

melatonina

N-[2-(5-methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]acetamide

CAS 73-31-4

CAS 73-31-4

C13H16N2O2

EC 200-797-7

MASA MOLOWA

232.28

1. Identyfikacja substancji/mieszaniny i identyfikacja przedsiębiorstwa

1.1 Nazwa substancji (PL)melatonina

1.1 Nazwa IUPACN-[2-(5-methoxy-1H-indol-3-yl)ethyl]acetamide

1.1 Numer CAS73-31-4

1.1 Numer EC200-797-7

1.1 PubChem CID896

1.1 InChIKeyDRLFMBDRBRZALE-UHFFFAOYSA-N

1.1 SMILESCC(=O)NCCC1=CNC2=C1C=C(C=C2)OC

1.1 Wzór sumarycznyC13H16N2O2

1.1 Masa molowa232.28 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: 73-31-4

Numer EC: 200-797-7

Wzór sumaryczny: C₁₃H₁₆N₂O₂

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)



Rękawice ochronne chemoodporne
EN ISO 374-1:2016+A1:2018
nitrylowe (min. 0.11 mm)



Okulary ochronne zamknięte lub gogle
EN ISO 16321-1:2022 / EN 166:2001



Obuwie ochronne zamknięte z ochroną palców
EN ISO 20345:2022 (S2/S3)

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)	0.8	
TPSA	54.1 Å ²	
HBD / HBA	2 / 2	
Wiązania rotowalne	4	
Masa molowa	232.28 g/mol	
Wzór sumaryczny	C13H16N2O2	
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 = 0.8. 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 5 źródeł (cache, pubchem, chembl, wikidata, literature). Wykrytych konfliktów: 0.

Cytaty naukowe (10)

- Ming-Zhi Zhang, Qiong Chen, Guang-Fu Yang. *A review on recent developments of indole-containing antiviral agents*. European Journal of Medicinal Chemistry (2014). DOI: 10.1016/j.ejmech.2014.10.065
- Margarita L. Dubocovich, Philippe Delagrangre, Diana N. Krause et al.. *International Union of Basic and Clinical Pharmacology. LXXV. Nomenclature, Classification, and Pharmacology of G Protein-Coupled Melatonin Receptors*. Pharmacological Reviews (2010). DOI: 10.1124/pr.110.002832
- Giovanna Li Petri, Maria Valeria Raimondi, Virginia Spanò et al.. *Pyrrrolidine in Drug Discovery: A Versatile Scaffold for Novel Biologically Active Compounds*. Topics in Current Chemistry (2021). DOI: 10.1007/s41061-021-00347-5
- Guglielmo A. Coppola, Serena Pillitteri, Erik V. Van der Eycken et al.. *Multicomponent reactions and photo/electrochemistry join forces: atom economy meets energy efficiency*. Chemical Society Reviews (2022). DOI: 10.1039/d1cs00510c
- Natalie Netz, Till Opatz. *Marine Indole Alkaloids*. Marine Drugs (2015). DOI: 10.3390/md13084814

Skróty

- ADR**Europejska umowa dot. międzynarodowego przewozu towarów niebezpiecznych
- ATE**Oszacowanie toksyczności ostrej (Acute Toxicity Estimate)
- CAS**Chemical Abstracts Service
- CLP**Classification, Labelling and Packaging (Rozp. 1272/2008)
- CMR**Rakotwórczość, mutagenność, toksyczność reprodukcyjna
- DNEL**Pochodny poziom niepowodujący zmian (Derived No-Effect Level)
- EC**European Community number
- EPI**Środki ochrony indywidualnej
- GHS**Globalnie Zharmonizowany System (Globally Harmonized System)
- IATA**Międzynarodowe Zrzeszenie Transportu Lotniczego
- IMDG**Międzynarodowy kodeks morski towarów niebezpiecznych
- Kch**Karta Charakterystyki (Safety Data Sheet)
- LC50**Stężenie śmiertelne 50% (Lethal Concentration)
- LD50**Dawka śmiertelna 50% (Lethal Dose)
- NDS**Najwyższe dopuszczalne stężenie (na stanowisku pracy)
- NDSch**Chwilowe NDS
- OEL**Occupational Exposure Limit
- PBT**Trwałe, bioakumulacyjne i toksyczne
- PNEC**Przewidywane stężenie niepowodujące zmian (Predicted No-Effect Concentration)
- REACH**Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Rozp. 1907/2006)
- SDS**Safety Data Sheet
- STOT**Toksyczność narządowa (Specific Target Organ Toxicity)
- SVHC**Substancja wzbudzająca szczególnie duże obawy (Substance of Very High Concern)
- TPSA**Topological Polar Surface Area
- vPvB**Bardzo 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/73-31-4> 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] Literature. literature. Data: .
- [13] Ustawa z 26.06.1974 r. — Kodeks pracy. Art.221–229. Dz.U. 2023 poz. 1465.
- [14] 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=73-31-4>
- Wikidata: <https://www.wikidata.org/wiki/Q180912>
- ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL3942629

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