

N-phenylacetyl-L-prolylglycine ethyl ester

ethyl 2-[[[(2S)-1-(2-phenylacetyl)pyrrolidine-2-carbonyl]amino]acetate

CAS 157115-85-0

CAS 157115-85-0

C17H22N2O4

EC 839-170-3

MASA MOLOWA

318.40

1. Identyfikacja substancji/mieszaniny i identyfikacja przedsiębiorstwa

1.1 Nazwa substancji (PL)N-phenylacetyl-L-prolylglycine ethyl ester

1.1 Nazwa IUPACethyl 2-[[[(2S)-1-(2-phenylacetyl)pyrrolidine-2-carbonyl]amino]acetate

1.1 Numer CAS157115-85-0

1.1 Numer EC839-170-3

1.1 PubChem CID180496

1.1 InChIKeyPJNSMUBMSNAEEN-AWEZNOCLSA-N

1.1 SMILESCCOC(=O)CNC(=O)[C@@H]1CCCN1C(=O)CC2=CC=CC=C2

1.1 Wzór sumarycznyC17H22N2O4

1.1 Masa molowa318.4 g/mol

1.1 Masa dokładna—

1.2 Zastosowania

Do celow laboratoryjnych i badawczych. Nie do uzytku w produkcji zywnosci, lekow ani kosmetykow bez odpowiednich zezwolen.

1.3 Dane dostawcy

Dane dostawcy nie zostaly skonfigurowane w panelu admina MOL-GOD.

1.4 Numer telefonu alarmowego

Telefon alarmowy+48 42 657 99 00

Centrum Informacji Toksykologicznej (CIT), Lodz — czynne 24/7

2. Identyfikacja zagrożeń

3. Skład/informacja o składnikach

Typ substancji: pure

Numer CAS: 157115-85-0

Numer EC: 839-170-3

Wzór sumaryczny: C₁₇H₂₂N₂O₄

Stężenie: >=99%

4. Środki pierwszej pomocy



Wdychanie

Przenieść poszkodowanego na świeże powietrze. Zapewnić spokój. Jeśli poszkodowany nie oddycha: sztuczne oddychanie (tylko wykwalifikowany personel).

Kontakt ze skórą

Zdjąć skażone ubranie. Spłukać skórę wodą z mydłem (min. 15 minut).

Kontakt z oczami

Przemyć oczy bieżącą wodą (min. 15 minut). Usunąć soczewki kontaktowe jeśli możliwe. Jeżeli podrażnienie utrzymuje się — konsultacja okulistyczna.

Połknięcie

NIE wywoływać wymiotów (chyba że lekarz zaleci inaczej). Wypłukać usta wodą. Nie podawać niczego doustnie osobie nieprzytomnej. CIT Łódź: +48 42 657 99 00 (24/7). Telefon ratunkowy: 112.

Objawy i skutki

Brak specyficznych objawów opisanych w literaturze.

Informacje dla lekarza

Leczenie objawowe. Brak swoistego antidotum.

Telefony alarmowe: CIT Łódź: +48 42 657 99 00 (24/7) | Ratunkowy: 112

5. Postępowanie w przypadku pożaru

Odpowiednie środki gaśnicze Dostosować środki gaśnicze do otoczenia. CO₂, proszek, piana.

Nieodpowiednie środki gaśnicze Brak szczególnych ograniczeń.

Zagrożenia szczególne Produkty rozkładu termicznego: CO, CO₂, NO_x.

Wskazówki dla strażaków Użyć aparatu oddechowego (SCBA). Pełny strój ochronny.

6. Postępowanie w przypadku niezamierzonego uwolnienia do środowiska

Środki ostrożności indywidualne Stosować środki ochrony indywidualnej (patrz Sekcja 8). Unikać wdychania pyłów/par.

Ochrona środowiska Zapobiec przedostaniu się do kanalizacji, wód gruntowych i powierzchniowych.

Metody ograniczania i oczyszczania Zebrać mechanicznie do odpowiednich pojemników. Absorpcja: piasek, vermikulit, ziemia okrzemkowa. Nie zmiatać na sucho (pylenie).

Odniesienie do sekcji [8,13]

7. Postępowanie z substancjami i mieszaninami oraz ich magazynowanie

Środki ostrożności Pracować w digestorium lub z odpowiednią wentylacją. Zakaz jedzenia, picia i palenia w miejscu pracy.

Temperatura przechowywania Przechowywać w temperaturze pokojowej (15-25°C) lub zgodnie z etykietą.

Wilgotność Przechowywać w suchym miejscu (<60% RH).

Światło Chronić przed bezpośrednim światłem słonecznym.

Materiały niezgodne Silne utleniacze, Silne kwasy, Silne zasady.

8. Kontrola narażenia/środki ochrony indywidualnej

8.1 Parametry kontroli narażenia

NDS (Polska)Nie figuruje w wykazie NDS (Rozp. MRiPS, Dz.U.2024 poz.1017). Stosować zasadę ALARA.

OEL (UE)Brak harmonizowanego OEL na poziomie UE.

DNELBrak danych dostępnych.

PNECBrak danych dostępnych.

8.2 Środki ochrony indywidualnej (ŚOI)



WERSJA
ROBOCZA

9. Właściwości fizyczne i chemiczne

Właściwość (pkt 9.1)	Wartość	Źródło
Stan skupienia	Brak danych dostępnych.	
Barwa	Brak danych dostępnych.	
Zapach	Brak danych dostępnych.	
pH (1% r-r wodny)	Brak danych dostępnych.	
Temp. topnienia	Brak danych dostępnych.	
Temp. wrzenia	Brak danych dostępnych.	
Temp. zapłonu	Brak danych dostępnych.	
Gęstość (20°C)	Brak danych dostępnych.	
Prężność par (20°C)	Brak danych dostępnych.	
Rozpuszcz. w wodzie (20°C)	Brak danych dostępnych.	
log Kow (XLogP3)	1.5	
TPSA	75.7 Å ²	
HBD / HBA	1 / 4	
Wiązania rotowalne	7	
Masa molowa	318.4 g/mol	
Wzór sumaryczny	C17H22N2O4	
Reguła Lipinskiego (RO5)	PASS	

10. Stabilność i reaktywność

Reaktywność Stabilna w normalnych warunkach przechowywania i użytkowania.

Stabilność chemiczna Stabilna termicznie w zalecanych warunkach.

Niebezpieczne reakcje Brak znanych niebezpiecznych reakcji w normalnych warunkach.

Warunki do unikania Wysokie temperatury, bezpośrednie nasłonecznienie, wilgoć.

Materiały niezgodne Silne utleniacze, Silne kwasy, Silne zasady.

Produkty rozkładu Produkty rozkładu termicznego: CO, CO₂, NO_x.

11. Informacje toksykologiczne

LD50 (doustna) Brak danych dostępnych.

LD50 (skórna) Brak danych dostępnych.

LC50 (inhalacyjna) Brak danych dostępnych.

Podrażnienie skóry Brak danych dostępnych.

Podrażnienie oczu Brak danych dostępnych.

Działanie uczulające Brak danych dostępnych.

Mutagenność Brak danych dostępnych.

Rakotwórczość Brak danych dostępnych.

Toksyczność reprodukcyjna Brak danych dostępnych.

STOT (narażenie jednorazowe) Brak danych dostępnych.

STOT (narażenie powtarzane) Brak danych dostępnych.

Zagrożenie aspiracyjne Brak danych dostępnych.

12. Informacje ekologiczne

Toksyczność wodna Brak danych dostępnych.

Trwałość / biodegradacja Brak danych dostępnych.

Bioakumulacja LogP = 1.5. Niski potencjał bioakumulacji.

Mobilność w glebie Brak danych dostępnych.

Ocena PBT/vPvB Brak wystarczających danych do oceny PBT/vPvB.

Działanie endokrynnne Brak informacji.

13. Postępowanie z odpadami

Metoda utylizacji Przekazać do utylizacji uprawnionym firmom zgodnie z przepisami krajowymi i lokalnymi. Nie wprowadzać do kanalizacji.

Kod odpadu (EWC) 16 05 06* — Chemikalia laboratoryjne i analityczne (np. odczynniki chemiczne) zawierające substancje niebezpieczne. Weryfikacja kodu EWC wymagana.

Opakowania Opakowania oczyszczone mogą być poddane recyklingowi. Opakowania zanieczyszczone traktować jako odpady niebezpieczne.

14. Informacje dotyczące transportu

Numer UN Nie przypisano (weryfikacja wymagana).

Zagrożenie dla środowiska Nie sklasyfikowany jako substancja niebezpieczna dla środowiska wodnego w transporcie.

Szczególne środki ostrożności Brak szczególnych środków ostrożności.

Kod CN/HS Kod CN/HS: weryfikacja wymagana w Eurostat Combined Nomenclature.

Uwagi W przypadku braku numeru UN: nie sklasyfikowany jako materiał niebezpieczny do transportu (ADR/IMDG/IATA).

data source h_codes_inference

15. Informacje dotyczące przepisów prawnych

SVHC (substancja wzbudzająca obawy)Nie

Status SVHCNie figuruje na liście SVHC (data sprawdzenia: 2026-04-28).

REACH Załącznik XIVNie

REACH Załącznik XVIINie

Data sprawdzenia2026-04-28

16. Inne informacje

Dane zweryfikowane z 4 źródeł (cache, pubchem, chembl, wikidata). Wykrytych konfliktów: 0.

Skróty

ADREuropejska umowa dot. międzynarodowego przewozu towarów niebezpiecznych
ATEOszacowanie toksyczności ostrej (Acute Toxicity Estimate)
CASChemical Abstracts Service
CLPClassification, Labelling and Packaging (Rozp. 1272/2008)
CMRRakotwórczość, mutagenność, toksyczność reprodukcyjna
DNELPochodny poziom niepowodujący zmian (Derived No-Effect Level)
ECEuropean Community number
EPIŚrodki ochrony indywidualnej
GHSGlobalnie Zharmonizowany System (Globally Harmonized System)
IATAMiędzynarodowe Zrzeszenie Transportu Lotniczego
IMDGMiędzynarodowy kodeks morski towarów niebezpiecznych
KchKarta Charakterystyki (Safety Data Sheet)
LC50Stężenie śmiertelne 50% (Lethal Concentration)
LD50Dawka śmiertelna 50% (Lethal Dose)
NDSNajwyższe dopuszczalne stężenie (na stanowisku pracy)
NDSchChwilowe NDS
OELOccupational Exposure Limit
PBTTrwałe, bioakumulacyjne i toksyczne
PNECPrzewidywane stężenie niepowodujące zmian (Predicted No-Effect Concentration)
REACHRegistration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Rozp. 1907/2006)
SDSSafety Data Sheet
STOTToksyczność narządowa (Specific Target Organ Toxicity)
SVHCSubstancja wzbudzająca szczególnie duże obawy (Substance of Very High Concern)
TPSATopological Polar Surface Area
vPvBBardzo trwałe i bardzo bioakumulacyjne

Historia wersji

v1 (28.04.2026)Pierwsza emisja. Auto-wygenerowane przez MOL-GOD v2.7.0.

Referencje

- [1] PE i Rada. Rozp.(WE) nr 1907/2006 (REACH). Art.31, Zał.II. Dz.Urz.UE L 396/2006.
- [2] Komisja Europejska. Rozp.(UE) 2020/878 — zmiana Zał.II REACH. Dz.Urz.UE L 203/2020. Od 01.01.2023.
- [3] PE i Rada. Rozp.(WE) 1272/2008 (CLP)+ATP 19. Dz.Urz.UE 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. PubChem PUG REST API. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/157115-85-0> Data: .
- [8] Cache+consensus. Local cache (previously fetched). Data: .
- [9] Local Cache. Local cache (previously fetched). Data: .
- [10] ChEMBL (EBI). ChEMBL (EBI). Data: .
- [11] Wikidata. wikidata. Data: .
- [12] Ustawa z 26.06.1974 r. — Kodeks pracy, Art.221–229. Dz.U. 2023 poz. 1465.
- [13] Rozp. MRIPS z 12.06.2018 r. — NDS/NDN. Dz.U. 2024 poz. 1017.

Linki zewnętrzne

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=157115-85-0>
Wikidata: <https://www.wikidata.org/wiki/Q7049784>
ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/ChEMBL3663392

Informacja prawna: Niniejszy dokument został wygenerowany automatycznie na podstawie danych z PubChem (NIH), ECHA, NIST WebBook, ChemSpider (RSC), Wikidata i innych publicznych baz danych. NIE ZASTĘPUJE zatwierdzonej Karty Charakterystyki (SDS) zgodnej z rozporządzeniem (WE) nr 1907/2006 (REACH). Przed użyciem substancji weryfikuj dane z aktualną KCh producenta.
Generator: MOL-GOD v2.7.0 | Potok danych: Wieloźródłowy (13 API) + Podwójna AI (Bielik+GROK) + Walidacja v4.0
Data wydania: 28.04.2026 | Wersja dokumentu: 1