

# 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

## 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**

$C_{10}H_{16}N_2O_3S$

MOLMASSE  
**244.31**

LOGP  
**0.30**  
(XLogP3,  
PubChem)

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

|                  |                                                                                        |
|------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|
| 1.1 Stoffname    | —                                                                                      |
| 1.1 IUPAC-Name   | 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    | Keine Daten                                                                            |
| 1.1 PubChem CID  | 171548                                                                                 |
| 1.1 InChIKey     | YBJHBAHKTYGVGT-ZKWXMUHSA-N                                                             |
| 1.1 SMILES       | <chem>C1[C@H]2[C@@H]([C@@H](S1)CCCC(=O)O)NC(=O)N2</chem>                               |
| 1.1 Summenformel | $C_{10}H_{16}N_2O_3S$                                                                  |
| 1.1 Molmasse     | 244.31 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    | 58-85-5               |
| Summenformel  | $C_{10}H_{16}N_2O_3S$ |
| Konzentration | >=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 <sub>2</sub> , Pulver, Schaum.                        |
| Ungeeignete Löschmittel          | Keine besonderen Einschränkungen.                                                              |
| Besondere Gefahren               | Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , SO <sub>x</sub> . |
| 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.                                                  |

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

## 8. Begrenzung und Überwachung der Exposition/Persönliche Schutzausrüstung

### 8.1 Zu überwachende Parameter

|                                            |                                                                                                                                                                              |
|--------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Arbeitsplatzgrenzwert — NDS (Polen)</b> | Kein NDS-Wert (Arbeitsplatzgrenzwert) im verfügbaren Verzeichnis — vor Verwendung in der aktuellen MRPIPS-Verordnung überprüfen; nicht vom Fehlen eines Grenzwerts ausgehen. |
| <b>OEL (EU)</b>                            | Der EU-OEL-Wert wurde anhand des verfügbaren Datenbestands nicht überprüft — die IOELV/BOELV-Richtlinien prüfen; das Fehlen eines Wertes nicht voraussetzen.                 |
| <b>DNEL</b>                                | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                                       |
| <b>PNEC</b>                                | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                                       |

### 8.2 Persönliche Schutzausrüstung (PSA)

|                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                                             |                                                                                                                                                                                      |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  <p><b>Chemikalienbeständige<br/>Schutzhandschuhe</b><br/>EN ISO 374-1:2016+A1:2018<br/><b>Nitril (min. 0.11 mm)</b></p> |  <p><b>Geschlossene<br/>Schutzbrille oder<br/>Korbbrille</b><br/>EN ISO 16321-1:2022 / EN<br/>166:2001</p> |  <p><b>Geschlossene<br/>Sicherheitsschuhe mit<br/>Zehenschutz</b><br/>EN ISO 20345:2022 (S2/S3)</p> |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

## 9. Physikalische und chemische Eigenschaften

| Eigenschaft (Pkt. 9.1)                 | Wert                                            | Quelle        |
|----------------------------------------|-------------------------------------------------|---------------|
| <b>Aggregatzustand</b>                 | Feststoff                                       |               |
| <b>Farbe</b>                           | Keine Daten verfügbar.                          |               |
| <b>Geruch</b>                          | Keine Daten verfügbar.                          |               |
| <b>pH-Wert (1%ige wässrige Lösung)</b> | Keine Daten verfügbar.                          |               |
| <b>Schmelzpunkt</b>                    | 232°C                                           |               |
| <b>Siedepunkt</b>                      | Keine Daten verfügbar.                          |               |
| <b>Flammpunkt</b>                      | Keine Daten verfügbar.                          |               |
| <b>Dichte (20°C)</b>                   | Keine Daten verfügbar.                          |               |
| <b>Dampfdruck (20°C)</b>               | Keine Daten verfügbar.                          |               |
| <b>Wasserlöslichkeit (20°C)</b>        | Keine Daten verfügbar.                          |               |
| <b>log Kow (XLogP3)</b>                | 0.3                                             |               |
| <b>TPSA</b>                            | 104 Å²                                          | PubChem (NIH) |
| <b>HBD / HBA</b>                       | Keine Daten verfügbar. / Keine Daten verfügbar. |               |
| <b>Frei drehbare Bindungen</b>         | Keine Daten verfügbar.                          |               |

| Eigenschaft (Pkt. 9.1) | Wert                                                            | Quelle        |
|------------------------|-----------------------------------------------------------------|---------------|
| <b>Molmasse</b>        | 244.31 g/mol                                                    | PubChem (NIH) |
| <b>Summenformel</b>    | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S | PubChem (NIH) |

## 10. Stabilität und Reaktivität

|                                   |                                                                                                |
|-----------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Reaktivität</b>                | Stabil unter normalen Lager- und Handhabungsbedingungen.                                       |
| <b>Chemische Stabilität</b>       | Thermisch stabil unter empfohlenen Bedingungen.                                                |
| <b>Gefährliche Reaktionen</b>     | Keine gefährlichen Reaktionen unter normalen Bedingungen bekannt.                              |
| <b>Zu vermeidende Bedingungen</b> | Hohe Temperaturen, direkte Sonneneinstrahlung, Feuchtigkeit.                                   |
| <b>Unverträgliche Materialien</b> | Starke Oxidationsmittel, starke Basen, Unedle Metalle (Wasserstoffentwicklung).                |
| <b>Zersetzungsprodukte</b>        | Produkte der thermischen Zersetzung: CO, CO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , SO <sub>x</sub> . |

## 11. Toxikologische Angaben

|                                         |                                                                                                                                                         |
|-----------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>LD50 (oral)</b>                      | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>LD50 (dermal)</b>                    | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>LC50 (inhalativ)</b>                 | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>Hautreizung</b>                      | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>Augenreizung</b>                     | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>Sensibilisierung</b>                 | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>Mutagenität</b>                      | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>Karzinogenität</b>                   | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>IARC-Einstufung (Karzinogenität)</b> | Keine individuelle IARC-Monographie für diese CAS — dies ist keine Bestätigung des Fehlens von Karzinogenität (vgl. CLP/GHS-Einstufung in Abschnitt 2). |
| <b>Reproduktionstoxizität</b>           | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>STOT — einmalige Exposition</b>      | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>STOT — wiederholte Exposition</b>    | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |
| <b>Aspirationsgefahr</b>                | Keine Daten verfügbar.                                                                                                                                  |

## 12. Umweltbezogene Angaben

|                                              |                                                 |
|----------------------------------------------|-------------------------------------------------|
| <b>Gewässertoxizität</b>                     | Keine Daten verfügbar.                          |
| <b>Persistenz / biologische Abbaubarkeit</b> | Keine Daten verfügbar.                          |
| <b>Bioakkumulationspotenzial</b>             | LogP = 0.3. Geringes Bioakkumulationspotenzial. |
| <b>Mobilität im Boden</b>                    | Keine Daten verfügbar.                          |
| <b>PBT-/vPvB-Beurteilung</b>                 | Unzureichende Daten zur Bewertung von PBT/vPvB. |
| <b>Endokrinschädliche Eigenschaften</b>      | Keine Informationen.                            |

## 13. Hinweise zur Entsorgung

|                              |                                                                                                                                                   |
|------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Entsorgungsverfahren</b>  | Zur Entsorgung an zugelassene Unternehmen gemäß nationalen und lokalen Vorschriften übergeben. Nicht in die Kanalisation einleiten.               |
| <b>Abfallschlüssel (EWC)</b> | 16 05 06* — Labor- und Analysechemikalien (z. B. chemische Reagenzien), die gefährliche Stoffe enthalten. Überprüfung des EWC-Codes erforderlich. |
| <b>Verpackungen</b>          | Gereinigte Verpackungen können recycelt werden. Kontaminierte Verpackungen sind als gefährlicher Abfall zu behandeln.                             |

## 14. Angaben zum Transport

|                                     |                                                                                                                                    |
|-------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>UN-Nummer</b>                    | ÜBERPRÜFUNG ERFORDERLICH — keine verifizierte UN-Zuordnung.                                                                        |
| <b>Umweltgefahr</b>                 | Keine Umweltgefahr gemäß GHS-Einstufung angezeigt. Verifizierung erforderlich.                                                     |
| <b>Besondere Vorsichtsmaßnahmen</b> | Überprüfung erforderlich.                                                                                                          |
| <b>KN/HS-Code</b>                   | CN/HS-Code: Überprüfung in der Eurostat Combined Nomenclature erforderlich.                                                        |
| <b>Anmerkungen</b>                  | Transportklassifizierung nicht überprüft. Das Fehlen von Beschränkungen nicht voraussetzen — vor dem Versand ADR/IMDG/IATA prüfen. |

## 15. Rechtsvorschriften

|                          |                                                                                                                                                                       |
|--------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>SVHC-Status</b>       | SVHC-Status nicht gegen die vollständige ECHA-Kandidatenliste verifiziert (Prüfung erforderlich) — ECHA-Kandidatenliste prüfen                                        |
| <b>REACH Anhang XIV</b>  | Nicht gegen die ECHA-Zulassungsliste verifiziert — REACH Anhang XIV prüfen.                                                                                           |
| <b>REACH Anhang XVII</b> | Im verfügbaren Anhang-XVII-Datensatz nicht bestätigt — vor dem Inverkehrbringen anhand der aktuellen ECHA-Liste prüfen; nicht vom Fehlen einer Beschränkung ausgehen. |
| <b>Prüfdatum</b>         | 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

|              |                                                                                                  |
|--------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>ADR</b>   | Europäisches Übereinkommen über die internationale Beförderung gefährlicher Güter auf der Straße |
| <b>ATE</b>   | Schätzwert Akuter Toxizität (Acute Toxicity Estimate)                                            |
| <b>CAS</b>   | Chemical Abstracts Service                                                                       |
| <b>CLP</b>   | Classification, Labelling and Packaging (Verordnung (EG) 1272/2008)                              |
| <b>CMR</b>   | Karzinogen, mutagen, reproduktionstoxisch                                                        |
| <b>DNEL</b>  | Abgeleitete Expositionshöhe ohne Beeinträchtigung (DNEL)                                         |
| <b>EC</b>    | European Community number                                                                        |
| <b>EPI</b>   | Persönliche Schutzausrüstung                                                                     |
| <b>GHS</b>   | Global Harmonisiertes System (GHS)                                                               |
| <b>IATA</b>  | Internationaler Luftverkehrsverband (IATA)                                                       |
| <b>IMDG</b>  | Internationaler Code für die Beförderung gefährlicher Güter mit Seeschiffen (IMDG)               |
| <b>SDB</b>   | Sicherheitsdatenblatt (Safety Data Sheet)                                                        |
| <b>LC50</b>  | Letale Konzentration, 50 % (Lethal Concentration)                                                |
| <b>LD50</b>  | Letale Dosis, 50 % (Lethal Dose)                                                                 |
| <b>NDS</b>   | Maximal zulässige Konzentration (Arbeitsplatz, PL)                                               |
| <b>NDSch</b> | Kurzzeitgrenzwert (PL)                                                                           |
| <b>OEL</b>   | Occupational Exposure Limit                                                                      |
| <b>PBT</b>   | Persistent, bioakkumulierbar und toxisch                                                         |
| <b>PNEC</b>  | Abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (PNEC)                                                   |
| <b>REACH</b> | Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Verordnung (EG) 1907/2006) |

|             |                                            |
|-------------|--------------------------------------------|
| <b>SDS</b>  | Safety Data Sheet                          |
| <b>STOT</b> | Spezifische Zielorgan-Toxizität (STOT)     |
| <b>SVHC</b> | Besonders besorgniserregender Stoff (SVHC) |
| <b>TPSA</b> | Topological Polar Surface Area             |
| <b>vPvB</b> | Sehr persistent und sehr bioakkumulierbar  |

### Versionshistorie

|                        |                                                                                                   |
|------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>v3 (15.07.2026)</b> | 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/171548> Data: 2026-07-11 10:40:56.
- [8] PubChem (NIH). NIH-Datenbank chemischer Verbindungen. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> Data: 2026-07-15 10:42:37.
- [9] ChEMBL (EBI). EMBL-EBI-Bioaktivitätsdatenbank. URL: <https://www.ebi.ac.uk/chembl> Data: 2026-07-15 10:42:43.
- [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=58-85-5>  
 ChEMBL: [https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound\\_report\\_card/CHEMBL857](https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL857)

**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](http://www.MolGod.org) — Plattform für automatisierte Sicherheitsdatenblätter (SDS).

Ausgabedatum: 15.07.2026 | Dokumentversion: 3