安全数据表 / SAFETY DATA SHEET (SDS)

符合法规 (EC) 1907/2006 (REACH) 附件 II——法规 (EU) 2020/878

日期： 26.10.2026 | 版本： 9 | ZH

咖啡因

1,3,7-trimethylpurine-2,6-dione

CAS 58-08-2

$C_8H_{10}N_4O_2$ | EC 200-362-1

摩尔质量	LOGP
194.19	-0.07 (pomiar: Merck Index 15th ed. (2013))

危险分类（GHS/CLP）



警告

H302

危害类别范围仅限于协调分类（*CLP 附件 VI*）；协调条目之外的类别可能需要供应商自我分类（*CLP 第 4(3) 条*）——请核对供应商安全数据表。

1. 物质/混合物和公司/企业的标识

1.1 物质名称	咖啡因
1.1 IUPAC名称	1,3,7-trimethylpurine-2,6-dione
1.1 CAS号	58-08-2
1.1 EC号	200-362-1
1.1 PubChem CID	2519
1.1 InChIKey	RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C
1.1 分子式	$C_8H_{10}N_4O_2$ [7]
1.1 摩尔质量	194.19 g/mol [7]
1.1 精确质量	194.0804 Da [7]

1.2 用途

用于实验室和研究目的。未经适当授权，不得用于食品、药品或化妆品的生产。

1.3 供应商信息

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 应急电话号码

应急电话	112 (EU-wide emergency number)

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

2. 危险性识别

GHS:



个人防护装备：



禁止事项：



警告

危险说明（H） [3][4][10]

H302	吞咽有害

防范说明（P） [3][4][10]

P264	作业后彻底清洗手部[和……]。
P270	使用本产品时不要进食、饮水或吸烟。
P301+P312	如误吞咽：：如感觉不适，呼叫中毒急救中心/医生/……
P330	漱口。
P501	处置内装物/容器……

危害类别范围仅限于协调分类（**CLP** 附件 **VI**）；协调条目之外的类别可能需要供应商自我分类（**CLP** 第 **4(3)** 条）——请核对供应商安全数据表。

WORKING DRAFT · 工作草案

3. 成分/组成信息

物质类型	纯物质
CAS号	58-08-2
EC号	200-362-1
分子式	$C_8H_{10}N_4O_2$
浓度	≥99% (典型试剂级纯度 — 须由供应商规格确认)
Clp index no	613-086-00-5

4. 急救措施



吸入

将受害者移至新鲜空气处。保持休息。如无呼吸：进行人工呼吸（仅限合格人员）。 [1][2][14]

皮肤接触

脱去受污染的衣物。用肥皂和水冲洗皮肤（至少15分钟）。 [1][2][14]

眼睛接触

用流动水冲洗眼睛（至少15分钟）。如可能，取出隐形眼镜。如刺激持续——咨询眼科医生。 [1][2][14]

食入

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][14]

症状和影响

恶心、呕吐、腹泻. [3][10]

给医生的建议

需要核实

应急电话： 紧急情况： **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. 消防措施

适用的灭火剂	根据周围环境调整灭火介质。CO2、干粉、泡沫。
不合适的灭火介质	无特殊限制。
特殊危害	热分解产物： CO, CO2, NOx. [15]
消防员建议	使用自给式呼吸器（SCBA）。全套防护服。

6. 泄漏应急处理

个人预防措施	使用个人防护装备（见第8节）。避免吸入粉尘。 [1][2][14]
环境预防措施	防止进入下水道、地下水和地表水。 [1][2][14]
围堵和清理方法	1. 确保通风 2. 防护装备：丁腈手套、P2 半面罩 3. 用机械方式收集到可封闭的袋中，避免产生粉尘 4. 用水冲洗残留物 5. 注意：人体致死剂量估计为 150–200 mg/kg 体重，通常 ≥5 g (Willson 2018, doi:10.1016/j.toxrep.2018.11.002)
相关章节	8; 13
大量泄漏	1. 疏散无关人员 2. 防护装备：丁腈手套、护目镜、P2 半面罩、防护服 3. 用机械方式收集到有标签的可封闭容器中，避免产生粉尘 4. 防止进入下水道；如释放到环境中，应通知主管部门
吸附剂	带HEPA过滤器的干式真空吸尘
需要**HAZMAT**响应	否
所需个人防护装备	防护手套: nitrile powder free; 防护眼镜: 是; 呼吸防护: dust mask P2; 防护服: lab coat

7. 操作处置与储存

预防措施	在通风橱或通风良好的地方工作。工作区域禁止进食、饮水或吸烟。 [1][2][14]
储存温度	储存温度低于 25°C. [1][2][14]
含水量	在干燥处储存（<60% RH）。 [1][2][14]
光	避免阳光直射。 [1][2][14]

储存于干燥阴凉处，远离食品和饮料。避光。

禁配物	强氧化剂. [15]

WORKING DRAFT · 工作草案

8. 暴露控制/个人防护

8.1 控制参数

NDS（波兰）	现有工作清单中无 NDS（职业接触限值）— 使用前请在现行 MRPiPS 法规中核实；不得假定不存在限值。
OEL（欧盟）	欧盟职业接触限值（OEL）未在可用数据集中验证——请检查IOELV/BOELV指令；不要假定无值。
DNEL	无可用数据。
PNEC	无可用数据。

8.2 个人防护装备（**PPE**） [5][6][16]



耐化学腐蚀防护手套
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
nitrile powder free



封闭式安全眼镜或护目镜
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001



封闭式安全鞋（带趾部防护）
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. 物理和化学性质

性质（第**9.1**项）	值	来源
物态	固体（白色针状晶体）	
颜色	白色	
气味	bezwonny, gorzki smak	
pH值（**1%**水溶液）	6.9	
熔点	236°C (CRC Handbook of Chemistry and Physics, 94th ed. (2013), p. 3-90) [8] [7]	
沸点	178°C (Sublimuje w 178 °C (nie wrze) — The Merck Index, 15th ed. (2013), p. 289) (experimental data) [7]	
闪点	不适用 (REACH 9.1(h))	
易燃性	无可用数据。	
上下爆炸极限/易燃极限	不适用 (REACH 9.1(g))	
密度（**20°C**）	1.23 g/cm³ (18 °C; The Merck Index, 15th ed. (2013), p. 289) [7]	
蒸气压	≈1.2×10⁻⁷ kPa (9.0×10⁻⁷ mmHg, 25 °C) — Emel'yanenko & Verevkin, J. Chem. Thermodyn. 40 (2008) 1661, doi:10.1016/j.jct.2008.07.002 [7]	
相对蒸气密度	不适用 (REACH 9.1(q))	
运动黏度	不适用 (REACH 9.1(l))	
自燃温度	无可用数据。	
分解温度	不适用	
解离常数 **(pKa)**	pKa_1 = 14 / pKa_2 = -0.12 [9]	

WORKING DRAFT 工作草稿

性质（第**9.1**项）	值	来源
水溶性	21.6 g/L (25 °C) — Yalkowsky, He, Jain, Handbook of Aqueous Solubility Data, 2nd ed. (2010), p. 506 [9][10]	
颗粒特征	尚未针对该商品形态测定粒径分布——根据附件 II 9.1(r) 属必填项；应根据供应商规格补充。	
log Kow（**XLogP3**）	-0.07 [7] (Hansch, Leo, Hoekman, Exploring QSAR (1995), p. 44; Sangster: −0.42)	
摩尔质量	194.19 g/mol [7]	
分子式	$C_8H_{10}N_4O_2$ [7]	
利平斯基五规则（**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. 稳定性和反应性

反应性	在正常储存和使用条件下稳定。
化学稳定性	在推荐条件下热稳定。
危险反应	正常条件下无已知危险反应。
应避免的条件	高温、直射阳光、湿气。
禁配物	强氧化剂.
分解产物	热分解产物： CO, CO2, NOx.

11. 毒理学信息

LD50（经口）	367 mg/kg (大鼠) [11]
LD50（经皮）	无可用数据。
LC50（吸入）	无可用数据。
皮肤刺激性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]
眼睛刺激性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]
致敏性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]
致突变性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]
致癌性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]
IARC分类（致癌性）	该CAS号无单独的IARC专著——这并不确认无致癌性（参见第2节CLP/GHS分类）。
生殖毒性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]
其他信息	人体致死剂量估计为 150–200 mg/kg 体重（通常 ≥5 g）；最低致死血药浓度约为 80 mg/L (Willson 2018，doi:10.1016/j.toxrep.2018.11.002)。 成人单次剂量不超过 200 mg（约 3 mg/kg 体重）以及习惯性摄入不超过 400 mg/天（孕妇：不超过 200 mg/天）不会引起安全担忧 (EFSA 2015，doi:10.2903/j.efsa.2015.4102)。 作用机制：腺苷 A1 和 A2A 受体的非选择性拮抗剂 (Fredholm 等 1999，PMID 10049999)。
STOT——单次暴露	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]
STOT——重复暴露	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]
吸入危害	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][10]

WORKING DRAFT 工作草案

12. 生态学信息

水生毒性	LC50 (96 h, Pimephales promelas) 151 mg/L; EC50 (24 h, Daphnia magna) 160 mg/L — Ministry of the Environment, Japan, initial environmental risk assessment, CAS 58-08-2 (env.go.jp/content/000316699.pdf)
持久性/生物降解性	无可用数据。
生物累积性	log Kow = -0.07 [7]。生物累积潜力低（log Kow < 4.5 — 依据 ECHA 指南 R.11 的 PBT/vPvB 筛查标准）。 [17][18]
土壤中的迁移性	无可用数据。
PBT/vPvB评估	数据不足以评估PBT/vPvB。
内分泌干扰特性	水生生物中报告的内分泌效应（生态毒理学数据，US EPA ECOTOX；不构成依据 2018/605 的监管内分泌干扰物分类）。 [19]

13. 废物处置

处置方法	根据国家和地方法规，交由有资质的承包商进行处置。不得排入下水道。
废物代码（**EWC**）	16 05 06* — 实验室和分析用化学品（例如化学试剂）含有危险物质。需要验证 EWC 代码。 [13]
包装	清洁过的包装可回收。受污染的包装必须作为危险废物处理。

14. 运输信息

UN编号	UN 1544 [7]
环境危害	运输方面未分类为环境危害物（CLP 附件 VI 中无 H400/H410/H411；无需海洋污染物标记） [3]
特殊预防措施	按分配的类别（ADR/IMDG/IATA）作为危险货物处理；采取该类别相应的预防措施。
CN/HS编码	CN/HS 编码：需在 Eurostat 组合税则中核实。
备注	UN number per the indicated source. Verify the transport class and packing group in ADR Table A / UN Model Regulations before shipment. [7]

15. 法规信息

SVHC状态	未对照可用数据集核实 SVHC 状态 — 请查阅最新的 ECHA 候选清单；请勿假定不存在。 [1]
REACH 附件 **XIV**	未对照 ECHA 授权清单进行核实 — 请查阅 REACH 附件 XIV。 [1]
REACH 附件 **XVII**	在现有附件XVII数据集中未确认——在投放市场前请根据当前ECHA清单验证；不要假设无限制。 [1]
EC号类型	EINECS

16. 其他信息

分类的法律地位：根据 CLP 附件 VI 协调 — 法规 (EC) No 1272/2008（截至签发日期）。生效日期晚于 26.10.2026 因尚未生效而被省略。

数据自动聚合自公共参考数据库（**PubChem**、**ECHA**、**NIST**等）。

科学引用 **(9)**

Deng H, Wang L, Liu P et al.. *Caffeine and taurine: a systematic review and network meta-analysis of their individual and combined effects on physical capacity, cognitive function, and physiological markers.*. Journal of the International Society of Sports Nutrition (2025). DOI: 10.1080/15502783.2025.2566371

Marcus GM, Hu FB, van Dam RM et al.. *Caffeine and Cardiovascular Disease: A Scientific Statement From the American Heart Association.*. Circulation (2026). DOI: 10.1161/CIR.0000000000001454

Eichenwald E, Corwin M, McEntire B et al.. *Intermittent hypoxia and caffeine in infants born preterm: the ICAF Randomized Clinical Trial.*. Archives of disease in childhood. Fetal and neonatal edition (2026). DOI: 10.1136/archdischild-2025-329230

Razazan R, Hemmatinafar M, Imanian B et al.. *Performance-enhancing effects of caffeine and L-Theanine among Iranian elite wrestlers: a focus on cognitive and specific physical performance.*. Journal of the International Society of Sports Nutrition (2025). DOI: 10.1080/15502783.2025.2564238

WORKING DRAFT · 工作草案

Nawarathna GS, Ariyasinghe DI, Dassanayake TL. *High-dose L-theanine-caffeine combination improves neurobehavioural and neurophysiological measures of selective attention in acutely sleep-deprived young adults: a double-blind, placebo-controlled crossover study.*. The British journal of nutrition (2025). DOI: 10.1017/S0007114525104169

H说明全文

H302	吞咽有害

P说明全文

P264	作业后彻底清洗手部[和……]。
P270	使用本产品时不要进食、饮水或吸烟。
P301+P312	如误吞咽：：如感觉不适，呼叫中毒急救中心/医生/……
P330	漱口。
P501	处置内装物/容器……

缩写

ADR	欧洲关于危险货物国际公路运输的协定
ATE	急性毒性估计
CAS号	Chemical Abstracts Service
CLP	分类、标签和包装（(EC) 1272/2008法规）
CMR	致癌性、致突变性、生殖毒性
DNEL	衍生无效应水平
EC	European Community number
EPI	个人防护装备
GHS	全球统一制度
IATA	国际航空运输协会
IMDG	国际海运危险货物规则
安全数据表	安全数据表
LC50	半数致死浓度
LD50	半数致死剂量
NDS	最高容许浓度（工作场所，波兰）
NDSCh	短时 NDS
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	持久性、生物累积性和毒性
PNEC	预测无效应浓度
REACH	化学品注册、评估、许可和限制（(EC) 1907/2006法规）
SDS	Safety Data Sheet
STOT	特定靶器官毒性
SVHC	高度关注物质
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	高持久性和高生物累积性

版本历史

v9 (26.10.2026)	基于 ECHA 协调分类编制（CLP 附件 VI，ATP 23）。

参考文献

[1] 欧洲议会和理事会。法规(EC) 第1907/2006号 (REACH)。第31条，附件II。欧盟官方公报 L 396/2006。 URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-26.

[2] 欧盟委员会。法规(EU) 2020/878 — 修订REACH附件II。欧盟官方公报 L 203/2020。自01.01.2023起。 URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-26.

WORKING DRAFT · 工作草案

[3] 欧洲议会和理事会。法规(EC) 1272/2008 (CLP) + ATP 23。欧盟官方公报 L 353/2008。 (2026-07-07) URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/oj Accessed: 2026-10-26.

[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: 2026-10-26.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-10-26.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-10-26.

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2519

[8] NIST. Chemistry WebBook, SRD 69. National Institute of Standards and Technology. URL: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=58-08-2

[9] O'Neil, M.J., ed. The Merck Index: An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 15th ed. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2013.

[10] ECHA. European Chemicals Agency — harmonised classification inventory (CLP Annex VI). URL: https://echa.europa.eu

[11] Adamson, R.H. "The acute lethal dose 50 (LD50) of caffeine in albino rats." Regulatory Toxicology and Pharmacology 80 (2016): 274–276. URL: https://doi.org/10.1016/j.yrtph.2016.07.011

[12] ECHA. REACH Registration Dossier (registered substance, acute toxicity study record). Helsinki: European Chemicals Agency. URL: https://echa.europa.eu/registration-dossier

[13] 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

[14] 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

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

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

[17] 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

[18] 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

[19] U.S. EPA. ECOTOX Knowledgebase. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. URL: https://cfpub.epa.gov/ecotox/

[20] MRiPS 2018年6月12日条例 — NDS/NDN。法律公报 2024 第1017项。 URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-26.

外部链接

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=58-08-2

NFPA 704 （补充信息——NFPA/美国系统；不是REACH附件II要求的欧盟安全数据表要素）



法律声明： 本文件根据 PubChem (NIH)、ECHA、NIST WebBook、ChemSpider (RSC) 及其他公共数据库的数据自动生成。本文件不能替代符合法规 (EC) No 1907/2006 (REACH) 的正式安全数据表 (SDS)。使用该物质前，请对照制造商现行的安全数据表核实数据。
生成器： 本文件根据 ECHA 协调分类（CLP 附件 VI）和公共理化数据库自动生成。
作者： **www.MolGod.org** — 自动化安全数据表 (SDS) 平台。
发布日期： 26.10.2026 | 文件版本： 9