SCHEDA DI DATI DI SICUREZZA / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conforme al Reg. (CE) n. 1907/2006 (REACH), All. II — Reg. (UE) 2020/878 | Data: 18.10.2026 | Versione: 2 | IT

Acefylline

2-(1,3-dimethyl-2,6-dioxopurin-7-yl)acetic acid

CAS 652-37-9

$C_9H_{10}N_4O_4$ | EC 211-490-2

MASSA MOLARE	LOGP
238.20	-0.8

TPSA: 95.7 Å²

CLASSIFICAZIONE DEI PERICOLI (GHS / CLP)



Attenzione

H315 | H319 | H335

Classificazione non armonizzata (nessuna voce nell'allegato VI del regolamento CLP) — assegnata dalle notifiche aggregate ECHA C&L; le indicazioni H devono essere verificate rispetto alla fonte ufficiale (ECHA C&L / scheda del produttore).

1. Identificazione della sostanza/miscela e della società/impresa

1.1 Nome della sostanza	Acefylline
1.1 Nome IUPAC	2-(1,3-dimethyl-2,6-dioxopurin-7-yl)acetic acid
1.1 Numero CAS	652-37-9
1.1 Numero EC	211-490-2
1.1 PubChem CID	69550
1.1 InChIKey	HCYFGRCYSCXKNQ-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CN1C2=C(C(=O)N(C1=O)C)N(C=N2)CC(=O)O
1.1 Formula molecolare	$C_9H_{10}N_4O_4$ [7]
1.1 Massa molare	238.20 g/mol [7]
1.1 Massa esatta	238.0702 Da [7]

1.2 Usi

Per scopi di laboratorio e di ricerca. Non destinato all'uso nella produzione di alimenti, medicinali o cosmetici senza le opportune autorizzazioni.

1.3 Informazioni sul fornitore

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 Numero telefonico di emergenza

Telefono di emergenza	112 (EU-wide emergency number)

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

2. Identificazione dei pericoli

GHS:



DPI:



Attenzione

Indicazioni di pericolo (H) [3][4]

H315	Provoca irritazione cutanea.
H319	Provoca grave irritazione oculare.
H335	Può irritare le vie respiratorie.

Consigli di prudenza (P) [3][4]

P261	Evitare di respirare la polvere/i fumi/i gas/la nebbia/i vapori/gli aerosol.
P264	Lavare accuratamente … dopo l’uso.
P271	Utilizzare soltanto all’aperto o in luogo ben ventilato.
P280	Indossare guanti/indumenti protettivi/Proteggere gli occhi/il viso.
P302+P352	IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: Lavare abbondantemente con acqua/…
P304+P340	IN CASO DI INALAZIONE: Trasportare l’infortunato all’aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione.
P305+P351+P338	IN CASO DI CONTATTO CON GLI OCCHI: Sciacquare accuratamente per parecchi minuti.; Togliere le eventuali lenti a contatto se è agevole farlo. Continuare a sciacquare.
P312	In caso di malessere, contattare un CENTRO ANTIVELENI/un medico/…
P332+P313	In caso di irritazione della pelle: Consultare un medico.
P337+P313	Se l’irritazione degli occhi persiste: Consultare un medico.
P403+P233	Conservare in luogo ben ventilato.: Tenere il recipiente ben chiuso.
P405	Conservare sotto chiave.
P501	Smaltire il prodotto/recipiente in …

Classificazione non armonizzata (nessuna voce nell'allegato VI del regolamento CLP) — assegnata dalle notifiche aggregate ECHA C&L; le indicazioni H devono essere verificate rispetto alla fonte ufficiale (ECHA C&L / scheda del produttore).

WORKING DRAFT · 工作草案

3. Composizione/informazioni sugli ingredienti

Tipo di sostanza	sostanza pura
Numero CAS	652-37-9
Numero CE	211-490-2
Formula molecolare	$C_9H_{10}N_4O_4$
Concentration	≥99% (purezza tipica di grado reagente — da confermare con la specifica del fornitore)

4. Misure di primo soccorso



Inalazione

Spostare la persona colpita all'aria fresca. Mantenere a riposo. Se la persona non respira: respirazione artificiale (solo personale qualificato). [1][2][10]

Contatto con la pelle

Togliere gli indumenti contaminati. Sciacquare la pelle con acqua e sapone (min. 15 minuti). [1][2][10]

Contatto con gli occhi

Sciacquare gli occhi con acqua corrente (min. 15 minuti). Rimuovere le lenti a contatto se possibile. Se l'irritazione persiste — consultare un oculista. [1][2][10]

Ingestione

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]

Sintomi ed effetti

tosse, dispnea, mal di testa, vertigini; arrossamento e irritazione della pelle; irritazione e lacrimazione oculare. [3]

Note per il medico

Verifica richiesta

Numeri di emergenza: Emergenza: 112 (EU-wide). Poison centre: as designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).

5. Misure antincendio

Mezzi di estinzione idonei	Adattare i mezzi di estinzione all'ambiente circostante. CO2, polvere, schiuma.
Mezzi di estinzione non idonei	Nessuna restrizione particolare.
Pericoli specifici	Prodotti di decomposizione termica: CO, CO2, NOx. [11]
Raccomandazioni per gli addetti antincendio	Utilizzare un autorespiratore (SCBA). Tuta protettiva completa.

6. Misure in caso di rilascio accidentale

Precauzioni personali	Utilizzare dispositivi di protezione individuale (vedere sezione 8). Evitare di respirare le polveri/i vapori. [1][2][10]
Precauzioni ambientali	Impedire la penetrazione nelle fognature, nelle acque sotterranee e superficiali. [1][2][10]
Metodi di contenimento e bonifica	Assorbire con materiale inerte (sabbia, vermiculite, farina fossile) e raccogliere in contenitori a tenuta ed etichettati. Non immettere nelle fognature. [1][2][10]
Sezioni correlate	8; 13

7. Manipolazione e immagazzinamento

Precauzioni	Lavorare sotto cappa aspirante o con ventilazione adeguata. Vietato mangiare, bere e fumare sul luogo di lavoro. [1][2][10]

WORKING DRAFT 工作草案

Temperatura di conservazione	Conservare a temperatura ambiente (15-25°C) o secondo quanto indicato sull'etichetta. [1][2][10]
Umidità	Conservare in luogo asciutto (<60% RH). [1][2][10]
Luce	Proteggere dalla luce solare diretta. [1][2][10]
Materiali incompatibili	Ossidanti forti, Basi forti, Metalli non nobili (sviluppo di idrogeno). [11]

8. Controllo dell'esposizione/protezione individuale

8.1 Parametri di controllo

NDS (Polonia)	Nessun valore NDS (OEL) nell'elenco di lavoro disponibile — verificare nell'attuale regolamento MRPiPS prima dell'uso; non presumere l'assenza di un valore limite.
OEL (UE)	Valore OEL-UE non verificato nel set disponibile — controllare le direttive IOELV/BOELV; non presumere l'assenza di un valore.
DNEL	Nessun dato disponibile.
PNEC	Nessun dato disponibile.

8.2 Dispositivi di protezione individuale (DPI) [5][6][12]



Guanti protettivi resistenti agli agenti chimici
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
nitrile (min. 0.11 mm)



Occhiali di sicurezza chiusi o occhiali a maschera
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001



Protezione delve vie respiratorie
La protezione respiratoria NON PUÒ essere selezionata dai dati disponibili — stato fisico indeterminato. Verifica richiesta prima dell'uso. Non presumere che un filtro sia sufficiente: per i gas inerti e l'ossigeno, l'apparecchio filtrante NON PROTEGGE.



Calzature di sicurezza chiuse con protezione delle dita
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

9. Proprietà fisiche e chimiche

Proprietà (punto 9.1)	Valore	Source
Stato fisico	Nessun dato disponibile.	
Colore	Nessun dato disponibile.	
Odore	Nessun dato disponibile.	
pH (soluzione acquosa 1%)	Nessun dato disponibile.	
Temp. di fusione	Nessun dato disponibile.	
Punto di ebollizione	Nessun dato disponibile.	
Punto di infiammabilità	Nessun dato disponibile.	
Infiammabilità	Nessun dato disponibile.	
Limite inferiore e superiore di esplosività	Nessun dato disponibile.	
Densità (20°C)	Nessun dato disponibile.	
Tensione di vapore	Nessun dato disponibile.	

WORKING DRAFT 工作草稿

Proprietà (punto 9.1)	Valore	Source
Densità di vapore relativa	Nessun dato disponibile.	
Viscosità cinematica	Nessun dato disponibile.	
Temperatura di autoaccensione	Nessun dato disponibile.	
Temperatura di decomposizione	Non applicabile	
Idrosolubilità	Nessun dato disponibile.	
Caratteristiche delle particelle	Nessun dato disponibile.	
Coefficiente di ripartizione n-ottanolo/acqua (valore logaritmico)	-0.8 [8]	
Massa molare	238.20 g/mol [7] ✓86%	*PubChem*
Formula molecolare	$C_9H_{10}N_4O_4$ [7] ✓86%	*PubChem*
Regola di Lipinski (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. Stabilità e reattività

Reattività	Stabile in condizioni normali di conservazione e manipolazione.
Stabilità chimica	Termicamente stabile nelle condizioni raccomandate.
Reazioni pericolose	Nessuna reazione pericolosa nota in condizioni normali.
Condizioni da evitare	Temperature elevate, luce solare diretta, umidità.
Materiali incompatibili	Ossidanti forti, Basi forti, Metalli non nobili (sviluppo di idrogeno).
Prodotti di decomposizione	Prodotti di decomposizione termica: CO, CO2, NOx.

11. Informazioni tossicologiche

LD50 (orale)	Nessun dato disponibile.
LD50 (cutanea)	Nessun dato disponibile.
LC50 (inalatoria)	Nessun dato disponibile.
Irritazione cutanea	Categoria 2 — irritazione cutanea.
Irritazione oculare	Categoria 2 — irritazione oculare.
Sensibilizzazione	Nessun dato disponibile.
Mutagenicità	Nessun dato disponibile.
Cancerogenicità	Nessun dato disponibile.
Classificazione IARC (cancerogenicità)	Nessuna monografia individuale IARC per questo CAS — ciò non conferma l'assenza di cancerogenicità (cfr. classificazione CLP/GHS nella sezione 2).
Tossicità riproduttiva	Nessun dato disponibile.
STOT (esposizione singola)	Categoria 3 (H335): Può irritare le vie respiratorie. [3]
STOT (esposizione ripetuta)	Nessun dato disponibile.
Pericolo in caso di aspirazione	Nessun dato disponibile.

WORKING DRAFT 工作草稿

12. Informazioni ecologiche

Tossicità acquatica	Nessun dato disponibile.
Persistenza / biodegradabilità	Nessun dato disponibile.
Potenziale di bioaccumulo	log Kow = -0.8 [8]. Basso potenziale di bioaccumulo (log Kow < 4,5 — criterio di screening PBT/vPvB secondo la guida ECHA R.11). [13][14]
Mobilità nel suolo	Nessun dato disponibile.
Valutazione PBT/ vPvB	Dati insufficienti per la valutazione PBT/vPvB.
Proprietà di interferenza endocrina	Nessuna informazione.

13. Considerazioni sullo smaltimento

Metodo di smaltimento	Conferire allo smaltimento ad aziende autorizzate secondo le normative nazionali e locali. Non immettere nella rete fognaria.
Codice rifiuto (EWC)	16 05 06* — Sostanze chimiche di laboratorio e analitiche (ad es. reagenti chimici) contenenti sostanze pericolose. Verifica del codice EWC richiesta. [9]
Imballaggio	Gli imballaggi puliti possono essere riciclati. Gli imballaggi contaminati devono essere trattati come rifiuti pericolosi.

14. Informazioni sul trasporto

Numero UN	VERIFICA RICHIESTA — nessuna attribuzione UN verificata.
Pericolo per l'ambiente	Pericolo per l'ambiente ai fini del trasporto: non verificato. Classificazione non armonizzata (fuori allegato VI CLP) — verificare la tossicità acquatica (sezione 12) e NON presumere che il marchio di inquinante marino non sia richiesto; confermare secondo ADR 2.2.9 / IMDG prima della spedizione.
Precauzioni speciali	Trattare come merce pericolosa secondo la classe assegnata (ADR/IMDG/ IATA); applicare le precauzioni proprie di tale classe.
Codice CN/HS	Codice CN/HS: verifica richiesta nella Nomenclatura combinata Eurostat.
Note	Classificazione di trasporto non verificata. Non presumere l'assenza di restrizioni — verificare ADR/IMDG/IATA prima della spedizione.

15. Informazioni sulla regolamentazione

Stato SVHC	Stato SVHC non verificato rispetto al set di dati disponibile — consultare l'attuale elenco delle sostanze candidate dell'ECHA; non presumere l'assenza. [1]
REACH Allegato XIV	Non verificato rispetto all'elenco delle autorizzazioni ECHA — verificare l'Allegato XIV di REACH. [1]
REACH Allegato XVII	Non confermato nel set di dati disponibile dell'Allegato XVII — verificare nell'elenco ECHA aggiornato prima dell'immissione sul mercato; non presumere l'assenza di restrizioni. [1]

16. Altre informazioni

Stato giuridico della classificazione: autoclassificazione del fornitore ai sensi dell'art. 4(3) del CLP — nessuna voce armonizzata nell'allegato VI.Le voci con data di entrata in vigore successiva al 17.10.2026 omessi in quanto futuri (non ancora applicabili).

Dati aggregati automaticamente da banche dati di riferimento pubbliche (PubChem, ECHA, NIST e altri).

Citazioni scientifiche (10)

Shahzadi I, Zahoor AF, Tüzün B et al.. *Repositioning of acefylline as anti-cancer drug: Synthesis, anticancer and computational studies of azomethines derived from acefylline tethered 4-amino-3-mercapto-1,2,4-triazole.*. PloS one (2022). DOI: 10.1371/journal.pone.0278027

WEISSENBURGER H. *[Theophylline-7-acetic acid and its derivatives].*. Archiv der Pharmazie und Berichte der Deutschen Pharmazeutischen Gesellschaft (1955). DOI: 10.1002/ardp.19552881109

Voynikov Y, Valcheva V, Momekov G et al.. *Theophylline-7-acetic acid derivatives with amino acids as anti-tuberculosis agents.*. Bioorganic & medicinal chemistry letters (2014). DOI: 10.1016/j.bmcl.2014.05.026

El-Houssini OM, Mohammad MA. *Versatile TLC-Densitometric Methods for the Synchronous Estimation of Cinnarizine and Acefylline Heptaminol in The Presence of Potential Impurity and Their Reported Degradation Products.*. Journal of chromatographic science (2022). DOI: 10.1093/chromsci/bmab129

WORKING DRAFT 工作草案

Méchin MC, Cau L, Galliano MF et al.. *Acefylline activates filaggrin deimination by peptidylarginine deiminases in the upper epidermis.*. Journal of dermatological science (2016). DOI: 10.1016/j.jdermsci.2015.11.006

Testo completo delle indicazioni H

H315	Provoca irritazione cutanea.
H319	Provoca grave irritazione oculare.
H335	Può irritare le vie respiratorie.

Testo completo dei consigli P

P261	Evitare di respirare la polvere/i fumi/i gas/la nebbia/i vapori/gli aerosol.
P264	Lavare accuratamente … dopo l'uso.
P271	Utilizzare soltanto all'aperto o in luogo ben ventilato.
P280	Indossare guanti/indumenti protettivi/Proteggere gli occhi/il viso.
P302+P352	IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: Lavare abbondantemente con acqua/…
P304+P340	IN CASO DI INALAZIONE: Trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione.
P305+P351+P338	IN CASO DI CONTATTO CON GLI OCCHI: Sciacquare accuratamente per parecchi minuti.; Togliere le eventuali lenti a contatto se è agevole farlo. Continuare a sciacquare.
P312	In caso di malessere, contattare un CENTRO ANTIVELENI/un medico/…
P332+P313	In caso di irritazione della pelle: Consultare un medico.
P337+P313	Se l'irritazione degli occhi persiste: Consultare un medico.
P403+P233	Conservare in luogo ben ventilato.: Tenere il recipiente ben chiuso.
P405	Conservare sotto chiave.
P501	Smaltire il prodotto/recipiente in …

Abbreviazioni

ADR	Accordo europeo relativo al trasporto internazionale di merci pericolose su strada
ATE	Stima della tossicità acuta (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (Reg. (CE) 1272/2008)
CMR	Cancerogenicità, mutagenicità, tossicità per la riproduzione
DNEL	Livello derivato senza effetto (Derived No-Effect Level)
EC	European Community number
EPI	Dispositivi di protezione individuale
GHS	Sistema mondiale armonizzato (Globally Harmonized System)
IATA	Associazione internazionale del trasporto aereo
IMDG	Codice marittimo internazionale delle merci pericolose
SDS	Scheda di Dati di Sicurezza (Safety Data Sheet)
LC50	Concentrazione letale 50% (Lethal Concentration)
LD50	Dose letale 50% (Lethal Dose)
NDS	Concentrazione massima ammissibile (sul luogo di lavoro)
NDSCh	NDS a breve termine (PL)
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistente, bioaccumulabile e tossico
PNEC	Concentrazione prevedibile priva di effetti (Predicted No-Effect Concentration)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Reg. 1907/2006)
STOT	Tossicità specifica per organi bersaglio (Specific Target Organ Toxicity)

WORKING DRAFT 工作草稿

SVHC	Sostanza estremamente preoccupante (Substance of Very High Concern)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Molto persistente e molto bioaccumulabile

Cronologia delle versioni

v2 (17.10.2026)	Elaborato sulla base dell'autoclassificazione del fornitore (notifiche ECHA C&L; nessuna voce armonizzata nell'allegato VI).

Riferimenti

[1] PE e Consiglio. Reg.(CE) n. 1907/2006 (REACH). Art.31, Allegato II. GU UE L 396/2006. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-10-17.

[2] Commissione europea. Reg.(UE) 2020/878 — modifica dell'Allegato II REACH. GU UE L 203/2020. Dal 01.01.2023. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-10-17.

[3] PE e Consiglio. Reg.(CE) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. GU 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/69550

[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] Regolamento MRiPS del 12.06.2018 — NDS/NDN. Gazzetta Ufficiale 2024 pos. 1017. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-10-17.

Collegamenti esterni

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=652-37-9

WORKING

ADMET / Drug-likeness



NFPA 704 (informazione supplementare — sistema NFPA/USA; non è un elemento obbligatorio della scheda di dati di sicurezza UE ai sensi dell'Allegato II del REACH)



Nota legale: Il presente documento è stato generato automaticamente a partire da dati di PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC) e altre banche dati pubbliche. NON SOSTITUISCE una scheda di dati di sicurezza (SDS) approvata conforme al regolamento (CE) n. 1907/2006 (REACH). Prima di utilizzare la sostanza, verificare i dati con la SDS aggiornata del produttore.
Generatore: Documento generato automaticamente dall'autoclassificazione del fornitore (notifiche ECHA C&L) e da banche dati fisico-chimiche pubbliche.
Autore: www.MolGod.org — piattaforma di schede di dati di sicurezza automatizzate (SDS).
Data di emissione: 18.10.2026 | Versione del documento: 2