

可可碱

一 化学品及企业标识

产品说明: Product Description:	可可碱 Theobromine
目录编号	A11861
俗名	2,6-Dihydroxy-3,7-dimethyl-purine; 3,7-Dimethyl-xanthine
CAS 号	83-67-0
分子式	C7 H8 N4 O2
供应商	阿法埃莎(中国)化学有限公司 上海市化学工业区奉贤分区银工路229号 邮编201424 紧急电话号码 +86 21-67582000 传真: +86 21-67582001
紧急电话号码	4008215118 Chemtrec: 400 120 4937
电子邮件地址	begel.sdsdesk@thermofisher.com
推荐用途	实验室化学品。
限制用途	无资料。

二 危险性概述

物理状态
粉末 固体

外观与性状
白色

气味
无气味

紧急情况概述
吞咽有害。

GHS危险性类别

急性经口毒性	类别4
--------	-----

标签元素



警示语

警告

危险说明

H302 - 吞咽有害

防范说明

预防措施

P264 - 作业后彻底清洗脸部、手部和任何接触的皮肤

P270 - 使用本产品时不要进食、饮水或吸烟

事故响应

P330 - 漱口

P301 + P312 - 如误吞咽：如感觉不适，呼叫解毒中心或医生

安全储存

P403 - 存放在通风良好的地方

处置

P501 - 委托有资质的废弃物处理厂处置内装物/容器

物理和化学危害

无确定。

健康危害

吞咽有害。

环境危害

没有包含对环境有危险的物质或者在废水处理厂不能被降解的物质。由于其水溶性，可能在环境中迁移。产品溶于水，在水系统中可能会蔓延。

其他危害

本品中不包含任何已知或怀疑内分泌干扰物。

三 成分/组成资料

组分	CAS 号	重量百分含量
3, 7-二氢-3, 7-二甲基-1H-嘌呤-2, 6-二酮	83-67-0	>95

四 急救措施

一般建议

如症状持续，呼叫医生。

眼睛接触

立即用大量清水冲洗至少15 分钟以上，包括眼皮下面。就医。

皮肤接触

立即用大量清水清洗至少15分钟。如皮肤刺激持续，呼叫医生。

吸入

转移至空气新鲜处。如呼吸停止，进行人工呼吸。如出现症状，就医。

食入

清水漱口，然后饮用大量的水。如出现症状，就医。

最重要的症状与影响

无合理可预见的。

对急救人员之自我防护

确保医务人员了解所涉及的物质，采取预防措施保护自己并防止污染扩散。

对医师的备注

对症治疗。

五 消防措施

适用的灭火剂

雾状水、二氧化碳 (CO2)、干粉、抗溶性泡沫。

基于安全原因而必须不得使用的灭火介质

无资料。

化学品引起的特殊危害

热分解会导致刺激性气体和蒸气的释放。产品及空容器请远离热源及点火源。

消防员的防护设备和注意事项

在任何火灾中，佩戴MSHA/NIOSH(批准或等效)的压力需求的自给式呼吸器和全面的防护装备。

六 泄漏应急处理

个人防护措施

确保足够的通风。使用所需的个人防护装备。避免粉尘的形成。

环境保护措施

不得排放到环境中。

为遏制和清理方法

清扫并用铲子转移至适当的容器中待处置。存放于适当的密闭容器中待处置。

请参阅第8节和第13节所列的防护措施。。

七 操作处置与储存

操作

穿个体防护装备/戴防护面具。确保足够的通风。严防进入眼中、接触皮肤或衣服。避免食入和吸入。。避免粉尘的形成。

安全储存

存放于干燥、阴凉且通风良好处。保持容器密闭。

特定用途

在实验室使用

八 接触控制和个体防护

控制参数

监测方法

EN 14042:2003 标题标识符: 工作场所空气。用于评估暴露于化学或生物试剂的程序指南。

暴露控制

工程措施

确保足够的通风，尤其是在有限区域中。确保洗眼台和安全淋浴室靠近工作场所。只要有可能，工程控制措施如工艺隔离或封闭、引入工艺或设备变更以使释放或接触的可能性尽可能的小、以及采用正确设计的通风系统，都应被采用来控制危险材料源。

个人防护设备

眼睛防护 护目镜（欧盟标准 - EN 166）

手部防护	防护手套
------	------

手套材料	突破时间	手套的厚度	欧盟标准	手套的意见
丁腈橡胶	请参见制造商的建议	-	EN 374	(最低要求)
氯丁橡胶				
天然橡胶				
PVC				

检查前使用的手套。请注意阅读手套供应商提供的关于手套的渗透性和溶剂穿透时间的说明。请参阅制造商/供应商信息。确保手套适合任务。化学兼容性。灵巧。操作条件。用户的易感性，例如敏化的影响。同时考虑使用场合的具体情况，例如危险的切割，砂磨和接触时间等。删除与护理，避免皮肤污染的手套。

皮肤和身体防护 长袖衫

呼吸防护	当浓度超过接触限值时，工人必须使用合适的呼吸器。 为保护穿戴者，呼吸防护设备必须正确地配合，并应妥善的使用和维护。
------	--

大型/紧急情况下使用 如果超过接触限值或发生刺激或其他症状，采用NIOSH/MSHA或欧盟标准EN 136认可的呼吸器
推荐的过滤器类型： 符合 EN 143的微粒过滤器

小规模/实验室使用 如果超过接触限值或发生刺激或其他症状，采用NIOSH/MSHA或欧盟标准EN 149:2001认可的呼吸器
推荐半面罩 - 粒子滤波：EN149: 2001
当视网膜色素上皮使用面罩适合测试应进行

卫生措施 依照良好的工业卫生和安全实践进行操作。

环境接触控制	无资料.
--------	------

九 理化特性

外观与性状	白色	
物理状态	粉末 固体	。
气味	无气味	
气味阈值	无资料	
pH值	5.5-7.0	1% aq.sol
熔点/熔点范围	290 - 295 °C / 554 - 563 °F	
软化点	无资料	
沸点/沸程	无资料	
闪火点	无资料	方法 - 无资料
蒸发速率	不适用	固体
易燃性(固体, 气体)	无资料	
爆炸极限	无资料	
蒸气压	无资料	
蒸汽密度	不适用	固体
比重 / 密度	无资料	
堆积密度	无资料	
水溶性	slightly soluble	
在其他溶剂中的溶解度	无资料	
分配系数(正辛醇/水)		
组分	log Pow	
3, 7-二氢-3, 7-二甲基-1H-嘌呤-2, 6-二酮	-0.78	
自燃温度	无资料	
分解温度	无资料	
黏度	不适用	固体
爆炸性	无资料	
氧化性	无资料	
分子式	C7 H8 N4 O2	
分子量	180.17	

十 稳定性和反应性

稳定性	正常条件下稳定.
危险反应	正常处理过程中不会发生.
危险的聚合作用	不会发生危险性聚合反应.
应避免的条件	避免粉尘的形成. 不相容产品.
应避免的材料	强氧化剂.
有害的分解产物	氮氧化物 (NOx). 一氧化碳 (CO). 二氧化碳(CO2).

十一 毒理学信息

产品信息

急性毒性;

组分	半数致死量(LD50)，口服	半数致死量(LD50)，皮肤	呼吸的半数致死浓度
3, 7-二氢-3, 7-二甲基-1H-嘌呤-2, 6-二酮	LD50 = 1265 mg/kg (Rat)		

皮肤腐蚀/刺激;
。 无资料

严重损伤/刺激眼睛; 无资料

呼吸或皮肤过敏;
 呼吸系统 无资料
 皮肤 无资料
。

生殖细胞致突变性;
。 无资料

致癌性;
。 无资料
本品没有已知的致癌化学物质

生殖毒性; 无资料

STOT单曝光; 无资料

STOT重复曝光; 无资料

 靶器官 无资料.

吸入危险。 不适用
固体

其他不良反应 毒理学特性还没有被完全研究。

症状 /效应 无资料
急性的和滞后

十二 生态学信息

生态毒性 不要排入下水道. .

持久性和降解性
持久存留 可溶于水，持久性是不可能，基于提供的信息无任何已知的情况.

生物累积潜力 不一定是生物积累性的。

组分	log Pow	生物富集因子 (BCF)
3,7-二氢-3,7-二甲基-1H-嘌呤-2,6-二酮	-0.78	无资料

土壤中的迁移性 产品溶于水，在水系统中可能会蔓延 由于其水溶性，可能在环境中迁移 土壤中流动性高

内分泌干扰物信息
持久性有机污染物
臭氧消耗趋势
本品中不包含任何已知或怀疑内分泌干扰物
本产品不含有任何已知或可疑的
本产品不含有任何已知或可疑的

十三 废弃处置

残留物/未使用产品带来的废物 废物被分为危险物质。按欧洲的对废物和危害性废物的条款进行处理。按照当地规定处理。

受污染的包装 这个容器处置危险废物或特殊废物收集点。

其他信息 废物代码应由使用者根据产品的应用指定。不要排入下水道。

十四 运输信息

公路和铁路运输 不受管制

IMDG/IMO 未作规定

IATA 未作规定

用户特别注意事项 没有特别的注意事项

十五 法规信息

国际清单

X =上市, 中国 (IECSC), 欧洲 (EINECS/ELINCS/NLP), U.S.A. (TSCA), 加拿大 (DSL/NDSL), 菲律宾 (PICCS), Japan (ENCS), Japan (ISHL), 澳大利亚 (AICS), Korea (KECL).

组分	危险化学品 名录 (2015版)	危险货物品 名表 - 2012版	台湾 - 有毒 化学物质名 录	中国现有 化学物质 名录 (IECSC)	EINECS	TSCA	DSL	菲律宾 化学品 与化学 物质列 表 (PICCS)	ENCS	ISHL	AICS	韩国既有化 学品目录 (KECL)
3,7-二氢-3,7-二甲基-1H-嘌呤-2,6-二酮	-	-	X	X	201-494-2	X	-	X	X	X	X	-

国家法规

请注意废物处理也应该满足当地法规的要求。
该表满足《危险化学品安全管理条例》中华人民共和国国务院令591号：GBT16483-2008《化学品安全技术说明书 内容和项目顺序》。

十六 其他信息

编制人 产品安全部门。
生效日期 16-Sep-2014
修订日期 25-Apr-2024
修订,再版的原因 新的紧急电话响应服务提供商。

培训建议

化学品危险意识培训，结合标签、安全数据表、个体防护设备和个体卫生。
使用个体防护设备，涵盖了适当的选择、兼容性、穿透阈值、护理、保养、配合和EN标准。
化学品接触的急救措施，包括使用洗眼和安全淋浴。

注释

CAS - Chemical Abstracts Service	TSCA - 美国有毒物质控制发难第8(b) 章节目录
EINECS/ELINCS - 欧洲现有商业化学物质名录/欧洲申报化学物质名录	DSL/NDSL - 加拿大国内物质清单/非国内物质清单
PICCS - 菲律宾化学品和化学物质名录	ENCS - 日本现有和新化学物质名录
IECSC - 中国现有化学物质名录	AICS - 澳大利亚化学物质名录
KECL - 韩国现有及已评估的化学物质	NZIoC - 新西兰化学品名录
WEL - 工作场所接触限值	TWA - 时间加权平均值
ACGIH - 美国政府工业卫生专家协会	IARC - 国际癌症研究机构
DNEL - 衍生出来的无影响水平	PNEC - 预测无影响浓度
RPE - 呼吸防护设备	LD50 - 50%致死剂量
LC50 - 50%致死浓度	EC50 - 50%有效浓度
NOEC - 无观测效应浓度	POW - 辛醇：水分配系数
PBT - 持久性，生物累积性，毒性	vPvB - 持久性，生物累积性
ICAO/IATA - 国际民航组织/国际航空运输协会	IMO/IMDG - 国际海事组织/国际海运危险货物规则
ADR - 欧洲关于通过公路国际运输危险货物的协议	MARPOL - 国际防止船舶造成污染公约“船舶
OECD - 经济合作与发展组织	ATE - 急性毒性估计
BCF - 生物浓度因子 (BCF)	VOC - (挥发性有机化合物)

主要参考文献和数据源

<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>
供应商安全数据表, Chemadvisor - LOLI, Merck索引, RTECS

根据GB/T 16483-2008, GB/T 17519-2013

免责声明

根据我们所掌握的最新知识、信息和观念，本安全技术说明书中所提供的信息是正确的。所提供的信息仅作为安全操作、使用、加工、储存、运输、处置和排放的指南，并不能作为保证书或质量说明书。这些信息仅用于指定的特定物质，可能不适用于与任何其他

物质混用，也不适用于所有情况，除非文中另有规定

安全技术说明书结束