

VEILIGHEIDSINFORMATIEBLAD / SAFETY DATA SHEET (SDS)

conform Verord. (EG) nr. 1907/2006 (REACH), Bijlage II — Verord. (EU) 2020/878

Datum: 17.07.2026 | Versie: 1 | NL

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

MOLAIRE MASSA
244.31

LOGP
0.3

1. Identificatie van de stof/het mengsel en van de vennootschap/onderneming

1.1 Naam van de stof	—
1.1 IUPAC-naam	5-[(3aS,4S,6aR)-2-oxo-1,3,3a,4,6,6a-hexahydrothieno[3,4-d]imidazol-4-yl]pentanoic acid
1.1 CAS-nummer	58-85-5
1.1 EG-nummer	Geen gegevens
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 Molecuulformule	C ₁₀ H ₁₆ N ₂ O ₃ S ^[7]
1.1 Molmassa	244.31 g/mol ^[7]
1.1 Exacte massa	—

1.2 Toepassingen

Voor laboratorium- en onderzoeksdoeleinden. Niet voor gebruik bij de productie van levensmiddelen, geneesmiddelen of cosmetica zonder de juiste vergunningen.

1.3 Gegevens van de leverancier

Naam	ADVANCED CHEMISTRY R&D SOLUTIONS
Adres	ul. Juliana Przybosa 8, 21-400 Łuków, Poland
Fiscaal nummer (NIP)	
Tel.	
E-mail	
Website	

1.4 Telefoonnummer voor noodgevallen

Noodtelefoon	+48 42 631 47 24
Toxicologisch Informatiecentrum (CIT), Łódź — 24/7 bereikbaar	

2. Identificatie van de gevaren

3. Samenstelling en informatie over de bestanddelen

Type stof	zuivere stof
CAS-nummer	58-85-5
Molecuulformule	$C_{10}H_{16}N_2O_3S$
Concentratie	≥99% (typische zuiverheid van reagentkwaliteit — te bevestigen door de specificatie van de leverancier)

4. Eerstehulpmaatregelen



Inademing

Breng de getroffen persoon in de frisse lucht. Houd de persoon in rust. Als de persoon niet ademt: kunstmatige beademing (uitsluitend gekwalificeerd personeel). ^{[1][2]}

Huidcontact

Verontreinigde kleding uittrekken. Huid spoelen met water en zeep (min. 15 minuten). ^{[1][2]}

Oogcontact

Ogen spoelen met stromend water (min. 15 minuten). Contactlenzen indien mogelijk verwijderen. Als de irritatie aanhoudt — raadpleeg een oogarts. ^{[1][2]}

Inslikken

GEEN braken opwekken (tenzij anders voorgeschreven door een arts). Mond spoelen met water. Geef nooit iets via de mond aan een bewusteloze persoon. Antigifcentrum Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7). Alarmnummer: 112. ^{[1][2]}

Symptomen en effecten

Geen specifieke symptomen beschreven in de literatuur. ^{[1][2]}

Informatie voor de arts

Symptomatische behandeling. Geen specifiek tegengif. ^{[1][2]}

Noodnummers: CIT Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7) | Noodgeval: 112

5. Brandbestrijdingsmaatregelen

Geschikte blusmiddelen	Blusmiddelen aanpassen aan de omgeving. CO ₂ , poeder, schuim. ^{[1][2]}
Ongeschikte blusmiddelen	Geen specifieke beperkingen. ^{[1][2]}
Specifieke gevaren	Producten van thermische ontleding: CO, CO ₂ , NO _x , SO _x .
Advies voor brandweerlieden	Gebruik onafhankelijke ademluchtapparatuur (SCBA). Volledig beschermend pak. ^{[1][2]}

6. Maatregelen bij het accidenteel vrijkomen van de stof

Persoonlijke voorzorgsmaatregelen	Gebruik persoonlijke beschermingsmiddelen (zie rubriek 8). Inademen van stof vermijden. ^{[1][2]}
Milieuvoorzorgsmaatregelen	Voorkom dat het in het riool, het grondwater en het oppervlaktewater terechtkomt. ^{[1][2]}
Methoden voor insluiting en reiniging	Mechanisch opnemen in geschikte containers. Absorptie: zand, vermiculiet, diatomeeënaarde. Niet droog vegen (stofvorming). ^{[1][2]}
Gerelateerde rubrieken	8; 13

7. Hantering en opslag

Voorzorgsmaatregelen

Werk in een zuurkast of met voldoende ventilatie. Verboden te eten, drinken en roken op de werkplek. ^{[1][2]}

Opslagtemperatuur	Bewaren bij kamertemperatuur (15-25°C) of zoals aangegeven op het etiket. ^{[1][2]}
Watergehalte	Bewaren op een droge plaats (<60% RH). ^{[1][2]}
Licht	Beschermen tegen direct zonlicht. ^{[1][2]}
Onverenigbare materialen	Sterke oxidatiemiddelen, Sterke basen, Onedele metalen (waterstofontwikkeling).

8. Maatregelen ter beheersing van blootstelling/persoonlijke bescherming

8.1 Controleparameters

NDS (Polen)	Geen NDS-waarde (grenswaarde) in de beschikbare werklijst — vóór gebruik controleren in de actuele MRPiPS-verordening; ga niet uit van het ontbreken van een grenswaarde.
OEL (EU)	EU-OEL-waarde niet geverifieerd in de beschikbare dataset — raadpleeg de IOELV/BOELV-richtlijnen; ga niet uit van de afwezigheid van een waarde.
DNEL	Geen gegevens beschikbaar.
PNEC	Geen gegevens beschikbaar.

8.2 Persoonlijke beschermingsmiddelen (PBM)

 Chemicaliënbestendige beschermende handschoenen EN ISO 374-1:2016+A1:2018 nitril (min. 0.11 mm)	 Gesloten veiligheidsbril of ruimzichtbril EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001	 Gesloten veiligheidsschoenen met teenbescherming EN ISO 20345:2022 (S2/S3)
--	--	---

9. Fysische en chemische eigenschappen

Eigenschap (punt 9.1)	Waarde	Bron
Fysische toestand	Vaste stof	
Kleur	Geen gegevens beschikbaar.	
Geur	Geen gegevens beschikbaar.	
pH (1% waterige oplossing)	Niet van toepassing	
Smeltpunt	232°C ^[8]	
Kookpunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Vlampunt	Geen gegevens beschikbaar.	
Ontvlambaarheid	Geen gegevens beschikbaar.	
Onderste en bovenste explosiegrens	Niet van toepassing	
Dichtheid (20°C)	Geen gegevens beschikbaar.	
Dampspanning	Geen gegevens beschikbaar.	
Relatieve dampdichtheid	Niet van toepassing	
Kinematische viscositeit	Niet van toepassing	
Ontledingstemperatuur	Geen gegevens beschikbaar.	

Eigenschap (punt 9.1)	Waarde	Bron
Wateroplosbaarheid (20°C)	0.22 g/L, 25°C ^[8]	
Deeltjeskenmerken	Geen gegevens beschikbaar.	
Verdelingscoëfficiënt n-octanol/water (logwaarde)	0.3 ^[8]	
TPSA	104 Å ² ^[7]	
HBD / HBA	Geen gegevens beschikbaar. / Geen gegevens beschikbaar.	
Roteerbare bindingen	Geen gegevens beschikbaar.	
Molaire massa	244.31 g/mol ^[7]	
Molecuulformule	C ₁₀ H ₁₆ N ₂ O ₃ S ^[7]	

10. Stabiliteit en reactiviteit

Reactiviteit	Stabiel onder normale opslag- en hanteringsomstandigheden.
Chemische stabiliteit	Thermisch stabiel onder de aanbevolen omstandigheden.
Gevaarlijke reacties	Geen gevaarlijke reacties bekend onder normale omstandigheden.
Te vermijden omstandigheden	Hoge temperaturen, direct zonlicht, vocht.
Onverenigbare materialen	Sterke oxidatiemiddelen, Sterke basen, Onedele metalen (waterstofontwikkeling).
Ontledingsproducten	Producten van thermische ontleding: CO, CO ₂ , NO _x , SO _x .

11. Toxicologische informatie

LD50 (oraal)	Geen gegevens beschikbaar.
LD50 (dermaal)	Geen gegevens beschikbaar.
LC50 (inhalatie)	Geen gegevens beschikbaar.
Huidirritatie	Geen gegevens beschikbaar.
Oogirritatie	Geen gegevens beschikbaar.
Sensibilisatie	Geen gegevens beschikbaar.
Mutageniteit	Geen gegevens beschikbaar.
Carcinogeniteit	Geen gegevens beschikbaar.
IARC-classificatie (carcinogeniteit)	Geen individuele IARC-monografie voor deze CAS — dit is geen bevestiging van de afwezigheid van kankerverwekkendheid (vgl. CLP/GHS-indeling in sectie 2).
Reproductietoxiciteit	Geen gegevens beschikbaar.
STOT (eenmalige blootstelling)	Geen gegevens beschikbaar.
STOT (herhaalde blootstelling)	Geen gegevens beschikbaar.
Aspiratiegevaar	Geen gegevens beschikbaar.

12. Ecologische informatie

Aquatische toxiciteit	Geen gegevens beschikbaar.
Persistentie / biologische afbreekbaarheid	Geen gegevens beschikbaar.
Bioaccumulatiepotentieel	log Kow = 0.3 [8]. Laag bioaccumulatiepotentieel (log Kow < 4,5 — PBT/zPzB-screeningscriterium volgens ECHA-richtsnoer R.11). [10][11]
Mobiliteit in de bodem	Geen gegevens beschikbaar.
PBT/vPvB-beoordeling	Onvoldoende gegevens om PBT/vPvB te beoordelen.
Hormoonontregelende eigenschappen	Geen informatie.

13. Instructies voor verwijdering

Verwijderingsmethode	Ter verwijdering overdragen aan erkende bedrijven overeenkomstig de nationale en lokale voorschriften. Niet in het riool lozen.
Afvalcode (EURAL)	16 05 06* — Laboratorium- en analysechemicaliën (bijv. chemische reagentia) die gevaarlijke stoffen bevatten. Verificatie van de EWC-code vereist. [9]
Verpakking	Gereinigde verpakkingen kunnen worden gerecycled. Verontreinigde verpakkingen moeten als gevaarlijk afval worden behandeld.

14. Informatie met betrekking tot het vervoer

UN-nummer	VERIFICATIE VEREIST — geen geverifieerde UN-toewijzing.
Milieugevaar	Niet ingedeeld als milieugevaarlijk voor transport (geen H400/H410/H411 in CLP bijlage VI; geen markering als mariene verontreiniging vereist) [3]
Bijzondere voorzorgsmaatregelen	Als gevaarlijke goederen behandelen volgens de toegewezen klasse (ADR/IMDG/IATA); de bij die klasse behorende voorzorgsmaatregelen toepassen.
GN/GS-code	GN/GS-code: verificatie vereist in de gecombineerde nomenclatuur van Eurostat.
Opmerkingen	Transportclassificatie niet geverifieerd. Ga niet uit van het ontbreken van beperkingen — controleer ADR/IMDG/IATA vóór verzending.

15. Regelgeving

SVHC-status	SVHC-status niet geverifieerd aan de hand van de beschikbare dataset — raadpleeg de actuele ECHA-kandidaatslijst; ga niet uit van afwezigheid. [1]
REACH Bijlage XIV	Niet geverifieerd aan de hand van de ECHA-autorisatielijst — controleer REACH Bijlage XIV. [1]
REACH Bijlage XVII	Niet bevestigd in de beschikbare dataset van Bijlage XVII — verifieer aan de hand van de actuele ECHA-lijst vóór het in de handel brengen; ga niet uit van de afwezigheid van een beperking. [1]
Verificatiedatum	2026-07-17

16. Overige informatie

Juridische status van de geharmoniseerde indeling: CLP — Verord. (EG) nr. 1272/2008, Bijlage VI (actuele geharmoniseerde ECHA-lijst, per datum van afgifte van het blad). Vermeldingen met een datum van inwerkingtreding na 17.07.2026 weggelaten als toekomstig (nog niet van toepassing).

Gegevens automatisch geaggregeerd uit openbare referentiedatabanken (PubChem, ECHA, NIST e.a.).

Afkortingen

ADR	Europese Overeenkomst betreffende het internationale vervoer van gevaarlijke goederen over de weg
ATE	Schatting van de acute toxiciteit (Acute Toxicity Estimate)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Classification, Labelling and Packaging (Verord. 1272/2008)

CMR	Kankerverwekkend, mutageen, giftig voor de voortplanting
DNEL	Afgeleide dosis zonder effect (Derived No-Effect Level)
EC	European Community number
EPI	Persoonlijke beschermingsmiddelen
GHS	Wereldwijd geharmoniseerd systeem (Globally Harmonized System)
IATA	Internationale Luchtvervoersvereniging
IMDG	Internationale Code voor het vervoer van gevaarlijke goederen over zee
VIB	Veiligheidsinformatieblad (Safety Data Sheet)
LC50	Letale concentratie 50% (Lethal Concentration)
LD50	Letale dosis 50% (Lethal Dose)
NDS	Maximaal toelaatbare concentratie (werkplek, PL)
NDSch	NDS kortetermijn (PL)
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	Persistent, bioaccumulerend en toxisch
PNEC	Voorspelde concentratie zonder effect (Predicted No-Effect Concentration)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Verord. (EG) 1907/2006)
SDS	Safety Data Sheet
STOT	Specifieke doelorgaantoxiciteit (Specific Target Organ Toxicity)
SVHC	Zeer zorgwekkende stof (Substance of Very High Concern)
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	Zeer persistent en zeer bioaccumulerend

Versiegeschiedenis

v1 (17.07.2026)	Opgesteld op basis van de geharmoniseerde ECHA-indeling (Bijlage VI bij CLP, ATP 23).
------------------------	---

Referenties

- [1] EP en Raad. Verord.(EG) nr. 1907/2006 (REACH). Art.31, Bijlage II. PB EU L 396/2006. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj> Accessed: 2026-07-17.
- [2] Europese Commissie. Verord.(EU) 2020/878 — wijziging van Bijlage II REACH. PB EU L 203/2020. Vanaf 01.01.2023. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj> Accessed: 2026-07-17.
- [3] EP en Raad. Verord.(EG) 1272/2008 (CLP) + ATP 23. PB EU 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://hcbp.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] MRIPS-verordening van 12.06.2018 — NDS/NDN. Staatsblad 2024 pos. 1017. URL: <https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017> Accessed: 2026-07-17.

Externe links

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

Juridische kennisgeving: Dit document is automatisch gegenereerd op basis van gegevens van PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC), Wikidata en andere openbare databanken. Het VERVANGT GEEN goedgekeurd veiligheidsinformatieblad (VIB) conform Verordening (EG) nr. 1907/2006 (REACH). Controleer de gegevens vóór gebruik van de stof aan de hand van het actuele VIB van de fabrikant.

Generator: Document automatisch samengesteld op basis van de geharmoniseerde ECHA-indeling (bijlage VI bij de CLP-verordening) en openbare fysisch-chemische databanken.

CONCEPT