

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

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

Date : 21.09.2026 | Version : 1 | FR

2-ethylhexanoic acid

2-ethylhexanoic acid

MASSE MOLAIRE

144.21

LOGP

2.6

CAS 149-57-5

 $C_8H_{16}O_2$

CLASSIFICATION DES DANGERS (GHS / CLP)



Attention

H361

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

—

1.1 Nom IUPAC

2-ethylhexanoic acid

1.1 Numéro CAS

149-57-5

1.1 Numéro CE

Aucune donnée

1.1 PubChem CID

8697

1.1 InChIKey

OBETXYAYXDNJHR-UHFFFAOYSA-N

1.1 SMILES

CCCCC(CC)C(=O)O

1.1 Formule brute

 $C_8H_{16}O_2$ ^[7]

1.1 Masse molaire

144.21 g/mol ^[7]

1.1 Masse exacte

144.1150 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

+48 42 631 47 24

Centre d'information toxicologique (CIT), Łódź — ouvert 24/7

2. Identification des dangers

GHS:



EPI :



Attention

Mentions de danger (H) ^{[3][4]}

H361

Susceptible de nuire à la fertilité ou au fœtus.

Conseils de prudence (P) ^{[3][4]}

P201

Se procurer les instructions spéciales avant utilisation.

P202

Ne pas manipuler avant d'avoir lu et compris toutes les précautions de sécurité.

P280

Porter des gants de protection/des vêtements de protection/un équipement de protection des yeux/du visage.

P308+P313

EN CAS d'exposition prouvée ou suspectée: Consulter un médecin.

P405

Garder sous clef.

P501

Éliminer le contenu/récipient dans ...

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	149-57-5
Formule brute	$C_8H_{16}O_2$
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][12]}

Contact cutané

Retirer les vêtements contaminés. Rincer la peau à l'eau savonneuse (min. 15 minutes). ^{[1][2][12]}

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][12]}

Ingestion

NE PAS faire vomir (sauf avis médical contraire). Rincer la bouche à l'eau. Ne rien administrer par voie orale à une personne inconsciente. Centre antipoison Łódź : +48 42 631 47 24 (24/7). Numéro d'urgence : 112. ^{[1][2][12]}

Symptômes et effets

Aucun symptôme spécifique décrit dans la littérature. ^[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).**

5. Mesures de lutte contre l'incendie

Moyens d'extinction appropriés	Adapter les moyens d'extinction à l'environnement. CO ₂ , poudre, mousse.
Moyens d'extinction inappropriés	Aucune restriction particulière.
Dangers spécifiques	Produits de décomposition thermique :CO, CO ₂ . ^[13]
Conseils aux pompiers	Utiliser un appareil respiratoire isolant (SCBA). Tenue de protection intégrale.
Point d'éclair	114°C ^[7]
Température d'auto-inflammation	370.6°C ^[7]

6. Mesures à prendre en cas de dispersion accidentelle

Précautions individuelles	Utiliser un équipement de protection individuelle (voir rubrique 8). Éviter de respirer les vapeurs. ^{[1][2][12]}
Précautions pour l'environnement	Empêcher la pénétration dans les égouts, les eaux souterraines et les eaux de surface. ^{[1][2][12]}
Méthodes de confinement et de nettoyage	Endiguer la fuite. Absorber avec un matériau inerte (sable, vermiculite, terre de diatomées). Recueillir dans des récipients étanches et étiquetés. Ne pas rejeter à l'égout. ^{[1][2][12]}
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][12]}
-------------	--

Température de stockage	Conserver à température ambiante (15-25°C) ou conformément à l'étiquette. ^{[1][2][12]}
Teneur en eau	Conserver dans un endroit sec (<60% HR). ^{[1][2][12]}
Lumière	Protéger de la lumière directe du soleil. ^{[1][2][12]}
Matières incompatibles	Oxydants forts, Bases fortes, Métaux communs (dégagement d'hydrogène). ^[13]

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][16]}

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

9. Propriétés physiques et chimiques

Propriété (point 9.1)	Valeur	Source
État physique	Liquide	
Couleur	Aucune donnée disponible.	
Odeur	Aucune donnée disponible.	
pH (solution aqueuse à 1%)	Sans objet	
Temp. de fusion	-59.00°C (experimental data) ^[7]	
Point d'ébullition	228.0673°C ^{[8] [7]}	
Point d'éclair	114°C (experimental data) ^[7]	
Inflammabilité	Aucune donnée disponible.	
Limites inférieure et supérieure d'explosion	Aucune donnée disponible.	
Densité (20°C)	0.903 g/cm ³ (experimental data) ^[7]	
Pression de vapeur	0.004 kPa (0.03 mmHg, 20°C) (experimental data) ^[7]	
Densité de vapeur relative	4.98 ^[20]	
Viscosité dynamique	7.8 mPa·s ^[7]	

Propriété (point 9.1)	Valeur	Source
Viscosité cinématique	Aucune donnée disponible.	
Indice de réfraction nD ²⁰	1.4241 (experimental data) ^[7]	
Température d'auto-inflammation	370.6°C (experimental data) ^[7]	
Température de décomposition	Sans objet	
Rozpuszcz. w wodzie	2 g/L, 20°C ^[7]	
Caractéristiques des particules	Sans objet (REACH 9.1(r))	
Coefficient de partage n-octanol/eau (valeur log)	2.6 ^[9]	
Masse molaire	144.21 g/mol ^[7]	
Formule brute	C ₈ H ₁₆ O ₂ ^[7]	
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, Bases fortes, Métaux communs (dégagement d'hydrogène).
Produits de décomposition	Produits de décomposition thermique :CO, CO2.

11. Informations toxicologiques

DL50 (voie orale)	LD50 1.6–3 g/kg (rat, orale) ^[7]
DL50 (voie cutanée)	LD50 1260 mg/kg (lapin) ^[7]
CL50 (inhalation)	Aucune donnée disponible.
Irritation cutanée	Aucune donnée disponible.
Irritation oculaire	Aucune donnée disponible.
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	Classification issue des notifications agrégées ECHA C&L (non harmonisée) — à vérifier ; aucune entrée à l'annexe VI du CLP.
STOT (exposition unique)	Aucune donnée disponible.
STOT (exposition répétée)	Aucune donnée disponible.
Danger par aspiration	Aucune donnée disponible.

12. Informations écologiques

Toxicité aquatique	EC ₅₀ (Daphnia): 106 mg/L (Daphnia magna, 48 h) ^[19]
Persistence / biodégradabilité	Aucune donnée disponible.
Potentiel de bioaccumulation	log Kow = 2.6 ^[9] . Faible potentiel de bioaccumulation (log Kow < 4,5 — critère de présélection PBT/vPvB selon le guide ECHA R.11). ^{[17][18]}
Mobilité dans le sol	Aucune donnée disponible.
Évaluation PBT/vPvB	Données insuffisantes pour évaluer PBT/vPvB.
Propriétés perturbant le système endocrinien	Zgłoszone efekty endokrynne u organizmów wodnych (dane ekotoksykologiczne, US EPA ECOTOX; nie stanowią regulacyjnej klasyfikacji ED wg 2018/605). [PL] ^[19]

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 (np. réactifs chimiques) zawierające substancje niebezpieczne. Vérification du code EWC requise. ^[11]
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.

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 21.09.2026 omises comme futures (pas encore applicables).

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

Citations scientifiques (8)

- Obringer C, Lester C, Karb M et al.. Impact of chemical structure on the in vitro hydrolysis of fatty esters of 2-ethylhexanoic acid or 2-ethylhexanol and extrapolation to the in vivo situation.. Regulatory toxicology and pharmacology : RTP (2023). DOI: 10.1016/j.yrtph.2022.105315
- Sumida K, Kaneko H, Yoshitake A. Inhibition of animal acetyl-coenzyme A carboxylase by 2-(p-chlorophenoxy)-2-methylpropionic acid and 2-ethylhexanoic acid.. Chemosphere (1996). DOI: 10.1016/0045-6535(96)00331-1

Juberg DR, David RM, Katz GV et al.. 2-Ethylhexanoic acid: subchronic oral toxicity studies in the rat and mouse.. Food and chemical toxicology : an international journal published for the British Industrial Biological Research Association (1998). DOI: 10.1016/s0278-6915(97)00168-3

Walker V, Mills GA. Urine 4-heptanone: a beta-oxidation product of 2-ethylhexanoic acid from plasticisers.. Clinica chimica acta; international journal of clinical chemistry (2001). DOI: 10.1016/s0009-8981(01)00390-4

Hamdoune M, Duclos S, Mounie J et al.. In vitro glucuronidation of peroxisomal proliferators: 2-ethylhexanoic acid enantiomers and their structural analogs.. Toxicology and applied pharmacology (1995). DOI: 10.1006/taap.1995.1066

Texte intégral des mentions H

H361 Susceptible de nuire à la fertilité ou au fœtus.

Texte intégral des conseils P

P201 Se procurer les instructions spéciales avant utilisation.

P202 Ne pas manipuler avant d'avoir lu et compris toutes les précautions de sécurité.

P280 Porter des gants de protection/des vêtements de protection/un équipement de protection des yeux/du visage.

P308+P313 EN CAS d'exposition prouvée ou suspectée: Consulter un médecin.

P405 Garder sous clef.

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

v1 (21.09.2026)

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: 2026-09-21.
- [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: 2026-09-21.
- [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: 2026-09-21.
- [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: 2026-09-21.
- [5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/72424.html> Accessed: 2026-09-21.
- [6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/51021.html> Accessed: 2026-09-21.
- [7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/8697>
- [8] NIST. Chemistry WebBook, SRD 69. National Institute of Standards and Technology. URL: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=149-57-5>
- [9] Rumble, J.R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 105th ed. Boca Raton: CRC Press, 2024. URL: <https://hbcpc.chemnetbase.com>
- [10] ECHA. European Chemicals Agency — harmonised classification inventory (CLP Annex VI). URL: <https://echa.europa.eu>
- [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] Act of 26 June 1974 — Labour Code (Poland), Art. 176 § 1. Journal of Laws 2023 item 1465. URL: <https://isap.sejm.gov.pl>
- [15] Council of Ministers of the Republic of Poland. Regulation of 3 April 2017 on the list of arduous, hazardous or health-harmful work for pregnant and breastfeeding women. Journal of Laws 2017 item 796. URL: <https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20170000796>
- [16] CEN. Personal protective equipment standards (EN ISO 374-1, EN 166, EN 149, EN 14387, EN ISO 20345). Brussels: European Committee for Standardization.
- [17] 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>
- [18] 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>
- [19] U.S. EPA. ECOTOX Knowledgebase. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. URL: <https://cfpub.epa.gov/ecotox/>
- [20] 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>
- [21] 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: 2026-09-21.

Liens externes

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=149-57-5>

ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL1162485

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), Wikidata 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 : 21.09.2026 | Version du document : 1