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

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

Date : 18.10.2026 | Version : 3 | FR

## (4S)-4-[[(2S)-2-[[(2S)-5-amino-2-[[(2S)-2-[[(2S)-3-hydroxy-2-[[(2S)-1-[(2S)-3-hydroxy-2-[[2-[[(2S)-3-methyl-2-[[(2S)-3-methyl-2-[[2-[4,7,10-tris(carboxymethyl)-1,4,7,10-tetrazacyclododec-1-yl]acetyl]amino]butanoyl]amino]butanoyl]amino]acetyl]amino]propanoyl]pyrrolidine-2-carbonyl]amino]propanoyl]amino]propanoyl]amino]-5-oxopentanoyl]amino]-3-carboxypropanoyl]amino]-5-[[(2S)-1-[[(2S)-1-[(2S)-2-[[(2S)-1-[[(1S)-1-carboxy-2-hydroxyethyl]amino]-4-methyl-1-oxopentan-2-yl]carbamoyl]pyrrolidin-1-yl]-3-hydroxy-1-oxopropan-2-yl]amino]-1-oxopropan-2-yl]amino]-5-oxopentanoic acid

*(4S)-4-[[(2S)-2-[[(2S)-5-amino-2-[[(2S)-2-[[(2S)-3-hydroxy-2-[[(2S)-1-[(2S)-3-hydroxy-2-[[2-[[(2S)-3-methyl-2-[[(2S)-3-methyl-2-[[2-[4,7,10-tris(carboxymethyl)-1,4,7,10-tetrazacyclododec-1-yl]acetyl]amino]butanoyl]amino]butanoyl]amino]acetyl]amino]propanoyl]pyrrolidine-2-carbonyl]amino]propanoyl]amino]propanoyl]amino]-5-oxopentanoyl]amino]-3-carboxypropanoyl]amino]-5-[[(2S)-1-[[(2S)-1-[(2S)-2-[[(2S)-1-[[(1S)-1-carboxy-2-hydroxyethyl]amino]-4-methyl-1-oxopentan-2-yl]carbamoyl]pyrrolidin-1-yl]-3-hydroxy-1-oxopropan-2-yl]amino]-1-oxopropan-2-yl]amino]-5-oxopentanoic acid*

**CAS 2828433-56-1**

$C_{76}H_{124}N_{20}O_{32}$

### 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** | (4S)-4-[[(2S)-2-[[(2S)-5-amino-2-[[(2S)-2-[[(2S)-3-hydroxy-2-[[(2S)-1-[(2S)-3-hydroxy-2-[[2-[[(2S)-3-methyl-2-[[(2S)-3-methyl-2-[[2-[4,7,10-tris(carboxymethyl)-1,4,7,10-tetrazacyclododec-1-yl]acetyl]amino]butanoyl]amino]butanoyl]amino]acetyl]amino]propanoyl]pyrrolidine-2-carbonyl]amino]propanoyl]amino]propanoyl]amino]-5-oxopentanoyl]amino]-3-carboxypropanoyl]amino]-5-[[(2S)-1-[[(2S)-1-[(2S)-2-[[(2S)-1-[[(1S)-1-carboxy-2-hydroxyethyl]amino]-4-methyl-1-oxopentan-2-yl]carbamoyl]pyrrolidin-1-yl]-3-hydroxy-1-oxopropan-2-yl]amino]-1-oxopropan-2-yl]amino]-5-oxopentanoic acid |
| **1.1 Nom IUPAC** | (4S)-4-[[(2S)-2-[[(2S)-5-amino-2-[[(2S)-2-[[(2S)-3-hydroxy-2-[[(2S)-1-[(2S)-3-hydroxy-2-[[2-[[(2S)-3-methyl-2-[[(2S)-3-methyl-2-[[2-[4,7,10-tris(carboxymethyl)-1,4,7,10-tetrazacyclododec-1-yl]acetyl]amino]butanoyl]amino]butanoyl]amino]acetyl]amino]propanoyl]pyrrolidine-2-carbonyl]amino]propanoyl]amino]propanoyl]amino]-5-oxopentanoyl]amino]-3-carboxypropanoyl]amino]-5-[[(2S)-1-[[(2S)-1-[(2S)-2-[[(2S)-1-[[(1S)-1-carboxy-2-hydroxyethyl]amino]-4-methyl-1-oxopentan-2-yl]carbamoyl]pyrrolidin-1-yl]-3-hydroxy-1-oxopropan-2-yl]amino]-1-oxopropan-2-yl]amino]-5-oxopentanoic acid |
| **1.1 Numéro CAS** | 2828433-56-1 |
| **1.1 Numéro CE** | Aucune donnée |
| **1.1 PubChem CID** | 166450476 |
| **1.1 InChIKey** | CTKGVHAYNBVRDI-SFDVICJKSA-N |

| | |
|---|---|
| **1.1 SMILES** | C[C@@H](C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)N1CCC[C@H]1C(=O)N[C@@H](CC(C)C)C(=O)N[C@@H](CO)C(=O)O)NC(=O)[C@H](CCC(=O)O)NC(=O)[C@H](CC(=O)O)NC(=O)[C@H](CCC(=O)N)NC(=O)[C@H](C)NC(=O)[C@H](CO)NC(=O)[C@@H]2CCCN2C(=O)[C@H](CO)NC(=O)CNC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)[C@H](C(C)C)NC(=O)CN3CCN(CCN(CCN(CC3)CC(=O)O)CC(=O)O)CC(=O)O |
| **1.1 Formule brute** | $C_{76}H_{124}N_{20}O_{32}$ [7] |
| **1.1 Masse molaire** | 1829.9 g/mol [7] |
| **1.1 Masse exacte** | 1828.8691 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** | 112 (EU-wide emergency number) |

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

## 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.**

WORKING DRAFT · 工作草案

## 3. Composition/informations sur les composants

| | |
|---|---|
| **Type de substance** | substance pure |
| **Numéro CAS** | 2828433-56-1 |
| **Formule brute** | $C_{76}H_{124}N_{20}O_{32}$ |
| **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

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]

### 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/vapeurs. [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** | Absorber avec un matériau inerte (sable, vermiculite, terre de diatomées) et recueillir dans des récipients étanches et étiquetés. Ne pas rejeter à l'égout. [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** | Aucune donnée disponible. | |
| **Couleur** | Aucune donnée disponible. | |
| **Odeur** | Aucune donnée disponible. | |
| **pH (solution aqueuse à 1%)** | Aucune donnée disponible. | |
| **Temp. de fusion** | Aucune donnée disponible. | |
| **Point d'ébullition** | Aucune donnée disponible. | |
| **Point d'éclair** | Aucune donnée disponible. | |
| **Inflammabilité** | Aucune donnée disponible. | |
| **Limites inférieure et supérieure d'explosion** | Aucune donnée disponible. | |
| **Densité (20°C)** | Aucune donnée disponible. | |
| **Pression de vapeur** | Aucune donnée disponible. | |

WORKING DRAFT 工作草案

| Propriété (point 9.1) | Valeur | Source |
|---|---|---|
| **Densité de vapeur relative** | Aucune donnée disponible. | |
| **Viscosité cinématique** | Aucune donnée disponible. | |
| **Température d'auto-inflammation** | Aucune donnée disponible. | |
| **Température de décomposition** | Sans objet | |
| **Hydrosolubilité** | Aucune donnée disponible. | |
| **Caractéristiques des particules** | Aucune donnée disponible. | |
| **Coefficient de partage n-octanol/eau (valeur log)** | -17.7 [8] | |
| **Masse molaire** | 1829.9 g/mol [7] ✓86% | *PubChem* |
| **Formule brute** | $C_{76}H_{124}N_{20}O_{32}$ [7] ✓86% | *PubChem* |
| **Règle de 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. 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. |
| **Danger par aspiration** | Aucune donnée disponible. |

WORKING DRAFT 工作草案

## 12. Informations écologiques

| | |
|---|---|
| **Toxicité aquatique** | Aucune donnée disponible. |
| **Persistance / biodégradabilité** | Aucune donnée disponible. |
| **Potentiel de bioaccumulation** | log Kow = -17.7 [8]. Faible potentiel de bioaccumulation (log Kow < 4,5 — critère de présélection PBT/vPvB selon le guide ECHA R.11). [10][11] |
| **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. [9] |
| **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 au 18.10.2026 omis comme futurs (pas encore applicables).

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

### Abréviations

| | |
|---|---|
| **ADR** | Accord européen relatif au transport international des marchandises dangereuses par route |

WORKING DRAFT · 工作草案

| | |
|---|---|
| **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

| | |
|---|---|
| **v3 (18.10.2026)** | 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: 2026-10-18.

[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: 2026-10-18.

[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: 2026-10-18.

[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: 2026-10-18.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-10-18.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-10-18.

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/166450476

[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] 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: 2026-10-18.


## Liens externes

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=2828433-56-1

WORKING DRAFT · 工作草稿

**ADMET / Drug-likeness**




**Mention légale :** Ce document a été généré automatiquement à partir de données de PubChem (NIH), l'ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) 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 : 18.10.2026 | Version du document : 3

WORKING DRAFT · 工作草案