲜处，保持呼吸舒适体位。
P305+P351+P338	如进入眼睛：：用水小心冲洗几分钟。；如戴隐形眼镜并可方便地取出，取出隐形眼镜。继续冲洗。
P312	如感觉不适，呼叫中毒急救中心/医生/……
P330	漱口。
P332+P313	如发生皮肤刺激：：求医/就诊。
P337+P313	如眼刺激持续：：求医/就诊。
P391	收集溢出物。
P501	处置内装物/容器……

分类来自 **ECHA C&L** 汇总通报（**PubChem PUG-View**）；通报者一致性 **<75%——**采取保守做法（列出所有已通报危害）。需依据官方来源（**ECHA C&L /** 制造商数据表）核实。

WORKING DRAFT · 工作草案

3. 成分/组成信息

物质类型	纯物质
CAS号	76469-88-0
EC号	616-338-2
分子式	$C_{10}H_9NO_2$
浓度	≥99% (典型试剂级纯度 — 须由供应商规格确认)

4. 急救措施



吸入

将受害者移至新鲜空气处。保持休息。如无呼吸：进行人工呼吸（仅限合格人员）。 [1][2][11]

皮肤接触

脱去受污染的衣物。用肥皂和水冲洗皮肤（至少15分钟）。立即就医。 [1][2][11]

眼睛接触

用流动水冲洗眼睛（至少15分钟）。如可能，取出隐形眼镜。如刺激持续——咨询眼科医生。 [1][2][11]

食入

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]

症状和影响

恶心、呕吐、腹泻; 咳嗽、呼吸困难、头痛、头晕; 皮肤发红和刺激; 眼睛刺激和流泪. [3]

给医生的建议

需要核实

应急电话： 紧急情况： **112 (EU-wide). Poison centre: as designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).**

5. 消防措施

适用的灭火剂	根据周围环境调整灭火介质。CO2、干粉、泡沫。
不合适的灭火介质	无特殊限制。
特殊危害	热分解产物： CO, CO2, NOx. [12]
消防员建议	使用自给式呼吸器（SCBA）。全套防护服。

6. 泄漏应急处理

个人预防措施	使用个人防护装备（见第8节）。避免吸入粉尘/蒸气。 [1][2][11]
环境预防措施	防止进入下水道、地下水和地表水。 [1][2][11]
围堵和清理方法	用惰性材料（砂、蛭石、硅藻土）吸附并收集至密封、标记的容器中。请勿排入下水道。 [1][2][11]
相关章节	8; 13

7. 操作处置与储存

预防措施	在通风橱或通风良好的地方工作。工作区域禁止进食、饮水或吸烟。 [1][2][11]
储存温度	在室温（15-25°C）下储存，或按标签指示储存。 [1][2][11]
含水量	在干燥处储存（<60% RH）。 [1][2][11]
光	避免阳光直射。 [1][2][11]
禁配物	强氧化剂. [12]

WORKING DRAFT 工作草案

8. 暴露控制/个人防护

8.1 控制参数

NDS（波兰）	现有工作清单中无 NDS（职业接触限值）— 使用前请在现行 MRPiPS 法规中核实；不得假定不存在限值。
OEL（欧盟）	欧盟职业接触限值（OEL）未在可用数据集中验证——请检查IOELV/BOELV指令；不要假定无值。
DNEL	无可用数据。
PNEC	无可用数据。

8.2 个人防护装备（PPE） [5][6][13]



耐化学腐蚀防护手套
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
丁腈橡胶（最小**0.11**毫米）

封闭式安全眼镜或护目镜
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001

呼吸防护
根据现有数据无法选择呼吸防护装备——物理状态未确定。使用前需进行判定。不要假设过滤器足够：对于惰性气体和氧气，过滤式装备不能提供防护。

耐化学腐蚀防护服
EN 13034:2005+A1:2009 (typ 6) / EN 14126:2003 (bio)

封闭式安全鞋（带趾部防护）
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. 物理和化学性质

性质（第**9.1**项）	值	来源
物态	无可用数据。	
颜色	无可用数据。	
气味	无可用数据。	
pH值（**1%**水溶液）	无可用数据。	
熔点	无可用数据。	
沸点	无可用数据。	
闪点	无可用数据。	
易燃性	无可用数据。	
上下爆炸极限/易燃极限	无可用数据。	
密度（**20°C**）	无可用数据。	
蒸气压	无可用数据。	
相对蒸气密度	无可用数据。	
运动黏度	无可用数据。	
自燃温度	无可用数据。	
分解温度	不适用	
水溶性	无可用数据。	
颗粒特征	无可用数据。	
辛醇－水分配系数（对数值）	2 [8]	
摩尔质量	175.18 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
分子式	$C_{10}H_9NO_2$ [7] ✓86%	*PubChem*

WORKING DRAFT 工作草稿

性质（第**9.1**项）	值	来源
利平斯基五规则（**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. 稳定性和反应性

反应性	在正常储存和使用条件下稳定。
化学稳定性	在推荐条件下热稳定。
危险反应	正常条件下无已知危险反应。
应避免的条件	高温、直射阳光、湿气。
禁配物	强氧化剂.
分解产物	热分解产物： CO, CO2, NOx.

11. 毒理学信息

LD50（经口）	无可用数据。
LD50（经皮）	无可用数据。
LC50（吸入）	无可用数据。
皮肤刺激性	第2类 — 皮肤刺激。
眼睛刺激性	第2类 — 眼刺激。
致敏性	无可用数据。
致突变性	无可用数据。
致癌性	无可用数据。
IARC分类（致癌性）	该CAS号无单独的IARC专著——这并不确认无致癌性（参见第2节CLP/GHS分类）。
生殖毒性	无可用数据。
STOT——单次暴露	无可用数据。
STOT——重复暴露	无可用数据。
吸入危害	无可用数据。

12. 生态学信息

水生毒性	根据 ECHA C&L 通报分类（自我分类，第 4(3) 条）：H412 — 对水生生物有害，具有长期持续影响（水生环境慢性危害 3）。可用数据集中LC_{50}/EC_{50}数值数据未经核实 — 不得假定无毒性。
持久性/生物降解性	无可用数据。
生物累积性	log Kow = 2 [8]。生物累积潜力低（log Kow < 4.5 — 依据 ECHA 指南 R.11 的 PBT/vPvB 筛查标准）。 [14][15]
土壤中的迁移性	无可用数据。
PBT/vPvB评估	数据不足以评估PBT/vPvB。
内分泌干扰特性	无信息。

13. 废物处置

处置方法	根据国家和地方法规，交由有资质的承包商进行处置。不得排入下水道。
废物代码（**EWC**）	16 05 06* — 实验室和分析用化学品（例如化学试剂）含有危险物质。需要验证 EWC 代码。 [10]
包装	清洁过的包装可回收。受污染的包装必须作为危险废物处理。

WORKING DRAFT 工作草案

14. 运输信息

UN编号	需要核实 — 无经核实的 UN 编号分配。
环境危害	运输环境危害：未经核实。分类未协调（CLP 附件 VI 之外）——核实水生毒性（第 12 节），请勿假定无需海洋污染物标记；发货前按 ADR 2.2.9 / IMDG 确认。
特殊预防措施	按分配的类别（ADR/IMDG/IATA）作为危险货物处理；采取该类别相应的预防措施。
CN/HS编码	CN/HS 编码：需在 Eurostat 组合税则中核实。
备注	运输分类未验证。不要假设没有限制——发货前请检查ADR/IMDG/IATA。

15. 法规信息

SVHC状态	未对照可用数据集核实 SVHC 状态 — 请查阅最新的 ECHA 候选清单；请勿假定不存在。 [1]
REACH 附件 XIV	未对照 ECHA 授权清单进行核实 — 请查阅 REACH 附件 XIV。 [1]
REACH 附件 XVII	在现有附件XVII数据集中未确认——在投放市场前请根据当前ECHA清单验证；不要假设无限制。 [1]

16. 其他信息

分类的法律地位：供应商根据 CLP 第 4(3) 条自我分类 — 附件 VI 中无协调条目。生效日期晚于 17.10.2026 因尚未生效而被省略。

数据自动聚合自公共参考数据库（**PubChem**、**ECHA**、**NIST**等）。

科学引用 (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

H说明全文

H302	吞咽有害
H312	皮肤接触有害
H315	造成皮肤刺激
H319	造成严重眼刺激
H332	吸入有害
H412	对水生生物有害并具有长期持续影响

P说明全文

P261	避免吸入粉尘/烟/气体/气雾/蒸气/喷雾。
P264	作业后彻底清洗手部[和……]。
P270	使用本产品时不要进食、饮水或吸烟。
P271	只能在室外或充分通风的情况下使用。
P273	避免释放到环境中。
P280	戴防护手套/穿防护服/戴防护眼罩/戴防护面具/戴听力保护装置……
P301+P312	如误吞咽：：如感觉不适，呼叫中毒急救中心/医生/……
P302+P352	如皮肤沾染：：用水充分清洗/……

WORKING DRAFT 工作草案

P304+P340	如误吸入：：将人转移到空气新鲜处，保持呼吸舒适体位。
P305+P351+P338	如进入眼睛：：用水小心冲洗几分钟。；如戴隐形眼镜并可方便地取出，取出隐形眼镜。继续冲洗。
P312	如感觉不适，呼叫中毒急救中心/医生/……
P330	漱口。
P332+P313	如发生皮肤刺激：：求医/就诊。
P337+P313	如眼刺激持续：：求医/就诊。
P391	收集溢出物。
P501	处置内装物/容器……

缩写

ADR	欧洲关于危险货物国际公路运输的协定
ATE	急性毒性估计
CAS号	Chemical Abstracts Service
CLP	分类、标签和包装（(EC) 1272/2008法规）
CMR	致癌性、致突变性、生殖毒性
DNEL	衍生无效应水平
EC	European Community number
EPI	个人防护装备
GHS	全球统一制度
IATA	国际航空运输协会
IMDG	国际海运危险货物规则
安全数据表	安全数据表
LC50	半数致死浓度
LD50	半数致死剂量
NDS	最高容许浓度（工作场所，波兰）
NDSCh	短时 NDS
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	持久性、生物累积性和毒性
PNEC	预测无效应浓度
REACH	化学品注册、评估、许可和限制（(EC) 1907/2006法规）
SDS	Safety Data Sheet
STOT	特定靶器官毒性
SVHC	高度关注物质
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	高持久性和高生物累积性

版本历史

v3 (17.10.2026)	基于供应商自我分类编制（ECHA C&L 通报；附件 VI 中无协调条目）。

参考文献

[1] 欧洲议会和理事会。法规(EC) 第1907/2006号 (REACH)。第31条，附件II。欧盟官方公报 L 396/2006。 URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-17.

[2] 欧盟委员会。法规(EU) 2020/878 — 修订REACH附件II。欧盟官方公报 L 203/2020。自01.01.2023起。 URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-17.

[3] 欧洲议会和理事会。法规(EC) 1272/2008 (CLP) + ATP 23。欧盟官方公报 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.

WORKING DRAFT · 工作草案

[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

[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

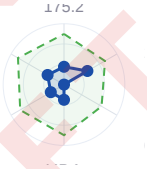
[15] European Parliament and Council. Regulation (EC) No 1907/2006 (REACH), Annex XIII — Criteria for the identification of PBT and vPvB substances. OJ EU L 396/2006 (consolidated). URL: https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:02006R1907-20140410

[16] MRiPS 2018年6月12日条例 — NDS/NDN。法律公报 2024 第1017项。 URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-17.

外部链接

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

ADMET / Drug-likeness



NFPA 704 （补充信息——NFPA/美国系统；不是REACH附件II要求的欧盟安全数据表要素）



法律声明： 本文件根据 PubChem (NIH)、ECHA、NIST WebBook、ChemSpider (RSC) 及其他公共数据库的数据自动生成。本文件不能替代符合法规 (EC) No 1907/2006 (REACH) 的正式安全数据表 (SDS)。使用该物质前，请对照制造商现行的安全数据表核实数据。
生成器： 本文件根据供应商自我分类（ECHA C&L 通报）和公共理化数据库自动生成。
作者： **www.MolGod.org** — 自动化安全数据表 (SDS) 平台。
发布日期： 18.10.2026 | 文件版本： 3