

SICHERHEITSDATENBLATT / SAFETY DATA SHEET (SDS)

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH), Anhang II — Verordnung (EU) 2020/878

Datum: 15.07.2026 | Version: 3 | DE

(3S)-3-amino-4-[[[(2S)-1-methoxy-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl]amino]-4-oxobutanoic acid

(3S)-3-amino-4-[[[(2S)-1-methoxy-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl]amino]-4-oxobutanoic acid



CAS 22839-47-0

$C_{14}H_{18}N_2O_5$

MOLMASSE
294.30

LOGP
-2.70
(XLogP3,
PubChem)

1. Bezeichnung des Stoffs bzw. des Gemischs und des Unternehmens

1.1 Stoffname	—
1.1 IUPAC-Name	(3S)-3-amino-4-[[[(2S)-1-methoxy-1-oxo-3-phenylpropan-2-yl]amino]-4-oxobutanoic acid
1.1 CAS-Nummer	22839-47-0
1.1 EG-Nummer	Keine Daten
1.1 PubChem CID	134601
1.1 InChIKey	IAOZJIPTCAWIRG-QWRGUYRKSA-N
1.1 SMILES	<chem>COC(=O)[C@H](CC1=CC=CC=C1)NC(=O)[C@H](CC(=O)O)N</chem>
1.1 Summenformel	$C_{14}H_{18}N_2O_5$
1.1 Molmasse	294.30 g/mol
1.1 Exakte Masse	—

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

Lieferantendaten wurden nicht konfiguriert (MOL-GOD → Etikettengenerator → Herstellerdaten).

1.4 Notrufnummer

Notruftelefon +48 42 657 99 00

Toxikologisches Informationszentrum (CIT), Łódź — rund um die Uhr erreichbar

2. Mögliche Gefahren

3. Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen

Stofftyp	Reinstoff
CAS-Nummer	22839-47-0
Summenformel	$C_{14}H_{18}N_2O_5$
Konzentration	$\geq 99\%$

4. Erste-Hilfe-Maßnahmen



Einatmen

Betroffene Person an die frische Luft bringen. Für Ruhe sorgen. Bei Atemstillstand: künstliche Beatmung (nur qualifiziertes Personal).

Hautkontakt

Kontaminierte Kleidung ausziehen. Haut mit Wasser und Seife spülen (mind. 15 Minuten).

Augenkontakt

Augen mit fließendem Wasser spülen (mind. 15 Minuten). Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Bei anhaltender Reizung — augenärztliche Untersuchung.

Verschlucken

KEIN Erbrechen herbeiführen (sofern nicht ärztlich angeordnet). Mund mit Wasser ausspülen. Einer bewusstlosen Person niemals etwas oral verabreichen. Giftnotruf Łódź: +48 42 657 99 00 (24/7). Notruf: 112.

Symptome und Wirkungen

Keine spezifischen Symptome in der Literatur beschrieben.

Hinweise für den Arzt

Symptomatische Behandlung. Kein spezifisches Antidot.

Notrufnummern: CIT Łódź: +48 42 657 99 00 (24/7) | Notruf: 112

5. Maßnahmen zur Brandbekämpfung

Geeignete Löschmittel	Löschmittel an die Umgebung anpassen. CO ₂ , Pulver, Schaum.
Ungeeignete Löschmittel	Keine besonderen Einschränkungen.
Besondere Gefahren	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO ₂ , NO _x .
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.
Umweltschutzmaßnahmen	Nicht in die Kanalisation, das Grundwasser oder Oberflächengewässer gelangen lassen.
Methoden für Rückhaltung und Reinigung	Mechanisch in geeignete Behälter aufnehmen. Absorption: Sand, Vermiculit, Kieselgur. Nicht trocken kehren (Staubbildung).
Zugehörige Abschnitte	8; 13

7. Handhabung und Lagerung

Vorsichtsmaßnahmen	Im Abzug oder mit ausreichender Belüftung arbeiten. Essen, Trinken und Rauchen am Arbeitsplatz verboten.
Lagertemperatur	Bei Raumtemperatur (15-25°C) oder gemäß Etikett lagern.

Luftfeuchtigkeit	An einem trockenen Ort lagern (<60 % rF).
Licht	Vor direkter Sonneneinstrahlung schützen.
Unverträgliche Materialien	Starke Oxidationsmittel, starke Basen, Unedle Metalle (Wasserstoffentwicklung).

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.

8.2 Persönliche Schutzausrüstung (PSA)

 Chemikalienbeständige Schutzhandschuhe EN ISO 374-1:2016+A1:2018 Butyl (Typ B/C) — KEIN Latex	 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	Feststoff	
Farbe	Keine Daten verfügbar.	
Geruch	Keine Daten verfügbar.	
pH-Wert (1%ige wässrige Lösung)	Keine Daten verfügbar.	
Schmelzpunkt	246.5°C	
Siedepunkt	Keine Daten verfügbar.	
Flammpunkt	Keine Daten verfügbar.	
Dichte (20°C)	Keine Daten verfügbar.	
Dampfdruck (20°C)	Keine Daten verfügbar.	
Wasserlöslichkeit (20°C)	Keine Daten verfügbar.	
log Kow (XLogP3)	-2.7	
TPSA	119 Å²	PubChem (NIH)
HBD / HBA	Keine Daten verfügbar. / Keine Daten verfügbar.	
Frei drehbare Bindungen	Keine Daten verfügbar.	

Eigenschaft (Pkt. 9.1)	Wert	Quelle
Molmasse	294.30 g/mol	PubChem (NIH)
Summenformel	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₅	PubChem (NIH)

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, starke Basen, Unedle Metalle (Wasserstoffentwicklung).
Zersetzungsprodukte	Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO ₂ , NO _x .

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	LogP = -2.7. Geringes Bioakkumulationspotenzial.
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)	16 05 06* — Labor- und Analysechemikalien (z. B. chemische Reagenzien), die gefährliche Stoffe enthalten. Überprüfung des EWC-Codes erforderlich.
Verpackungen	Gereinigte Verpackungen können recycelt werden. Kontaminierte Verpackungen sind als gefährlicher Abfall zu behandeln.

14. Angaben zum Transport

UN-Nummer	ÜBERPRÜFUNG ERFORDERLICH — keine verifizierte UN-Zuordnung.
Umweltgefahr	Keine Umweltgefahr gemäß GHS-Einstufung angezeigt. Verifizierung erforderlich.
Besondere Vorsichtsmaßnahmen	Überprüfung erforderlich.
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 nicht gegen die vollständige ECHA-Kandidatenliste verifiziert (Prüfung erforderlich) — ECHA-Kandidatenliste prüfen
REACH Anhang XIV	Nicht gegen die ECHA-Zulassungsliste verifiziert — REACH Anhang XIV prüfen.
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.
Prüfdatum	2026-07-15

16. Sonstige Angaben

Rechtsstatus der harmonisierten Einstufung: CLP — Verordnung (EG) Nr. 1272/2008, Anhang VI (aktuelles harmonisiertes ECHA-Verzeichnis, Stand: Ausgabedatum dieses Datenblatts). Einträge mit Inkrafttreten nach 15.07.2026 wurden als zukünftig weggelassen (noch nicht anwendbar).

Daten automatisch aus öffentlichen Referenzdatenbanken aggregiert (PubChem, ECHA, NIST u. a.).

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)
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 (15.07.2026) Erstellt auf Grundlage der harmonisierten ECHA-Einstufung (Anhang VI der CLP-Verordnung, ATP 23).

Referenzen

- [1] EP und Rat. Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH). Art.31, Anhang II. ABl. EU L 396/2006.
- [2] Europäische Kommission. Verordnung (EU) 2020/878 — Änderung von Anhang II REACH. ABl. EU L 203/2020. Ab 01.01.2023.
- [3] EP und Rat. Verordnung (EG) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. ABl. EU L 353/2008.
- [4] United Nations. GHS Rev.9. ST/SG/AC.10/30/Rev.9. ONZ, 2021.
- [5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs.
- [6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs.
- [7] PubChem (NIH). NIH-Datenbank chemischer Verbindungen. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/134601> Data: 2026-07-11 08:50:28.
- [8] PubChem (NIH). NIH-Datenbank chemischer Verbindungen. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> Data: 2026-07-15 10:22:56.
- [9] ChEMBL (EBI). EMBL-EBI-Bioaktivitätsdatenbank. URL: <https://www.ebi.ac.uk/chembl> Data: 2026-07-15 10:23:00.
- [10] Gesetz vom 26.06.1974 — Arbeitsgesetzbuch (Polen). Art.221-229. GBl. 2023 Pos. 1465.
- [11] Verordnung MRiPS vom 12.06.2018 — NDS/NDN. GBl. 2024 Pos. 1017.

Externe Links

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=22839-47-0>
 ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL171679

Rechtlicher Hinweis: Dieses Dokument wurde automatisch aus PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC), Wikidata und anderen öffentlichen Datenbanken erstellt. Es ERSETZT KEIN genehmigtes Sicherheitsdatenblatt (SDS) 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 der harmonisierten ECHA-Einstufung (Anhang VI der CLP-Verordnung, ATP 23) und öffentlicher physikalisch-chemischer Datenbanken.

Autor: www.MolGod.org — Plattform für automatisierte Sicherheitsdatenblätter (SDS).
 Ausgabedatum: 15.07.2026 | Dokumentversion: 3