KARTA CHARAKTERYSTYKI / SAFETY DATA SHEET (SDS)

zgodna z Rozp. (WE) 1907/2006 (REACH), Zał. II — Rozp. (UE) 2020/878 Data: 17.10.2026 | Wersja: 2 | PL

(+)-Biotin 4-nitrophenyl ester

(4-nitrophenyl) 5-[(3aS,4S,6aR)-2-oxo-1,3,3a,4,6,6a-hexahydrothieno[3,4-d]imidazol-4-yl]pentanoate

CAS 33755-53-2

$C_{16}H_{19}N_3O_5S$

MOLAR MASS	LOGP	TPSA
365.40	2	139 Å²

KLASYFIKACJA ZAGROŻEŃ (GHS / CLP)

Klasyfikacja CLP nieustalona — brak wpisu zharmonizowanego (Załącznik VI), prowieniencja self-klasyfikacji nieustalona. Wymaga weryfikacji w ECHA C&L / karcie producenta. NIE zakładać braku zagrożenia.

1. Identyfikacja substancji/mieszaniny i identyfikacja przedsiębiorstwa

1.1 Nazwa substancji (PL)	(+)-Biotin 4-nitrophenyl ester
1.1 Nazwa IUPAC	(4-nitrophenyl) 5-[(3aS,4S,6aR)-2-oxo-1,3,3a,4,6,6a-hexahydrothieno[3,4-d]imidazol-4-yl]pentanoate
1.1 Numer CAS	33755-53-2
1.1 Numer EC	Brak danych
1.1 PubChem CID	83848
1.1 InChIKey	YUDNXDTXQPYKCA-YDHLFZDLSA-N
1.1 SMILES	C1[C@H]2[C@@H]([C@@H](S1)CCCCC(=O)OC3=CC=C(C=C3)[N+](=O)[O-])NC(=O)N2
1.1 Wzór sumaryczny	$C_{16}H_{19}N_3O_5S$ [7]
1.1 Masa molowa	365.4 g/mol [7]
1.1 Masa dokładna	365.1045 Da [7]

1.2 Zastosowania

Do celów laboratoryjnych i badawczych. Nie do użytku w produkcji żywności, leków ani kosmetyków bez odpowiednich zezwoleń.

1.3 Dane dostawcy

KOPIA REFERENCYJNA — BEZ DANYCH DOSTAWCY — NIE DO DYSTRYBUCJI	Dane dostawcy nie są zawarte w tej kopii referencyjnej. Dostawca wprowadzający substancję do obrotu ma obowiązek uzupełnić tę sekcję i pozostaje odpowiedzialny za kartę charakterystyki zgodnie z rozporządzeniem REACH. MolGod.org przygotowuje dokumentację i nie jest dostawcą tej substancji.

1.4 Numer telefonu alarmowego

Telefon alarmowy	112 (EU-wide emergency number)

Skontaktuj się z ośrodkiem zatruć wyznaczonym w kraju wprowadzenia do obrotu (art. 45 CLP).

2. Identyfikacja zagrożeń

Klasyfikacja CLP nieustalona — brak wpisu zharmonizowanego (Załącznik VI), prowieniencja self-klasyfikacji nieustalona. Wymaga weryfikacji w ECHA C&L / karcie producenta. NIE zakładać braku zagrożenia.

3. Skład/informacja o składnikach

Typ substancji	substancja czysta
Numer CAS	33755-53-2
Wzór sumaryczny	$C_{16}H_{19}N_3O_5S$
Stężenie	≥99% (typowa czystość odczynnikowa — do potwierdzenia specyfikacją dostawcy)

4. Środki pierwszej pomocy



Wdychanie

Przenieść poszkodowanego na świeże powietrze. Zapewnić spokój. Jeśli poszkodowany nie oddycha: sztuczne oddychanie (tylko wykwalifikowany personel). [1][2]

Kontakt ze skórą

Zdjąć skażone ubranie. Spłukać skórę wodą z mydłem (min. 15 minut). [1][2]

Kontakt z oczami

Przemyć oczy bieżącą wodą (min. 15 minut). Usunąć soczewki kontaktowe jeśli możliwe. Jeżeli podrażnienie utrzymuje się — konsultacja okulistyczna. [1][2]

Połknięcie

NIE wywoływać wymiotów (chyba że lekarz zaleci inaczej). Wypłukać usta wodą. Nie podawać niczego doustnie osobie nieprzytomnej. CIT Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7). Telefon ratunkowy: 112. [1][2]

Objawy i skutki

Brak specyficznych objawów opisanych w literaturze. [1][2]

Informacje dla lekarza

Wymaga weryfikacji

Telefony alarmowe: CIT Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7) | Ratunkowy: 112

5. Postępowanie w przypadku pożaru

Odpowiednie środki gaśnicze	Dostosować środki gaśnicze do otoczenia. CO2, proszek, piana.
Nieodpowiednie środki gaśnicze	Brak szczególnych ograniczeń.
Zagrożenia szczególne	Produkty rozkładu termicznego: CO, CO2, NOx, SOx.
Wskazówki dla strażaków	Użyć aparatu oddechowego (SCBA). Pełny strój ochronny.

6. Postępowanie w przypadku niezamierzonego uwolnienia do środowiska

Środki ostrożności indywidualne	Stosować środki ochrony indywidualnej (patrz Sekcja 8). Unikać wdychania pyłów/par. [1][2]
Ochrona środowiska	Zapobiec przedostaniu się do kanalizacji, wód gruntowych i powierzchniowych. [1][2]
Metody ograniczania i oczyszczania	Zaabsorbować materiałem obojętnym (piasek, vermiculit, ziemia okrzemkowa) i zebrać do szczelnych, oznakowanych pojemników. Nie wprowadzać do kanalizacji. [1][2]
Sekcje powiązane	8; 13

WORKING DRAFT 工作草案

7. Postępowanie z substancjami i mieszaninami oraz ich magazynowanie

Środki ostrożności	Pracować w digestorium lub z odpowiednią wentylacją. Zakaz jedzenia, picia i palenia w miejscu pracy. [1][2]
Temperatura przechowywania	Przechowywać w temperaturze pokojowej (15-25°C) lub zgodnie z etykietą. [1][2]
Wilgotność	Przechowywać w suchym miejscu (<60% RH). [1][2]
Światło	Chronić przed bezpośrednim światłem słonecznym. [1][2]
Materiały niezgodne	Silne utleniacze.

8. Kontrola narażenia/środki ochrony indywidualnej

8.1 Parametry kontroli narażenia

NDS (Polska)	Brak wartości NDS w dostępnym wykazie roboczym — zweryfikować w aktualnym Rozp. MRPiPS przed użyciem; nie zakładać braku wartości granicznej.
OEL (UE)	Wartość OEL-UE niezweryfikowana w dostępnym zbiorze — sprawdzić dyrektywy IOELV/BOELV; nie zakładać braku wartości.
DNEL	Brak danych dostępnych.
PNEC	Brak danych dostępnych.

8.2 Środki ochrony indywidualnej (ŚOI)



Rękawice ochronne chemoodporne
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
Dobór ŚOI wymaga ustalenia klasyfikacji zagrożeń — brak podstawy do wskazania materiału rękawic. Stosować ŚOI wg karty charakterystyki dostawcy i oceny ryzyka na stanowisku.



Okulary ochronne zamknięte lub gogle
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001



Obuwie ochronne zamknięte z ochroną palców
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. Właściwości fizyczne i chemiczne

Właściwość (pkt 9.1)	Wartość	Źródło
Stan skupienia	Brak danych dostępnych.	
Barwa	Brak danych dostępnych.	
Zapach	Brak danych dostępnych.	
pH (1% r-r wodny)	Brak danych dostępnych.	
Temp. topnienia	Brak danych dostępnych.	
Temp. wrzenia	Brak danych dostępnych.	
Temp. zapłonu	Brak danych dostępnych.	
Palność materiałów	Brak danych dostępnych.	
Dolna i górna granica wybuchowości	Brak danych dostępnych.	

WORKING DRAFT 工作草稿

Właściwość (pkt 9.1)	Wartość	Źródło
Gęstość (20°C)	Brak danych dostępnych.	
Prężność pary	Brak danych dostępnych.	
Względna gęstość pary	Brak danych dostępnych.	
Lepkość kinematyczna	Brak danych dostępnych.	
Temperatura samozapłonu	Brak danych dostępnych.	
Temperatura rozkładu	Nie dotyczy	
Rozpuszcz. w wodzie	Brak danych dostępnych.	
Charakterystyka cząsteczek	Brak danych dostępnych.	
Współczynnik podziału n-oktanol/ woda (wartość współczynnika log)	2 [8]	
Masa molowa	365.4 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Wzór sumaryczny	$C_{16}H_{19}N_3O_5S$ [7] ✓86%	*PubChem*
Reguła Lipinskiego (RO5)	**PASS**	

Jeśli powyżej widnieje "Brak danych dostępnych", w przejrzanych źródłach publicznych nie znaleziono zmierzonej wartości dla tej substancji. Właściwość nie została oznaczona przez MolGod.org i żadna wartość nie jest domniemywana. "Nie dotyczy" oznacza, że właściwość nie ma znaczenia dla tej substancji w dostarczanej postaci.

10. Stabilność i reaktywność

Reaktywność	Stabilna w normalnych warunkach przechowywania i użytkowania.
Stabilność chemiczna	Stabilna termicznie w zalecanych warunkach.
Niebezpieczne reakcje	Brak znanych niebezpiecznych reakcji w normalnych warunkach.
Warunki do unikania	Wysokie temperatury, bezpośrednie nasłonecznienie, wilgoć.
Materiały niezgodne	Silne utleniacze.
Produkty rozkładu	Produkty rozkładu termicznego: CO, CO2, NOx, SOx.

11. Informacje toksykologiczne

LD50 (doustna)	Brak danych dostępnych.
LD50 (skórna)	Brak danych dostępnych.
LC50 (inhalacyjna)	Brak danych dostępnych.
Podrażnienie skóry	Brak danych dostępnych.
Podrażnienie oczu	Brak danych dostępnych.
Działanie uczulające	Brak danych dostępnych.
Mutagenność	Brak danych dostępnych.
Rakotwórczość	Brak danych dostępnych.
Klasyfikacja IARC (rakotwórczość)	Brak indywidualnej monografii IARC dla tego CAS — nie jest to potwierdzenie braku rakotwórczości (por. klasyfikacja CLP/GHS w sekcji 2).
Toksyczność reprodukcyjna	Brak danych dostępnych.
STOT (narażenie jednorazowe)	Brak danych dostępnych.
STOT (narażenie powtarzane)	Brak danych dostępnych.
Zagrożenie aspiracyjne	Brak danych dostępnych.

WORKING DRAFT · 工作草案

12. Informacje ekologiczne

Toksyczność wodna	Brak danych dostępnych.
Trwałość / biodegradacja	Brak danych dostępnych.
Bioakumulacja	log Kow = 2 [8]. Niski potencjał bioakumulacyjny (log Kow < 4.5 — kryterium przesiewowe PBT/vPvB wg wytycznych ECHA R.11). [10][11]
Mobilność w glebie	Brak danych dostępnych.
Ocena PBT/vPvB	Brak wystarczających danych do oceny PBT/vPvB.
Działanie endokrynne	Brak informacji.

13. Postępowanie z odpadami

Metoda utylizacji	Przekazać do utylizacji uprawnionym firmom zgodnie z przepisami krajowymi i lokalnymi. Nie wprowadzać do kanalizacji.
Kod odpadu (EWC)	Kod odpadu (EWC) niemożliwy do ustalenia bez klasyfikacji zagrożeń — prowieniencja klasyfikacji nieustalona. NIE zakładać ani niebezpieczności (16 05 06*), ani jej braku (16 05 09); ustalić po weryfikacji klasyfikacji w ECHA. [9]
Opakowania	Opakowania oczyszczone mogą być poddane recyklingowi. Opakowania zanieczyszczone traktować zgodnie z klasyfikacją odpadu (patrz kod EWC powyżej); przy braku ustalonej klasyfikacji nie zakładać niebezpieczności.

14. Informacje dotyczące transportu

Numer UN	WYMAGA WERYFIKACJI — brak zweryfikowanego przypisania UN.
Zagrożenie dla środowiska	Zagrożenie dla środowiska w transporcie: niezweryfikowane. Prowieniencja klasyfikacji nieustalona — NIE zakładać braku zagrożenia dla środowiska ani braku wymogu oznakowania jako zanieczyszczenie morskie; zweryfikować wg zał. VI CLP, sekcji 12 i kryteriów ADR 2.2.9 / IMDG przed wysyłką.
Szczególne środki ostrożności	Traktować jako towar niebezpieczny zgodnie z przypisaną klasą (ADR/IMDG/IATA); stosować środki ostrożności właściwe dla tej klasy.
Kod CN/HS	Kod CN/HS: weryfikacja wymagana w Eurostat Combined Nomenclature.
Uwagi	Klasyfikacja transportowa niezweryfikowana. Nie zakładać braku ograniczeń — sprawdzić ADR/IMDG/IATA przed wysyłką.

15. Informacje dotyczące przepisów prawnych

Status SVHC	Status SVHC niezweryfikowany w dostępnym zbiorze — sprawdzić aktualną listę kandydacką ECHA; nie zakładać braku wpisu. [1]
REACH Załącznik XIV	Niezweryfikowane wobec listy autoryzacyjnej ECHA — sprawdzić REACH Załącznik XIV. [1]
REACH Załącznik XVII	Nie potwierdzono w dostępnym zbiorze Załącznika XVII — zweryfikować w aktualnym wykazie ECHA przed wprowadzeniem do obrotu; nie zakładać braku ograniczenia. [1]

16. Inne informacje

Stan prawny klasyfikacji: pochodzenie niezapisane — wymaga weryfikacji w ECHA.Wpisy z datą wejścia w życie po 17.10.2026 pominięto jako przyszłe (jeszcze nie obowiązują).

Dane zagregowane automatycznie z publicznych baz referencyjnych (PubChem, ECHA, NIST i in.).

Cytaty naukowe (2)

Simona Marincean, Diana Nichols, Rachael Schulz et al.. *6-(7,8-Dimethyl-2,4-dioxo-3,4-dihydrobenzo[g]pteridin-10(2H)-yl)hexyl 5-((3aS,4S,6aR)-2-oxohexahydro-1H-thieno[3,4-d]imidazol-4-yl)pentanoate*. Molbank (2025). DOI: 10.3390/m1994

Xiaomei Yang, Siyu Chen, Wenxin Liu et al.. *Crystal structure of (3 R ,5a S ,6 R ,9 R ,12 R ,12a R)-3,6,9-trimethyldecahydro-12 H -3,12-epoxy[1,2]dioxepino[4,3- i]isochromen-10-yl 5-((3a S ,4 S ,6a R)-2-oxohexahydro-1 H -thieno[3,4- d]imidazol-4-yl)pentanoate*. (2026). DOI: 10.1107/s2056989026004895/hb8220sup1.cif

WORKING DRAFT 工作草案

Skróty

ADR	Europejska umowa dot. międzynarodowego przewozu towarów niebezpiecznych
ATE	Oszacowanie toksyczności ostrej (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (Rozp. 1272/2008)
CMR	Rakotwórczość, mutagenność, toksyczność reprodukcyjna
DNEL	Pochodny poziom niepowodujący zmian (Derived No-Effect Level)
EC	European Community number
EPI	Środki ochrony indywidualnej
GHS	Globalnie Zharmonizowany System (Globally Harmonized System)
IATA	Międzynarodowe Zrzeszenie Transportu Lotniczego
IMDG	Międzynarodowy kodeks morski towarów niebezpiecznych
KCh	Karta Charakterystyki (Safety Data Sheet)
LC50	Stężenie śmiertelne 50% (Lethal Concentration)
LD50	Dawka śmiertelna 50% (Lethal Dose)
NDS	Najwyższe dopuszczalne stężenie (na stanowisku pracy)
NDSCh	Chwilowe NDS
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Trwałe, bioakumulacyjne i toksyczne
PNEC	Przewidywane stężenie niepowodujące zmian (Predicted No-Effect Concentration)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Rozp. 1907/2006)
SDS	Safety Data Sheet
STOT	Toksyczność narządowa (Specific Target Organ Toxicity)
SVHC	Substancja wzbudzająca szczególnie duże obawy (Substance of Very High Concern)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Bardzo trwałe i bardzo bioakumulacyjne

Historia wersji

v2 (17.10.2026)	Pochodzenie klasyfikacji nie zostało zapisane w kanonie — zweryfikuj źródło w ECHA (Annex VI / C&L).

Referencje

[1] PE i Rada. Rozp.(WE) nr 1907/2006 (REACH). Art.31, Zał.II. Dz.Urz.UE L 396/2006. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-17.

[2] Komisja Europejska. Rozp.(UE) 2020/878 — zmiana Zał.II REACH. Dz.Urz.UE L 203/2020. Od 01.01.2023. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-17.

[3] PE i Rada. Rozp.(WE) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. Dz.Urz.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/83848

[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] Rozp. MRiPS z 12.06.2018 r. — NDS/NDN. Dz.U. 2024 poz. 1017. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-17.

Linki zewnętrzne

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=33755-53-2

WORKING DRAFT · 工作草稿

ADMET / Drug-likeness



Informacja prawna: Niniejszy dokument został wygenerowany automatycznie na podstawie danych z PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) i innych publicznych baz danych. NIE ZASTĘPUJE zatwierdzonej Karty Charakterystyki (SDS) zgodnej z rozporządzeniem (WE) nr 1907/2006 (REACH). Przed użyciem substancji weryfikuj dane z aktualną KCh producenta.
Generator: Dokument opracowany automatycznie na podstawie klasyfikacji o niezapisanym pochodzeniu (do weryfikacji w ECHA) oraz publicznych baz danych fizykochemicznych.
Autor: www.MolGod.org — platforma automatycznych kart charakterystyki (SDS).
Data wydania: 17.10.2026 | Wersja dokumentu: 2

WORKING DRAFT · 工作草案