# VEILIGHEIDSINFORMATIEBLAD / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conform Verord. (EG) nr. 1907/2006 (REACH), Bijlage II — Verord. (EU) 2020/878 Datum: 18.10.2026 | Versie: 2 | NL

## 4-Nitrophenylalanine

*2-amino-3-(4-nitrophenyl)propanoic acid*

**CAS 2922-40-9**

$C_9H_{10}N_2O_4$ EC 220-868-6

| MOLAIRE MASSA | LOGP |
|---|---|
| 210.19 | -1.2 |

TPSA
109 Å²

### GEVARENCLASSIFICATIE (GHS / CLP)



**Gevaar**

H301

*Niet-geharmoniseerde indeling (geen vermelding in bijlage VI bij de CLP-verordening) — toegekend op basis van geaggregeerde ECHA C&L-kennisgevingen; de H-zinnen moeten worden geverifieerd aan de hand van de officiële bron (ECHA C&L / gegevensblad van de fabrikant).*

WORKING DRAFT · 工作草案

## 1. Identificatie van de stof/het mengsel en van de vennootschap/onderneming

| | |
|---|---|
| **1.1 Naam van de stof** | 4-Nitrophenylalanine |
| **1.1 IUPAC-naam** | 2-amino-3-(4-nitrophenyl)propanoic acid |
| **1.1 CAS-nummer** | 2922-40-9 |
| **1.1 EG-nummer** | 220-868-6 |
| **1.1 PubChem CID** | 65089 |
| **1.1 InChIKey** | GTVVZTAFGPQSPC-UHFFFAOYSA-N |
| **1.1 SMILES** | C1=CC(=CC=C1CC(C(=O)O)N)[N+](=O)[O-] |
| **1.1 Molecuulformule** | $C_9H_{10}N_2O_4$ [7] |
| **1.1 Molmassa** | 210.19 g/mol [7] |
| **1.1 Exacte massa** | 210.0641 Da [7] |

### 1.2 Toepassingen

Voor laboratorium- en onderzoeksdoeleinden. Niet voor gebruik bij de productie van levensmiddelen, geneesmiddelen of cosmetica zonder de juiste vergunningen.

### 1.3 Gegevens van de leverancier

| | |
|---|---|
| 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 Telefoonnummer voor noodgevallen

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

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

## 2. Identificatie van de gevaren

**GHS:**



**PBM:**



**Verboden:**



**Gevaar**

### Gevarenaanduidingen (H) [3][4]

| | |
|---|---|
| **H301** | Giftig bij inslikken. |

### Voorzorgsmaatregelen (P) [3][4]

| | |
|---|---|
| **P264** | Na het werken met dit product ... grondig wassen. |
| **P270** | Niet eten, drinken of roken tijdens het gebruik van dit product. |
| **P301+P310** | NA INSLIKKEN: Onmiddellijk een ANTIGIFCENTRUM/arts/... raadplegen |
| **P330** | De mond spoelen. |
| **P501** | Inhoud/verpakking afvoeren naar ... |

**Niet-geharmoniseerde indeling (geen vermelding in bijlage VI bij de CLP-verordening) — toegekend op basis van geaggregeerde ECHA C&L-kennisgevingen; de H-zinnen moeten worden geverifieerd aan de hand van de officiële bron (ECHA C&L / gegevensblad van de fabrikant).**

WORKING DRAFT · 工作草案

## 3. Samenstelling en informatie over de bestanddelen

| | |
|---|---|
| **Type stof** | zuivere stof |
| **CAS-nummer** | 2922-40-9 |
| **EG-nummer** | 220-868-6 |
| **Molecuulformule** | $C_9H_{10}N_2O_4$ |
| **Concentratie** | ≥99% (typische zuiverheid van reagenskwaliteit — te bevestigen door de specificatie van de leverancier) |

## 4. Eerstehulpmaatregelen



### Inademing

Breng de getroffen persoon in de frisse lucht. Houd de persoon in rust. Als de persoon niet ademt: kunstmatige beademing (uitsluitend gekwalificeerd personeel). [1][2][10]

### Huidcontact

Verontreinigde kleding uittrekken. Huid spoelen met water en zeep (min. 15 minuten). [1][2][10]

### Oogcontact

Ogen spoelen met stromend water (min. 15 minuten). Contactlenzen indien mogelijk verwijderen. Als de irritatie aanhoudt — raadpleeg een oogarts. [1][2][10]

### Inslikken

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][10]

### Symptomen en effecten

misselijkheid, braken, diarree. [3]

### Informatie voor de arts

Verificatie vereist

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

## 5. Brandbestrijdingsmaatregelen

| | |
|---|---|
| **Geschikte blusmiddelen** | Blusmiddelen aanpassen aan de omgeving. CO2, poeder, schuim. |
| **Ongeschikte blusmiddelen** | Geen specifieke beperkingen. |
| **Specifieke gevaren** | Producten van thermische ontleding: CO, CO2, NOx. [11] |
| **Advies voor brandweerlieden** | Gebruik onafhankelijke ademluchtapparatuur (SCBA). Volledig beschermend pak. |

## 6. Maatregelen bij het accidenteel vrijkomen van de stof

| | |
|---|---|
| **Persoonlijke voorzorgsmaatregelen** | Gebruik persoonlijke beschermingsmiddelen (zie rubriek 8). Inademen van stof/damp vermijden. [1][2][10] |
| **Milieuvoorzorgsmaatregelen** | Voorkom dat het in het riool, het grondwater en het oppervlaktewater terechtkomt. [1][2][10] |
| **Methoden voor insluiting en reiniging** | Absorberen met inert materiaal (zand, vermiculiet, diatomeeënaarde) en verzamelen in afgesloten, geëtiketteerde containers. Niet in het riool laten lopen. [1][2][10] |
| **Gerelateerde rubrieken** | 8; 13 |

WORKING DRAFT 工作草案

## 7. Hantering en opslag

| | |
|---|---|
| **Voorzorgsmaatregelen** | Werk in een zuurkast of met voldoende ventilatie. Verboden te eten, drinken en roken op de werkplek. [1][2][10] |
| **Opslagtemperatuur** | Bewaren bij kamertemperatuur (15-25°C) of zoals aangegeven op het etiket. [1][2][10] |
| **Watergehalte** | Bewaren op een droge plaats (<60% RH). [1][2][10] |
| **Licht** | Beschermen tegen direct zonlicht. [1][2][10] |
| **Onverenigbare materialen** | Sterke oxidatiemiddelen, Sterke basen, Onedele metalen (waterstofontwikkeling). [11] |

## 8. Maatregelen ter beheersing van blootstelling/persoonlijke bescherming

### 8.1 Controleparameters

| | |
|---|---|
| **NDS (Polen)** | Geen NDS-waarde (grenswaarde) in de beschikbare werklijst — vóór gebruik controleren in de actuele MRPiPS-verordening; ga niet uit van het ontbreken van een grenswaarde. |
| **OEL (EU)** | EU-OEL-waarde niet geverifieerd in de beschikbare dataset — raadpleeg de IOELV/BOELV-richtlijnen; ga niet uit van de afwezigheid van een waarde. |
| **DNEL** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **PNEC** | Geen gegevens beschikbaar. |

### 8.2 Persoonlijke beschermingsmiddelen (PBM) [5][6][12]



**Chemicaliënbestendige beschermende handschoenen**
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
butyl (type B/C) — GEEN latex

**Gesloten veiligheidsbril of ruimzichtbril**
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001

**Gesloten veiligheidsschoenen met teenbescherming**
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

## 9. Fysische en chemische eigenschappen

| Eigenschap (punt 9.1) | Waarde | Bron |
|---|---|---|
| **Fysische toestand** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Kleur** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Geur** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **pH (1% waterige oplossing)** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Smeltpunt** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Kookpunt** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Vlampunt** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Ontvlambaarheid** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Onderste en bovenste explosiegrens** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Dichtheid (20°C)** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Dampspanning** | Geen gegevens beschikbaar. | |

WORKING DRAFT 工作稿

| Eigenschap (punt 9.1) | Waarde | Bron |
|---|---|---|
| **Relatieve dampdichtheid** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Kinematische viscositeit** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Zelfontbrandingstemperatuur** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Ontledingstemperatuur** | Niet van toepassing | |
| **Oplosbaarheid in water** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Deeltjeskenmerken** | Geen gegevens beschikbaar. | |
| **Verdelingscoëfficiënt n-octanol/water (logwaarde)** | -1.2 [8] | |
| **Molaire massa** | 210.19 g/mol [7] ✓86% | *PubChem* |
| **Molecuulformule** | $C_9H_{10}N_2O_4$ [7] ✓86% | *PubChem* |
| **Lipinski-regel (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. Stabiliteit en reactiviteit

| | |
|---|---|
| **Reactiviteit** | Stabiel onder normale opslag- en hanteringsomstandigheden. |
| **Chemische stabiliteit** | Thermisch stabiel onder de aanbevolen omstandigheden. |
| **Gevaarlijke reacties** | Geen gevaarlijke reacties bekend onder normale omstandigheden. |
| **Te vermijden omstandigheden** | Hoge temperaturen, direct zonlicht, vocht. |
| **Onverenigbare materialen** | Sterke oxidatiemiddelen, Sterke basen, Onedele metalen (waterstofontwikkeling). |
| **Ontledingsproducten** | Producten van thermische ontleding: CO, CO2, NOx. |

## 11. Toxicologische informatie

| | |
|---|---|
| **LD50 (oraal)** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **LD50 (dermaal)** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **LC50 (inhalatie)** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **Huidirritatie** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **Oogirritatie** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **Sensibilisatie** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **Mutageniteit** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **Carcinogeniteit** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **IARC-classificatie (carcinogeniteit)** | Geen individuele IARC-monografie voor deze CAS — dit is geen bevestiging van de afwezigheid van kankerverwekkendheid (vgl. CLP/GHS-indeling in sectie 2). |
| **Reproductietoxiciteit** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **STOT (eenmalige blootstelling)** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **STOT (herhaalde blootstelling)** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **Aspiratiegevaar** | Geen gegevens beschikbaar. |

WORKING DRAFT 工作草稿

## 12. Ecologische informatie

| | |
|---|---|
| **Aquatische toxiciteit** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **Persistentie / biologische afbreekbaarheid** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **Bioaccumulatiepotentieel** | log Kow = -1.2 [8]. Laag bioaccumulatiepotentieel (log Kow < 4,5 — PBT/zPzB-screeningscriterium volgens ECHA-richtsnoer R.11). [13][14] |
| **Mobiliteit in de bodem** | Geen gegevens beschikbaar. |
| **PBT/vPvB-beoordeling** | Onvoldoende gegevens om PBT/vPvB te beoordelen. |
| **Hormoonontregelende eigenschappen** | Geen informatie. |

## 13. Instructies voor verwijdering

| | |
|---|---|
| **Verwijderingsmethode** | Ter verwijdering overdragen aan erkende bedrijven overeenkomstig de nationale en lokale voorschriften. Niet in het riool lozen. |
| **Afvalcode (EURAL)** | 16 05 06* — Laboratorium- en analysechemicaliën (bijv. chemische reagentia) die gevaarlijke stoffen bevatten. Verificatie van de EWC-code vereist. [9] |
| **Verpakking** | Gereinigde verpakkingen kunnen worden gerecycled. Verontreinigde verpakkingen moeten als gevaarlijk afval worden behandeld. |

## 14. Informatie met betrekking tot het vervoer




Klasse 6.1 — Giftige stoffen

| | |
|---|---|
| **UN-nummer** | VERIFICATIE VEREIST — geen geverifieerde UN-toewijzing. |
| **Transportgevarenklasse** | Afgeleid uit de GHS-indeling — VERIFICATIE VEREIST. |
| **Milieugevaar** | Milieugevaar voor transport: niet geverifieerd. Niet-geharmoniseerde indeling (buiten CLP bijlage VI) — verifieer aquatische toxiciteit (rubriek 12) en ga er NIET van uit dat markering als mariene verontreiniging niet vereist is; bevestig volgens ADR 2.2.9 / IMDG vóór verzending. |
| **Bijzondere voorzorgsmaatregelen** | Als gevaarlijke goederen behandelen volgens de toegewezen klasse (ADR/IMDG/IATA); de bij die klasse behorende voorzorgsmaatregelen toepassen. |
| **GN/GS-code** | GN/GS-code: verificatie vereist in de gecombineerde nomenclatuur van Eurostat. |
| **Opmerkingen** | LET OP: de GHS-classificatie geeft aan dat de stof onderworpen kan zijn aan de voorschriften voor het vervoer van gevaarlijke goederen (ADR/IMDG/IATA). Ga NIET uit van de afwezigheid van beperkingen — verifieer het UN-nummer vóór verzending. |

## 15. Regelgeving

| | |
|---|---|
| **SVHC-status** | SVHC-status niet geverifieerd aan de hand van de beschikbare dataset — raadpleeg de actuele ECHA-kandidaatslijst; ga niet uit van afwezigheid. [1] |
| **REACH Bijlage XIV** | Niet geverifieerd aan de hand van de ECHA-autorisatielijst — controleer REACH Bijlage XIV. [1] |
| **REACH Bijlage XVII** | Niet bevestigd in de beschikbare dataset van Bijlage XVII — verifieer aan de hand van de actuele ECHA-lijst vóór het in de handel brengen; ga niet uit van de afwezigheid van een beperking. [1] |

## 16. Overige informatie

Juridische status van de indeling: zelfindeling door de leverancier volgens art. 4(3) CLP — geen geharmoniseerde vermelding in bijlage VI.Vermeldingen met een datum van inwerkingtreding na 17.10.2026 weggelaten als toekomstig (nog niet van toepassing).

**Gegevens automatisch geaggregeerd uit openbare referentiedatabanken (PubChem, ECHA, NIST e.a.).**

WORKING DRAFT · 工作草稿

## Wetenschappelijke citaten (4)


Tong Y, Fang X, Tian H et al.. *De novo generation of specific human IgGs by in vitro immunization using autologous proteins containing immunogenic p-nitrophenylalanine.*. mAbs (2019). DOI: 10.1080/19420862.2018.1537580

Maurici N, Savidge N, Lee BU et al.. *Crystal structures of green fluorescent protein with the unnatural amino acid 4-nitro-L-phenylalanine.*. Acta crystallographica. Section F, Structural biology communications (2018). DOI: 10.1107/S2053230X1801169X

Smith EE, Linderman BY, Luskin AC et al.. *Probing local environments with the infrared probe: L-4-nitrophenylalanine.*. The journal of physical chemistry. B (2011). DOI: 10.1021/jp109288j

Haiser K, Koller FO, Huber M et al.. *Nitro-phenylalanine: a novel sensor for heat transfer in peptides.*. The journal of physical chemistry. A (2011). DOI: 10.1021/jp110597a


## Volledige tekst van de H-zinnen

| | |
|---|---|
| **H301** | Giftig bij inslikken. |

## Volledige tekst van de P-zinnen

| | |
|---|---|
| **P264** | Na het werken met dit product … grondig wassen. |
| **P270** | Niet eten, drinken of roken tijdens het gebruik van dit product. |
| **P301+P310** | NA INSLIKKEN: Onmiddellijk een ANTIGIFCENTRUM/arts/… raadplegen |
| **P330** | De mond spoelen. |
| **P501** | Inhoud/verpakking afvoeren naar … |

## Afkortingen

| | |
|---|---|
| **ADR** | Europese Overeenkomst betreffende het internationale vervoer van gevaarlijke goederen over de weg |
| **ATE** | Schatting van de acute toxiciteit (Acute Toxicity Estimate) |
| **CAS** | Chemical Abstracts Service |
| **CLP** | Classification, Labelling and Packaging (Verord. 1272/2008) |
| **CMR** | Kankerverwekkend, mutageen, giftig voor de voortplanting |
| **DNEL** | Afgeleide dosis zonder effect (Derived No-Effect Level) |
| **EC** | European Community number |
| **EPI** | Persoonlijke beschermingsmiddelen |
| **GHS** | Wereldwijd geharmoniseerd systeem (Globally Harmonized System) |
| **IATA** | Internationale Luchtvervoersvereniging |
| **IMDG** | Internationale Code voor het vervoer van gevaarlijke goederen over zee |
| **VIB** | Veiligheidsinformatieblad (Safety Data Sheet) |
| **LC50** | Letale concentratie 50% (Lethal Concentration) |
| **LD50** | Letale dosis 50% (Lethal Dose) |
| **NDS** | Maximaal toelaatbare concentratie (werkplek, PL) |
| **NDSCh** | NDS kortetermijn (PL) |
| **OEL** | Occupational Exposure Limit |
| **PBT** | Persistent, bioaccumulerend en toxisch |
| **PNEC** | Voorspelde concentratie zonder effect (Predicted No-Effect Concentration) |
| **REACH** | Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Verord. (EG) 1907/2006) |
| **SDS** | Safety Data Sheet |
| **STOT** | Specifieke doelorgaantoxiciteit (Specific Target Organ Toxicity) |
| **SVHC** | Zeer zorgwekkende stof (Substance of Very High Concern) |
| **TPSA** | Topological Polar Surface Area |
| **vPvB** | Zeer persistent en zeer bioaccumulerend |

WORKING DRAFT 工作草稿

## Versiegeschiedenis

| | |
|---|---|
| **v2 (17.10.2026)** | Opgesteld op basis van zelfindeling door de leverancier (ECHA C&L-kennisgevingen; geen geharmoniseerde vermelding in bijlage VI). |

## Referenties


[1] EP en Raad. Verord.(EG) nr. 1907/2006 (REACH). Art.31, Bijlage II. PB EU L 396/2006. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-17.

[2] Europese Commissie. Verord.(EU) 2020/878 — wijziging van Bijlage II REACH. PB EU L 203/2020. Vanaf 01.01.2023. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-17.

[3] EP en Raad. Verord.(EG) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. PB 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/65089

[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] 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

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

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

[13] 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

[14] 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

[15] MRiPS-verordening van 12.06.2018 — NDS/NDN. Staatsblad 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=2922-40-9

WORKING DRAFT

**ADMET / Drug-likeness**



**NFPA 704** (aanvullende informatie — NFPA/VS-systeem; geen verplicht onderdeel van een EU-veiligheidsinformatieblad volgens REACH Bijlage II)




**Juridische kennisgeving:** Dit document is automatisch gegenereerd op basis van gegevens van PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) en andere openbare databanken. Het VERVANGT GEEN goedgekeurd veiligheidsinformatieblad (VIB) conform Verordening (EG) nr. 1907/2006 (REACH). Controleer de gegevens vóór gebruik van de stof aan de hand van het actuele VIB van de fabrikant.
**Generator:** Document automatisch gegenereerd op basis van zelfindeling door de leverancier (ECHA C&L-kennisgevingen) en openbare fysisch-chemische databanken.
**Auteur:** www.MolGod.org — platform voor geautomatiseerde veiligheidsinformatiebladen (VIB).
Datum van uitgifte: 18.10.2026 | Documentversie: 2