

Sicherheitsdatenblatt

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006

Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

Überarbeitet am: 19.03.2026

Materialnummer: OP133

Seite 1 von 7

ABSCHNITT 1: Bezeichnung des Stoffs beziehungsweise des Gemischs und des Unternehmens

1.1. Produktidentifikator

Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

Weitere Handelsnamen

(E)-N-Acetyl-S-[3-(4-methoxyphenyl)allyl]-L-cysteine-13C3,15N

Stoffname: Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

CAS-Nr.: na

1.2. Relevante identifizierte Verwendungen des Stoffs oder Gemischs und Verwendungen, von denen abgeraten wird

Verwendung des Stoffs/des Gemischs

Referenzstandard für die Analytik.

1.3. Einzelheiten zum Lieferanten, der das Sicherheitsdatenblatt bereitstellt

Firmenname: WITEGA Laboratorien Berlin-Adlershof GmbH

Straße: James-Franck-Strasse 4

Ort: D-12489 Berlin

Telefon: +493063922001

Telefax: +493063922007

E-Mail: witega@witega.de

Internet: www.witega.de

1.4. Notrufnummer: +493063922001

ABSCHNITT 2: Mögliche Gefahren

2.1. Einstufung des Stoffs oder Gemischs

Verordnung (EG) Nr. 1272/2008

Skin Irrit. 2; H315

Eye Irrit. 2; H319

STOT SE 3; H335

Wortlaut der Gefahrenhinweise: siehe ABSCHNITT 16.

2.2. Kennzeichnungselemente

Verordnung (EG) Nr. 1272/2008

Signalwort: Achtung

Piktogramme:



Gefahrenhinweise

H315 Verursacht Hautreizungen.

H319 Verursacht schwere Augenreizung.

H335 Kann die Atemwege reizen.

Sicherheitshinweise

P280 Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.

P262 Nicht in die Augen, auf die Haut oder auf die Kleidung gelangen lassen.

P261 Einatmen von Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol vermeiden.

P305+P351+P338 BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser ausspülen.

Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter ausspülen.

2.3. Sonstige Gefahren

Keine Daten verfügbar

Sicherheitsdatenblatt

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006

Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

Überarbeitet am: 19.03.2026

Materialnummer: OP133

Seite 2 von 7

ABSCHNITT 3: Zusammensetzung/Angaben zu Bestandteilen

3.1. Stoffe

Summenformel: C1213C3H1915NO4S
Molmasse: 313.35 g/mol g/mol

Relevante Bestandteile

CAS-Nr.	Stoffname			Anteil
	EG-Nr.	Index-Nr.	REACH-Nr.	
	Einstufung (Verordnung (EG) Nr. 1272/2008)			
na	Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N			100 %
	Skin Irrit. 2, Eye Irrit. 2, STOT SE 3; H315 H319 H335			

Wortlaut der H- und EUH-Sätze: siehe Abschnitt 16.

ABSCHNITT 4: Erste-Hilfe-Maßnahmen

4.1. Beschreibung der Erste-Hilfe-Maßnahmen

Allgemeine Hinweise

Bei Unfall oder Unwohlsein sofort Arzt hinzuziehen (wenn möglich, Betriebsanweisung oder Sicherheitsdatenblatt vorzeigen).

Nach Einatmen

Betroffenen an die frische Luft bringen und warm und ruhig halten. Bei Atembeschwerden oder Atemstillstand künstliche Beatmung einleiten.

Nach Hautkontakt

Beschmutzte, getränkte Kleidung sofort ausziehen. Anschließend nachwaschen mit: Wasser und Seife

Nach Augenkontakt

Bei Berührung mit den Augen sofort bei geöffnetem Lidspalt 10 bis 15 Minuten mit fließendem Wasser spülen und Augenarzt aufsuchen.

Nach Verschlucken

Sofort Mund ausspülen und reichlich Wasser nachtrinken. Sofort ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
KEIN Erbrechen herbeiführen. Niemals einer bewusstlosen Person oder bei auftretenden Krämpfen etwas über den Mund verabreichen.

4.2. Wichtigste akute und verzögert auftretende Symptome und Wirkungen

Keine Daten verfügbar

4.3. Hinweise auf ärztliche Soforthilfe oder Spezialbehandlung

Keine Daten verfügbar

ABSCHNITT 5: Maßnahmen zur Brandbekämpfung

5.1. Löschmittel

Geeignete Löschmittel

Wassersprühstrahl. Schaum. Trockenlöschmittel. Kohlendioxid (CO₂).

5.2. Besondere vom Stoff oder Gemisch ausgehende Gefahren

Im Brandfall können entstehen: Pyrolyseprodukte, toxisch. Explosions- und Brandgase nicht einatmen.

5.3. Hinweise für die Brandbekämpfung

Im Brandfall: Umgebungsluftunabhängiges Atemschutzgerät tragen.

ABSCHNITT 6: Maßnahmen bei unbeabsichtigter Freisetzung

Sicherheitsdatenblatt

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006

Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

Überarbeitet am: 19.03.2026

Materialnummer: OP133

Seite 3 von 7

6.1. Personenbezogene Vorsichtsmaßnahmen, Schutzausrüstungen und in Notfällen anzuwendende Verfahren

Allgemeine Hinweise

Persönliche Schutzausrüstung verwenden. Gas/Rauch/Dampf/Aerosol nicht einatmen.

6.2. Umweltschutzmaßnahmen

Nicht in die Kanalisation oder Gewässer gelangen lassen.

6.3. Methoden und Material für Rückhaltung und Reinigung

Weitere Angaben

Staubfrei aufnehmen und staubfrei ablagern.

6.4. Verweis auf andere Abschnitte

Entsorgung: siehe Abschnitt 13

ABSCHNITT 7: Handhabung und Lagerung

7.1. Schutzmaßnahmen zur sicheren Handhabung

Hinweise zum sicheren Umgang

Bei offenem Umgang sind nach Möglichkeit Vorrichtungen mit lokaler Absaugung zu verwenden.

Hinweise zum Brand- und Explosionsschutz

Von Zündquellen fernhalten - Nicht rauchen. Maßnahmen gegen elektrostatische Aufladungen treffen.

Hinweise zu allgemeinen Hygienemaßnahmen am Arbeitsplatz

Persönliche Schutzausrüstung verwenden.

7.2. Bedingungen zur sicheren Lagerung unter Berücksichtigung von Unverträglichkeiten

Anforderungen an Lagerräume und Behälter

Behälter dicht geschlossen halten und an einem kühlen, gut gelüfteten Ort aufbewahren. Vermeiden von:
UV-Einstrahlung/Sonnenlicht

Weitere Angaben zu den Lagerbedingungen

Lagertemperatur: 2-8°C
under inert gas

7.3. Spezifische Endanwendungen

keine/keiner

ABSCHNITT 8: Begrenzung und Überwachung der Exposition/Persönliche Schutzausrüstungen

8.1. Zu überwachende Parameter

8.2. Begrenzung und Überwachung der Exposition

Geeignete technische Steuerungseinrichtungen

Bei offenem Umgang sind nach Möglichkeit Vorrichtungen mit lokaler Absaugung zu verwenden. Wenn eine lokale Absaugung nicht möglich oder unzureichend ist, sollte nach Möglichkeit eine gute Belüftung des Arbeitsbereiches sichergestellt werden.

Individuelle Schutzmaßnahmen, zum Beispiel persönliche Schutzausrüstung

Augen-/Gesichtsschutz

Gestellbrille mit Seitenschutz

Handschutz

Geeignete Schutzhandschuhe tragen. Chemikalienschutzhandschuhe sind in ihrer Ausführung in Abhängigkeit von Gefahrstoffkonzentration und -menge arbeitsplatzspezifisch auszuwählen.

Körperschutz

Laborkittel

Atemschutz

Bei unzureichender Belüftung Atemschutz tragen.

Sicherheitsdatenblatt

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006

Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

Überarbeitet am: 19.03.2026

Materialnummer: OP133

Seite 4 von 7

ABSCHNITT 9: Physikalische und chemische Eigenschaften

9.1. Angaben zu den grundlegenden physikalischen und chemischen Eigenschaften

Aggregatzustand:	fest	
Farbe:	weiß	
Geruch:	geruchlos	
Schmelzpunkt/Gefrierpunkt:		123-125 °C
Siedepunkt oder Siedebeginn und Siedebereich:		Keine Daten verfügbar
Entzündbarkeit:		Keine Daten verfügbar
Untere Explosionsgrenze:		Keine Daten verfügbar
Obere Explosionsgrenze:		Keine Daten verfügbar
Flammpunkt:		Keine Daten verfügbar
Zündtemperatur:		Keine Daten verfügbar
Zersetzungstemperatur:		Keine Daten verfügbar
pH-Wert:		Keine Daten verfügbar
Wasserlöslichkeit:		Keine Daten verfügbar
Löslichkeit in anderen Lösungsmitteln		
Keine Daten verfügbar		
Verteilungskoeffizient n-Oktanol/Wasser:		Keine Daten verfügbar
Dampfdruck:		Keine Daten verfügbar
Dichte:		Keine Daten verfügbar
Relative Dampfdichte:		Keine Daten verfügbar

9.2. Sonstige Angaben

Angaben über physikalische Gefahrenklassen

Explosionsgefahren

Keine Daten verfügbar

Selbstentzündungstemperatur

Feststoff:

Keine Daten verfügbar

Gas:

Keine Daten verfügbar

Oxidierende Eigenschaften

Keine Daten verfügbar

Sonstige sicherheitstechnische Kenngrößen

Verdampfungsgeschwindigkeit:

Keine Daten verfügbar

Weitere Angaben

keine/keiner

ABSCHNITT 10: Stabilität und Reaktivität

10.1. Reaktivität

Reagiert mit : Oxidationsmittel, Alkalien (Laugen), Beizen und Säuren

10.2. Chemische Stabilität

Das Produkt ist unter den empfohlenen Lagerungs-, Verwendungs- und Temperaturbedingungen chemisch stabil.

10.3. Möglichkeit gefährlicher Reaktionen

Es sind keine gefährlichen Reaktionen bekannt.

10.4. Zu vermeidende Bedingungen

Nicht Temperaturen über 50 °C/122 °F aussetzen.

Sicherheitsdatenblatt

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006

Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

Überarbeitet am: 19.03.2026

Materialnummer: OP133

Seite 5 von 7

10.5. Unverträgliche Materialien

Oxidationsmittel, Alkalien (Laugen), Beizen und Säuren

10.6. Gefährliche Zersetzungsprodukte

Im Brandfall können entstehen: Pyrolyseprodukte, toxisch.

ABSCHNITT 11: Toxikologische Angaben

11.1. Angaben zu den Gefahrenklassen im Sinne der Verordnung (EG) Nr. 1272/2008

Akute Toxizität

Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

Reiz- und Ätzwirkung

Ätzwirkung auf die Haut/Hautreizung: Verursacht Hautreizungen.

Schwere Augenschädigung/Augenreizung: Verursacht schwere Augenreizung.

Sensibilisierende Wirkungen

Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

Krebserzeugende, erbgutverändernde und fortpflanzungsgefährdende Wirkungen

Keimzellmutagenität: Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

Karzinogenität: Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

Reproduktionstoxizität: Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

Spezifische Zielorgan-Toxizität bei einmaliger Exposition

Kann die Atemwege reizen. (Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N)

Spezifische Zielorgan-Toxizität bei wiederholter Exposition

Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

Aspirationsgefahr

Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

Spezifische Wirkungen im Tierversuch

Keine Daten verfügbar

ABSCHNITT 12: Umweltbezogene Angaben

12.1. Toxizität

Aufgrund der verfügbaren Daten sind die Einstufungskriterien nicht erfüllt.

Keine Daten verfügbar

12.2. Persistenz und Abbaubarkeit

Keine Daten verfügbar

12.3. Bioakkumulationspotenzial

Kein Hinweis auf Bioakkumulationspotential.

12.4. Mobilität im Boden

Keine Daten verfügbar

12.5. Ergebnisse der PBT- und vPvB-Beurteilung

Dieser Stoff erfüllt nicht die PBT-/vPvB-Kriterien der REACH-Verordnung, Anhang XIII.

Dieser Stoff erfüllt nicht die PBT-/vPvB-Kriterien der REACH-Verordnung, Annex XIII.

12.6. Endokrinschädliche Eigenschaften

Dieser Stoff hat gegenüber Nichtzielorganismen keine endokrinen Eigenschaften.

12.7. Andere schädliche Wirkungen

Keine Daten verfügbar

ABSCHNITT 13: Hinweise zur Entsorgung

13.1. Verfahren der Abfallbehandlung

Sicherheitsdatenblatt

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006

Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

Überarbeitet am: 19.03.2026

Materialnummer: OP133

Seite 6 von 7

Empfehlungen zur Entsorgung

Entsorgung gemäß den behördlichen Vorschriften.

Nicht in die Kanalisation oder Gewässer gelangen lassen. Nicht in den Untergrund/Erdreich gelangen lassen.

Entsorgung ungereinigter Verpackung und empfohlene Reinigungsmittel

Dieses Produkt und sein Behälter sind als gefährlicher Abfall zu entsorgen.

ABSCHNITT 14: Angaben zum Transport

Landtransport (ADR/RID)

14.2. Ordnungsgemäße

Kein Gefahrgut im Sinne der Transportvorschriften.

UN-Versandbezeichnung:

Binnenschifftransport (ADN)

14.2. Ordnungsgemäße

Kein Gefahrgut im Sinne der Transportvorschriften.

UN-Versandbezeichnung:

Seeschifftransport (IMDG)

14.2. Ordnungsgemäße

Kein Gefahrgut im Sinne der Transportvorschriften.

UN-Versandbezeichnung:

Lufttransport (ICAO-TI/IATA-DGR)

14.2. Ordnungsgemäße

Kein Gefahrgut im Sinne der Transportvorschriften.

UN-Versandbezeichnung:

14.5. Umweltgefahren

UMWELTGEFÄHRDEND: Nein

14.6. Besondere Vorsichtsmaßnahmen für den Verwender

Keine Daten verfügbar

14.7. Massengutbeförderung auf dem Seeweg gemäß IMO-Instrumenten

Kein Gefahrgut im Sinne der Transportvorschriften.

ABSCHNITT 15: Rechtsvorschriften

15.1. Vorschriften zu Sicherheit, Gesundheits- und Umweltschutz/spezifische Rechtsvorschriften für den Stoff oder das Gemisch

Nationale Vorschriften

Beschäftigungsbeschränkung: Beschäftigungsbeschränkungen für Jugendliche beachten (§ 22 JArbSchG). Beschäftigungsbeschränkungen für werdende und stillende Mütter beachten (§§ 11 und 12 MuSchG).

Zusätzliche Hinweise

Das Produkt unterliegt möglicherweise der Anlage 2 der Chemikalienverbotsverordnung (ChemVerbotsV) - Anforderungen in Bezug auf die Abgabe

15.2. Stoffsicherheitsbeurteilung

Für diesen Stoff wurde keine Stoffsicherheitsbeurteilung durchgeführt.

ABSCHNITT 16: Sonstige Angaben

Abkürzungen und Akronyme

Skin Irrit: Hautreizung

Eye Irrit: Augenreizung

STOT SE: Spezifische Zielorgan-Toxizität (einmalige Exposition)

Wortlaut der H- und EUH-Sätze (Nummer und Volltext)

H315 Verursacht Hautreizungen.

H319 Verursacht schwere Augenreizung.

H335 Kann die Atemwege reizen.

Sicherheitsdatenblatt

gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006

Estragol-N-Acetylcystein-13C3,15N

Überarbeitet am: 19.03.2026

Materialnummer: OP133

Seite 7 von 7

Weitere Angaben

Die vorliegenden Informationen sind nach unserem besten Wissen zusammengestellt, sie erheben keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Die Witega Laboratorien GmbH schließt jegliche Haftung für Schäden aus, die mit dem Umgang oder im Kontakt mit dieser Chemikalie auftreten. Wir verweisen dazu ausdrücklich auf unsere Verkaufs- und Lieferbedingungen. Nur für den F&E Gebrauch bestimmt. Nicht als Heilmittel, im Haushalt oder für andere Verwendungszwecke.