# SICHERHEITSDATENBLATT / SAFETY DATA SHEET (SDS)

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH), Anhang II — Verordnung (EU) 2020/878

Datum: 18.10.2026 | Version: 3 | DE

## 5'''-(3'',5''-Dicarboxy[1,1':4',1''-terphenyl]-4-YL) [1,1':4',1'':4'',1''':3''',1'''':4'''',1''''':4''''',1'''''-septiphenyl]-3,3''''',5,5'''''-tetracarboxylic acid

*5-[4-[4-[3,5-bis[4-[4-(3,5-dicarboxyphenyl)phenyl]phenyl]phenyl]phenyl]phenyl]benzene-1,3-dicarboxylic acid*

**CAS 1333127-74-4**

$C_{66}H_{42}O_{12}$

| MOLMASSE | LOGP |
|---|---|
| 1027.00 | 13.7 |

| TPSA |
|---|
| 224 Å² |

### GEFAHRENKLASSIFIZIERUNG (GHS / CLP)

*CLP-Einstufung nicht ermittelt — kein harmonisierter Eintrag (Anhang VI), Herkunft der Selbsteinstufung nicht geklärt. Überprüfung im ECHA-C&L-Verzeichnis / im Sicherheitsdatenblatt des Herstellers erforderlich. Das Fehlen einer Gefahr NICHT annehmen.*

## 1. Bezeichnung des Stoffs bzw. des Gemischs und des Unternehmens

| | |
|---|---|
| **1.1 Stoffname** | 5'''-(3'',5''-Dicarboxy[1,1':4',1''-terphenyl]-4-YL)[1,1':4',1'':4'',1''':3''',1'''':4'''',1''''':4''''',1'''''-septiphenyl]-3,3''''',5,5'''''-tetracarboxylic acid |
| **1.1 IUPAC-Name** | 5-[4-[4-[3,5-bis[4-[4-(3,5-dicarboxyphenyl)phenyl]phenyl]phenyl]phenyl]phenyl]benzene-1,3-dicarboxylic acid |
| **1.1 CAS-Nummer** | 1333127-74-4 |
| **1.1 EG-Nummer** | Keine Daten |
| **1.1 PubChem CID** | 101962344 |
| **1.1 InChIKey** | NFSVNVMPPWZNFD-UHFFFAOYSA-N |
| **1.1 SMILES** | C1=CC(=CC=C1C2=CC=C(C=C2)C3=CC(=CC(=C3)C(=O)O)C(=O)O)C4=CC(=CC(=C4)C5=CC=C(C=C5)C6=CC=C(C=C6)C7=C |
| **1.1 Summenformel** | $C_{66}H_{42}O_{12}$ [7] |
| **1.1 Molmasse** | 1027.0 g/mol [7] |
| **1.1 Exakte Masse** | 1026.2676 Da [7] |

### 1.2 Verwendungen

Für Labor- und Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei der Herstellung von Lebensmitteln, Arzneimitteln oder Kosmetika ohne entsprechende Genehmigungen.

### 1.3 Angaben zum Lieferanten

| | |
|---|---|
| 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 Notrufnummer

| | |
|---|---|
| **Notruftelefon** | 112 (EU-wide emergency number) |

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

## 2. Mögliche Gefahren

**CLP-Einstufung nicht ermittelt — kein harmonisierter Eintrag (Anhang VI), Herkunft der Selbsteinstufung nicht geklärt. Überprüfung im ECHA-C&L-Verzeichnis / im Sicherheitsdatenblatt des Herstellers erforderlich. Das Fehlen einer Gefahr NICHT annehmen.**

## 3. Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen

| | |
|---|---|
| **Stofftyp** | Reinstoff |
| **CAS-Nummer** | 1333127-74-4 |
| **Summenformel** | $C_{66}H_{42}O_{12}$ |
| **Konzentration** | ≥99% (typische Reinheit in Reagenzienqualität — durch die Spezifikation des Lieferanten zu bestätigen) |

## 4. Erste-Hilfe-Maßnahmen



### Einatmen

Betroffene Person an die frische Luft bringen. Für Ruhe sorgen. Bei Atemstillstand: künstliche Beatmung (nur qualifiziertes Personal). [1][2]

### Hautkontakt

Kontaminierte Kleidung ausziehen. Haut mit Wasser und Seife spülen (mind. 15 Minuten). [1][2]

### Augenkontakt

Augen mit fließendem Wasser spülen (mind. 15 Minuten). Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Bei anhaltender Reizung — augenärztliche Untersuchung. [1][2]

### Verschlucken

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]

### Symptome und Wirkungen

Keine spezifischen Symptome in der Literatur beschrieben. [1][2]

### Hinweise für den Arzt

Überprüfung erforderlich

**Notrufnummern: Notruf: 112 (EU-wide). Poison centre: as designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).**

WORKING DRAFT 工作草案

## 5. Maßnahmen zur Brandbekämpfung

| | |
|---|---|
| **Geeignete Löschmittel** | Löschmittel an die Umgebung anpassen. CO2, Pulver, Schaum. |
| **Ungeeignete Löschmittel** | Keine besonderen Einschränkungen. |
| **Besondere Gefahren** | Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO2. |
| **Hinweise für die Brandbekämpfung** | Umluftunabhängiges Atemschutzgerät (SCBA) verwenden. Vollschutzanzug. |

## 6. Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

| | |
|---|---|
| **Persönliche Vorsichtsmaßnahmen** | Persönliche Schutzausrüstung verwenden (siehe Abschnitt 8). Einatmen von Staub/Dämpfen vermeiden. [1][2] |
| **Umweltschutzmaßnahmen** | Nicht in die Kanalisation, das Grundwasser oder Oberflächengewässer gelangen lassen. [1][2] |
| **Methoden für Rückhaltung und Reinigung** | Mit inertem Material aufnehmen (Sand, Vermiculit, Kieselgur) und in dichte, gekennzeichnete Behälter sammeln. Nicht in die Kanalisation einleiten. [1][2] |
| **Zugehörige Abschnitte** | 8; 13 |

## 7. Handhabung und Lagerung

| | |
|---|---|
| **Vorsichtsmaßnahmen** | Im Abzug oder mit ausreichender Belüftung arbeiten. Essen, Trinken und Rauchen am Arbeitsplatz verboten. [1][2] |
| **Lagertemperatur** | Bei Raumtemperatur (15-25°C) oder gemäß Etikett lagern. [1][2] |
| **Luftfeuchtigkeit** | An einem trockenen Ort lagern (<60 % rF). [1][2] |
| **Licht** | Vor direkter Sonneneinstrahlung schützen. [1][2] |
| **Unverträgliche Materialien** | Starke Oxidationsmittel, starke Basen, Unedle Metalle (Wasserstoffentwicklung). |

## 8. Begrenzung und Überwachung der Exposition/Persönliche Schutzausrüstung

### 8.1 Zu überwachende Parameter

| | |
|---|---|
| **Arbeitsplatzgrenzwert — NDS (Polen)** | Kein NDS-Wert (Arbeitsplatzgrenzwert) im verfügbaren Verzeichnis — vor Verwendung in der aktuellen MRPiPS-Verordnung überprüfen; nicht vom Fehlen eines Grenzwerts ausgehen. |
| **OEL (EU)** | Der EU-OEL-Wert wurde anhand des verfügbaren Datenbestands nicht überprüft — die IOELV/BOELV-Richtlinien prüfen; das Fehlen eines Wertes nicht voraussetzen. |
| **DNEL** | Keine Daten verfügbar. |
| **PNEC** | Keine Daten verfügbar. |

WORKING DRAFT 工作草案

### 8.2 Persönliche Schutzausrüstung (PSA)



**Chemikalienbeständige Schutzhandschuhe**
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
**Die Auswahl der PSA setzt eine ermittelte Gefahrenklassifizierung voraus – es besteht keine Grundlage für die Angabe eines Handschuhmaterials. PSA gemäß dem Sicherheitsdatenblatt des Lieferanten und der Gefährdungsbeurteilung am Arbeitsplatz verwenden.**



**Geschlossene Schutzbrille oder Korbbrille**
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001



**Geschlossene Sicherheitsschuhe mit Zehenschutz**
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

## 9. Physikalische und chemische Eigenschaften

| Eigenschaft (Pkt. 9.1) | Wert | Quelle |
|---|---|---|
| **Aggregatzustand** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Farbe** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Geruch** | Keine Daten verfügbar. | |
| **pH-Wert (1%ige wässrige Lösung)** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Schmelzpunkt** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Siedepunkt** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Flammpunkt** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Entzündbarkeit** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Untere und obere Explosionsgrenze** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Dichte (20°C)** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Dampfdruck** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Relative Dampfdichte** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Kinematische Viskosität** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Selbstentzündungstemperatur** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Zersetzungstemperatur** | Nicht zutreffend | |
| **Wasserlöslichkeit** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Partikeleigenschaften** | Keine Daten verfügbar. | |
| **Verteilungskoeffizient n-Oktanol/ Wasser (log-Wert)** | 13.7 [8] | |
| **Molmasse** | 1027.0 g/mol [7] ✓86% | *PubChem* |
| **Summenformel** | $C_{66}H_{42}O_{12}$ [7] ✓86% | *PubChem* |
| **Lipinski-Regel (RO5)** | **FAIL** | |

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.

WORKING DRAFT 工作草稿

## 10. Stabilität und Reaktivität

| | |
|---|---|
| **Reaktivität** | Stabil unter normalen Lager- und Handhabungsbedingungen. |
| **Chemische Stabilität** | Thermisch stabil unter empfohlenen Bedingungen. |
| **Gefährliche Reaktionen** | Keine gefährlichen Reaktionen unter normalen Bedingungen bekannt. |
| **Zu vermeidende Bedingungen** | Hohe Temperaturen, direkte Sonneneinstrahlung, Feuchtigkeit. |
| **Unverträgliche Materialien** | Starke Oxidationsmittel, starke Basen, Unedle Metalle (Wasserstoffentwicklung). |
| **Zersetzungsprodukte** | Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO2. |

## 11. Toxikologische Angaben

| | |
|---|---|
| **LD50 (oral)** | Keine Daten verfügbar. |
| **LD50 (dermal)** | Keine Daten verfügbar. |
| **LC50 (inhalativ)** | Keine Daten verfügbar. |
| **Hautreizung** | Keine Daten verfügbar. |
| **Augenreizung** | Keine Daten verfügbar. |
| **Sensibilisierung** | Keine Daten verfügbar. |
| **Mutagenität** | Keine Daten verfügbar. |
| **Karzinogenität** | Keine Daten verfügbar. |
| **IARC-Einstufung (Karzinogenität)** | Keine individuelle IARC-Monographie für diese CAS — dies ist keine Bestätigung des Fehlens von Karzinogenität (vgl. CLP/GHS-Einstufung in Abschnitt 2). |
| **Reproduktionstoxizität** | Keine Daten verfügbar. |
| **STOT — einmalige Exposition** | Keine Daten verfügbar. |
| **STOT — wiederholte Exposition** | Keine Daten verfügbar. |
| **Aspirationsgefahr** | Keine Daten verfügbar. |

## 12. Umweltbezogene Angaben

| | |
|---|---|
| **Gewässertoxizität** | Keine Daten verfügbar. |
| **Persistenz / biologische Abbaubarkeit** | Keine Daten verfügbar. |
| **Bioakkumulationspotenzial** | log Kow = 13.7 [8]. Erhöhtes Bioakkumulationspotenzial (log Kow ≥ 4,5 — PBT/vPvB-Screening-Schwelle gemäß ECHA R.11); eine abschließende Bewertung erfordert den Biokonzentrationsfaktor BCF (REACH Anhang XIII: B bei BCF > 2000). [10][11] |
| **Mobilität im Boden** | Keine Daten verfügbar. |
| **PBT-/vPvB-Beurteilung** | Unzureichende Daten zur Bewertung von PBT/vPvB. |
| **Endokrinschädliche Eigenschaften** | Keine Informationen. |

## 13. Hinweise zur Entsorgung

| | |
|---|---|
| **Entsorgungsverfahren** | Zur Entsorgung an zugelassene Unternehmen gemäß nationalen und lokalen Vorschriften übergeben. Nicht in die Kanalisation einleiten. |
| **Abfallschlüssel (EWC)** | Der Abfallschlüssel (AVV/EWC) kann ohne Gefahrenklassifizierung nicht bestimmt werden — die Herkunft der Einstufung ist nicht geklärt. Weder Gefährlichkeit (16 05 06*) noch deren Fehlen (16 05 09) annehmen; nach Überprüfung der Einstufung bei der ECHA festlegen. [9] |
| **Verpackungen** | Gereinigte Verpackungen können recycelt werden. Kontaminierte Verpackungen sind entsprechend der Abfalleinstufung zu behandeln (siehe AVV-Schlüssel oben); liegt keine Einstufung vor, ist das Fehlen einer Gefahr nicht anzunehmen. |

WORKING DRAFT · 工作草稿

## 14. Angaben zum Transport

| | |
|---|---|
| **UN-Nummer** | ÜBERPRÜFUNG ERFORDERLICH — keine verifizierte UN-Zuordnung. |
| **Umweltgefahr** | Umweltgefährdung für den Transport: nicht verifiziert. Herkunft der Einstufung ungeklärt — NICHT annehmen, dass keine Umweltgefahr besteht oder keine Kennzeichnung als Meeresschadstoff erforderlich ist; anhand CLP Anhang VI, Abschnitt 12 und ADR 2.2.9 / IMDG prüfen. |
| **Besondere Vorsichtsmaßnahmen** | Als Gefahrgut gemäß der zugewiesenen Klasse behandeln (ADR/IMDG/IATA); die für diese Klasse geltenden Vorsichtsmaßnahmen anwenden. |
| **KN/HS-Code** | CN/HS-Code: Überprüfung in der Eurostat Combined Nomenclature erforderlich. |
| **Anmerkungen** | Transportklassifizierung nicht überprüft. Das Fehlen von Beschränkungen nicht voraussetzen — vor dem Versand ADR/IMDG/IATA prüfen. |

## 15. Rechtsvorschriften

| | |
|---|---|
| **SVHC-Status** | SVHC-Status anhand des verfügbaren Datensatzes nicht geprüft — aktuelle ECHA-Kandidatenliste prüfen; kein Fehlen annehmen. [1] |
| **REACH Anhang XIV** | Nicht gegen die ECHA-Zulassungsliste verifiziert — REACH Anhang XIV prüfen. [1] |
| **REACH Anhang XVII** | Im verfügbaren Anhang-XVII-Datensatz nicht bestätigt — vor dem Inverkehrbringen anhand der aktuellen ECHA-Liste prüfen; nicht vom Fehlen einer Beschränkung ausgehen. [1] |

## 16. Sonstige Angaben

Rechtsstatus der Einstufung: Herkunft nicht erfasst — Überprüfung in ECHA erforderlich.Einträge mit einem Datum des Inkrafttretens nach 17.10.2026 wurden als zukünftig weggelassen (noch nicht anwendbar).

**Daten automatisch aus öffentlichen Referenzdatenbanken aggregiert (PubChem, ECHA, NIST u. a.).**

### Abkürzungen

| | |
|---|---|
| **ADR** | Europäisches Übereinkommen über die internationale Beförderung gefährlicher Güter auf der Straße |
| **ATE** | Schätzwert Akuter Toxizität (Acute Toxicity Estimate) |
| **CAS** | Chemical Abstracts Service |
| **CLP** | Classification, Labelling and Packaging (Verordnung (EG) 1272/2008) |
| **CMR** | Karzinogen, mutagen, reproduktionstoxisch |
| **DNEL** | Abgeleitete Expositionshöhe ohne Beeinträchtigung (DNEL) |
| **EC** | European Community number |
| **EPI** | Persönliche Schutzausrüstung |
| **GHS** | Global Harmonisiertes System (GHS) |
| **IATA** | Internationaler Luftverkehrsverband (IATA) |
| **IMDG** | Internationaler Code für die Beförderung gefährlicher Güter mit Seeschiffen (IMDG) |
| **SDB** | Sicherheitsdatenblatt (Safety Data Sheet) |
| **LC50** | Letale Konzentration, 50 % (Lethal Concentration) |
| **LD50** | Letale Dosis, 50 % (Lethal Dose) |
| **NDS** | Maximal zulässige Konzentration (Arbeitsplatz, PL) |
| **NDSCh** | Kurzzeitgrenzwert (PL) |
| **OEL** | Occupational Exposure Limit |
| **PBT** | Persistent, bioakkumulierbar und toxisch |
| **PNEC** | Abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (PNEC) |

WORKING DRAFT 制图 工作稿

| | |
|---|---|
| **REACH** | Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Verordnung (EG) 1907/2006) |
| **SDS** | Safety Data Sheet |
| **STOT** | Spezifische Zielorgan-Toxizität (STOT) |
| **SVHC** | Besonders besorgniserregender Stoff (SVHC) |
| **TPSA** | Topological Polar Surface Area |
| **vPvB** | Sehr persistent und sehr bioakkumulierbar |

## Versionshistorie

| | |
|---|---|
| **v3 (17.10.2026)** | Herkunft der Einstufung nicht im Kanon erfasst — Quelle in ECHA (Anhang VI / C&L) überprüfen. |

## Referenzen


[1] EP und Rat. Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH). Art.31, Anhang II. ABl. EU L 396/2006. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-17.

[2] Europäische Kommission. Verordnung (EU) 2020/878 — Änderung von Anhang II REACH. ABl. EU L 203/2020. Ab 01.01.2023. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-17.

[3] EP und Rat. Verordnung (EG) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. ABl. EU 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.

[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/101962344

[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

[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] Verordnung MRiPS vom 12.06.2018 — NDS/NDN. GBl. 2024 Pos. 1017. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-17.


## Externe Links

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=1333127-74-4


WORKING DRAFT


**ADMET / Drug-likeness**





**Rechtlicher Hinweis:** Dieses Dokument wurde automatisch aus Daten von PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) und anderen öffentlichen Datenbanken erstellt. Es ERSETZT KEIN zugelassenes Sicherheitsdatenblatt (SDB) gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH). Überprüfen Sie die Daten vor der Verwendung des Stoffes anhand des aktuellen SDB des Herstellers.
**Generator:** Dokument automatisch erstellt auf Grundlage einer Einstufung unbekannter Herkunft (in ECHA zu überprüfen) und öffentlicher physikalisch-chemischer Datenbanken.
**Autor:** www.MolGod.org — Plattform für automatisierte Sicherheitsdatenblätter (SDB).
Ausgabedatum: 18.10.2026 | Dokumentversion: 3