VEILIGHEIDSINFORMATIEBLAD / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conform Verord. (EG) nr. 1907/2006 (REACH), Bijlage II — Verord. (EU) 2020/878 Datum: 18.10.2026 | Versie: 1 | NL

4-tert-butylbenzoic acid

4-tert-butylbenzoic acid

CAS 98-73-7

$C_{11}H_{14}O_2$ EC 202-696-3

MOLAIRE MASSA	LOGP
178.23	3.9

TPSA
37.3 Å²

GEVARENCLASSIFICATIE (GHS / CLP)



Gevaar

H360F H302 H372

Bereik van de gevarenklassen beperkt tot de geharmoniseerde indeling (CLP bijlage VI); klassen buiten de geharmoniseerde vermelding kunnen zelfclassificatie door de leverancier vereisen (CLP art. 4(3)) — verifieer met het veiligheidsinformatieblad van de leverancier.

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

1.1 Naam van de stof	4-tert-butylbenzoic acid
1.1 IUPAC-naam	4-tert-butylbenzoic acid
1.1 CAS-nummer	98-73-7
1.1 EG-nummer	202-696-3
1.1 PubChem CID	7403
1.1 InChIKey	KDVYCTOWXSLNNI-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CC(C)(C)C1=CC=C(C=C1)C(=O)O
1.1 Molecuulformule	$C_{11}H_{14}O_2$ [7]
1.1 Molmassa	178.23 g/mol [7]
1.1 Exacte massa	178.0994 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:



Verboden:



Gevaar

Gevarenaanduidingen (H) [3][4][9]

H360F	Kan de vruchtbaarheid schaden.
H302	Schadelijk bij inslikken.
H372	Veroorzaakt schade aan organen bij langdurige of herhaalde blootstelling.

Voorzorgsmaatregelen (P) [3][4][9]

P201	Vóór gebruik speciale aanwijzingen raadplegen.
P202	Pas gebruiken nadat u alle veiligheidsvoorschriften gelezen en begrepen heeft.
P260	Stof/rook/gas/nevel/damp/spuitnevel niet inademen.
P264	Na het werken met dit product ... grondig wassen.
P270	Niet eten, drinken of roken tijdens het gebruik van dit product.
P280	Beschermende handschoenen/beschermende kleding/oogbescherming/ gelaatsbescherming dragen.
P301+P312	NA INSLIKKEN: Bij onwel voelen een ANTIGIFCENTRUM/arts/... raadplegen.
P308+P313	NA (mogelijke) blootstelling: Een arts raadplegen.
P314	Bij onwel voelen een arts raadplegen.
P330	De mond spoelen.
P405	Achter slot bewaren.
P501	Inhoud/verpakking afvoeren naar ...

Bereik van de gevarenklassen beperkt tot de geharmoniseerde indeling (CLP bijlage VI); klassen buiten de geharmoniseerde vermelding kunnen zelfclassificatie door de leverancier vereisen (CLP art. 4(3)) — verifieer met het veiligheidsinformatieblad van de leverancier.

WORKING DRAFT · 工作草案

3. Samenstelling en informatie over de bestanddelen

Type stof	zuivere stof
CAS-nummer	98-73-7
EG-nummer	202-696-3
Molecuulformule	$C_{11}H_{14}O_2$
Concentratie	≥99% (typische zuiverheid van reagenskwaliteit — te bevestigen door de specificatie van de leverancier)
Clp index no	607-698-00-1

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][12]

Huidcontact

Verontreinigde kleding uittrekken. Huid spoelen met water en zeep (min. 15 minuten). [1][2][12]

Oogcontact

Ogen spoelen met stromend water (min. 15 minuten). Contactlenzen indien mogelijk verwijderen. Als de irritatie aanhoudt — raadpleeg een oogarts. [1][2][12]

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][12]

Symptomen en effecten

misselijkheid, braken, diarree. [3][9]

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. [13]
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 vermijden. [1][2][12]
Milieuvoorzorgsmaatregelen	Voorkom dat het in het riool, het grondwater en het oppervlaktewater terechtkomt. [1][2][12]
Methoden voor insluiting en reiniging	Mechanisch opnemen in geschikte containers. Absorptie: zand, vermiculiet, diatomeeënaarde. Niet droog vegen (stofvorming). [1][2][12]
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][12]
Opslagtemperatuur	Bewaren bij kamertemperatuur (15-25°C) of zoals aangegeven op het etiket. [1][2][12]
Watergehalte	Bewaren op een droge plaats (<60% RH). [1][2][12]
Licht	Beschermen tegen direct zonlicht. [1][2][12]
Onverenigbare materialen	Sterke oxidatiemiddelen, Sterke basen, Onedele metalen (waterstofontwikkeling). [13]

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	Vaste stof	
Kleur	Naalden uit verdunde alcohol [7]	
Geur	Geen gegevens beschikbaar.	
pH (1% waterige oplossing)	Geen gegevens beschikbaar.	
Smeltpunt	163.6°C [8]	
Kookpunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Vlampunt	Niet van toepassing (REACH 9.1(h))	
Ontvlambaarheid	Geen gegevens beschikbaar.	
Onderste en bovenste explosiegrens	Niet van toepassing (REACH 9.1(g))	
Dichtheid (20°C)	Geen gegevens beschikbaar.	
Dampspanning	Geen gegevens beschikbaar.	

WORKING DRAFT 工作稿

Eigenschap (punt 9.1)	Waarde	Bron
Relatieve dampdichtheid	Niet van toepassing (REACH 9.1(q))	
Kinematische viscositeit	Niet van toepassing (REACH 9.1(l))	
Zelfontbrandingstemperatuur	Geen gegevens beschikbaar.	
Ontledingstemperatuur	Niet van toepassing	
Oplosbaarheid in water	Geen gegevens beschikbaar.	
Deeltjeskenmerken	De deeltjesgrootteverdeling is voor deze handelsvorm niet bepaald — vereist op grond van bijlage II 9.1(r); aan te vullen met de specificatie van de leverancier.	
Verdelingscoëfficiënt n-octanol/water (logwaarde)	3.9 [8]	
Molaire massa	178.23 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Molecuulformule	$C_{11}H_{14}O_2$ [7] ✓86%	*PubChem*
Lipinski-regel (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. 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, Sterke basen, Onedele metalen (waterstofontwikkeling).
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	Niet ingedeeld voor dit gevaar (buiten het toepassingsgebied van de geharmoniseerde indeling in CLP bijlage VI; controleer de zelfclassificatie van de leverancier) [3][9]
Oogirritatie	Niet ingedeeld voor dit gevaar (buiten het toepassingsgebied van de geharmoniseerde indeling in CLP bijlage VI; controleer de zelfclassificatie van de leverancier) [3][9]
Sensibilisatie	Niet ingedeeld voor dit gevaar (buiten het toepassingsgebied van de geharmoniseerde indeling in CLP bijlage VI; controleer de zelfclassificatie van de leverancier) [3][9]
Mutageniteit	Niet ingedeeld voor dit gevaar (buiten het toepassingsgebied van de geharmoniseerde indeling in CLP bijlage VI; controleer de zelfclassificatie van de leverancier) [3][9]
Carcinogeniteit	Niet ingedeeld voor dit gevaar (buiten het toepassingsgebied van de geharmoniseerde indeling in CLP bijlage VI; controleer de zelfclassificatie van de leverancier) [3][9]

WORKING DRAFT · 工作草案

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	Categorie 1A/1B (geharmoniseerde indeling, bijlage VI bij CLP).
STOT (eenmalige blootstelling)	Niet ingedeeld voor dit gevaar (buiten het toepassingsgebied van de geharmoniseerde indeling in CLP bijlage VI; controleer de zelfclassificatie van de leverancier) [3][9]
STOT (herhaalde blootstelling)	Categorie 1 (H372): Veroorzaakt schade aan organen bij langdurige of herhaalde blootstelling. [3][9]
Aspiratiegevaar	Niet ingedeeld voor dit gevaar (buiten het toepassingsgebied van de geharmoniseerde indeling in CLP bijlage VI; controleer de zelfclassificatie van de leverancier) [3][9]

12. Ecologische informatie

Aquatische toxiciteit	LC_{50} (vissen): 4 mg/L (Carassius auratus, 96 h) [17]
Persistentie / biologische afbreekbaarheid	Geen gegevens beschikbaar.
Bioaccumulatiepotentieel	log Kow = 3.9 [8]. Laag bioaccumulatiepotentieel (log Kow < 4,5 — PBT/zPzB-screeningscriterium volgens ECHA-richtsnoer R.11). [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. [11]
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	Niet ingedeeld als milieugevaarlijk voor transport (geen H400/H410/H411 in CLP bijlage VI; geen markering als mariene verontreiniging vereist) [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.

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	Onderworpen aan de algemene vermeldingen 28–30 van Bijlage XVII van REACH (CMR-stof cat. 1A/1B): verkoop aan het grote publiek verboden — in de handel brengen uitsluitend voor professionele gebruikers. [1]

WORKING DRAFT · 工作草案

16. Overige informatie

Juridische status van de indeling: geharmoniseerd volgens CLP bijlage VI — Verordening (EG) nr. 1272/2008 (op de datum van afgifte).Vermeldingen met een datum van inwerkingtreding na 10.10.2026 weggelaten als toekomstig (nog niet van toepassing).

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

Wetenschappelijke citaten (2)

Popiołek Ł, Biernasiuk A. *Hydrazide-hydrazones of 3-methoxybenzoic acid and 4-tert-butylbenzoic acid with promising antibacterial activity against Bacillus spp.*. Journal of enzyme inhibition and medicinal chemistry (2016). DOI: 10.3109/14756366.2016.1170012

Whorton MD, Stubbs HA, Obrinsky A et al.. *Testicular function of men occupationally exposed to para-tertiary butyl benzoic acid.*. Scandinavian journal of work, environment & health (1981). DOI: 10.5271/sjweh.3113

Volledige tekst van de H-zinnen

H360F	Kan de vruchtbaarheid schaden.
H302	Schadelijk bij inslikken.
H372	Veroorzaakt schade aan organen bij langdurige of herhaalde blootstelling.

Volledige tekst van de P-zinnen

P201	Vóór gebruik speciale aanwijzingen raadplegen.
P202	Pas gebruiken nadat u alle veiligheidsvoorschriften gelezen en begrepen heeft.
P260	Stof/rook/gas/nevel/damp/spuitnevel niet inademen.
P264	Na het werken met dit product ... grondig wassen.
P270	Niet eten, drinken of roken tijdens het gebruik van dit product.
P280	Beschermende handschoenen/beschermende kleding/oogbescherming/ gelaatsbescherming dragen.
P301+P312	NA INSLIKKEN: Bij onwel voelen een ANTIGIFCENTRUM/arts/... raadplegen.
P308+P313	NA (mogelijke) blootstelling: Een arts raadplegen.
P314	Bij onwel voelen een arts raadplegen.
P330	De mond spoelen.
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 · 工作草案

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

v1 (10.10.2026)	Opgesteld op basis van de geharmoniseerde ECHA-indeling (bijlage VI bij CLP, ATP 23).

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: 2026-10-10.

[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: 2026-10-10.

[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: 2026-10-10.

[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: 2026-10-10.

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

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

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/7403

[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] ECHA. REACH Registration Dossier (registered substance, acute toxicity study record). Helsinki: European Chemicals Agency. URL: https://echa.europa.eu/registration-dossier

[11] 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

[12] 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

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

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

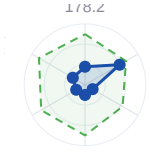
[18] MRiPS-verordening van 12.06.2018 — NDS/NDN. Staatsblad 2024 pos. 1017. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-10.

Externe links

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=98-73-7

ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL93746

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 de geharmoniseerde ECHA-indeling (bijlage VI bij CLP) en openbare fysisch-chemische databanken.
Auteur: www.MolGod.org — platform voor geautomatiseerde veiligheidsinformatiebladen (VIB).
Datum van uitgifte: 18.10.2026 | Documentversie: 1

WORKING DRAFT · 工作草案