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

conforme al Reg. (CE) n. 1907/2006 (REACH), All. II — Reg. (UE) 2020/878 Data: 21.10.2026 | Versione: 1 | IT

Acetyl Tributyl Citrate

tributyl 2-acetyloxypropane-1,2,3-tricarboxylate

CAS 77-90-7

$C_{20}H_{34}O_8$ **EC 201-067-0**

MASSA MOLARE	LOGP
402.50	3.3

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	Acetyl Tributyl Citrate
1.1 Nome IUPAC	tributyl 2-acetyloxypropane-1,2,3-tricarboxylate
1.1 Numero CAS	77-90-7
1.1 Numero EC	201-067-0
1.1 PubChem CID	6505
1.1 InChIKey	QZCLKYGREBVARF-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CCCCOC(=O)CC(CC(=O)OCCCC)(C(=O)OCCCC)OC(=O)C
1.1 Formula molecolare	$C_{20}H_{34}O_8$ [7]
1.1 Massa molare	402.5 g/mol [7]
1.1 Massa esatta	402.2254 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	77-90-7
Numero CE	201-067-0
Formula molecolare	$C_{20}H_{34}O_8$
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.
Punto di infiammabilità	113°C [7]

6. Misure in caso di rilascio accidentale

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

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]

WORKING DRAFT 工作草案

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)



9. Proprietà fisiche e chimiche

Proprietà (punto 9.1)	Valore	Source
Stato fisico	Liquido	
Colore	Liquido incolore [7]	
Odore	Nessun dato disponibile.	
pH (soluzione acquosa 1%)	Nessun dato disponibile.	
Temp. di fusione	-80°C (experimental data) [7]	
Punto di ebollizione	331°C (experimental data) [7]	
Punto di infiammabilità	113°C (experimental data) [7]	
Infiammabilità	Nessun dato disponibile.	
Limite inferiore e superiore di esplosività	Nessun dato disponibile.	
Densità (20°C)	1.047 g/cm³ [7]	
Tensione di vapore	0 kPa (0.000005 mmHg) (experimental data) [7]	

WORKING DRAFT 工作草稿

Proprietà (punto 9.1)	Valore	Source
Densità di vapore relativa	13.89 [13]	
Viscosità dinamica	42.7 mPa·s [7]	
Viscosità cinematica	Nessun dato disponibile.	
Indice di rifrazione nD²⁰	1.4408 (experimental data) [7]	
Temperatura di autoaccensione	Nessun dato disponibile.	
Temperatura di decomposizione	Non applicabile	
Idrosolubilità	0.0045 g/L, 20°C [7]	
Caratteristiche delle particelle	Non applicabile (REACH 9.1(r))	
Coefficiente di ripartizione n-ottanolo/acqua (valore logaritmico)	3.3 [8]	
Massa molare	402.5 g/mol [7]	
Formula molecolare	$C_{20}H_{34}O_8$ [7]	
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)	LD50 >50 mL/kg (gatto, orale) [7]
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 · 工作草案

12. Informazioni ecologiche

Tossicità acquatica	Nessun dato disponibile.
Persistenza / biodegradabilità	Nessun dato disponibile.
Potenziale di bioaccumulo	log Kow = 3.3 [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 21.10.2026 omessi in quanto futuri (non ancora applicabili).

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

Citazioni scientifiche (8)

Choi H, Jo EK, Kwon J et al.. *Identification of candidate exposure biomarkers for acetyl tributyl citrate and acetyl triethyl citrate using suspect screening in human liver microsomes.*. Environment international (2024). DOI: 10.1016/j.envint.2024.108980

WORKING DRAFT · 工作草案

Jeon H, Yeo S, Park EA et al.. *Identification and quantification of acetyl tributyl citrate (ATBC) metabolites using human liver microsomes and human urine.*. Chemosphere (2024). DOI: 10.1016/j.chemosphere.2024.142840

Huang S. *Efficient analysis of toxicity and mechanisms of environmental pollutants with network toxicology and molecular docking strategy: Acetyl tributyl citrate as an example.*. The Science of the total environment (2023). DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.167904

Zhang W, Jie J, Xu Q et al.. *Characterizing the obesogenic and fatty liver-inducing effects of Acetyl tributyl citrate (ATBC) plasticizer using both in vivo and in vitro models.*. Journal of hazardous materials (2023). DOI: 10.1016/j.jhazmat.2022.130548

Johnson W Jr. *Final report on the safety assessment of acetyl triethyl citrate, acetyl tributyl citrate, acetyl trihexyl citrate, and acetyl trioctyl citrate.*. International journal of toxicology (2002). DOI: 10.1080/10915810290096504

Abbreviazioni

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

v1 (21.10.2026)	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: 2026-10-21.

[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: 2026-10-21.

[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: 2026-10-21.

[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: 2026-10-21.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-10-21.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-10-21.

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/6505

[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

WORKING DRAFT · 工作草稿

[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] U.S. EPA. ECOTOX Knowledgebase. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. URL: https://cfpub.epa.gov/ecotox/

[13] 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

[14] 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: 2026-10-21.

Collegamenti esterni

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=77-90-7

ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL1904556

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: 21.10.2026 | Versione del documento: 1

WORKING DRAFT · 工作草稿