

# 安全数据表 / SAFETY DATA SHEET (SDS)

符合法规 (EC) 1907/2006 (REACH) 附件 II——法规 (EU) 2020/878

日期：17.07.2026 | 版本：1 | ZH

## 7,8-dimethyl-10-[(2S,3S,4R)-2,3,4,5-tetrahydroxypentyl]benzo[g]pteridine-2,4-dione

7,8-dimethyl-10-[(2S,3S,4R)-2,3,4,5-tetrahydroxypentyl]benzo[g]pteridine-2,4-dione

CAS 83-88-5

C<sub>17</sub>H<sub>20</sub>N<sub>4</sub>O<sub>6</sub>



摩尔质量  
376.40

LOGP  
-1.5

### 1. 物质/混合物和公司/企业的标识

|                 |                                                                                    |
|-----------------|------------------------------------------------------------------------------------|
| 1.1 物质名称        | —                                                                                  |
| 1.1 IUPAC名称     | 7,8-dimethyl-10-[(2S,3S,4R)-2,3,4,5-tetrahydroxypentyl]benzo[g]pteridine-2,4-dione |
| 1.1 CAS号        | 83-88-5                                                                            |
| 1.1 EC号         | 无数据                                                                                |
| 1.1 PubChem CID | 493570                                                                             |
| 1.1 InChIKey    | AUNGANRZJHBGPY-SCRDCRAPSA-N                                                        |
| 1.1 SMILES      | CC1=CC2=C(C=C1C)N(C3=NC(=O)NC(=O)C3=N2)C[C@@H]([C@@H]([C@@H](CO)O)O)O              |
| 1.1 分子式         | C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub> <sup>[7]</sup>       |
| 1.1 摩尔质量        | 376.4 g/mol <sup>[7]</sup>                                                         |
| 1.1 精确质量        | —                                                                                  |

#### 1.2 用途

用于实验室和研究目的。未经适当授权，不得用于食品、药品或化妆品的生产。

#### 1.3 供应商信息

|          |                                              |
|----------|----------------------------------------------|
| 名称       | ADVANCED CHEMISTRY R&D SOLUTIONS             |
| 地址       | ul. Juliana Przybosa 8, 21-400 Łuków, Poland |
| 税号 (NIP) |                                              |
| 电话       |                                              |
| 电子邮件     |                                              |
| 网站       |                                              |

#### 1.4 应急电话号码

|                           |                  |
|---------------------------|------------------|
| 应急电话                      | +48 42 631 47 24 |
| 毒理学信息中心 (CIT)，罗兹 — 24/7可用 |                  |

### 2. 危险性识别

### 3. 成分/组成信息

|      |                            |
|------|----------------------------|
| 物质类型 | 纯物质                        |
| CAS号 | 83-88-5                    |
| 分子式  | $C_{17}H_{20}N_4O_6$       |
| 浓度   | ≥99% (典型试剂级纯度 — 须由供应商规格确认) |

### 4. 急救措施



#### 吸入

将受害者移至新鲜空气处。保持休息。如无呼吸：进行人工呼吸（仅限合格人员）。<sup>[1][2]</sup>

#### 皮肤接触

脱去受污染的衣物。用肥皂和水冲洗皮肤（至少15分钟）。<sup>[1][2]</sup>

#### 眼睛接触

用流动水冲洗眼睛（至少15分钟）。如可能，取出隐形眼镜。如刺激持续——咨询眼科医生。<sup>[1][2]</sup>

#### 食入

禁止催吐（除非医生指示）。用水漱口。切勿对失去意识者经口给予任何东西。罗兹中毒中心：+48 42 631 47 24（24/7）。紧急电话：112。<sup>[1][2]</sup>

#### 症状和影响

文献中未描述特定症状。<sup>[1][2]</sup>

#### 给医生的建议

对症治疗。无特效解毒剂。<sup>[1][2]</sup>

应急电话：CIT Łódź: +48 42 631 47 24 (24/7) | 紧急情况：112

### 5. 消防措施

|          |                                                        |
|----------|--------------------------------------------------------|
| 适用的灭火剂   | 根据周围环境调整灭火介质。CO <sub>2</sub> 、干粉、泡沫。 <sup>[1][2]</sup> |
| 不合适的灭火介质 | 无特殊限制。 <sup>[1][2]</sup>                               |
| 特殊危害     | 热分解产物：CO, CO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> .          |
| 消防员建议    | 使用自给式呼吸器（SCBA）。全套防护服。 <sup>[1][2]</sup>                |

### 6. 泄漏应急处理

|         |                                                     |
|---------|-----------------------------------------------------|
| 个人防护措施  | 使用个人防护装备（见第8节）。避免吸入粉尘。 <sup>[1][2]</sup>            |
| 环境预防措施  | 防止进入下水道、地下水和地表水。 <sup>[1][2]</sup>                  |
| 围堵和清理方法 | 机械收集至合适容器。吸附：砂、蛭石、硅藻土。请勿干扫（产生粉尘）。 <sup>[1][2]</sup> |
| 相关章节    | 8; 13                                               |

### 7. 操作处置与储存

|      |                                                  |
|------|--------------------------------------------------|
| 预防措施 | 在通风橱或通风良好的地方工作。工作区域禁止进食、饮水或吸烟。 <sup>[1][2]</sup> |
| 储存温度 | 在室温（15-25°C）下储存，或按标签指示储存。 <sup>[1][2]</sup>      |
| 含水量  | 在干燥处储存（<60% RH）。 <sup>[1][2]</sup>               |
| 光    | 避免阳光直射。 <sup>[1][2]</sup>                        |
| 禁配物  | 强氧化剂.                                            |

## 8. 暴露控制/个人防护

### 8.1 控制参数

|                 |                                                          |
|-----------------|----------------------------------------------------------|
| <b>NDS</b> (波兰) | 现有工作清单中无 NDS (职业接触限值) — 使用前请在现行 MRPiPS 法规中核实; 不得假定不存在限值。 |
| <b>OEL</b> (欧盟) | 欧盟职业接触限值 (OEL) 未在可用数据集中验证——请检查IOELV/BOELV指令; 不要假定无值。     |
| <b>DNEL</b>     | 无可用数据。                                                   |
| <b>PNEC</b>     | 无可用数据。                                                   |

### 8.2 个人防护装备 (PPE)



## 9. 物理和化学性质

| 性质 (第9.1项)       | 值                                                                                                                            | 来源 |
|------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 物态               | 固体                                                                                                                           |    |
| 颜色               | Fine orange-yellow needles from 2N acetic acid, alcohol, water, or pyridine ... three different crystal forms <sup>[7]</sup> |    |
| 气味               | Slight odor <sup>[7]</sup>                                                                                                   |    |
| pH值 (1%水溶液)      | 不适用                                                                                                                          |    |
| 熔点               | 280°C <sup>[8]</sup>                                                                                                         |    |
| 沸点               | 无可用数据。                                                                                                                       |    |
| 闪点               | 无可用数据。                                                                                                                       |    |
| 易燃性              | 无可用数据。                                                                                                                       |    |
| 上下爆炸极限/易燃极限      | 不适用                                                                                                                          |    |
| 密度 (20°C)        | 无可用数据。                                                                                                                       |    |
| 蒸气压              | 无可用数据。                                                                                                                       |    |
| 相对蒸气密度           | 不适用                                                                                                                          |    |
| 运动黏度             | 不适用                                                                                                                          |    |
| 分解温度             | 无可用数据。                                                                                                                       |    |
| 水溶性 (20°C)       | 0.1 g/L, 25°C <sup>[8]</sup>                                                                                                 |    |
| 颗粒特征             | 无可用数据。                                                                                                                       |    |
| 辛醇 - 水分配系数 (对数值) | -1.5 <sup>[8]</sup>                                                                                                          |    |
| TPSA             | 155 Å <sup>2</sup> <sup>[7]</sup>                                                                                            |    |
| HBD / HBA        | 无可用数据。 / 无可用数据。                                                                                                              |    |

| 性质（第9.1项） | 值                                                                            | 来源 |
|-----------|------------------------------------------------------------------------------|----|
| 可旋转键      | 无可用数据。                                                                       |    |
| 摩尔质量      | 376.4 g/mol <sup>[7]</sup>                                                   |    |
| 分子式       | C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub> <sup>[7]</sup> |    |

## 10. 稳定性和反应性

|        |                                               |
|--------|-----------------------------------------------|
| 反应性    | 在正常储存和使用条件下稳定。                                |
| 化学稳定性  | 在推荐条件下热稳定。                                    |
| 危险反应   | 正常条件下无已知危险反应。                                 |
| 应避免的条件 | 高温、直射阳光、湿气。                                   |
| 禁配物    | 强氧化剂。                                         |
| 分解产物   | 热分解产物：CO, CO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> 。 |

## 11. 毒理学信息

|                     |                                             |
|---------------------|---------------------------------------------|
| <b>LD50</b> （经口）    | 无可用数据。                                      |
| <b>LD50</b> （经皮）    | 无可用数据。                                      |
| <b>LC50</b> （吸入）    | 无可用数据。                                      |
| 皮肤刺激性               | 无可用数据。                                      |
| 眼睛刺激性               | 无可用数据。                                      |
| 致敏性                 | 无可用数据。                                      |
| 致突变性                | 无可用数据。                                      |
| 致癌性                 | 无可用数据。                                      |
| <b>IARC</b> 分类（致癌性） | 该CAS号无单独的IARC专著——这并不确认无致癌性（参见第2节CLP/GHS分类）。 |
| 生殖毒性                | 无可用数据。                                      |
| <b>STOT</b> ——单次暴露  | 无可用数据。                                      |
| <b>STOT</b> ——重复暴露  | 无可用数据。                                      |
| 吸入危害                | 无可用数据。                                      |

## 12. 生态学信息

|                    |                                                                                                                 |
|--------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 水生毒性               | 无可用数据。                                                                                                          |
| 持久性/生物降解性          | 无可用数据。                                                                                                          |
| 生物累积性              | log Kow = -1.5 <sup>[8]</sup> 。生物累积潜力低（log Kow < 4.5 — 依据 ECHA 指南 R.11 的 PBT/vPvB 筛查标准）。<br><sup>[10][11]</sup> |
| 土壤中的迁移性            | 无可用数据。                                                                                                          |
| <b>PBT/vPvB</b> 评估 | 数据不足以评估PBT/vPvB。                                                                                                |
| 内分泌干扰特性            | 无信息。                                                                                                            |

## 13. 废物处置

|                    |                                                                  |
|--------------------|------------------------------------------------------------------|
| 处置方法               | 根据国家和地方法规，交由有资质的承包商进行处置。不得排入下水道。                                 |
| 废物代码（ <b>EW</b> C） | 16 05 06* — 实验室和分析用化学品（例如化学试剂）含有危险物质。需要验证 EWC 代码。 <sup>[9]</sup> |
| 包装                 | 清洁过的包装可回收。受污染的包装必须作为危险废物处理。                                      |

## 14. 运输信息

|              |                       |
|--------------|-----------------------|
| <b>UN</b> 编号 | 需要核实 — 无经核实的 UN 编号分配。 |
|--------------|-----------------------|

|         |                                                                     |
|---------|---------------------------------------------------------------------|
| 环境危害    | 运输方面未分类为环境危害物（CLP 附件 VI 中无 H400/H410/H411；无需海洋污染物标记） <sup>[3]</sup> |
| 特殊预防措施  | 按分配类别（ADR/IMDG/IATA）作为危险货物处理；采取该类别相应的预防措施。                          |
| CN/HS编码 | CN/HS 编码：需在 Eurostat 组合税则中核实。                                       |
| 备注      | 运输分类未验证。不要假设没有限制——发货前请检查ADR/IMDG/IATA。                              |

15. 法规信息

|               |                                                               |
|---------------|---------------------------------------------------------------|
| SVHC状态        | 未对照可用数据集核实 SVHC 状态 — 请查阅最新的 ECHA 候选清单；请勿假定不存在。 <sup>[1]</sup> |
| REACH 附件 XIV  | 未对照 ECHA 授权清单进行核实 — 请查阅 REACH 附件 XIV。 <sup>[1]</sup>          |
| REACH 附件 XVII | 在现有附件XVII数据集中未确认——在投放市场前请根据当前ECHA清单验证；不要假设无限制。 <sup>[1]</sup> |
| 验证日期          | 2026-07-17                                                    |

16. 其他信息

协调分类的法律状态：CLP——(EC) 第 1272/2008 号法规，附件 VI（ECHA 现行协调清单，截至卡片签发之日的状态）。生效日晚于17.07.2026因尚未生效而被省略。

数据自动聚合自公共参考数据库（PubChem、ECHA、NIST等）。

| 缩写    |                                  |
|-------|----------------------------------|
| ADR   | 欧洲关于危险货物国际公路运输的协定                |
| ATE   | 急性毒性估计                           |
| CAS号  | Chemical Abstracts Service       |
| CLP   | 分类、标签和包装（(EC) 1272/2008法规）       |
| CMR   | 致癌性、致突变性、生殖毒性                    |
| DNEL  | 衍生无效应水平                          |
| EC    | European Community number        |
| EPI   | 个人防护装备                           |
| GHS   | 全球统一制度                           |
| IATA  | 国际航空运输协会                         |
| IMDG  | 国际海运危险货物规则                       |
| 安全数据表 | 安全数据表                            |
| LC50  | 半数致死浓度                           |
| LD50  | 半数致死剂量                           |
| NDS   | 最高容许浓度（工作场所，波兰）                  |
| NDSch | 短时 NDS                           |
| OEL   | Occupational Exposure Limit      |
| PBT   | 持久性、生物累积性和毒性                     |
| PNEC  | 预测无效应浓度                          |
| REACH | 化学品注册、评估、许可和限制（(EC) 1907/2006法规） |
| SDS   | Safety Data Sheet                |
| STOT  | 特定靶器官毒性                          |
| SVHC  | 高度关注物质                           |
| TPSA  | Topological Polar Surface Area   |

## 版本历史

## v1 (17.07.2026)

根据 ECHA 协调分类 (CLP 附件 VI, ATP 23) 编制。

## 参考文献

- [1] 欧洲议会和理事会。法规(EC) 第1907/2006号 (REACH)。第31条, 附件II。欧盟官方公报 L 396/2006。 URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj> Accessed: 2026-07-17.
- [2] 欧盟委员会。法规(EU) 2020/878 — 修订REACH附件II。欧盟官方公报 L 203/2020。自01.01.2023起。 URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj> Accessed: 2026-07-17.
- [3] 欧洲议会和理事会。法规(EC) 1272/2008 (CLP) + ATP 23。欧盟官方公报 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/493570> 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] MRIPS 2018年6月12日条例 — NDS/NDN。法律公报 2024 第1017项。 URL: <https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017> Accessed: 2026-07-17.

## 外部链接

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=83-88-5>ChEMBL: [https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound\\_report\\_card/CHEMBL1534](https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL1534)

**法律声明：** 本文件根据 PubChem (NIH)、ECHA、NIST WebBook、ChemSpider (RSC)、Wikidata 及其他公共数据库的数据自动生成。本文件不能替代符合法规 (EC) No 1907/2006 (REACH) 的正式安全数据表 (SDS)。使用该物质前，请对照制造商现行的安全数据表核实数据。

**生成器：** 本文件依据 ECHA 协调分类 (CLP 法规附件 VI) 及公共理化数据库自动编制。

**作者：** [www.MolGod.org](http://www.MolGod.org) — 自动化安全数据表 (SDS) 平台。

**发布日期：** 17.07.2026 | 文件版本：1