

FICHE DE DONNÉES DE SÉCURITÉ / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conforme au Règlement (CE) n° 1907/2006 (REACH), Ann. II — Règlement (UE) 2020/878

Date : 17.07.2026 | Version : 1 | FR

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

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



CAS 58-85-5

C₁₀H₁₆N₂O₃S

MASSE MOLAIRE

244.31

LOGP

0.3

1. Identification de la substance/du mélange et de la société/l'entreprise

1.1 Nom de la substance

—

1.1 Nom IUPAC

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

1.1 Numéro CAS

58-85-5

1.1 Numéro CE

Aucune donnée

1.1 PubChem CID

171548

1.1 InChIKey

YBJHBAHKTYGVGT-ZKWXMUAHSA-N

1.1 SMILES

C1[C@H]2[C@@H]([C@@H](S1)CCCC(=O)O)NC(=O)N2

1.1 Formule brute

C₁₀H₁₆N₂O₃S ^[7]

1.1 Masse molaire

244.31 g/mol ^[7]

1.1 Masse exacte

—

1.2 Utilisations

À des fins de laboratoire et de recherche. Ne pas utiliser dans la production d'aliments, de médicaments ou de cosmétiques sans les autorisations appropriées.

1.3 Renseignements concernant le fournisseur

Nom

ADVANCED CHEMISTRY R&D SOLUTIONS

Adresse

ul. Juliana Przybosa 8, 21-400 Łuków, Poland

NIP

Tél.

E-mail

Site web

1.4 Numéro d'appel d'urgence

Téléphone d'urgence

+48 42 631 47 24

Centre d'information toxicologique (CIT), Łódź — ouvert 24/7

2. Identification des dangers

3. Composition/informations sur les composants

Type de substance	substance pure
Numéro CAS	58-85-5
Formule brute	$C_{10}H_{16}N_2O_3S$
Concentration	≥99% (pureté typique de qualité réactif — à confirmer par la spécification du fournisseur)

4. Premiers secours



Inhalation

Transporter la personne affectée à l'air frais. Assurer le repos. Si la personne ne respire pas : respiration artificielle (personnel qualifié uniquement). ^{[1][2]}

Contact cutané

Retirer les vêtements contaminés. Rincer la peau à l'eau savonneuse (min. 15 minutes). ^{[1][2]}

Contact avec les yeux

Rincer les yeux à l'eau courante (min. 15 minutes). Retirer les lentilles de contact si possible. Si l'irritation persiste — consultation ophtalmologique. ^{[1][2]}

Ingestion

NE PAS faire vomir (sauf avis médical contraire). Rincer la bouche à l'eau. Ne rien administrer par voie orale à une personne inconsciente. Centre antipoison Łódź : +48 42 631 47 24 (24/7). Numéro d'urgence : 112. ^{[1][2]}

Symptômes et effets

Aucun symptôme spécifique décrit dans la littérature. ^{[1][2]}

Informations destinées au médecin

Traitement symptomatique. Aucun antidote spécifique. ^{[1][2]}

Numéros d'urgence : CIT Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7) | Urgence : 112

5. Mesures de lutte contre l'incendie

Moyens d'extinction appropriés	Adapter les moyens d'extinction à l'environnement. CO ₂ , poudre, mousse. ^{[1][2]}
Moyens d'extinction inappropriés	Aucune restriction particulière. ^{[1][2]}
Dangers spécifiques	Produits de décomposition thermique :CO, CO ₂ , NO _x , SO _x .
Conseils aux pompiers	Utiliser un appareil respiratoire isolant (SCBA). Tenue de protection intégrale. ^{[1][2]}

6. Mesures à prendre en cas de dispersion accidentelle

Précautions individuelles	Utiliser un équipement de protection individuelle (voir rubrique 8). Éviter de respirer les poussières. ^{[1][2]}
Précautions pour l'environnement	Empêcher la pénétration dans les égouts, les eaux souterraines et les eaux de surface. ^{[1][2]}
Méthodes de confinement et de nettoyage	Recueillir mécaniquement dans des récipients appropriés. Absorption : sable, vermiculite, terre de diatomées. Ne pas balayer à sec (formation de poussières). ^{[1][2]}
Sections associées	8; 13

7. Manipulation et stockage

Précautions	Travailler sous une hotte aspirante ou avec une ventilation adéquate. Interdiction de manger, boire et fumer sur le lieu de travail. ^{[1][2]}
Température de stockage	Conserver à température ambiante (15-25°C) ou conformément à l'étiquette. ^{[1][2]}

Teneur en eau	Conserver dans un endroit sec (<60% HR). ^{[1][2]}
Lumière	Protéger de la lumière directe du soleil. ^{[1][2]}
Matières incompatibles	Oxydants forts, Bases fortes, Métaux communs (dégagement d'hydrogène).

8. Contrôle de l'exposition/protection individuelle

8.1 Paramètres de contrôle

NDS (Pologne)	Aucune valeur NDS (VLEP) dans la liste de travail disponible — vérifier dans le règlement MRPIPS en vigueur avant utilisation ; ne pas présumer l'absence de valeur limite.
OEL (UE)	Valeur OEL-UE non vérifiée dans le jeu de données disponible — consulter les directives IOELV/BOELV ; ne pas supposer l'absence de valeur.
DNEL	Aucune donnée disponible.
PNEC	Aucune donnée disponible.

8.2 Équipements de protection individuelle (EPI)

 Gants de protection résistants aux produits chimiques EN ISO 374-1:2016+A1:2018 nitrile (min. 0.11 mm)	 Lunettes de protection fermées ou lunettes-masque EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001	 Chaussures de sécurité fermées avec protection des orteils EN ISO 20345:2022 (S2/S3)
--	---	--

9. Propriétés physiques et chimiques

Propriété (point 9.1)	Valeur	Source
État physique	Solide	
Couleur	Aucune donnée disponible.	
Odeur	Aucune donnée disponible.	
pH (solution aqueuse à 1%)	Sans objet	
Temp. de fusion	232°C ^[8]	
Point d'ébullition	Aucune donnée disponible.	
Point d'éclair	Aucune donnée disponible.	
Inflammabilité	Aucune donnée disponible.	
Limites inférieure et supérieure d'explosion	Sans objet	
Densité (20°C)	Aucune donnée disponible.	
Pression de vapeur	Aucune donnée disponible.	
Densité de vapeur relative	Sans objet	
Viscosité cinématique	Sans objet	
Température de décomposition	Aucune donnée disponible.	
Solubilité dans l'eau (20°C)	0.22 g/L, 25°C ^[8]	

Propriété (point 9.1)	Valeur	Source
Caractéristiques des particules	Aucune donnée disponible.	
Coefficient de partage n-octanol/eau (valeur log)	0.3 ^[8]	
TPSA	104 Å ² ^[7]	
HBD / HBA	Aucune donnée disponible. / Aucune donnée disponible.	
Liaisons rotables	Aucune donnée disponible.	
Masse molaire	244.31 g/mol ^[7]	
Formule brute	C ₁₀ H ₁₆ N ₂ O ₃ S ^[7]	

10. Stabilité et réactivité

Réactivité	Stable dans des conditions normales de stockage et de manipulation.
Stabilité chimique	Thermiquement stable dans les conditions recommandées.
Réactions dangereuses	Aucune réaction dangereuse connue dans des conditions normales.
Conditions à éviter	Températures élevées, exposition directe au soleil, humidité.
Matières incompatibles	Oxydants forts, Bases fortes, Métaux communs (dégagement d'hydrogène).
Produits de décomposition	Produits de décomposition thermique :CO, CO2, NOx, SOx.

11. Informations toxicologiques

DL50 (voie orale)	Aucune donnée disponible.
DL50 (voie cutanée)	Aucune donnée disponible.
CL50 (inhalation)	Aucune donnée disponible.
Irritation cutanée	Aucune donnée disponible.
Irritation oculaire	Aucune donnée disponible.
Sensibilisation	Aucune donnée disponible.
Mutagénicité	Aucune donnée disponible.
Cancérogénicité	Aucune donnée disponible.
Classification CIRC (cancérogénicité)	Aucune monographie IARC individuelle pour ce CAS — ce n'est pas une confirmation de l'absence de cancérogénicité (cf. classification CLP/GHS à la section 2).
Toxicité pour la reproduction	Aucune donnée disponible.
STOT (exposition unique)	Aucune donnée disponible.
STOT (exposition répétée)	Aucune donnée disponible.
Danger par aspiration	Aucune donnée disponible.

12. Informations écologiques

Toxicité aquatique	Aucune donnée disponible.
Persistance / biodégradabilité	Aucune donnée disponible.
Potentiel de bioaccumulation	$\log K_{ow} = 0.3$ [8]. Faible potentiel de bioaccumulation ($\log K_{ow} < 4,5$ — critère de présélection PBT/vPvB selon le guide ECHA R.11). [10][11]
Mobilité dans le sol	Aucune donnée disponible.
Évaluation PBT/vPvB	Données insuffisantes pour évaluer PBT/vPvB.
Propriétés perturbant le système endocrinien	Aucune information.

13. Traitement des déchets

Méthode d'élimination	Confier l'élimination à des entreprises agréées conformément aux réglementations nationales et locales. Ne pas rejeter dans les égouts.
Code déchet (CED)	16 05 06* — Produits chimiques de laboratoire et d'analyse (par ex. réactifs chimiques) contenant des substances dangereuses. Vérification du code CED requise. [9]
Emballages	Les emballages nettoyés peuvent être recyclés. Les emballages contaminés doivent être traités comme des déchets dangereux.

14. Informations relatives au transport

Numéro ONU	VÉRIFICATION REQUISE — aucune attribution ONU vérifiée.
Danger pour l'environnement	Non classé comme dangereux pour l'environnement pour le transport (pas de H400/H410/H411 à l'annexe VI CLP ; aucune marque de polluant marin requise) [3]
Précautions particulières	Traiter comme marchandise dangereuse selon la classe attribuée (ADR/IMDG/IATA) ; appliquer les précautions propres à cette classe.
Code NC/SH	Code NC/SH : vérification requise dans la nomenclature combinée Eurostat.
Remarques	Classification de transport non vérifiée. Ne pas présumer l'absence de restrictions — vérifier ADR/IMDG/IATA avant l'expédition.

15. Informations réglementaires

Statut SVHC	Statut SVHC non vérifié par rapport à l'ensemble de données disponible — consulter la liste actuelle des substances candidates de l'ECHA ; ne pas présumer l'absence. [1]
REACH Annexe XIV	Non vérifié par rapport à la liste d'autorisation de l'ECHA — vérifier l'Annexe XIV de REACH. [1]
REACH Annexe XVII	Non confirmé dans le jeu de données disponible de l'annexe XVII — vérifier dans la liste actuelle de l'ECHA avant la mise sur le marché ; ne pas supposer l'absence de restriction. [1]
Date de vérification	2026-07-17

16. Autres informations

Statut juridique de la classification harmonisée : CLP — Régl. (CE) n° 1272/2008, Annexe VI (liste harmonisée en vigueur de l'ECHA, à la date d'émission de la fiche). Les entrées dont la date d'entrée en vigueur est postérieure au 17.07.2026 omises comme futures (pas encore applicables).

Données agrégées automatiquement à partir de bases de données de référence publiques (PubChem, ECHA, NIST, etc.).

Abréviations

ADR	Accord européen relatif au transport international des marchandises dangereuses par route
ATE	Estimation de la toxicité aiguë (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (règl. 1272/2008)
CMR	Cancérogénicité, mutagénicité, toxicité pour la reproduction

DNEL	Niveau dérivé sans effet (Derived No-Effect Level)
EC	European Community number
EPI	Équipement de protection individuelle
GHS	Système général harmonisé (Globally Harmonized System)
IATA	Association du transport aérien international
IMDG	Code maritime international des marchandises dangereuses
FDS	Fiche de données de sécurité (Safety Data Sheet)
LC50	Concentration létale 50% (Lethal Concentration)
LD50	Dose létale 50% (Lethal Dose)
NDS	Concentration maximale admissible (au poste de travail)
NDSCh	NDS à court terme (PL)
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistant, bioaccumulable et toxique
PNEC	Concentration prédite sans effet (Predicted No-Effect Concentration)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Règl. (CE) 1907/2006)
SDS	Safety Data Sheet
STOT	Toxicité spécifique pour certains organes cibles (Specific Target Organ Toxicity)
SVHC	Substance extrêmement préoccupante (Substance of Very High Concern)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Très persistant et très bioaccumulable

Historique des versions

v1 (17.07.2026)

Élaboré sur la base de la classification harmonisée de l'ECHA (Annexe VI du CLP, ATP 23).

Références

- [1] PE et Conseil. Regl.(CE) n° 1907/2006 (REACH). Art.31, Annexe II. JO UE L 396/2006. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj> Accessed: 2026-07-17.
- [2] Commission européenne. Regl.(UE) 2020/878 — modifiant l'Annexe II REACH. JO UE L 203/2020. À partir du 01.01.2023. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj> Accessed: 2026-07-17.
- [3] PE et Conseil. Regl.(CE) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. JO UE L 353/2008. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/oj> Accessed: 2026-07-17.
- [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: 2026-07-17.
- [5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/72424.html> Accessed: 2026-07-17.
- [6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: <https://www.iso.org/standard/51021.html> Accessed: 2026-07-17.
- [7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/171548> Accessed: 2026-07-17.
- [8] Rumble, J.R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 105th ed. Boca Raton: CRC Press, 2024. URL: <https://hbcpc.chemnetbase.com> Accessed: 2026-07-17.
- [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> Accessed: 2026-07-17.
- [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> Accessed: 2026-07-17.
- [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> Accessed: 2026-07-17.
- [12] Règlement MRIPS du 12.06.2018 — NDS/NDN. Journal des Lois 2024 pos. 1017. URL: <https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017> Accessed: 2026-07-17.

Liens externes

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=58-85-5>
ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL857

Mention légale : Ce document a été généré automatiquement à partir de données de PubChem (NIH), l'ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC), Wikidata et d'autres bases de données publiques. Il NE REMPLACE PAS une fiche de données de sécurité (FDS) approuvée conforme au règlement (CE) n° 1907/2006 (REACH). Avant d'utiliser la substance, vérifiez les données par rapport à la FDS actuelle du fabricant.

Générateur : Document établi automatiquement sur la base de la classification harmonisée de l'ECHA (annexe VI du règlement CLP) et de bases de données physico-chimiques publiques.

BROUILLON