

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

conforme al Reg. (CE) n. 1907/2006 (REACH), All. II — Reg. (UE) 2020/878

Data: 17.07.2026 | Versione: 1 | IT

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

MASSA MOLARE

244.31

LOGP

0.3

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

1.1 Nome della sostanza

—

1.1 Nome IUPAC

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

1.1 Numero CAS

58-85-5

1.1 Numero EC

Nessun dato

1.1 PubChem CID

171548

1.1 InChIKey

YBJHBAHKTGYVGT-ZKWXMUAHSA-N

1.1 SMILES

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

1.1 Formula molecolare

C₁₀H₁₆N₂O₃S ^[7]

1.1 Massa molare

244.31 g/mol ^[7]

1.1 Massa esatta

—

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

Nome

ADVANCED CHEMISTRY R&D SOLUTIONS

Indirizzo

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

NIP

Tel.

E-mail

Sito web

1.4 Numero telefonico di emergenza

Telefono di emergenza

+48 42 631 47 24

Centro di Informazione Tossicologica (CIT), Łódź — attivo 24/7

2. Identificazione dei pericoli

3. Composizione/informazioni sugli ingredienti

Tipo di sostanza	sostanza pura
Numero CAS	58-85-5
Formula molecolare	$C_{10}H_{16}N_2O_3S$
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]}

Contatto con la pelle

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

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]}

Ingestione

NON indurre il vomito (salvo diversa indicazione medica). Sciacquare la bocca con acqua. Non somministrare nulla per via orale a una persona incosciente. Centro Antiveneni Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7). Numero di emergenza: 112. ^{[1][2]}

Sintomi ed effetti

Nessun sintomo specifico descritto in letteratura. ^{[1][2]}

Note per il medico

Trattamento sintomatico. Nessun antidoto specifico. ^{[1][2]}

Numeri di emergenza: CIT Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7) | Emergenza: 112

5. Misure antincendio

Mezzi di estinzione idonei	Adattare i mezzi di estinzione all'ambiente circostante. CO ₂ , polvere, schiuma. ^{[1][2]}
Mezzi di estinzione non idonei	Nessuna restrizione particolare. ^{[1][2]}
Pericoli specifici	Prodotti di decomposizione termica: CO, CO ₂ , NO _x , SO _x .
Raccomandazioni per gli addetti antincendio	Utilizzare un autorespiratore (SCBA). Tuta protettiva completa. ^{[1][2]}

6. Misure in caso di rilascio accidentale

Precauzioni personali	Utilizzare dispositivi di protezione individuale (vedere sezione 8). Evitare di respirare le polveri. ^{[1][2]}
Precauzioni ambientali	Impedire la penetrazione nelle fognature, nelle acque sotterranee e superficiali. ^{[1][2]}
Metodi di contenimento e bonifica	Raccogliere meccanicamente in contenitori idonei. Assorbimento: sabbia, vermiculite, farina fossile. Non spazzare a secco (formazione di polvere). ^{[1][2]}
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]}
Temperatura di conservazione	Conservare a temperatura ambiente (15-25°C) o secondo quanto indicato sull'etichetta. ^{[1][2]}
Umidità	Conservare in luogo asciutto (<60% RH). ^{[1][2]}

Luce

Proteggere dalla luce solare diretta. ^{[1][2]}

Materiali incompatibili

Ossidanti forti, Basi forti, Metalli non nobili (sviluppo di idrogeno).

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)

 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	 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	Solido	
Colore	Nessun dato disponibile.	
Odore	Nessun dato disponibile.	
pH (soluzione acquosa 1%)	Non applicabile	
Temp. di fusione	232°C ^[8]	
Punto di ebollizione	Nessun dato disponibile.	
Punto di infiammabilità	Nessun dato disponibile.	
Infiammabilità	Nessun dato disponibile.	
Limite inferiore e superiore di esplosività	Non applicabile	
Densità (20°C)	Nessun dato disponibile.	
Tensione di vapore	Nessun dato disponibile.	
Densità di vapore relativa	Non applicabile	
Viscosità cinematica	Non applicabile	
Temperatura di decomposizione	Nessun dato disponibile.	
Solubilità in acqua (20°C)	0.22 g/L, 25°C ^[8]	
Caratteristiche delle particelle	Nessun dato disponibile.	

Proprietà (punto 9.1)	Valore	Source
Coefficiente di ripartizione n-ottanolo/acqua (valore logaritmico)	0.3 ^[8]	
TPSA	104 Å ² ^[7]	
HBD / HBA	Nessun dato disponibile. / Nessun dato disponibile.	
Legami rotabili	Nessun dato disponibile.	
Massa molare	244.31 g/mol ^[7]	
Formula molecolare	C ₁₀ H ₁₆ N ₂ O ₃ S ^[7]	

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, CO ₂ , NO _x , SO _x .

11. Informazioni tossicologiche

LD50 (orale)	Nessun dato disponibile.
LD50 (cutanea)	Nessun dato disponibile.
LC50 (inalatoria)	Nessun dato disponibile.
Irritazione cutanea	Nessun dato disponibile.
Irritazione oculare	Nessun dato disponibile.
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)	Nessun dato disponibile.
STOT (esposizione ripetuta)	Nessun dato disponibile.
Pericolo in caso di aspirazione	Nessun dato disponibile.

12. Informazioni ecologiche

Tossicità acquatica	Nessun dato disponibile.
Persistenza / biodegradabilità	Nessun dato disponibile.
Potenziale di bioaccumulo	log Kow = 0.3 ^[8] . Basso potenziale di bioaccumulo (log Kow < 4,5 — criterio di screening PBT/vPvB secondo la guida ECHA R.11). ^{[10][11]}
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	Non classificato come pericoloso per l'ambiente ai fini del trasporto (nessun H400/H410/H411 nell'allegato VI CLP; nessun marchio di inquinante marino richiesto) ^[3]
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]
Data di verifica	2026-07-17

16. Altre informazioni

Stato giuridico della classificazione armonizzata: CLP — Reg. (CE) n. 1272/2008, Allegato VI (elenco armonizzato ECHA in vigore, alla data di emissione della scheda). Le voci con data di entrata in vigore successiva al 17.07.2026 omessi in quanto futuri (non ancora applicabili).

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

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

Cronologia delle versioni

v1 (17.07.2026) Elaborato sulla base della classificazione armonizzata ECHA (Allegato VI del CLP, ATP 23).

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: 2026-07-17.
- [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: 2026-07-17.
- [3] PE e Consiglio. Reg.(CE) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. GU 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] 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: 2026-07-17.

Collegamenti esterni

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

Nota legale: Il presente documento è stato generato automaticamente a partire da dati di PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC), Wikidata 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 redatto automaticamente sulla base della classificazione armonizzata dell'ECHA (allegato VI del regolamento CLP) e di banche dati fisico-chimiche pubbliche.

Autore: www.MolGod.org — piattaforma di schede di dati di sicurezza automatizzate (SDS).

Data di emissione: 17.07.2026 | Versione del documento: 1