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

conforme al Reg. (CE) n. 1907/2006 (REACH), All. II — Reg. (UE) 2020/878

Data: 18.10.2026 | Versione: 2 | IT

hexadecyl 4-chloro-3-[2-(5,5-dimethyl-2,4-dioxo-1,3-oxazolidin-3-yl)-4,4-dimethyl-3-oxopentamido]benzoate

hexadecyl 4-chloro-3-[[2-(5,5-dimethyl-2,4-dioxo-1,3-oxazolidin-3-yl)-4,4-dimethyl-3-oxopentanoyl]amino]benzoate

CAS 168689-49-4

$C_{35}H_{53}ClN_2O_7$ | EC 418-550-9

MASSA MOLARE	LOGP
649.30	11.3

TPSA: 119 Å²

CLASSIFICAZIONE DEI PERICOLI (GHS / CLP)

Attenzione

H413

Ambito delle classi di pericolo limitato alla classificazione armonizzata (allegato VI CLP); le classi al di fuori della voce armonizzata possono richiedere l'autoclassificazione del fornitore (art. 4(3) CLP) — verificare con la scheda dati di sicurezza del fornitore.

1. Identificazione della sostanza/miscela e della società/impresa

1.1 Nome della sostanza	hexadecyl 4-chloro-3-[2-(5,5-dimethyl-2,4-dioxo-1,3-oxazolidin-3-yl)-4,4-dimethyl-3-oxopentamido]benzoate
1.1 Nome IUPAC	hexadecyl 4-chloro-3-[[2-(5,5-dimethyl-2,4-dioxo-1,3-oxazolidin-3-yl)-4,4-dimethyl-3-oxopentanoyl]amino]benzoate
1.1 Numero CAS	168689-49-4
1.1 Numero EC	418-550-9
1.1 PubChem CID	9917562
1.1 InChIKey	AXHHFGVVBVHHPY-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CCCCCCCCCCCCCCCCOC(=O)C1=CC(=C(C=C1)Cl)NC(=O)C(C(=O)C(C)(C)C)N2C(=O)C(OC2=O)(C)C
1.1 Formula molecolare	$C_{35}H_{53}ClN_2O_7$ [7]
1.1 Massa molare	649.3 g/mol [7]
1.1 Massa esatta	648.3541 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

DPI:



Attenzione

Indicazioni di pericolo (H) [3][4][9]

H413	Può essere nocivo per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata.

Consigli di prudenza (P) [3][4][9]

P273	Non disperdere nell’ambiente.
P391	Raccogliere il materiale fuoriuscito.
P501	Smaltire il prodotto/recipiente in ...

Ambito delle classi di pericolo limitato alla classificazione armonizzata (allegato VI CLP); le classi al di fuori della voce armonizzata possono richiedere l'autoclassificazione del fornitore (art. 4(3) CLP) — verificare con la scheda dati di sicurezza del fornitore.

WORKING DRAFT · 工作草案

3. Composizione/informazioni sugli ingredienti

Tipo di sostanza	sostanza pura
Numero CAS	168689-49-4
Numero CE	418-550-9
Formula molecolare	$C_{35}H_{53}ClN_2O_7$
Concentration	≥99% (purezza tipica di grado reagente — da confermare con la specifica del fornitore)
Clp index no	607-479-00-0

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][11]

Contatto con la pelle

Togliere gli indumenti contaminati. Sciacquare la pelle con acqua e sapone (min. 15 minuti). [1][2][11]

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][11]

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][11]

Sintomi ed effetti

Nessun sintomo specifico descritto in letteratura. [3][9]

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, NOx, HCl (cloruro di idrogeno). [12]
Raccomandazioni per gli addetti antincendio	Utilizzare un autorespiratore (SCBA). Tuta protettiva completa.

6. Misure in caso di rilascio accidentale

Precauzioni personali	Utilizzare dispositivi di protezione individuale (vedere sezione 8). Evitare di respirare le polveri/i vapori. [1][2][11]
Precauzioni ambientali	Impedire la penetrazione nelle fognature, nelle acque sotterranee e superficiali. [1][2][11]
Metodi di contenimento e bonifica	Assorbire con materiale inerte (sabbia, vermiculite, farina fossile) e raccogliere in contenitori a tenuta ed etichettati. Non immettere nelle fognature. [1][2][11]
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][11]

WORKING DRAFT 工作草案

Temperatura di conservazione	Conservare a temperatura ambiente (15-25°C) o secondo quanto indicato sull'etichetta. [1][2][11]
Umidità	Conservare in luogo asciutto (<60% RH). [1][2][11]
Luce	Proteggere dalla luce solare diretta. [1][2][11]
Materiali incompatibili	Ossidanti forti. [12]

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) [5][6][13]



Guanti protettivi resistenti agli agenti chimici
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
fluoroelastomero FKM (Viton), min. 0,4 mm — NON nitrile (permeazione in pochi minuti)

Occhiali di sicurezza chiusi o occhiali a maschera
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001

Calzature di sicurezza chiuse con protezione delle dita
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. Proprietà fisiche e chimiche

Proprietà (punto 9.1)	Valore	Source
Stato fisico	Nessun dato disponibile.	
Colore	Nessun dato disponibile.	
Odore	Nessun dato disponibile.	
pH (soluzione acquosa 1%)	Nessun dato disponibile.	
Temp. di fusione	Nessun dato disponibile.	
Punto di ebollizione	Nessun dato disponibile.	
Punto di infiammabilità	Nessun dato disponibile.	
Infiammabilità	Nessun dato disponibile.	
Limite inferiore e superiore di esplosività	Nessun dato disponibile.	
Densità (20°C)	Nessun dato disponibile.	
Tensione di vapore	Nessun dato disponibile.	
Densità di vapore relativa	Nessun dato disponibile.	
Viscosità cinematica	Nessun dato disponibile.	

WORKING DRAFT 工作稿

Proprietà (punto 9.1)	Valore	Source
Temperatura di autoaccensione	Nessun dato disponibile.	
Temperatura di decomposizione	Non applicabile	
Idrosolubilità	Nessun dato disponibile.	
Caratteristiche delle particelle	Nessun dato disponibile.	
Coefficiente di ripartizione n-ottanolo/acqua (valore logaritmico)	11.3 [8]	
Massa molare	649.3 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Formula molecolare	$C_{35}H_{53}ClN_2O_7$ [7] ✓86%	*PubChem*
Regola di Lipinski (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.

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, NOx, HCl (cloruro di idrogeno).

11. Informazioni tossicologiche

LD50 (orale)	Nessun dato disponibile.
LD50 (cutanea)	Nessun dato disponibile.
LC50 (inalatoria)	Nessun dato disponibile.
Irritazione cutanea	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]
Irritazione oculare	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]
Sensibilizzazione	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]
Mutagenicità	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]
Cancerogenicità	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]
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	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]
STOT (esposizione singola)	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]

WORKING DRAFT 工作草稿

STOT (esposizione ripetuta)	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]
Pericolo in caso di aspirazione	Non classificato per questo pericolo (al di fuori dell'ambito della classificazione armonizzata nell'allegato VI CLP; verificare l'autoclassificazione del fornitore) [3][9]

12. Informazioni ecologiche

Tossicità acquatica	Classificazione armonizzata (CLP allegato VI): H413 — può essere nocivo per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata (cat. cronica 4). Dati numerici LC_{50}/EC_{50} non verificati nell'insieme di dati disponibile — non presumere l'assenza di tossicità.
Persistenza / biodegradabilità	Nessun dato disponibile.
Potenziale di bioaccumulo	log Kow = 11.3 [8]. Potenziale di bioaccumulo elevato (log Kow ≥ 4,5 — soglia di screening PBT/vPvB secondo ECHA R.11); una valutazione definitiva richiede il fattore di bioconcentrazione BCF (REACH Allegato XIII: B se BCF > 2000). [14][15]
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)	16 05 06* — Sostanze chimiche di laboratorio e analitiche (ad es. reagenti chimici) contenenti sostanze pericolose. Verifica del codice EWC richiesta. [10]
Imballaggio	Gli imballaggi puliti possono essere riciclati. Gli imballaggi contaminati devono essere trattati come rifiuti pericolosi.

14. Informazioni sul trasporto

Numero UN	VERIFICA RICHIESTA — nessuna attribuzione UN verificata.
Pericolo per l'ambiente	Non classificato come pericoloso per l'ambiente ai fini del trasporto (nessun H400/H410/H411 nell'allegato VI CLP; nessun marchio di inquinante marino richiesto) [3]
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]

WORKING DRAFT 工作草案

16. Altre informazioni

Stato giuridico della classificazione: armonizzata secondo l'allegato VI del CLP — reg. (CE) n. 1272/2008 (alla data di emissione).Le voci con data di entrata in vigore successiva al 17.10.2026 omessi in quanto futuri (non ancora applicabili).

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

Testo completo delle indicazioni H

H413	Può essere nocivo per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata.

Testo completo dei consigli P

P273	Non disperdere nell’ambiente.
P391	Raccogliere il materiale fuoriuscito.
P501	Smaltire il prodotto/recipiente in ...

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

v2 (17.10.2026)	Elaborato sulla base della classificazione armonizzata ECHA (allegato VI del CLP, ATP 23).

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: 2026-10-17.

[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: 2026-10-17.

WORKING DRAFT 工作稿

[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: 2026-10-17.

[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/9917562

[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] 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

[11] 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

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

[13] CEN. Personal protective equipment standards (EN ISO 374-1, EN 166, EN 149, EN 14387, EN ISO 20345). Brussels: European Committee for Standardization.

[14] 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

[15] 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

[16] 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: 2026-10-17.

Collegamenti esterni

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=168689-49-4

ADMET / Drug-likeness



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 dalla classificazione armonizzata ECHA (allegato VI del CLP) e da banche dati fisico-chimiche pubbliche.
Autore: www.MolGod.org — piattaforma di schede di dati di sicurezza automatizzate (SDS).
Data di emissione: 18.10.2026 | Versione del documento: 2