WORKING DRAFT · 工作草案

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

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

Date : 23.09.2026 | Version : 1 | FR

Walina

(2S)-2-amino-3-methylbutanoic acid

CAS 72-18-4

$C_5H_{11}NO_2$ | EC 200-773-6

易 普 化 工
EAPEARL CHEM

MASSE MOLAIRE	LOGP
117.15	-2.3

CLASSIFICATION DES DANGERS (GHS / CLP)

Classification CLP non établie — aucune entrée harmonisée (Annexe VI), la provenance de l'autoclassification n'est pas établie. Une vérification dans l'inventaire C&L de l'ECHA / la fiche de données de sécurité du fabricant est requise. Ne PAS présumer l'absence de danger.

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

1.1 Nom de la substance	Walina
1.1 Nom IUPAC	(2S)-2-amino-3-methylbutanoic acid
1.1 Numéro CAS	72-18-4
1.1 Numéro CE	200-773-6
1.1 PubChem CID	6287
1.1 InChIKey	KZSNJWFQEVHDMF-BYPYZUCNSA-N
1.1 SMILES	CC(C)[C@@H](C(=O)O)N
1.1 Formule brute	$C_5H_{11}NO_2$ [7]
1.1 Masse molaire	117.15 g/mol [7]
1.1 Masse exacte	117.0790 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

Classification CLP non établie — aucune entrée harmonisée (Annexe VI), la provenance de l'autoclassification n'est pas établie. Une vérification dans l'inventaire C&L de l'ECHA / la fiche de données de sécurité du fabricant est requise. Ne PAS présumer l'absence de danger.

3. Composition/informations sur les composants

Type de substance	substance pure
Numéro CAS	72-18-4
Numéro CE	200-773-6
Formule brute	$C_5H_{11}NO_2$
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]

Contact cutané

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

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]

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]

Symptômes et effets

Aucun symptôme spécifique décrit dans la littérature. [1][2]

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. CO2, poudre, mousse.
Moyens d'extinction inappropriés	Aucune restriction particulière.
Dangers spécifiques	Produits de décomposition thermique :CO, CO2, NOx.
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. [1][2]
Précautions pour l'environnement	Empêcher la pénétration dans les égouts, les eaux souterraines et les eaux de surface. [1][2]
Méthodes de confinement et de nettoyage	Recueillir mécaniquement dans des récipients appropriés. Absorption : sable, vermiculite, terre de diatomées. Ne pas balayer à sec (formation de poussières). [1][2]
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]

WORKING DRAFT 工作草案

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

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)



Gants de protection résistants aux produits chimiques
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
Le choix des EPI nécessite que la classification des dangers soit établie — aucune base ne permet d'indiquer un matériau de gants. Utiliser les EPI conformément à la fiche de données de sécurité du fournisseur et à l'évaluation des risques au poste de travail.



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	Solide	
Couleur	Aucune donnée disponible.	
Odeur	Aucune donnée disponible.	
pH (solution aqueuse à 1%)	Aucune donnée disponible.	
Temp. de fusion	315°C (experimental data) [7]	
Point d'ébullition	Aucune donnée disponible.	
Point d'éclair	Sans objet (REACH 9.1(h))	
Inflammabilité	Aucune donnée disponible.	
Limites inférieure et supérieure d'explosion	Sans objet (REACH 9.1(g))	
Densité (20°C)	1.23 g/cm³ (experimental data) [7]	

WORKING DRAFT 工作草稿

Propriété (point 9.1)	Valeur	Source
Pression de vapeur	0 kPa (0 mmHg) (experimental data) [7]	
Densité de vapeur relative	Sans objet (REACH 9.1(q))	
Viscosité cinématique	Sans objet (REACH 9.1(l))	
Température d'auto-inflammation	Aucune donnée disponible.	
Température de décomposition	Aucune donnée disponible.	
Rozpuszcz. w wodzie	83.4 g/L, 25°C [7]	
Caractéristiques des particules	La distribution granulométrique n'a pas été déterminée pour cette forme commerciale — requise au titre de l'annexe II 9.1(r) ; à compléter à partir de la spécification du fournisseur.	
Coefficient de partage n-octanol/eau (valeur log)	-2.3 [7]	
Masse molaire	117.15 g/mol [7]	
Formule brute	$C_5H_{11}NO_2$ [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, NOx.

11. Informations toxicologiques

DL50 (voie orale)	Aucune donnée disponible.
DL50 (voie cutanée)	Aucune donnée disponible.
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	Aucune donnée disponible.
STOT (exposition unique)	Aucune donnée disponible.
STOT (exposition répétée)	Aucune donnée disponible.

WORKING DRAFT 工作稿

Danger par aspiration	Aucune donnée disponible.

12. Informations écologiques

Toxicité aquatique	Aucune donnée disponible.
Persistance / biodégradabilité	Aucune donnée disponible.
Potentiel de bioaccumulation	log Kow = -2.3 [7]. Faible potentiel de bioaccumulation (log Kow < 4,5 — critère de présélection PBT/vPvB selon le guide ECHA R.11). [9][10]
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)	Le code déchet (CED) ne peut pas être déterminé sans classification des dangers — la provenance de la classification n'est pas établie. Ne PAS présumer ni la dangerosité (16 05 06*) ni son absence (16 05 09) ; déterminer après vérification de la classification auprès de l'ECHA. [8]
Emballages	Les emballages nettoyés peuvent être recyclés. Les emballages contaminés doivent être traités conformément à la classification du déchet (voir le code CED ci-dessus) ; en l'absence de classification établie, ne pas présumer l'absence de danger.

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. Provenance de la classification indéterminée — ne PAS supposer l'absence de danger ni qu'aucune marque de polluant marin n'est requise ; vérifier selon l'annexe VI CLP, la section 12 et 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 : origine non enregistrée — vérification requise dans l'ECHA.Les entrées dont la date d'entrée en vigueur est postérieure au23.09.2026 omis comme futurs (pas encore applicables).

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

WORKING DRAFT · 工作草稿

Citations scientifiques (10)

Amalendu Pal, Nalin Chauhan. Thermodynamic Study of Some Amino Acids, 2-Aminopropanoic Acid, 2-Amino-3-methylbutanoic Acid, 2-Amino-4-methylpentanoic Acid, and 2-Amino-3-phenylpropanoic Acid in Aqueous Saccharide Solutions at Different Temperatures: Volumetric and Ultrasonic Study. Journal of Chemical & Engineering Data (2011). DOI: 10.1021/je100857s

Zhenning Yan, Yang Zhao, Ronghua Xing et al.. Volumetric and Conductometric Behavior at T = 298.15 K of 2-[(2-Aminoacetyl)amino]acetic Acid, 2-[(2-Aminoacetyl)amino]-3-methylbutanoic Acid, and (2S)-2-[(2-Aminoacetyl)amino]-4-methylpentanoic Acid with Sodium Hexanoate. Journal of Chemical & Engineering Data (2009). DOI: 10.1021/je900449q

Maria Annunziata M. Capozzi, Cosimo Cardellicchio. (S,S)-2-(((Hydroxynaphth-1-yl)(4′-nitrophenyl)methyl)amino)-3-methylbutanoic Acid Methyl Ester. Molbank (2022). DOI: 10.3390/m1528

Jiarui Lu, Yuyang Wang, Yizhe Zhang et al.. SimpleDesign: A Joint Model for Protein Sequence and Structure Codesign. arXiv (2609.03377v1) (2026).

Boheng Guan, Xuyu Liu. (R)-2-Amino-3-mercapto-3-methylbutanoic Acid. Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis (2026). DOI: 10.1002/047084289x.rn02173

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 (23.09.2026)	Origine de la classification non enregistrée dans le canon — vérifier la source dans l'ECHA (annexe VI / C&L).

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: 2026-09-23.

[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: 2026-09-23.

[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: 2026-09-23.

[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: 2026-09-23.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-09-23.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-09-23.

WORKING DRAFT 工作草稿

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/6287

[8] 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

[9] 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

[10] 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

[11] 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: 2026-09-23.

Liens externes

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=72-18-4

Wikidata: https://www.wikidata.org/wiki/Q483752

ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL43068

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 d'une classification d'origine non enregistrée (à vérifier dans l'ECHA) et de bases de données physico-chimiques publiques.
Auteur : **www.MolGod.org** — plateforme de fiches de données de sécurité automatisées (FDS).
Date d'émission : 23.09.2026 | Version du document : 1

WORKING DRAFT 工作草稿