

7-[(3-chloro-6-methyl-5,5-dioxo-11H-benzo[c][2,1]benzothiazepin-11-yl)amino]heptanoic acid

7-[(3-chloro-6-methyl-5,5-dioxo-11H-benzo[c][2,1]benzothiazepin-11-yl)amino]heptanoic acid

CAS 66981-73-5

CAS 66981-73-5

C21H25ClN2O4S

MASA MOLOWA

437.00

KLASYFIKACJA ZAGROZEŃ (GHS / CLP)



Uwaga

H361 (100%): Suspected of damaging fertility or the unborn child [Warning Reproductive toxicity]

H362 (100%): May cause harm to breast-fed children [Reproductive toxicity, effects on or via lactation]

H373 (100%): May cause damage to organs through prolonged or repeated exposure [Warning Specific target organ toxicity, repeated exposure]

1. Identyfikacja substancji/mieszanki i identyfikacja przedsiębiorstwa

1.1 Nazwa substancji (PL) —

1.1 Nazwa IUPAC 7-[(3-chloro-6-methyl-5,5-dioxo-11H-benzo[c][2,1]benzothiazepin-11-yl)amino]heptanoic acid

1.1 Numer CAS 66981-73-5

1.1 Numer EC Brak danych

1.1 PubChem CID 68870

1.1 InChIKey ICJBGPMZQUBB-UHFFFAOYSA-N

1.1 SMILES CN1C2=CC=CC=C2C(C3=C(S1(=O)=O)C=C(C=C3)Cl)NCCCCC(=O)O

1.1 Wzór sumaryczny C₂₁H₂₅ClN₂O₄S

1.1 Masa molowa 437.0 g/mol

1.1 Masa dokładna —

1.2 Zastosowania

Do celów laboratoryjnych i badawczych. Nie do użytku w produkcji żywności, leków ani kosmetyków bez odpowiednich zezwoleń.

1.3 Dane dostawcy

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

1.4 Numer telefonu alarmowego

Telefon alarmowy +48 42 657 99 00

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

2. Identyfikacja zagrożeń



GHS:



ŚOI:

Uwaga

Zwroty wskazujące rodzaj zagrożeń (H)

H361 (100%): Suspected of damaging fertility or the unborn child [Warning Reproductive toxicity]—

H362 (100%): May cause harm to breast-fed children [Reproductive toxicity, effects on or via lactation]—

H373 (100%): May causes damage to organs through prolonged or repeated exposure [Warning Specific target organ toxicity, repeated exposure]—

Zwroty wskazujące środki ostrożności (P)

P203, P260, P263, P264, P270, P280, P318, P319, P405, and P501—

3. Skład/informacja o składnikach

Typ substancji: **pure**

Numer CAS: **66981-73-5**

Wzór sumaryczny: **C₂₁H₂₅ClN₂O₄S**

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. Splukać skórę wodą z mydłem (min. 15 minut).

Kontakt z oczami

Przemycić 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 gaśniczeDostosować środki gaśnicze do otoczenia. CO₂, proszek, piana.

Nieodpowiednie środki gaśniczeBrak szczególnych ograniczeń.

Zagrożenia szczególneProdukty rozkładu termicznego: CO, CO₂, NO_x, SO_x, HCl.

Wskazówki dla strażakówUżyć aparatu oddechowego (SCBA). Pełny strój ochronny.

6. Postępowanie w przypadku niezamierzonego uwolnienia do środowiska

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

Ochrona środowiskaZapobiec przedostaniu się do kanalizacji, wód gruntowych i powierzchniowych.

Metody ograniczania i oczyszczaniaZebrać 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 ostrożnościPracować w digestorium lub z odpowiednią wentylacją. Zakaz jedzenia, picia i palenia w miejscu pracy.

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

WilgotnośćPrzechowywać w suchym miejscu (<60% RH).

ŚwiatłoChronić przed bezpośrednim światłem słonecznym.

Materiały niezgodneSilne 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)



9. Właściwości fizyczne i chemiczne

Właściwość (pkt 9.1)	Wartość	Zródło
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)	1.2	
TPSA	95.1 Å ²	
HBD / HBA	2 / 6	
Wiązania rotowalne	8	
Masa molowa	437.0 g/mol	
Wzór sumaryczny	C21H25ClN2O4S	
Reguła Lipinskiego (RO5)	PASS	

10. Stabilność i reaktywność

ReaktywnośćStabilna w normalnych warunkach przechowywania i użytkowania.

Stabilność chemicznaStabilna termicznie w zalecanych warunkach.

Niebezpieczne reakcjeBrak znanych niebezpiecznych reakcji w normalnych warunkach.

Warunki do unikaniaWysokie temperatury, bezpośrednie nasłonecznienie, wilgoć.

Materiały niezgodneSilne utleniacze, Silne kwasy, Silne zasady.

Produkty rozkładuProdukty rozkładu termicznego: CO, CO2, NOx, SOx, HCl.

11. Informacje toksykologiczne

LD50 (doustna)Brak danych dostępnych.

LD50 (skórna)Brak danych dostępnych.

LC50 (inhalacyjna)Brak danych dostępnych.

Podrażnienie skóryBrak danych dostępnych.

Podrażnienie oczuBrak danych dostępnych.

Działanie uczulająceBrak danych dostępnych.

MutagennośćBrak danych dostępnych.

RakotwórczośćBrak danych dostępnych.

Toksyczność reprodukcyjnaBrak danych dostępnych.

STOT (narażenie jednorazowe)Brak danych dostępnych.

STOT (narażenie powtarzane)Brak danych dostępnych.

Zagrożenie aspiracyjneBrak danych dostępnych.

12. Informacje ekologiczne

Toksyczność wodna Brak danych dostępnych.

Trwałość / biodegradacja Brak danych dostępnych.

Bioakumulacja LogP = 1.2. Niski potencjał bioakumulacji.

Mobilność w glebie Brak danych dostępnych.

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

Działanie endokryne 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 SVHC Nie figuruje na liście SVHC (data sprawdzenia: 2026-04-28).

REACH Załącznik XIV Nie

REACH Załącznik XVII Nie

Data sprawdzenia 2026-04-28

16. Inne informacje

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

Cytaty naukowe (10)

et al.. *The neurobiological properties of tianeptine (Stablon): from monoamine hypothesis to glutamatergic modulation.* . (2010). DOI: 10.1038/mp.2009.80
et al.. *The Behavioral Effects of the Antidepressant Tianeptine Require the Mu-Opioid Receptor.* . (2017). DOI: 10.1038/npp.2017.60
Formulation of a novel tianeptine sodium orodispersible film. . (2010). DOI: 10.1208/s12249-010-9464-2
et al.. *When an obscurity becomes trend: social-media descriptions of tianeptine use and associated atypical drug use.* . (2021). DOI: 10.1080/00952990.2021.1904408
et al.. *Characteristics of Tianeptine Exposures Reported to the National Poison Data System - United States, 2000-2017.* . (2018). DOI: 10.15585/mmwr.mm6730a2

Pełne teksty H

H361 (100%): Suspected of damaging fertility or the unborn child [Warning Reproductive toxicity]—
H362 (100%): May cause harm to breast-fed children [Reproductive toxicity, effects on or via lactation]—
H373 (100%): May causes damage to organs through prolonged or repeated exposure [Warning Specific target organ toxicity, repeated exposure]—

Pełne teksty P

P203, P260, P263, P264, P270, P280, P318, P319, P405, and P501—

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/66981-73-5>Data>.
[8] Cache+consensus. Local cache (previously fetched). Data: .
[9] Local Cache. Local cache (previously fetched). Data: .
[10] ChEMBL (EBI). ChEMBL (EBI). Data: .
[11] Literature. literature. Data: .
[12] Ustawa z 26.06.1974 r. — Kodeks pracy. Art.221–229. Dz.U. 2023 poz. 1465.

Linki zewnętrzne

NIST: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=66981-73-5>

ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL3659241

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