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

Biotinyl-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

$C_{16}H_{19}N_3O_5S$

MOLMASSE	LOGP
365.40	2

TPSA
139 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	Biotinyl-4-nitrophenyl ester
1.1 IUPAC-Name	(4-nitrophenyl) 5-[(3aS,4S,6aR)-2-oxo-1,3,3a,4,6,6a-hexahydrothieno[3,4-d]imidazol-4-yl]pentanoate
1.1 CAS-Nummer	33755-53-2
1.1 EG-Nummer	Keine Daten
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 Summenformel	$C_{16}H_{19}N_3O_5S$ [7]
1.1 Molmasse	365.4 g/mol [7]
1.1 Exakte Masse	365.1045 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).

WORKING DRAFT · 工作草案

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	33755-53-2
Summenformel	$C_{16}H_{19}N_3O_5S$
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, NOx, SOx.
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.

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)	2 [8]	
Molmasse	365.4 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Summenformel	$C_{16}H_{19}N_3O_5S$ [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.

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.
Zersetzungsprodukte	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO2, NOx, SOx.

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 = 2 [8]. Geringes Bioakkumulationspotenzial (log Kow < 4,5 — PBT/vPvB-Screening-Kriterium gemäß ECHA-Leitlinie R.11). [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 · 工作草案

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.).

Wissenschaftliche Zitate (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

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)

WORKING DRAFT 草稿 工作

NDS	Maximal zulässige Konzentration (Arbeitsplatz, PL)
NDSCh	Kurzzeitgrenzwert (PL)
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistent, bioakkumulierbar und toxisch
PNEC	Abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (PNEC)
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/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] 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=33755-53-2

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