

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS  
INDUSTRIALES



ESTUDIO FOTOQUÍMICO Y FOTOFÍSICO DEL  
ANTIINFLAMATORIO FLURBIPROFENO Y SUS  
DERIVADOS DE INTERÉS FOTOBIOLÓGICO

**PROYECTO FIN DE CARRERA**

**AUTORA:**

Lorena Gil Flores

**DIRECTORES:**

M. Consuelo Jiménez Molero  
Miguel A. Miranda Alonso

Valencia, a 13 de mayo de 2015



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>7</b>
<b>2. Objetivos</b>	<b>9</b>
<b>3. Justificación</b>	<b>11</b>
<b>4. Estado del arte</b>	<b>13</b>
4.1. Procesos fotoquímicos y fotofísicos . . . . .	13
4.2. Antiinflamatorios no esteroideos (AINES) . . . . .	15
4.2.1. Perspectiva histórica . . . . .	15
4.2.2. Actividad farmacológica de los AINES . . . . .	16
4.2.3. Ácidos 2-arylpropiónicos . . . . .	17
4.3. Proteínas . . . . .	18
4.3.1. Tipos de proteínas . . . . .	19
4.3.2. Interacción con sustratos . . . . .	22
<b>5. Equipos</b>	<b>23</b>
5.1. Equipos generales . . . . .	23
5.1.1. Espectrómetro de masas . . . . .	23
5.1.2. Resonancia magnética nuclear . . . . .	25
5.1.3. Cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) . . . . .	26
5.2. Equipos fotoquímicos/fotofísicos . . . . .	28
5.2.1. Espectrofotómetro Ultravioleta-Visible . . . . .	28
5.2.2. Espectrofluorímetro . . . . .	28
5.2.3. Fosforímetro . . . . .	30
5.2.4. Fotólisis de destello láser (FDL) . . . . .	30

## Índice general

---

<b>6. Datos experimentales y resultados</b>	<b>33</b>
6.1. 1-(2-fluor-[1,1'-bifenil]-4-il) etanona . . . . .	33
6.1.1. Introducción . . . . .	33
6.1.2. Obtención . . . . .	34
6.1.3. Estudios fotofísicos . . . . .	37
6.1.4. Estudio en proteínas . . . . .	43
6.2. 1-(2-fluor-[1,1'-bifenil]-4-il)etanol . . . . .	48
6.2.1. Introducción . . . . .	48
6.2.2. Obtención . . . . .	48
6.2.3. Estudio en disolución . . . . .	51
6.2.4. Estudio en proteínas . . . . .	56
6.3. 4-etil-2fluor-1,1'-bifenilo . . . . .	61
6.3.1. Introducción . . . . .	61
6.3.2. Obtención . . . . .	61
6.3.3. Estudio en disolución . . . . .	63
6.3.4. Estudio en proteínas . . . . .	68
<b>7. Presupuesto</b>	<b>73</b>
7.1. Coste de la materia prima . . . . .	74
7.2. Coste de los equipos . . . . .	75
7.3. Coste del material . . . . .	76
7.4. Mano de obra . . . . .	80
7.5. Coste final del proyecto . . . . .	80
<b>8. Normativa</b>	<b>81</b>
<b>9. Conclusiones</b>	<b>83</b>
<b>Anexos</b>	<b>85</b>
<b>A. Experimentación</b>	<b>87</b>
A.1. Obtención de los fotoproductos . . . . .	87
A.2. Obtención de las disoluciones . . . . .	88
A.3. Especificaciones de los equipos . . . . .	88
<b>B. Fichas de seguridad</b>	<b>91</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>176</b>





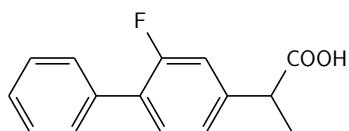
# Capítulo 1

## Introducción

En la actualidad, los antiinflamatorios no esteroideos (AINES) son uno de los grupos de fármacos que más se prescriben debido a su gran variedad de indicaciones terapéuticas. Se trata de fármacos con actividad antipirética, antiinflamatoria y analgésica.

Según el Informe Farmaco-Terapéutico del Sistema Nacional de Salud de España de 2009, los AINES en conjunto ocupan un lugar destacado en las ventas de medicamentos, con más de 40 millones de envases vendidos, lo que representa más de 350 millones de euros solo en el año 2009. El grupo de medicamentos más consumido dentro de los AINES son los derivados arilpropiónicos, y entre ellos destaca el ibuprofeno con casi el 50 % del consumo total de AINES.[1]

El flurbiprofeno (FBP), fármaco objeto del presente estudio, también pertenece a la familia de los ácidos 2-arylpropiónicos, al igual que el ibuprofeno, aunque con un consumo inferior. Su nombre químico es ácido 2-(2-fluoro-1,1'-bifenil-4-il) propanoico, y su estructura química se muestra en la Figura 1.1. Posee actividad analgésica, antiinflamatoria y antipirética. Suele administrarse generalmente por vía oral, aunque también es posible hacerlo en forma de disoluciones salinas. Se elimina del organismo a través del hígado prácticamente en su totalidad pasadas 24h de su administración, en forma de distintos derivados hidroxilados en las diversas posiciones del grupo bifenilo y del derivado glucurónico.[2]



**Figura 1.1:** Estructura del FBP

Su prescripción varía según los fines médicos, ya que se utiliza para el tratamiento de

## Capítulo 1. Introducción

---

diversos procesos, como son la inflamación y el dolor causado por la artritis reumatoide [3], osteoartritis[4] y daños leves en los tejidos (tendinitis y bursitis),[5] prevención de migrañas,[6] tratamiento de quemaduras en la piel,[7] etc.

El FBP posee un carbono asimétrico en la parte propiónica, por lo que es posible la existencia de los dos enantiómeros (S)- y (R)-. Se sabe que el enantiómero (S)- es el farmacológicamente activo, siendo unas 80 veces más potente que su homólogo (R)-.[8]

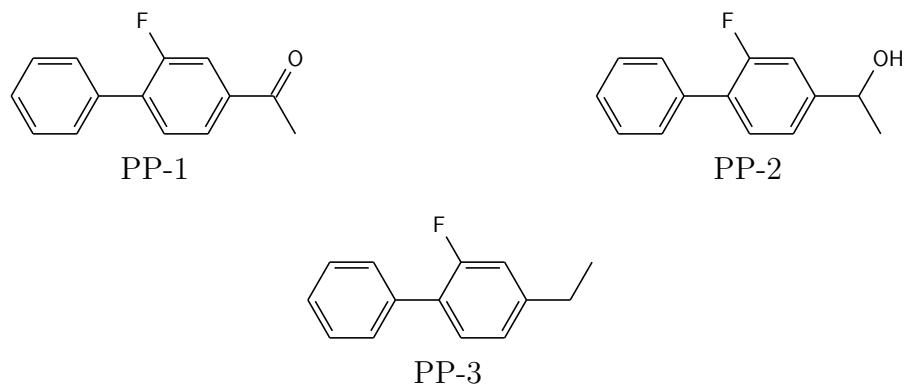


**Figura 1.2:** Estructura del (R)-FBP y (S)-FBP

# Capítulo 2

## Objetivos

El objeto de este proyecto final de carrera es la caracterización fotofísica y fotoquímica en distintos medios de los principales fotoproductos del FBP (Figura 2.1).



**Figura 2.1:** Principales fotoproductos del flurbiprofeno

En concreto, los objetivos que se pretenden conseguir son:

1. Sintetizar y aislar los tres principales fotoproductos del flurbiprofeno y caracterizarlos mediante técnicas espectroscópicas de elucidación estructural comunes (RMN, MS, etc).
2. Estudiar el comportamiento de dichos fotoproductos en disolución en distintos disolventes, concretamente en hexano, acetonitrilo y en una solución salina tamponada con fosfato (PBS, pH=7.4), mediante el uso de técnicas fotofísicas como fluorescencia, fosforescencia y fotólisis de destello láser (FDL).

## Capítulo 2. Objetivos

---

3. Estudiar la interacción de los tres fotoproductos con albúminas séricas, las proteínas transportadoras mayoritarias en la sangre, mediante técnicas fotofísicas.

# **Capítulo 3**

## **Justificación**

El flurbiprofeno es un fármaco comercial que se consume actualmente. Se ha estudiado que el fármaco no tenga indicaciones adversas para sus consumidores, pero no se han analizado hasta el momento los efectos fotobiológicos debidos a los fotoproductos derivados del mismo. Por ello la finalidad de este proyecto es conocer si dichos fotoproductos presentan riesgo fotobiológico.

En este contexto se continúan los estudios realizados en anteriores tesis doctorales donde se investigaron otros derivados del flurbiprofeno.

Por otro lado, la farmacología es una ciencia muy interesante desde mi punto de vista, y con este proyecto se puede profundizar en este tema. Además, el campo de la fotoquímica y fotofísica no se aborda en la carrera con mucho detalle con lo que se amplían los conocimientos en esta materia.

Por último, se pretende cumplir el último requisito imprescindible para la obtención del título de Ingeniero Químico en la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, donde se muestran los conocimientos adquiridos durante la carrera.



# Capítulo 4

## Estado del arte

### 4.1. Procesos fotoquímicos y fotofísicos

La fotoquímica, una subdisciplina de la química, es la ciencia relacionada con las interacciones entre átomos y moléculas con la luz (o radiación electromagnética).

Un proceso fotoquímico comienza con la absorción de radiación ultravioleta y/o visible (200-800 nm) por grupos cromóforos (cuyos electrones se encuentren en orbitales n o  $\pi$ , como dienos, grupos carbonilo, aromáticos, etc). Los espectros de absorción y emisión de una molécula proporcionan información sobre la estructura y la energía de los estados electrónicos excitados y puede ayudar a comprender e interpretar la reactividad fotoquímica y las propiedades fotofísicas de los compuestos.

Cualquier compuesto, después de absorber un fotón, pasa a un estado excitado que es inestable y busca volver a su estado fundamental. Esta desactivación de la molécula excitada se puede llevar a cabo por dos tipos de procesos[9]:

- Los **procesos fotoquímicos** son transformaciones que puede sufrir una molécula desde su estado electrónico excitado para dar lugar a estructuras químicas de diferente constitución o configuración, respecto a la del estado inicial.
- Los **procesos fotofísicos** suponen un cambio en el estado cuántico de la molécula sin que se produzca ninguna modificación en su naturaleza química. Estos procesos a su vez pueden dividirse en radiantes si se emite radiación electromagnética para desactivar la molécula, o no radiantes si no se produce ninguna emisión.

Dentro de los procesos radiantes más comunes se encuentran:

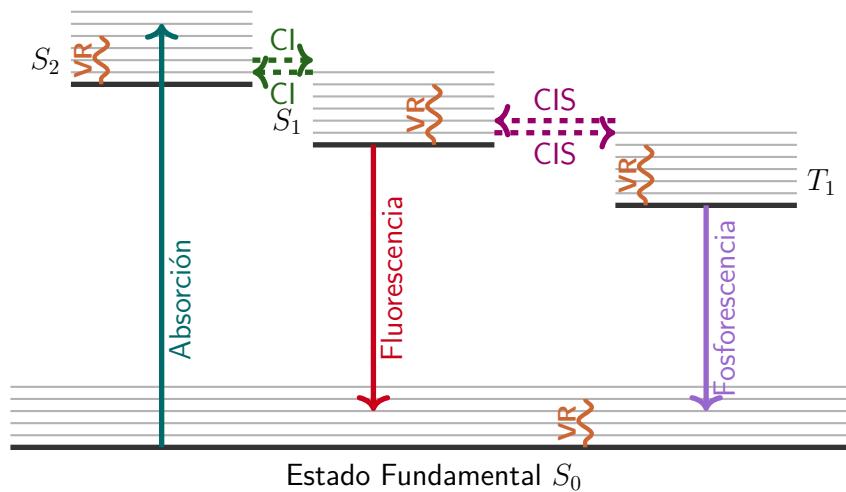
- Absorción (A): asociada a transiciones electrónicas entre diferentes niveles energéticos en ciertos grupos de la molécula. Está caracterizada por un coeficiente de absorción molar ( $\epsilon$ ).
- Fluorescencia (F): se produce la desactivación de una especie excitada desde el primer estado excitado singlete al estado fundamental ( $S_1 \rightarrow S_0 + h\nu$ ) con la consiguiente emisión de un fotón de radiación. Esta emisión está caracterizada por una constante de velocidad  $k_F$ .
- Fosforescencia (P): se produce la desactivación de una especie excitada desde el primer estado excitado triplete al estado fundamental ( $T_1 \rightarrow S_0 + h\nu$ ) con la consiguiente emisión de un fotón. Esta emisión está caracterizada por una constante de velocidad  $k_P$ .

Entre los procesos no radiantes más comunes se encuentran:

- Conversión interna (CI): transiciones entre estados de la misma multiplicidad en las que la molécula excitada pasa de un estado electrónico más alto a otro más bajo, ocasionando una serie de relajaciones vibracionales sin emisión de radiación. La CI está favorecida cuando dos niveles electrónicos son de energía similar. Ésta se caracteriza por una constante de velocidad  $k_{CI}$ .
- Cruce intersistemas (CIS): transiciones prohibidas entre estados de distinta multiplicidad (por ejemplo,  $S_1 \rightarrow T_1$  o  $T_1 \rightarrow S_0$ ), caracterizadas por una constante de velocidad  $k_{CIS}$ . Este proceso se ve favorecido en moléculas que contienen átomos pesados.
- Relajación vibracional (RV): transmisión de un exceso de energía de un nivel vibracional excitado a un nivel vibracional de menor energía.

Estos procesos se muestran en el diagrama de Jablonsky de la Figura 4.1. La duración de éstos se muestra en la Tabla 4.1.

Proceso fotoquímico	Tiempo (s)
Absorción	$10^{-15}$
Relajación vibracional	$10^{-12} - 10^{-10}$
Tiempo de vida del estado excitado $S_1$	$10^{-10} - 10^{-7}$
Conversión interna	$10^{-11} - 10^{-9}$
Cruce intersistemas	$10^{-10} - 10^{-6}$
Tiempo de vida del estado excitado $T_1$	$10^{-6}$

**Tabla 4.1:** Tiempo característico de los principales procesos fotoquímicos**Figura 4.1:** Diagrama de Jablonsky, donde se encuentran representados los diferentes niveles de energía (S = singlete y T = triplete)

## 4.2. Antiinflamatorios no esteroideos (AINES)

### 4.2.1. Perspectiva histórica

Desde la época de la medicina griega hasta la mitad del siglo XIX el descubrimiento de agentes medicinales fue catalogado como un arte empírico, donde se combinaron folklore y creencias mitológicas para la utilización de productos vegetales y minerales constituyentes de la farmacopea de la época.

Ya en el siglo V a.C., Hipócrates usó el extracto de la corteza y las hojas de sauce para el tratamiento del dolor y el control de la fiebre. Celsius (año 30 a.C.) describió los signos de inflamación (enrojecimiento, fiebre, dolor e hinchazón) y utilizó la corteza de

sauce para aliviarlos[10]. En 1763, el reverendo Edmund Stone inició el primer estudio clínico sobre los efectos del extracto de sauce como tratamiento antifebril, presentando los resultados obtenidos ante la Royal Society en Londres[11].

El ingrediente activo de la corteza de sauce se debe a la salicina (1828, Johan Andreas Buchner), un glucósido que por hidrólisis libera glucosa y alcohol salicílico. Éste puede ser convertido, tanto *in vivo* como por manipulación química, en ácido salicílico (antecedente de la aspirina), el cual posee propiedades analgésicas y antiinflamatorias. En 1859 Kolbe sintetiza por primera vez el ácido salicílico, y es en 1897 cuando Félix Hoffmann descubrió el ácido acetilsalicílico, principio activo de la aspirina, que posee propiedades analgésicas, antipiréticas y antiinflamatorias.

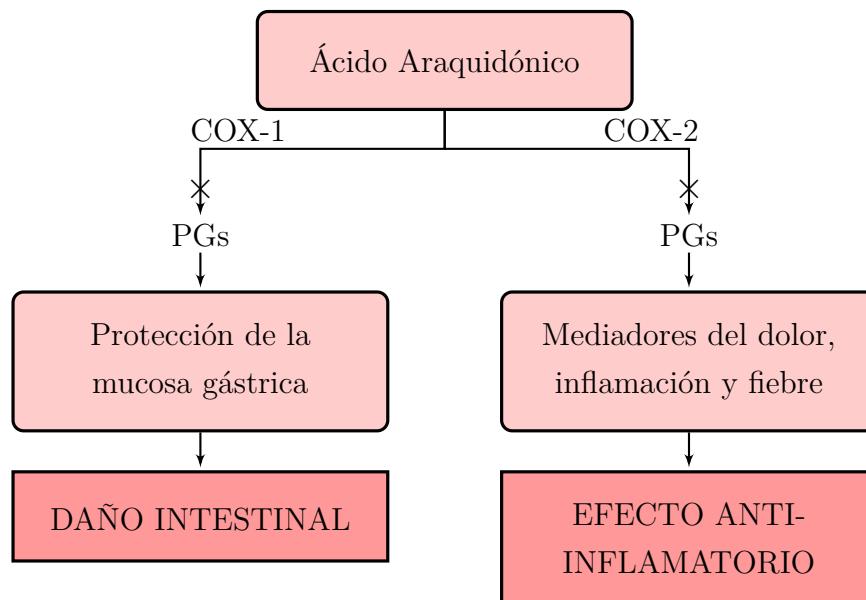
Tras el descubrimiento de la aspirina se impulsó el desarrollo de nuevos fármacos de la familia de los antiinflamatorios no esteroideos (AINES). A partir de la segunda mitad del siglo XX surgen fármacos como la indometacina (1960), el ibuprofeno, naproxeno, flurbiprofeno, ketoprofeno, carprofeno, benoxaprofeno y otros derivados de los ácidos 2-arylpropiónicos (1970-80), el meloxicam, rofecoxib, celecoxib, etc (1990).

#### **4.2.2. Actividad farmacológica de los AINES**

Los AINES constituyen uno de los grupos de fármacos más prescritos en la actualidad. Aproximadamente, a nivel mundial, unos 30 millones de personas consumen diariamente AINES. En España se prescribían hace poco más de una década más de 27 millones de envases anuales de estos fármacos.

Los AINES son un grupo de fármacos que poseen actividad antipirética y analgésica cuando son consumidos en dosis bajas y durante cortos períodos de tiempo, utilizándose para el tratamiento del dolor leve-moderado. Además, poseen actividad antiinflamatoria cuando son consumidos en dosis mayores y de forma continuada, siendo utilizados para tratar el dolor y la inflamación en diferentes enfermedades como artritis reumatoide, artrosis y otras dolencias. Sin embargo, aunque los efectos beneficiosos en el consumo de AINES son notables, también generan efectos adversos en el organismo cuando son consumidos de forma continuada, los cuales pueden llegar a ser graves; entre ellos cabe destacar: fallo renal, anemia, hepatitis, daño gastrointestinal (formación de úlceras), hemorragias digestivas y perforación[12]. La aparición de estos efectos secundarios conduce a la hospitalización de un gran número de pacientes. Por ejemplo, en EEUU se producen más de 100 mil hospitalizaciones graves cada año relacionadas con el daño gastrointestinal; alrededor de un 10 % de estos pacientes hospitalizados mueren [13].

Los antiinflamatorios no esteroideos inhiben la actividad de la enzima ciclooxygenasa responsable de la síntesis de prostaglandinas a partir del ácido araquidónico. El problema es que los AINES disponibles en el mercado inhiben tanto la ciclooxygenasa-1 (COX-1) que sintetizan las prostaglandinas responsables de la protección de la mucosa gástrica, como la ciclooxygenasa-2 (COX-2) que generan las prostaglandinas nocivas para el organismo, mediadores del dolor, inflamación y fiebre. La inhibición de la COX-2 es la parte que conlleva a la acción antiinflamatoria, analgésica y antipirética de los AINES , sin embargo, aquellos que simultáneamente inhiben a la COX-1 tienen la capacidad de causar hemorragias digestivas y úlcera, en especial la aspirina. Por lo tanto, se enfatizan las ventajas de inhibidores selectivos para la COX-2 (Figura 4.2).

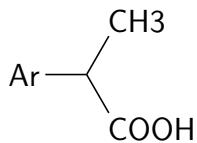


**Figura 4.2:** Mecanismo general de inhibición de COX-1 y COX-2 por acción de AINES no selectivos de COX.

### 4.2.3. Ácidos 2-arylpropiónicos

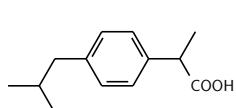
Los ácidos 2-arylpropiónicos son fármacos antiinflamatorios no esteroideos de uso común para el tratamiento de la inflamación, fiebre, dolor asociado a la artritis reumatoide, osteoartritis, daños leves en los tejidos, como tendinitis, prevención de migrañas, etc.[14, 16]

La estructura general de estos fármacos se muestra en la Figura 4.3 Poseen un grupo Ar que puede ser de distinta naturaleza (naftaleno, bifenilo, benzofenona, benzoíltiofeno, etc) y otra parte propiónica con un centro quiral que puede ser (S)- o (R)-.

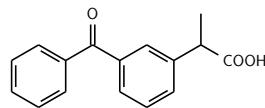


**Figura 4.3:** Estructura general de los ácidos 2-arylpropiónicos

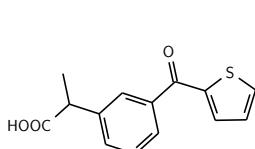
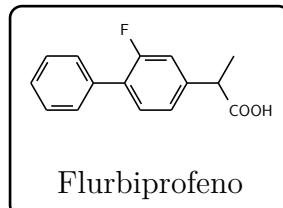
En la (Figura 4.4) se muestran las estructuras químicas de algunos fármacos de la familia de los ácidos 2-arylpropiónicos.



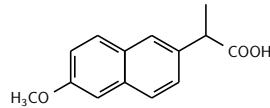
Ibuprofeno (IBP)



Ketroprofeno (KTP)



Suprofeno (SP)



Naproxeno(NPX)

**Figura 4.4:** Estructura química de algunos fármacos pertenecientes a la familia de los ácidos 2-arylpropionicos

Entre las distintas estructuras se destaca el ácido 2-(2-fluoro-1,1'-bifenil-4-il) propanoico, comúnmente llamado flurbiprofeno (FBP), objeto de estudio de este proyecto final de carrera. El flurbiprofeno se usa para aliviar el dolor, sensibilidad, inflamación (hinchazón) y la rigidez causada por la osteoartritis y la artritis reumatoide.

### 4.3. Proteínas

Las proteínas son macromoléculas muy abundantes en los organismos vivos. Son biomoléculas muy diversas y versátiles que cumplen con diversas funciones vitales,

pudiendo actuar como enzimas, hormonas, anticuerpos, receptores o como vehículo de transporte de diversas sustancias, tanto endógenas como exógenas[17].

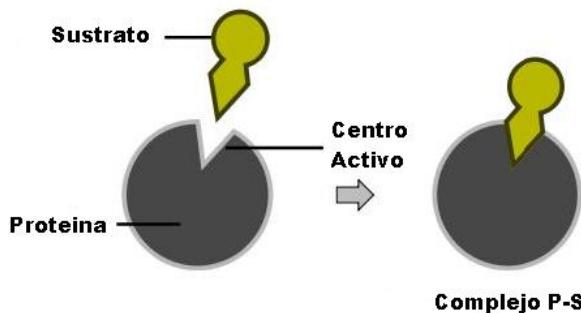
Desde el punto de vista de su estructura, las proteínas pueden ser consideradas como polímeros formados por aminoácidos. Constan de cuatro niveles estructurales: estructura primaria, secundaria, terciaria y cuaternaria. La estructura primaria viene determinada por la secuencia de aminoácidos que forman parte de la cadena. La estructura secundaria ocurre cuando la secuencia de aminoácidos adquiere una disposición espacial estable, que viene dada por el plegamiento de la cadena polipeptídica debido a enlaces de hidrógeno. La estructura terciaria de las proteínas da información sobre la disposición espacial de la estructura secundaria de un polipéptido al plegarse sobre si misma, originando una estructura globular. Las interacciones que tienen lugar en la estructura terciaria son puentes disulfuro, enlaces de hidrógeno, interacciones iónicas e interacciones hidrófobas. La estructura cuaternaria viene dada por la disposición espacial de las distintas cadenas polipeptídicas de una proteína multimérica, es decir, compuesta por varios péptidos. Tanto la interacción entre los aminoácidos de la cadena polipeptídica, como la disposición geométrica que adoptan conducen a la formación del sitio de unión o centro activo, el cual constituye una cavidad donde tiene lugar la interacción específica entre sustratos de distinta naturaleza y la proteína. Es, por tanto, donde la proteína desarrolla sus funciones propias[18]. El centro activo está formado por las cadenas laterales de los residuos de aminoácido específicos que forman parte del mismo, lo que le confiere una disposición tridimensional particular distinta al resto de la proteína[19].

Generalmente, las interacciones más significativas que tienen lugar entre un sustrato y los aminoácidos del centro activo de la proteína son de naturaleza iónica, por enlace de hidrógeno o tipo van der Waals.

En la Figura 4.5 se muestra de forma esquemática la interacción entre un sustrato y el sitio de unión de la proteína.

#### 4.3.1. Tipos de proteínas

Las proteínas pueden interaccionar con una gran variedad de sustratos, como iones metálicos, vitaminas, ácidos grasos, fármacos, etc. Las proteínas que son susceptibles de interaccionar con fármacos forman partes de las denominadas dianas farmacológicas. Entre ellas se encuentran, los receptores, algunas enzimas y las proteínas transportadoras[20].



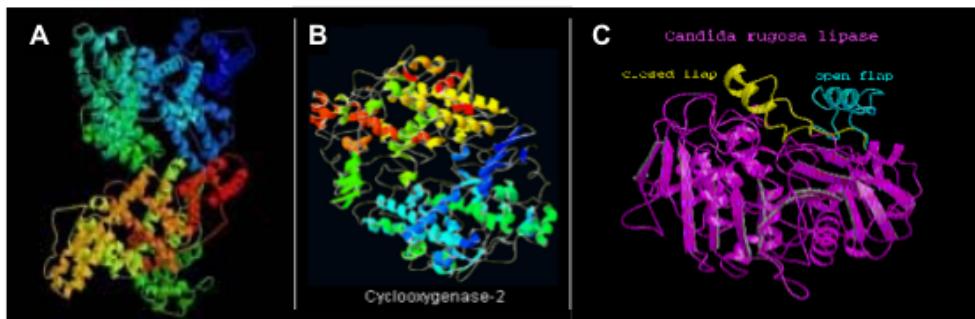
**Figura 4.5:** Esquema de la formación de un complejo proteína-sustrato (P-S)

- Los **receptores farmacológicos** son moléculas, generalmente de naturaleza proteica, en las que el fármaco desarrolla su acción al interaccionar en el centro activo de éstas. Las interacciones que tienen lugar entre el fármaco y el receptor son generalmente lábiles y reversibles.
- Las **enzimas** son biocatalizadores de naturaleza proteica[21, 22]. Todas las reacciones químicas del metabolismo celular se realizan gracias a la acción de estos catalizadores, cuya función principal es la de incrementar la velocidad de los procesos químicos, actuando sobre un sustrato de forma específica y enormemente eficiente. Las enzimas son fundamentales, ya que las funciones vitales de cualquier célula serían demasiado lentas[22]. En lo que se refiere a los fármacos, las enzimas son de gran importancia ya que gracias a ellas se forman sus metabolitos.
- Las **proteínas transportadoras** son aquellas que proporcionan un medio de transporte, bien en el plasma o a través de la membrana celular, a aquellos sustratos que interaccionan en el centro activo de ésta. Estas proteínas se emplearán para el estudio de los derivados del flurbiprofeno.

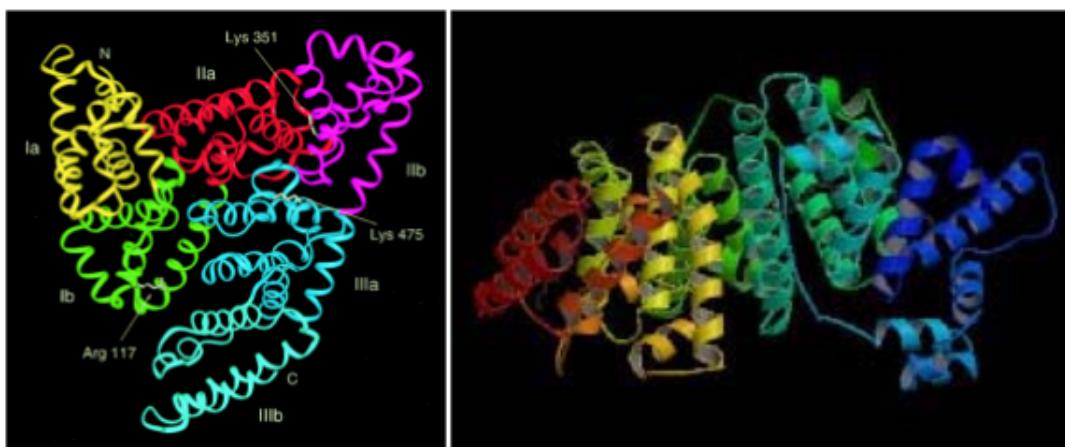
En la Figura 4.6 se muestran algunos ejemplos de proteínas descritas.

### Albúmina Sérica (AS)

La albúmina sérica se encuentra presente en todas las especies animales. Se puede extraer de bovinos (ASB), ratas (ASR), conejos (ASC), cerdos (ASCe), perros (ASP), humanos (ASH), etc. La estructura de algunas de estas albúminas se muestra en la Figura 4.7.



**Figura 4.6:** A) Albúmina sérica humana (proteína transportadora); B) Ciclooxigenasa-2 (receptor farmacológico); C) Lipasa de Cándida rugosa (enzima)



**Figura 4.7:** Estructura de la albúmina sérica humana (izquierda) y de la albúmina sérica bovina (derecha)

La albúmina es una proteína que se sintetiza en el hígado. Puede encontrarse en cuquier fluido corporal, como en el fluido vítreo y acuoso ocular, en el sudor, en las lágrimas, saliva y sangre donde es la proteína transportadora más abundante (3.5-4 g en 100 ml). Su función principal es actuar como vehículo de transporte y distribución de sustrancias endógenas y exógenas en la sangre, como por ejemplo el transporte de fármacos, influyendo en la farmacocinética.

Además, puede actuar como almacén de ciertas toxinas, incluso interaccionando con ellas para que sean menos nocivas o como enzima si interacciona con moléculas pequeñas. También, puede incrementar la solubilidad de los sustratos en la sangre.

En concreto, la proteína sérica humana es una proteína globular que constituye alrededor del 60 % del total de proteína en la sangre. Posee una masa molecular promedio

de 66500 Da y consta de 585 aminoácidos, entre los cuales se forman un total de 17 puentes disulfuro; existe un tiol libre (Cys-34) y un único triptófano (Trp-214).

Las albúminas de las otras especies estudiadas presentan una similitud en la secuencia peptídica del 70-80 % respecto a la humana. Existen diferencias en cuanto al número de aminoácidos que la forman y al número de triptófanos presentes.

#### 4.3.2. Interacción con sustratos

Las albúminas son proteínas flexibles que pueden adaptar su estructura para interaccionar con una gran variedad de sustratos en sus distintos sitios de unión. Tienen una gran afinidad por ácidos grasos, aminoácidos, algunos metabolitos como la bilirrubina y por fármacos, entre los que se encuentran los antiinflamatorios no esteroideos (AINES).

El estudio de la interacción entre el fármaco y la AS es importante para conocer la biodistribución, el metabolismo, la eliminación y el efecto farmacológico en el organismo.

Los AINES presentan un alto grado de unión con la albúmina, en muchos casos el 99 %[23]. Las interacciones pueden ser por puente de hidrógeno, puente salino o de tipo van der Waals, y generalmente reversibles.

Las AS poseen varios dominios de unión con sustratos, pero se sigue aceptando por consenso la existencia de dos sitios específicos de unión o centros activos para moléculas orgánicas pequeñas. Estos centros activos fueron designados por Sudlow como sitio I (o sitio de unión de la warfarina) y sitio II (o sitio de unión del diazepam)[24]. En la Tabla 4.2 se muestran algunas características de los dos principales sitios de unión de ASH.

Sitio de unión	Sitio I	Sitio II
<b>Sustratos específicos</b>	Warfarina, dalsilnamida	Dansilasarcosina diacepán
<b>Otros sustratos afines</b>	ésteres de los ácidos 2-arylpropiónicos	ácidos 2-arylpropiónicos
<b>Residuos de a.a. presentes</b>	Trp 214, Arg 218	His 146, Lys 194, Arg 410, Tyr 411

**Tabla 4.2:** Características de los dos principales sitios de unión de ASH

# **Capítulo 5**

## **Equipos**

### **5.1. Equipos generales**

#### **5.1.1. Espectrómetro de masas**

La espectrometría de masas es una técnica de análisis cualitativo de amplia utilización para la determinación de estructuras orgánicas, por si sola o en combinación con otras técnicas de espectrofotometría.

La espectrometría de masas está basada en la obtención de iones a partir de moléculas orgánicas en fase gaseosa; una vez obtenidos estos iones, se separan de acuerdo con su masa y su carga, y finalmente se detectan por medio de un dispositivo adecuado.

Esencialmente, el espectrómetro de masas debe ser capaz de desempeñar cuatro funciones:

1. El espectrómetro de masas debe ser capaz de vaporizar substancias de volatilidades muy diferentes.
2. Una vez volatilizada la muestra, el espectrómetro debe ser capaz de originar iones a partir de las moléculas neutras en fase gaseosa.
3. Una vez generados los iones, el espectrómetro debe ser capaz de separarlos en función de su relación masa/carga.
4. Una vez separados los iones, el espectrómetro debe ser capaz de detectar los iones formados y registrar la información adecuadamente.

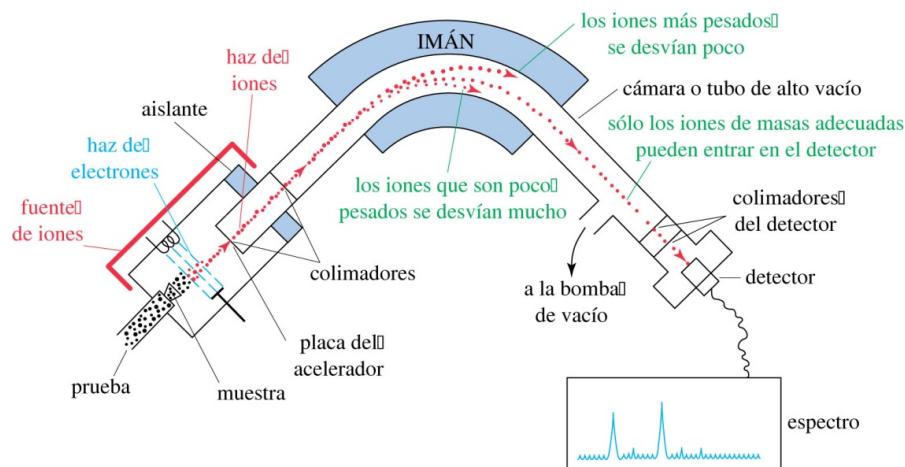
Ya que el espectrómetro debe cumplir estas cuatro funciones, deberá constar de cuatro partes más o menos independientes:

## Capítulo 5. Equipos

---

1. Sistema de introducción de muestras.
2. Fuente de iones.
3. Analizador, para la separación de iones.
4. Sistema detector y registrador.

En la Figura 5.1 se muestra de manera esquemática el funcionamiento de un espectrómetro de masas



**Figura 5.1:** Funcionamiento de un espectrómetro de masas

Respecto al equipo utilizado, los análisis de cromatografía de gases-espectrometría de masas se registraron con un espectrómetro Hewlett Packard HP 6869.



**Figura 5.2:** Espectrómetro de masas empleado

### 5.1.2. Resonancia magnética nuclear

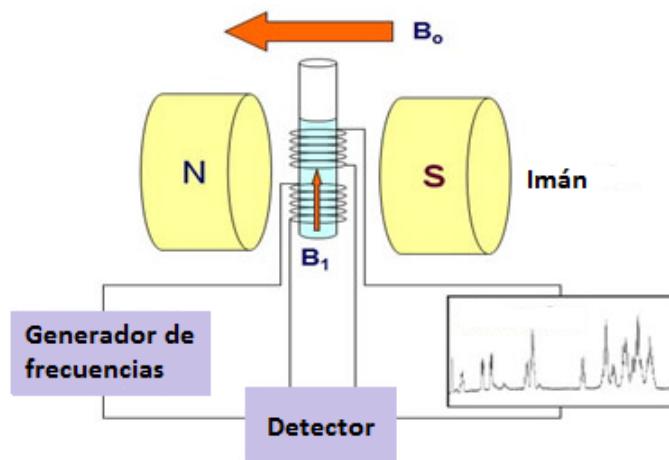
La espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN) es una técnica empleada para conocer estructuras moleculares, aunque también se puede emplear con fines cuantitativos.

Algunos núcleos atómicos sometidos a un campo magnético externo absorben radiación electromagnética en la región de radiofrecuencias. En función del entorno de dichos núcleos la frecuencia exacta de esta absorción varía, con lo que se puede emplear para determinar la estructura de la molécula. Sin embargo, para que se pueda emplear la técnica los núcleos deben tener un momento magnético distinto de cero. Esta condición la cumplen los núcleos con número másico y número atómico impar, entre ellos los más importantes en química orgánica son:  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{19}\text{F}$  y  $^{15}\text{N}$ .

Se prefieren los núcleos de número cuántico de espín nuclear igual a  $1/2$ , ya que carecen de un momento cuadrupolar eléctrico que produce un ensanchamiento de las señales de RMN. También es mejor que el isótopo sea abundante en la naturaleza, ya que la intensidad de la señal dependerá de la concentración de esos núcleos activos. Por eso, uno de los más útiles es el  $^1\text{H}$ , dando lugar a la espectroscopia de resonancia magnética nuclear de protón. En química orgánica, también es importante el  $^{13}\text{C}$ , aunque se trata de un núcleo menos abundante.

Un espectrómetro de RMN consta de las siguientes partes fundamentales:

- Un **imán** que genere un campo magnético estable, el cual puede ser de una intensidad variable, definiendo la frecuencia de resonancia de cada núcleo. Generalmente se identifica cada espectrómetro por la frecuencia de resonancia del protón, así en un imán de 7.046 Tesla, los núcleos de  $^1\text{H}$  resuenan a 300 MHz, y por tanto sería un espectrómetro de 300 MHz.
- Una **sonda**, que se sitúa dentro del imán, en la que se introduce la muestra y que consta de las bobinas responsables de emitir y recibir las radiofrecuencias (RF). El número de bobinas y su disposición determinan el tipo y las aplicaciones de cada sonda.
- Una **consola** en la que se generan los pulsos de RF y se controla el resto de la parte electrónica del espectrómetro.
- Un **ordenador** que sirve de interfaz con el espectrómetro y con el que se analiza toda la información obtenida.



**Figura 5.3:** Descripción del funcionamiento del RMN

Para la determinación estructural de moléculas orgánicas y organometálicas los experimentos más utilizados, como ya se ha comentado, son:

- Espectro monodimensional de  $^1\text{H}$ : Da información del número y tipo de hidrógenos diferentes que hay en la molécula. La posición en el espectro (desplazamiento químico) determina el entorno químico del núcleo, y por tanto da información de grupos funcionales a los que pertenecen o que están cerca. La forma de la señal da información de los protones cercanos acoplados escalarmente.
- Espectro monodimensional de  $^{13}\text{C}$ : Al igual que en  $^1\text{H}$  el desplazamiento químico da información de los grupos funcionales. Dependiendo del tipo de experimento realizado se puede obtener información del número de hidrógenos unidos a cada carbono

En concreto, se ha empleado un espectrómetro Bruker de 400 MHz, utilizando como disolvente cloroformo deuterado. Los valores de desplazamiento químico ( $\delta$ ) son expresados en partes por millón (ppm), y son relativos a la señal del tetrametilsilano (TMS), escogido como referencia.

### 5.1.3. Cromatografía líquida de alta resolución (HPLC)

La Cromatografía líquida de alta eficacia o *High performance liquid chromatography* (HPLC) es una técnica que se utiliza para separar los componentes de una mezcla en función de las interacciones químicas entre las sustancias analizadas y la columna cromatográfica.

Esta técnica consiste en hacer pasar el compuesto por la columna a través de la fase estacionaria (normalmente, contiene pequeñas partículas con ciertas características químicas en la superficie) mediante el bombeo de líquido (fase móvil) a alta presión a través de la columna. La muestra a analizar es introducida en pequeñas cantidades y sus componentes se retrasan dependiendo de las interacciones químicas o físicas con la fase estacionaria a medida que avanzan por la columna, separando así los distintos componentes. El grado de retención de los componentes de la muestra depende de la naturaleza del compuesto, de la composición de la fase estacionaria y de la fase móvil, y el tiempo que tarda un compuesto en salir de la columna se denomina tiempo de retención. La utilización de presión en este tipo de cromatografías incrementa la velocidad lineal de los compuestos dentro de la columna y reduce así su difusión dentro de la columna mejorando la resolución de la cromatografía. Los disolventes más utilizados son: agua, metanol, acetonitrilo, diclorometano, acetato de etilo y hexano.

#### Tipos de HPLC

Existen diferentes tipos de HPLC en función de la columna cromatográfica empleada, entre ellos, se destaca:

- **Cromatografía de fase directa:** se caracteriza por separar los compuestos en base a su polaridad. Esta técnica utiliza una fase estacionaria polar y una fase móvil apolar, y se emplea cuando el compuesto de interés es bastante polar. El compuesto polar se asocia y queda retenido por la fase estacionaria.
- **Cromatografía de fase reversa:** emplea una fase estacionaria apolar y una fase móvil de polaridad moderada. El tiempo de retención es mayor para las moléculas de naturaleza apolar, mientras que las moléculas de carácter polar avanzan más rápidamente.

Concretamente, se ha utilizado un equipo Waters Integrity System, compuesto por una bomba Waters 2695 de cuatro canales y un detector ultravioleta Diode-Array Waters 996, acoplado a un detector de masas con cámara de ionización por impacto electrónico Thermabeam. Se utilizó como eluyente acetonitrilo (de grado HPLC).

## 5.2. Equipos fotoquímicos/fotofísicos

### 5.2.1. Espectrofotómetro Ultravioleta-Visible

La espectrofotometría de absorción ultravioleta-visible (UV-vis) se basa en la absorción de radiación por la materia en el rango de longitudes de onda comprendido entre el ultravioleta cercano y el infrarrojo cercano (180-1100 nm). Cuando una especie química absorbe radiación pasa a un estado excitado.

El equipo utilizado para realizar espectros de absorción es un espectrofotómetro. Los componentes básicos son: una fuente de radiación, un sistema que permita seleccionar una banda estrecha de longitudes de onda, una cubeta o recipiente que contenga la muestra, un detector, y un sistema de tratamiento y lectura de la señal.

- Las **fuentes de radiación** deben ser continuas en una amplia zona del espectro, de intensidad elevada y constante con la longitud de onda. En la zona del visible la fuente más utilizada es la lámpara de filamento de wolframio, basada en la emisión de radiación por efecto de la temperatura.
- Los **filtros y monocromadores** son sistemas que seleccionan un haz de radiación con un estrecho rango de longitudes de onda. Existen filtros de absorción, basados en la absorción selectiva de ciertos rangos de longitudes de onda, y filtros de interferencia, que mediante reflexiones de la radiación en un dieléctrico transparente recubierto en ambas caras por un material reflectante, refuerzan unas longitudes de onda mientras que las otras sufren interferencias destructivas. Los filtros de absorción se usan en la región del visible y los de interferencia en las regiones ultravioleta y visible. Los monocromadores se caracterizan por producir un haz de gran purezapectral y por variar la longitud de onda de la radiación de forma continua y en un amplio intervalo.
- Los **detectores** son transductores que convierten la radiación electromagnética en un corriente o voltaje que posteriormente es amplificada y cuantificada.

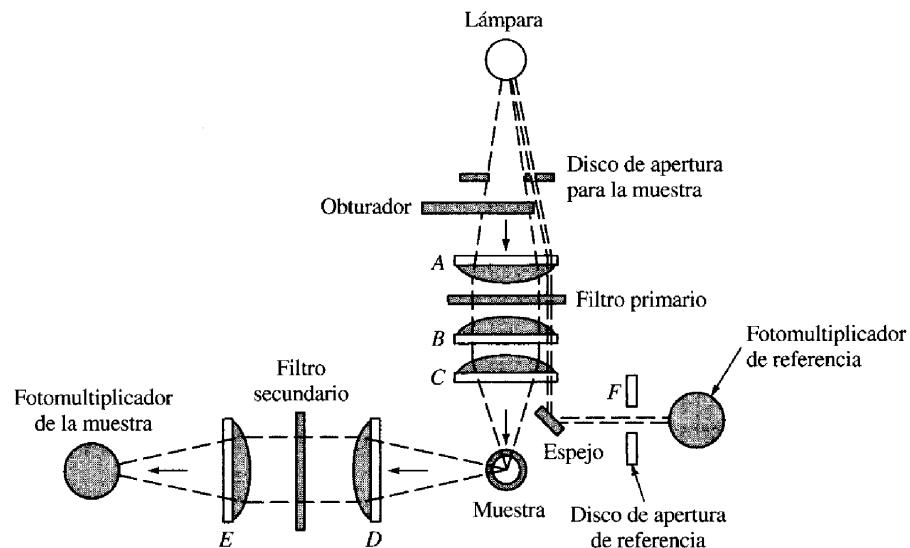
Especificando el equipo empleado, los espectros de absorción ultravioleta-visible (UV-vis) se registraron en un espectrofotómetro Jasco.

### 5.2.2. Espectrofluorímetro

Un espectrofluorímetro es un dispositivo de laboratorio utilizado para medir los parámetros de la fluorescencia: su intensidad y la distribución de longitudes de onda

del espectro de emisión después de la excitación por un cierto espectro de luz. Como ya se ha comentado en el apartado 4.1, la fluorescencia mide la emisión de desactivación del estado singlete excitado al estado fundamental.

Respecto a los componentes de un espectrofluorímetro, éstos son similares a los que se encuentran en los espectrofotómetros ultravioleta/visible. En la figura 5.4 se muestra la configuración característica de éstos.



**Figura 5.4:** Descripción del funcionamiento de un espectrofluorímetro

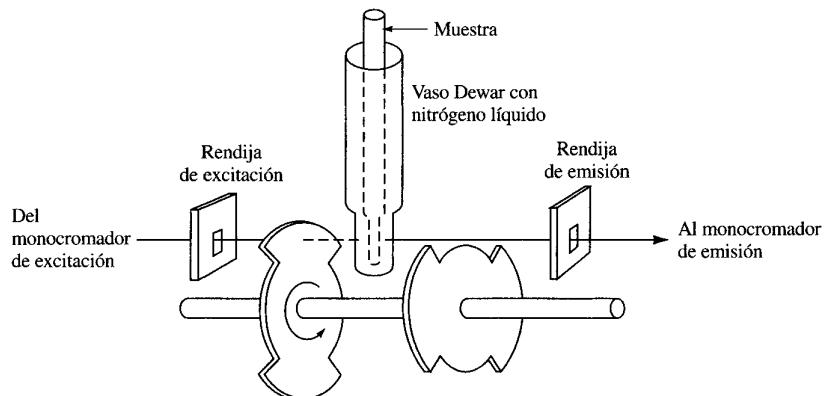
Un espectrofluorímetro consta principalmente de los siguientes componentes:

- **Lámpara:** emite luz para excitar a la muestra.
- **Filtros y monocromadores:** se utilizan para la selección de la longitud de onda del haz de excitación y de la radiación fluorescente resultante.
- **Detectores:** es quién capta la emisión resultante de la muestra. Además, como la señal de fluorescencia típica es de baja intensidad, por ello, para su medida se necesitan ganancias de amplificador elevadas.

En cuanto al equipo utilizado para la medida de fluorescencia, se utilizó un espectrofluorímetro Jasco. Los espectros se registraron empleando una cubeta de cuarzo 10 x 10 mm<sup>2</sup> con una capacidad volumétrica de 4 mL.

### 5.2.3. Fosforímetro

Los instrumentos que se utilizan para estudios de fosforescencia tienen diseños similares a los fluorómetros y a los espectrofluorímetros antes considerados, sólo difieren en que requieren dos componentes adicionales. El primero es un dispositivo que irradia alternativamente la muestra y, después de un retraso en el tiempo adecuado, mide la intensidad de fosforescencia. El retraso en el tiempo es necesario para diferenciar la emisión fosforescente de larga vida de la emisión fluorescente de corta vida que podrían originarse en la misma muestra. Se utilizan dispositivos mecánicos y electrónicos y muchos instrumentos de fluorescencia comerciales tienen accesorios para medidas de fosforescencia. Un ejemplo de un tipo de dispositivo mecánico se muestra en la Figura 5.5.



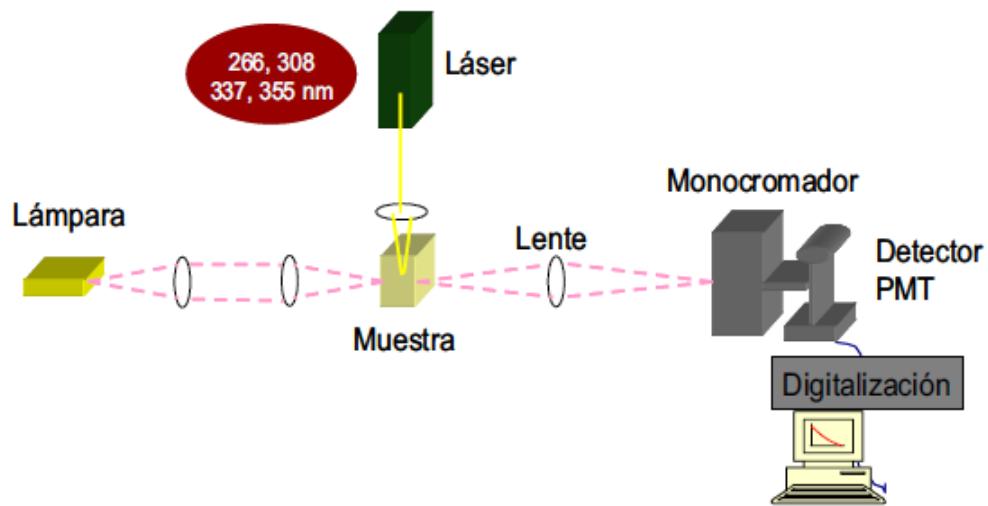
**Figura 5.5:** Descripción del funcionamiento de un espectrofosforímetro

### 5.2.4. Fotólisis de destello láser (FDL)

La técnica de fotólisis de destello láser es una técnica de absorción resuelta en el tiempo que consiste en la generación de especies excitadas mediante un haz excitador (láser pulsado de elevada intensidad) y en registrar la absorción de éstas mediante un haz analizador, en la región UV-vis con resolución temporal. En la figura 5.6 se muestra de forma esquemática un sistema de FDL.

Los componentes de un sistema de FDL son los siguientes:

- Haz excitador: láser pulsado, que puede ser de XeF, Nd, etc. En este caso se utilizó un sistema láser pulsado de Nd-YAG (Quantel Brilliant, de 266 ó 355 nm).



**Figura 5.6:** Esquema de un sistema FDL

- Haz analizador: se pueden utilizar distintos tipos de fuentes de radiación, como infrarrojo, UV-vis, etc. aunque el más común es el de UV-vis. En este caso se utilizó un detector UV-vis (lámpara de Xe).



# Capítulo 6

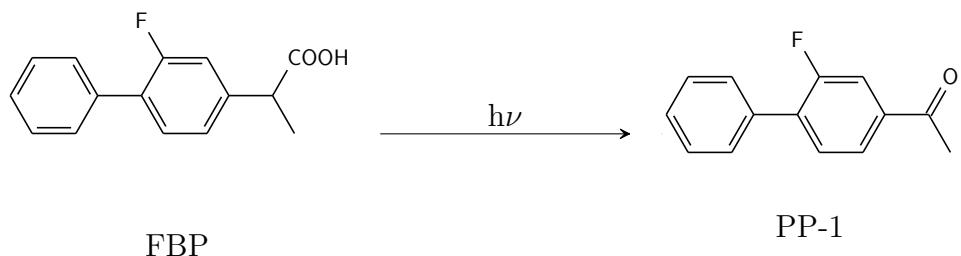
## Datos experimentales y resultados

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en el estudio de cada uno de los tres fotoproductos. Es por ello, que se ha dividido el capítulo en tres secciones, donde en cada una de ellas se muestran los resultados particulares obtenidos para cada sustrato.

### 6.1. 1-(2-fluor-[1,1'-bifenil]-4-il) etanona

#### 6.1.1. Introducción

El primer fotoproducto que se pretende estudiar es la 1-(2-fluor-[1,1'-bifenil]-4-il)etanona (PP-1). La diferencia con su precursor FBP es la presencia de un grupo carbonilo en lugar de carboxilo, así como un átomo de carbono menos.



**Figura 6.1:** Estructura de FBP y uno de sus fotoproductos (PP-1)

### 6.1.2. Obtención

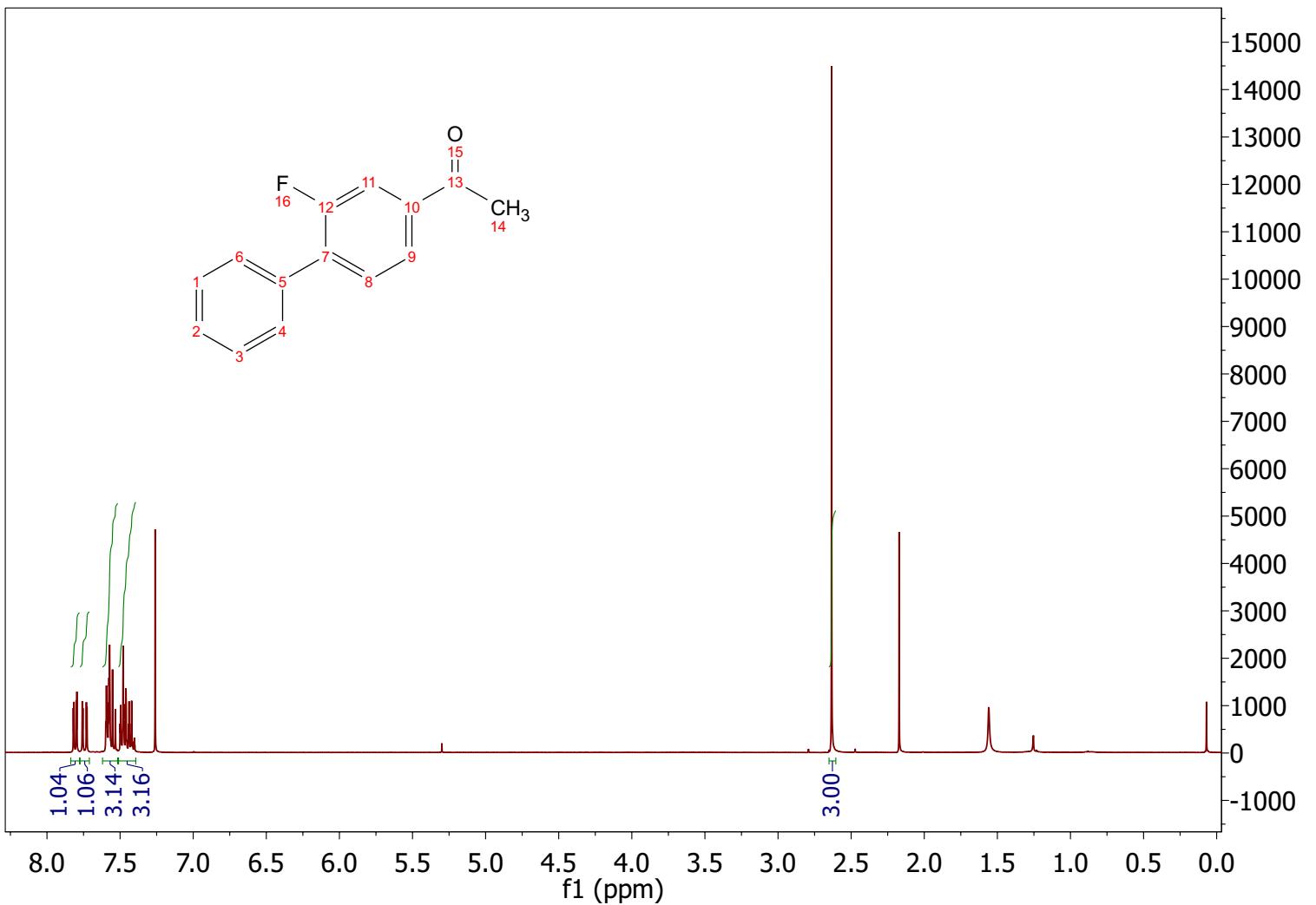
Desde el punto de vista experimental, el proceso de obtención de los fotoproductos consiste en irradiar FBP disuelto en acetonitrilo. Las irradiaciones se llevaron a cabo en atmósfera  $N_2$ , a 255 nm y en tubos de cuarzo. Sin embargo, la conversión es muy baja.

En concreto, el PP-1 se ha obtenido irradiando FBP en acetonitrilo durante 15 horas. Tras la irradiación se purificó mediante PLC (Preparative Liquid Chromatography) y HPLC (High Performance Liquid Chromatography) para así conseguir el fotoproducto con una elevada pureza para realizar los ensayos fotoquímicos.

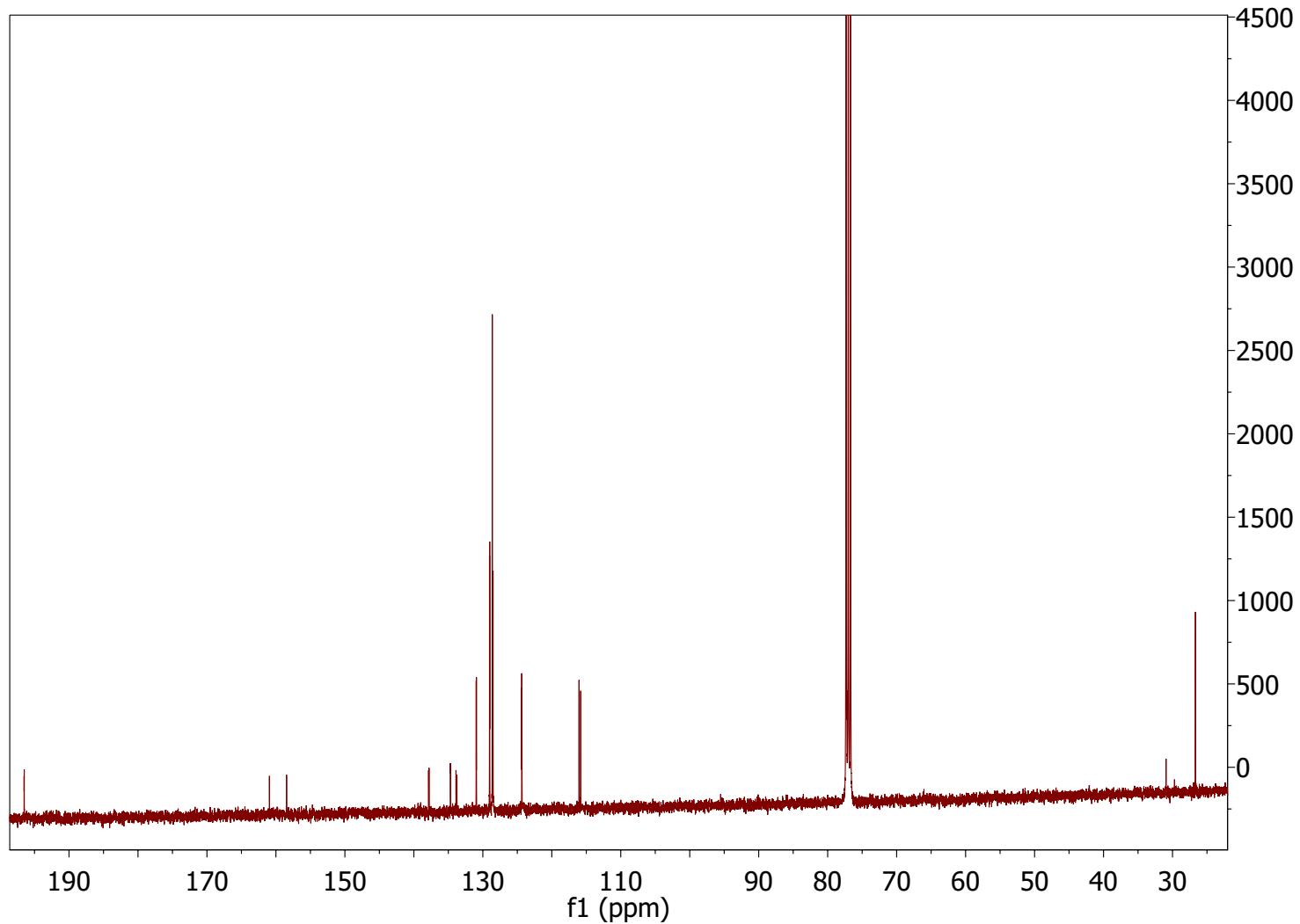
Partiendo de 200 mg de FBP, tras la purificación se obtienen 5.8 mg de PP-1 de elevada pureza, lo que supone un rendimiento de 3.3 %

A continuación se muestra el cromatograma (CG), el espectro de masas y los espectros de RMN-<sup>1</sup>H y el RMN-<sup>13</sup>C del compuesto, como criterio de pureza y caracterización espectroscópica del compuesto.

6.1. 1-(2-fluor-[1,1'-bifenyl]-4-yl) etanona



RMN-<sup>13</sup>C (CDCl<sub>3</sub>) δ(ppm): 197.19, 158.80, 138.35, 135.23, 134.43, 129.69, 129.18, 129.20, 124.62, 116.58, 31.48.



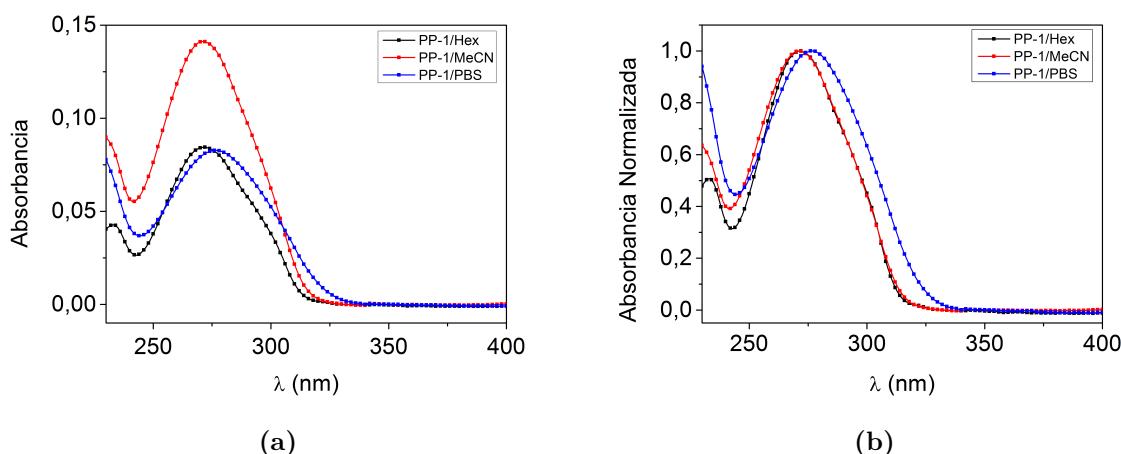
### 6.1.3. Estudios fotofísicos

En este apartado se presentan los resultados obtenidos para PP-1 en hexano, acetonitrilo y PBS (pH=7.4).

Las disoluciones se prepararon a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5}$ M de PP-1 y se realizaron medidas de absorción en estado estacionario, fluorescencia, fosforescencia y absorción transitoria.

#### Espectros de absorción en estado estacionario

Primero se mide la absorción para determinar su  $\varepsilon$  (Figura 6.2)



**Figura 6.2:** Espectro de absorción UV-visible de PP-1 en diferentes disolventes. (a) a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5}$ M (b) Normalizado.

La determinación del  $\varepsilon$  se realiza a partir la ecuación 6.1.

$$Abs = \varepsilon \cdot l \cdot [C] \quad (6.1)$$

donde  $l$  es la longitud de la cubeta empleada,  $[C]$  es la concentración de la muestra en mol/L y  $Abs$  la absorbancia para una cierta longitud de onda. Los  $\varepsilon$  calculado para los distintos disolventes se recogen en la Tabla 6.1, donde se toma  $l$  igual a 1 cm y la absorbancia obtenida a 266 nm.

También se midió la absorción en atmósfera inerte, pues los ensayos se realizaron en presencia de nitrógeno, pero no se observaron cambios.

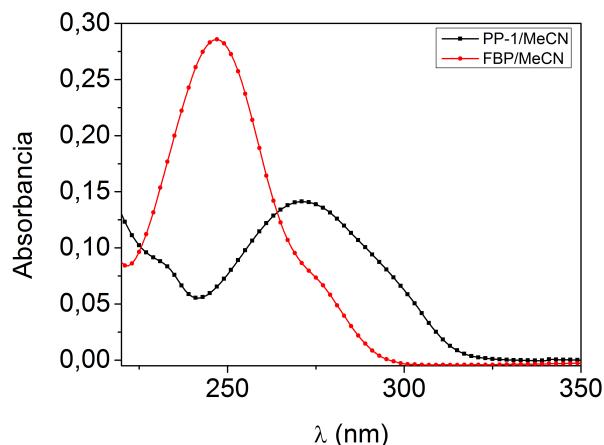
Se puede observar que en acetonitrilo la banda de absorción para PP-1 está desplazada hacia longitudes de onda más largas que la del FBP, puesto que máximo para PP-1 está a 271 nm mientras que para el FBP es de 246 nm (Figura 6.3). Por ello PP-1

Disolvente	$Abs$	$\varepsilon \left( \frac{mol}{cm^2} \right)$
MeCN	0,13604	$6,80 \cdot 10^6$
Hexano	0,08044	$4,02 \cdot 10^6$
PBS	0,07399	$3,70 \cdot 10^6$

**Tabla 6.1:** Valor de  $\varepsilon$  a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5} M$  y a  $\lambda=266\text{nm}$ 

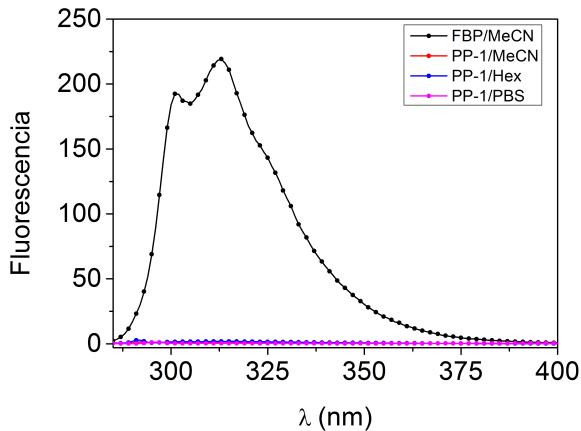
se podría considerar potencialmente un agente fotofísico, a ser capaz de absorber luz por encima de 300nm (luz solar), pudiendo generar algún daño en el organismo.

Además, se observa que el espectro en hexano y acetonitrilo coinciden totalmente una vez normalizados, pero en PBS la banda se desplaza hacia la derecha.

**Figura 6.3:** Comparación del espectro UV-visible de PP-1 con su precursor el FBP en acetonitrilo

## Fluorescencia

Después de medir la absorción del compuesto, se mide la emisión desde de su estado singlete ( $\lambda_{exc} = 266\text{ nm}$ ,  $N_2$ ). Para el caso de PP-1, no se observa prácticamente emisión por fluorescencia como se comprueba en la Figura 6.4, lo que está de acuerdo con el comportamiento típico de una cetona aromática.



**Figura 6.4:** Espectro de fluorescencia de PP-1 en los distintos disolventes comparado con su precursor FBP

Respecto a los rendimientos cuánticos de fluorescencia ( $\phi_F$ ), se determinaron en los tres disolventes disolventes empleados. Para su cálculo se hace uso de la ecuación 6.2.

$$\phi_F = \phi_{F(\text{referencia})} \frac{A}{A_{\text{referencia}}} \frac{Abs_{\text{referencia}}}{Abs} \frac{n^2}{n_{\text{referencia}}^2} \quad (6.2)$$

Como compuesto de referencia se ha tomado el FBP puesto que sus rendimientos cuánticos ya fueron obtenidos en tesis doctorales anteriores. A continuación, se muestra en la Tabla 6.2 con los rendimientos del FBP.

Disolvente	$\phi_F$	$\tau_F$ (ns)	$k_F$
MeCN	0.20 (0.22)	1.7	1.2x10 <sup>8</sup>
Hexano	0.32 (0.33)	1.2	1.6x10 <sup>8</sup>
PBS	0.15 (0.15)	0.7	2.1x10 <sup>8</sup>

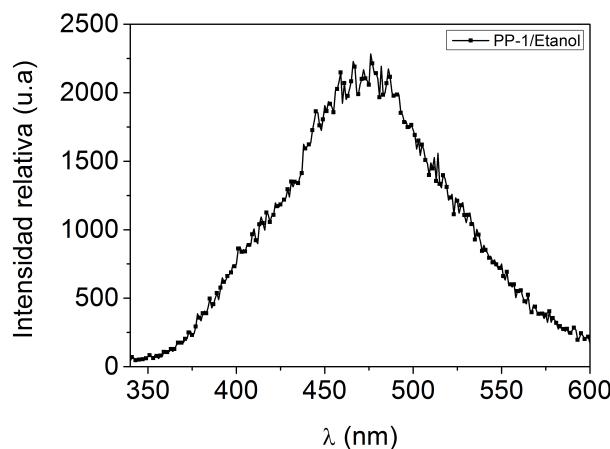
**Tabla 6.2:** Propiedades fotofísicas derivadas del primer estado excitado singlete del FBP en disolución y en atmósfera de  $N_2$ , que se han tomado como referencia. Medidas obtenidas excitando a 254 ó 281 nm (entre paréntesis).

Utilizando estos rendimientos cuánticos de referencia, y realizando los ensayos de absorción y fluorescencia se pueden obtener  $\phi_F$  para PP-1, que resultaron ser menores de  $10^{-4}$ .

Debido a la baja emisión de fluorescencia no se ha podido determinar las energías de singlete ( $E_S$ ) ni los tiempos de vida ( $\tau_F$ ).

## Fosforescencia

La fosforescencia, al igual que la fluorescencia, es un proceso de desactivación de una molécula desde su estado excitado, en este caso desde el estado excitado triplete. Para ello se preparó una disolución a la misma concentración ( $2 \cdot 10^{-5}$  M) en etanol puesto que este ensayo se realiza en matriz sólida a  $T=78$  K (Figura 6.5).



**Figura 6.5:** Espectro de fosforescencia de PP-1

Respecto a la energía de triplete, ésta se ha determinado utilizando la relación de Planck (Ecuación 6.3).

$$E_T = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (6.3)$$

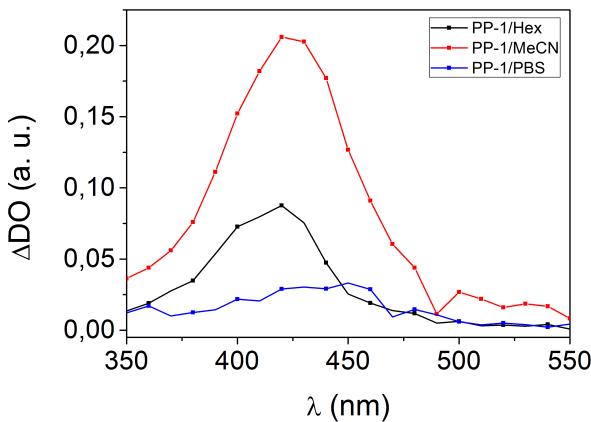
donde  $h$  es la constante de Planck y  $c$  la velocidad de la luz. La  $\lambda$  empleada es aquella que corresponde al 5 % de subida de la curva de fosforescencia, que en este caso es a 360 nm.

Por tanto, la energía de triplete obtenida para PP-1 es de 79.3 kcal/mol.

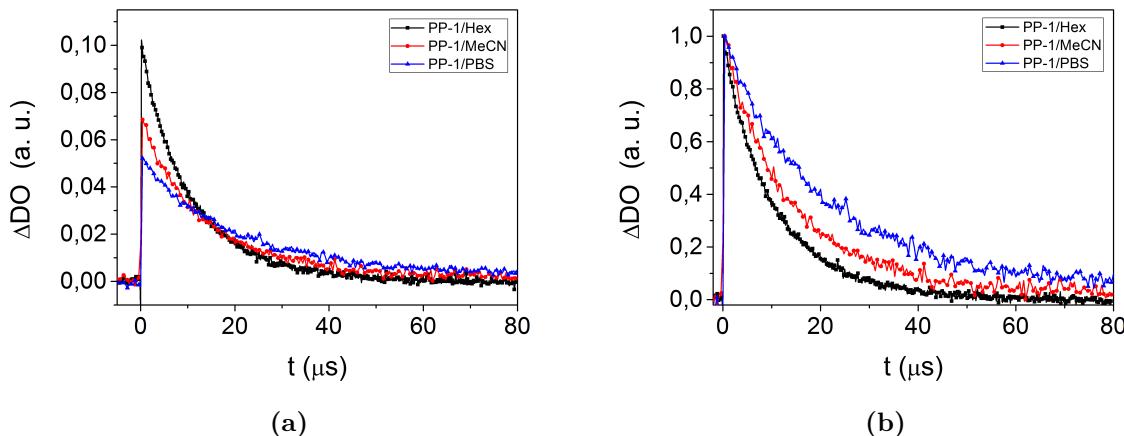
## Fotólisis de destello láser

Con este ensayo se pretende detectar las especies transitorias de PP-1 en los distintos medios. El ensayo se realiza con las mismas disoluciones a la misma concentración ( $2 \cdot 10^{-5}$  M) en atmósfera inerte ( $N_2$ ).

En la Figura 6.6 se muestra el espectro de absorción en estado transitorio.

**Figura 6.6:** Espectro de absorción transitorio de PP-1

En el espectro anterior, se observa que PP-1 en acetonitrilo y hexano aparece una especie transitoria a 420 nm cuando se excita a una longitud de onda de 266 nm. Es por ello que para conocer las desactivaciones de las especies transitorias se ha monitorizado a  $\lambda=420$  nm (Figura 6.7).

**Figura 6.7:** (a) Desapariciones de PP-1 (b) Desapariciones normalizadas de PP-1 monitorizadas a 420 nm en diferentes disolventes a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5}$  M en atmósfera inerte.

Se observa claramente que, una vez normalizadas las desactivaciones de PP-1, la especie transitoria en PBS tiene una vida más larga que en acetonitrilo, y éste más larga que en hexano, lo cual es razonable puesto que el acetonitrilo tiene una polaridad intermedia con respecto a los otros dos disolventes.

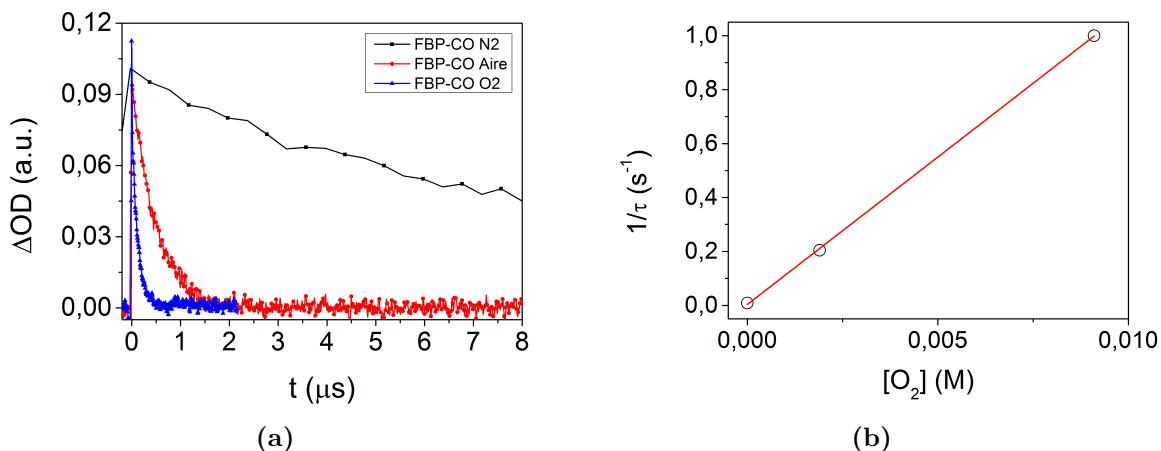
A continuación, en la Tabla 6.3 se recogen los tiempos de vida de las especies transitorias obtenidas a partir del ajuste exponencial haciendo uso de la ecuación 6.4.

$$y = y_0 + A_1 \cdot \exp\left(\frac{-x}{\tau_{trans}}\right) \quad (6.4)$$

Disolvente	$\tau_{trans} (\mu s)$
Hexano	10.3
MeCN	13.8
PBS	20.9

**Tabla 6.3:** Tiempos de vida de las especies transitorias de PP-1 en disolución y en atmósfera de N<sub>2</sub>. Medidas obtenidas excitando a 266 nm y monitorizando a 420 nm.

Además, para comprobar que se trata del estado triplete se realiza un ensayo para conocer la constante de quenching por O<sub>2</sub>, ya que el estado triplete se desactiva en presencia de O<sub>2</sub>. Para ello, se prepara una disolución de PP-1 en tres ambientes distintos: N<sub>2</sub>, aire y O<sub>2</sub>.



**Figura 6.8:** (a) Desactivación monitorizadas a 420 nm (b) Ecuación Stern-Volmer

En la gráfica se observa que conforme aumentamos la cantidad de N<sub>2</sub> presente en la disolución mayor es también el tiempo de desactivación de la especie, con lo cual se puede afirmar que se trata del estado triplete, puesto que a mayor concentración de O<sub>2</sub> la especie se desactiva más rápido. Además, el punto máximo para los tres casos es el mismo, con lo que se puede deducir que todo se desactiva por el estado triplete.

En la segunda gráfica, se representan los tres puntos en los distintos ambientes ajustados por la ecuación de Stern-Volmer (6.5).

$$\frac{1}{\tau} = k_Q \cdot [O_2] \quad (6.5)$$

Donde la pendiente de la recta es la constante de Quenching por oxígeno,  $k_Q$ . Para PP-1  $k_Q$  es  $1.1 \cdot 10^9 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ .

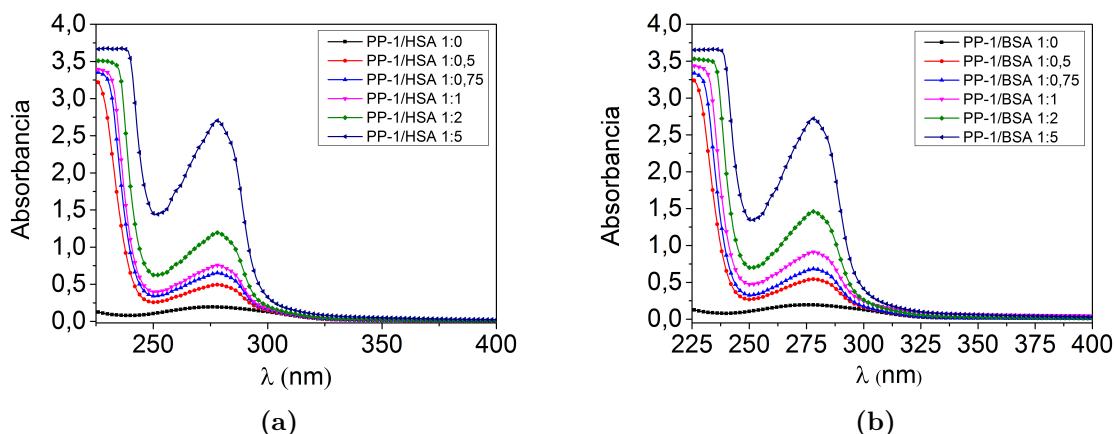
#### 6.1.4. Estudio en proteínas

Además de estudiar el fotoproducto en disolución se ha analizado su interacción con proteínas en PBS a pH = 7.4, ya que se trata de pH cercano al fisiológico. El estudio se realiza con albúminas séricas, las proteínas transportadoras más abundantes en sangre. En nuestro caso hemos utilizado albúminas de dos tipos: humana y bovina, para observar si existen diferencias entre sus interacciones.

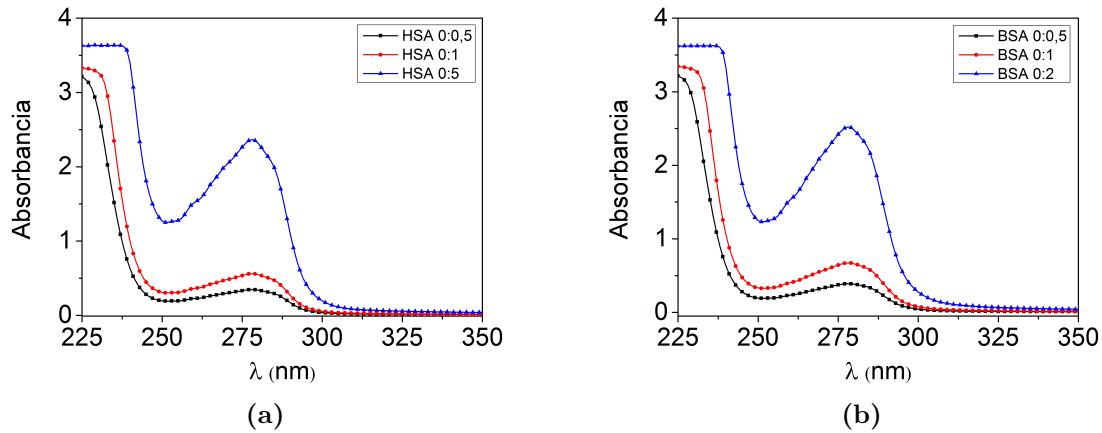
Se prepararon soluciones con distintas proporciones de PP-1 y proteína. Para ello, se ha fijado la concentración de PP-1 a  $2 \cdot 10^{-5} \text{ M}$  y se ha añadido proteína a relaciones molares 1:0, 1:0.5, 1:0.75, 1:1, 1:2 y 1:5.

#### Espectro de absorción en estado estacionario

Se registran los espectros de absorción PP-1/SA a distintas relaciones molares y se compara con la proteína sola. Los resultados se muestran en las Figuras 6.9 y 6.10.

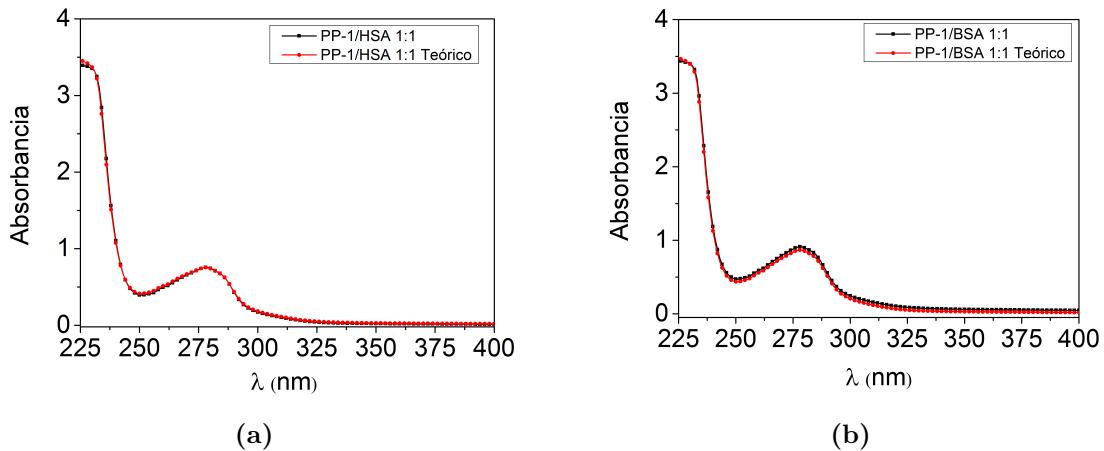


**Figura 6.9:** (a) Espectro UV-visible de PP-1 en HSA (b) Espectro UV-visible de PP-1 en BSA a diferentes proporciones



**Figura 6.10:** (a) Espectro UV-visible de HSA (b) Espectro UV-visible de BSA a diferentes concentraciones

Además, se comprobó que la absorción teórica (suma de la absorción de PP-1 y SA por separado) coincidían con la de la mezcla, por tanto no se observa ninguna interacción significativa en el estado fundamental.



**Figura 6.11:** (a) Espectro UV-visible de PP-1 en HSA (1:1) (b) Espectro UV-visible de PP-1 en BSA (1:1) y sus respectivos cálculos teóricos (suma de ambas absorciones por separado).

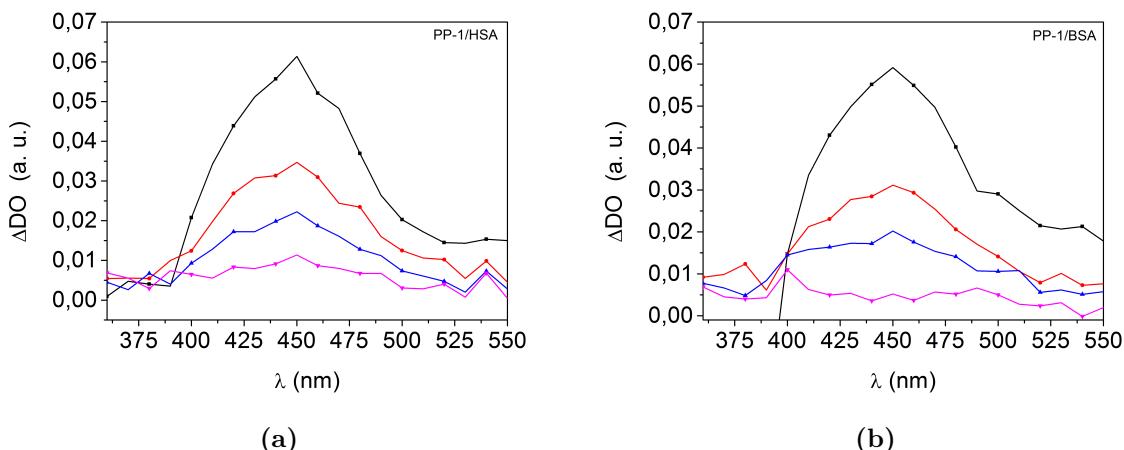
En la Figura 6.11 se comprueba que la suma de la absorción del PP-1 y SA, tanto de la albúmina humana como bovina medida por separado coincide con la absorción de ambos compuestos juntos. Lo que demuestra que no hay interacciones en estado fundamental.

## Fluorescencia

No procede realizar el estudio de fluorescencia para PP-1 ya que apenas emite, como se ha comentado en el apartado 6.1.3, y solo se observaría la emisión de la proteína.

## Fotólisis de destello láser (FDL)

En la Figura 6.12 se muestra el espectro de absorción en estado transitorio.



**Figura 6.12:** (a)Espectro de absorción transitorio de PP-1/HSA (b) Espectro de absorción transitorio de PP-1/BSA

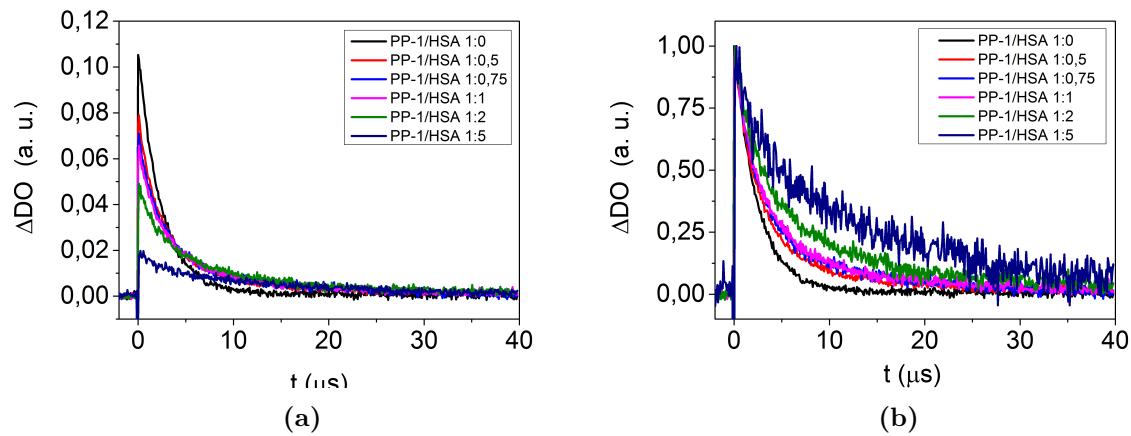
Los datos obtenidos sobre la desactivación de PP-1 en presencia de HSA y BSA se recogen a 450 nm puesto que es donde aparece el máximo de absorción de la especie transitoria (Figuras 6.13 y 6.14).

Analizando los datos normalizados de la desactivación del fotoproducto desde su estado excitado, se destaca que a medida que se aumenta la concentración de proteína el tiempo de vida de la especie excitada se alarga.

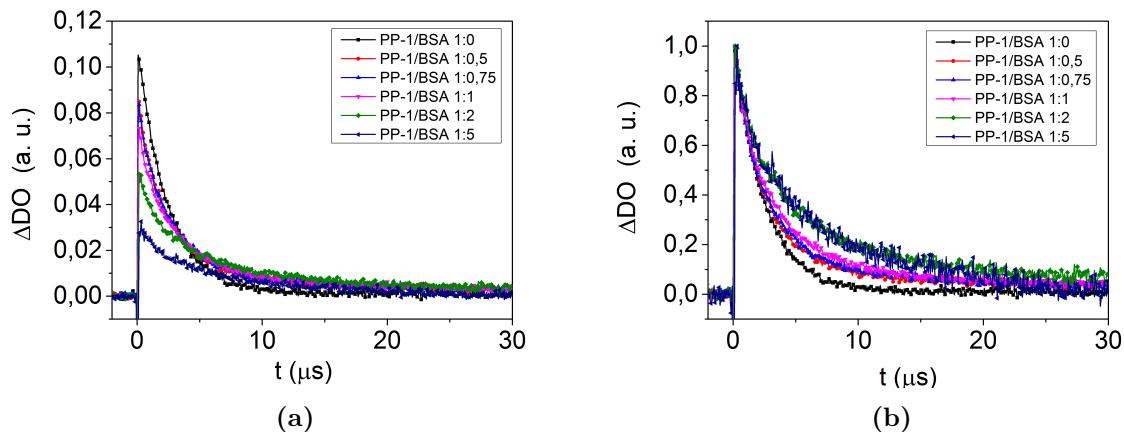
Las desactivaciones se han ajustado mediante el uso de funciones exponenciales de distinto orden para obtener los tiempos de vida de las especies transitorias. El mejor ajuste ha sido a una ecuación biexponencial, siguiendo la siguiente expresión:

$$y = y_0 + A_1 \cdot \exp\left(\frac{x}{\tau_1}\right) + A_2 \cdot \exp\left(\frac{x}{\tau_2}\right) \quad (6.6)$$

Para conseguir el porcentaje de PP-1 libre e unido a la proteína en las distintas proporciones estudiadas, se ha considerado que el tiempo de vida cuando PP-1 está libre es el de PP-1/SA (1:0) ya que no hay proteína y PP-1 unido a la proteína cuando



**Figura 6.13:** (a) Desactivaciones monitorizadas a 450nm de PP-1 en HSA (b) Desactivaciones normalizadas monitorizadas a 450nm de PP-1 en HSA



**Figura 6.14:** (a) Desactivaciones monitorizadas a 450nm del PP-1 en BSA (b) Desactivaciones normalizadas monitorizadas a 450nm del PP-1 en BSA

está totalmente saturado PP-1/SA (1:5). Por tanto, se han fijado estos dos tiempos de vida para así obtener la proporción de cada uno de ellos en las distintas proporciones.

En la Tabla 6.4 y 6.5 , se muestran los tiempos de vida de las especies transitorias en las distintas proporciones molares.

Además, se muestra gráficamente las proporciones de PP-1 libre y unido a la proteína dependiendo de la concentración de la proteína (Figura 6.15).

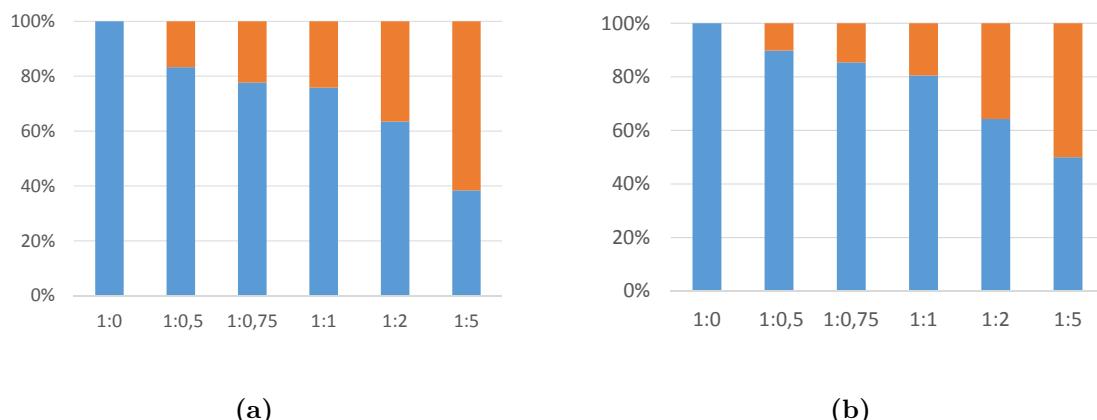
### 6.1. 1-(2-fluor-[1,1'-bifenil]-4-il) etanona

PP-1/HSA	$A_1(\tau_1 = 2.4\mu s)$	$A_2(\tau_2 = 17.8\mu s)$
	PP-1 libre	PP-1 unido a la proteína
<b>1:0</b>	100	0
<b>1:0.5</b>	83.3	16.7
<b>1:0.75</b>	77.7	22.3
<b>1:1</b>	75.8	24.2
<b>1:2</b>	63.5	36.5
<b>1:5</b>	38.4	61.6

**Tabla 6.4:** Proporción en porcentajes de cada tiempo de vida en las diferentes concentraciones de albúmina sérica humana

PP-1/BSA	$A_1(\tau_1 = 2.4\mu s)$	$A_2(\tau_2 = 11.3\mu s)$
<b>1:0</b>	100	0
<b>1:0.5</b>	89.8	10.2
<b>1:0.75</b>	85.4	14.6
<b>1:1</b>	80.5	19.5
<b>1:2</b>	64.3	35.7
<b>1:5</b>	50	50

**Tabla 6.5:** Proporción en porcentajes de cada tiempo de vida en las diferentes concentraciones de albúmina sérica bobina

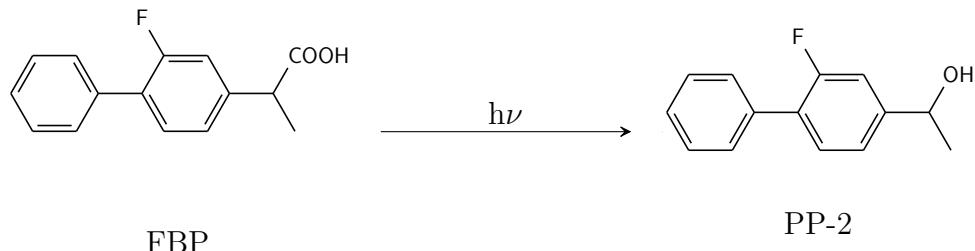


**Figura 6.15:** PP-1 libre (azul); PP-1 unido a la proteína (naranja) (a)para HSA (b)para BSA.

## 6.2. 1-(2-fluor-[1,1'-bifenil]-4-il)etanol

### 6.2.1. Introducción

El siguiente fotoproducto que se pretende estudiar es el alcohol (PP-2). La diferencia con el FBP es la presencia del grupo hidroxilo en lugar de carboxilo.



**Figura 6.16:** Estructura de FBP y uno de sus fotoproductos (PP-2)

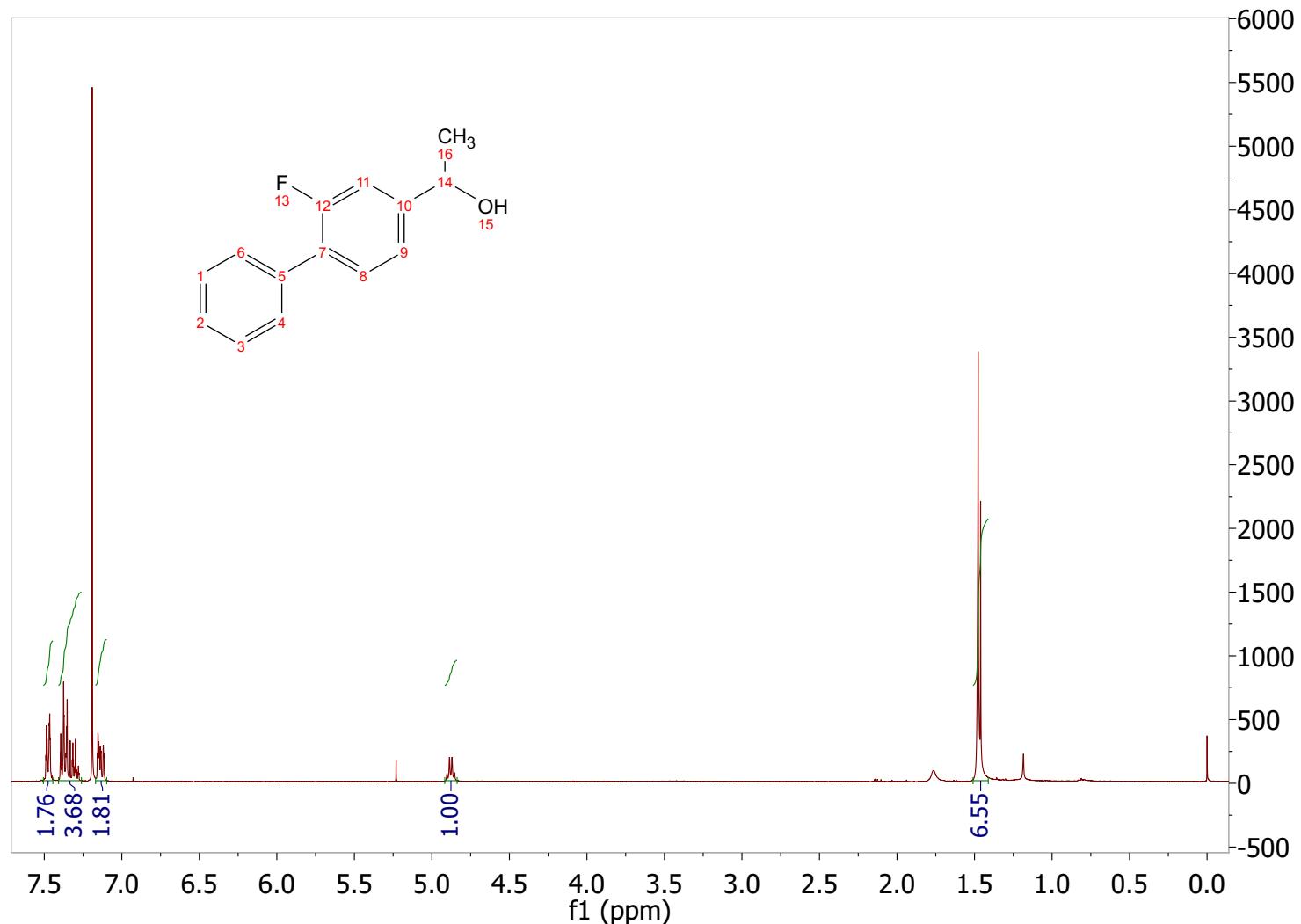
### 6.2.2. Obtención

Al igual que para el anterior fotoproducto, PP-2 se ha obtenido irradiando en el fotoreactor flurbiprofeno en acetonitrilo en tubos de cuarzo durante 15 horas en atmósfera inerte a 255nm . Se purificó mediante PLC (Preparative Liquid Chromatography) y HPLC (High Performance Liquid Chromatography) para conseguir así el fotoproducto con una pureza adecuada para realizar los ensayos fotofísicos.

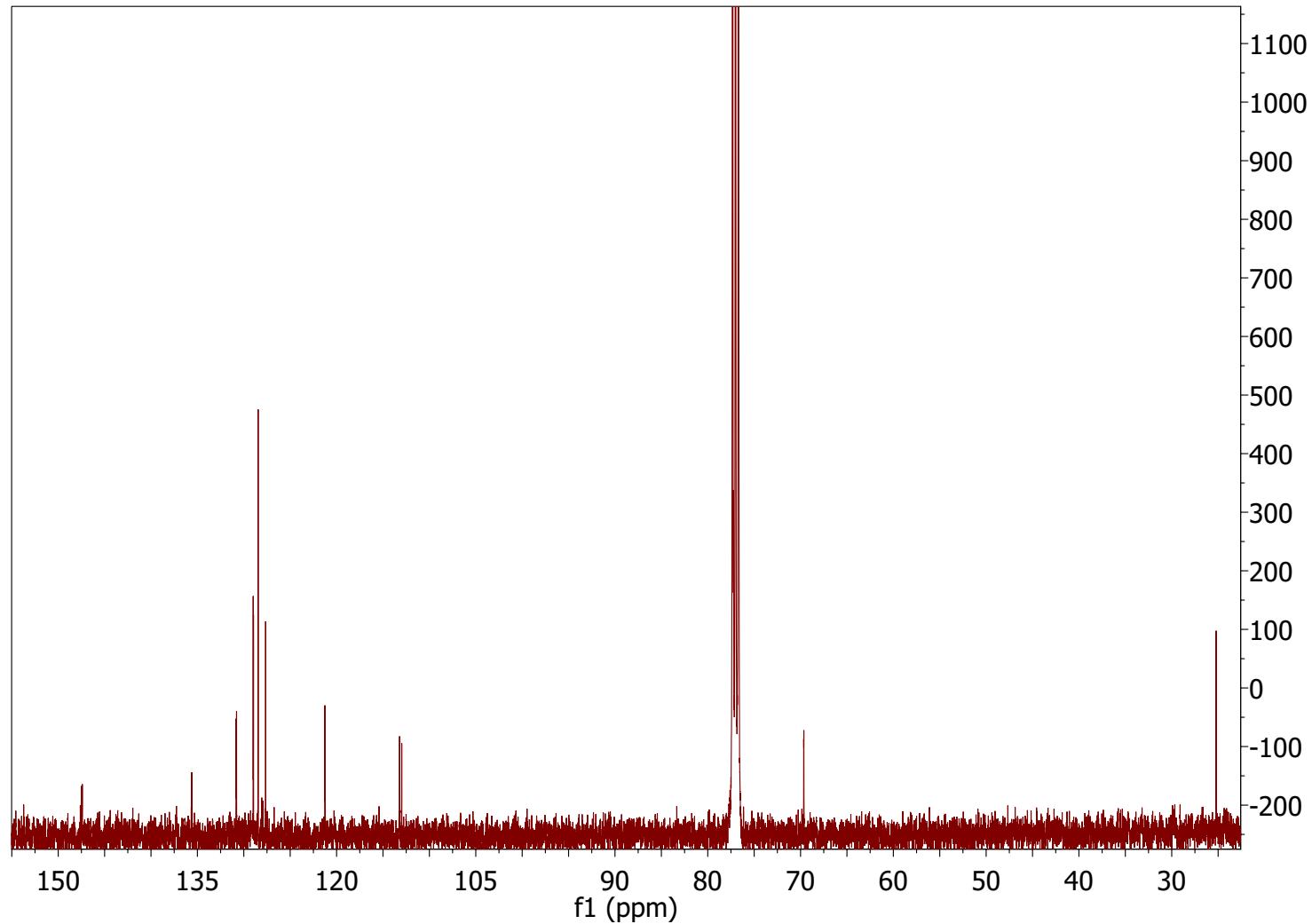
Partiendo de 200 mg de FBP, después de la purificación se obtienen 1.8 mg de PP-2 de elevada pureza, lo que supone un rendimiento de 1.01 %.

A continuación se muestra el cromatograma (CG), el espectro de masas y los espectros de RMN-<sup>1</sup>H y el RMN-<sup>13</sup>C del compuesto como criterio de pureza y caracterización espectroscópica del compuesto.

6.2. 1-(2-fluor-[1,1'-bifenyl]-4-yl)ethanol



RMN-<sup>13</sup>C (CDCl<sub>3</sub>) δ(ppm): 148.07, 135.27, 131.49, 129.62, 129.09, 128.30, 121.89, 113.87, 70.29, 25.72.



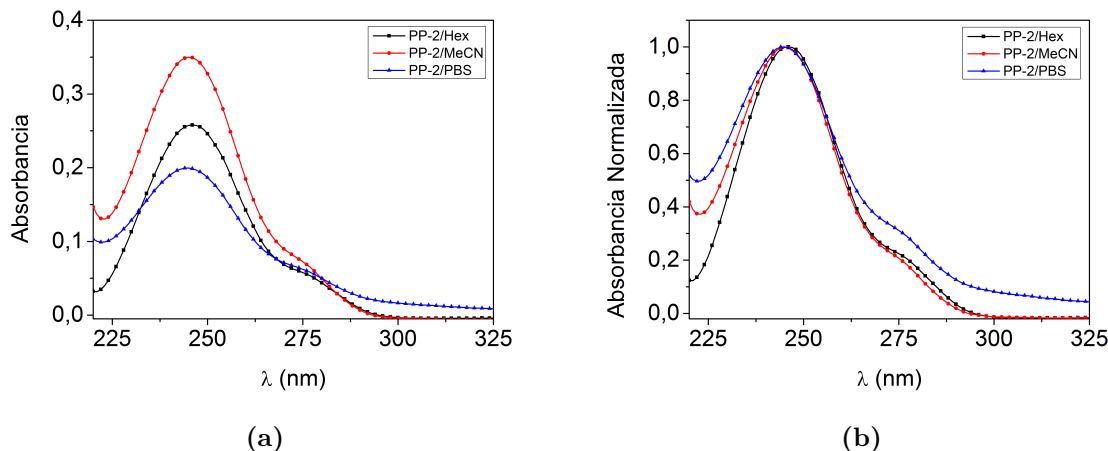
### 6.2.3. Estudio en disolución

En este apartado se muestran los resultados obtenidos para PP-2 en hexano, acetona y PBS.

Al igual que para el primer fotoproducto, las disoluciones se prepararon a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5}$  M y se realizaron medidas de absorción, fluorescencia y absorción transitoria.

#### Espectros de absorción en estado estacionario

Los espectros de UV/vis se muestran a continuación:



**Figura 6.17:** Espectro de absorción UV-visible de PP-2 en diferentes disolventes. (a) a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5}$  M (b) Normalizado.

Para la determinación de  $\varepsilon$  se ha utilizado la ecuación 6.1, que se muestra en el apartado 6.1.3. En la Tabla 6.6, se recogen los valores obtenidos.

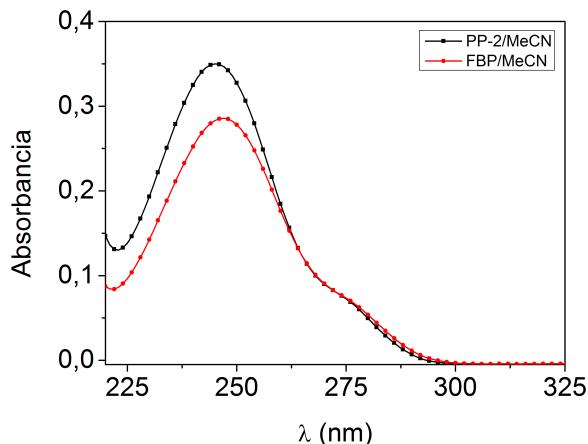
Disolvente	<i>Abs</i>	$\varepsilon \left( \frac{mol}{cm^2} \right)$
MeCN	0,11378	$5.69 \cdot 10^6$
Hexano	0,08658	$4.33 \cdot 10^6$
PBS	0,08281	$5.14 \cdot 10^6$

**Tabla 6.6:** Valor de  $\varepsilon$  a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5}$  M y a  $\lambda=266$ nm

También se midió la absorción en atmósfera inerte, pues los ensayos posteriores se realizaron en presencia de nitrógeno, pero no se observaron cambios.

Se puede observar que la banda de absorción para PP-2 es similar a la del FBP en acetonitrilo, puesto que tiene el máximo a 246 nm y presenta un pequeño hombro a 275 nm (Figura 6.18).

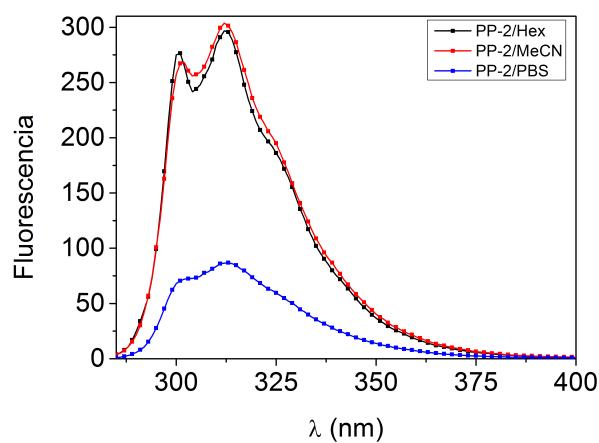
Además, se observa que el espectro en los tres disolventes empleados coinciden una vez normalizados.



**Figura 6.18:** Comparación del espectro UV-visible de PP-1 con su precursor (FBP) en acetonitrilo

## Fluorescencia

Después de medir la absorción del compuesto, se mide la emisión desde de su estado singlete ( $\lambda_{exc} = 266$  nm,  $N_2$  ). Para este fotoproducto, PP-2, sí que se observa emisión por fluorescencia como se comprueba en la Figura 6.19.



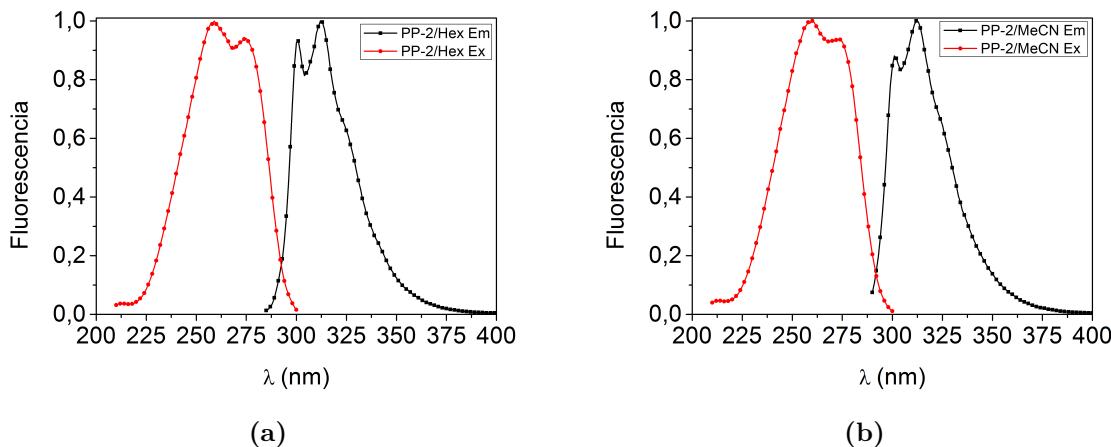
**Figura 6.19:** Espectro de fluorescencia del PP-2 en los distintos disolventes

Respecto a los rendimientos cuánticos de fluorescencia ( $\phi_F$ ), se determinaron en los tres disolventes empleados. Para su cálculo se hace uso de la ecuación 6.2 (ver en el apartado 6.1.3), tomando en mismo compuesto de referencia (FBP) obteniéndose los resultados que se muestran en la Tabla 6.7.

Disolvente	$\phi_F$
Hexano	0,33
MeCN	0,27
PBS	0,12

**Tabla 6.7:** Propiedades fotofísicas derivadas del primer estado excitado singlete del PP-2 en disolución y en atmósfera de N<sub>2</sub>. Medidas obtenidas excitando a 266 nm.

Para la determinación de las energías de singlete, se extrae del gráfico 6.20 la longitud de onda de corte ( $\lambda$ ) entre la curva de emisión y excitación del fotoproducto una vez normalizados los datos.



**Figura 6.20:** Espectros de fluorescencia del PP-2 de emisión ( $\lambda_{em}=267\text{nm}$ ) y excitación ( $\lambda_{exc}=310\text{nm}$ ) (a) Hexano (b) MeCN.

Con dicha longitud de onda de corte extraída de los gráficos anteriores, se obtiene la energía de singlete utilizando la relación de Planck (Ecuación 6.7), empleada también para la determinación de la energía triplete.

$$E_S = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (6.7)$$

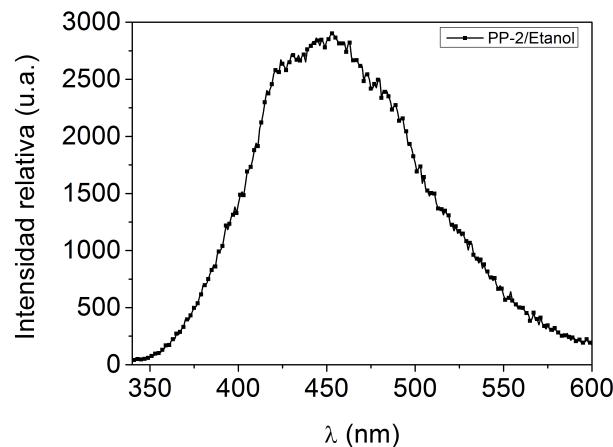
En la Tabla 6.8, se muestra la  $\lambda$  de corte y la energía singlete obtenida disuelto en hexano y en acetonitrilo ya que en PBS no se consiguió disolver PP-2.

Disolvente	$\lambda_{corte}$ (nm)	$E_S$ (kcal/mol)
Hexano	292.5	97.81
MeCN	291.9	98.01

**Tabla 6.8:** Energías de singlete del PP-2 en disolución y en atmósfera de N<sub>2</sub>. Medidas obtenidas excitando a 266 nm.

### Fosforescencia

Al igual que para PP-1, se preparó una disolución de la misma concentración ( $2 \cdot 10^{-5} M$ ) en etanol ya que este ensayo se realiza en matriz sólida a T=78K (Figura 6.21).



**Figura 6.21:** Espectro de fosforescencia de PP-2

Respecto a la energía de triplete, ésta se ha determinado utilizando la relación de Planck (Ecuación 6.3 en la página 40).

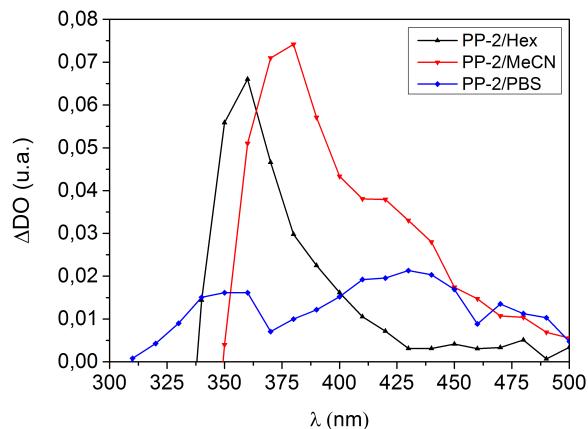
La  $\lambda$  empleada es aquella que corresponde al 5 % de subida de la curva de fosforescencia, que en este caso es de 359nm.

Por tanto, la energía de triplete para PP-2 es de 79.7 kcal/mol.

### Fotólisis de destello láser

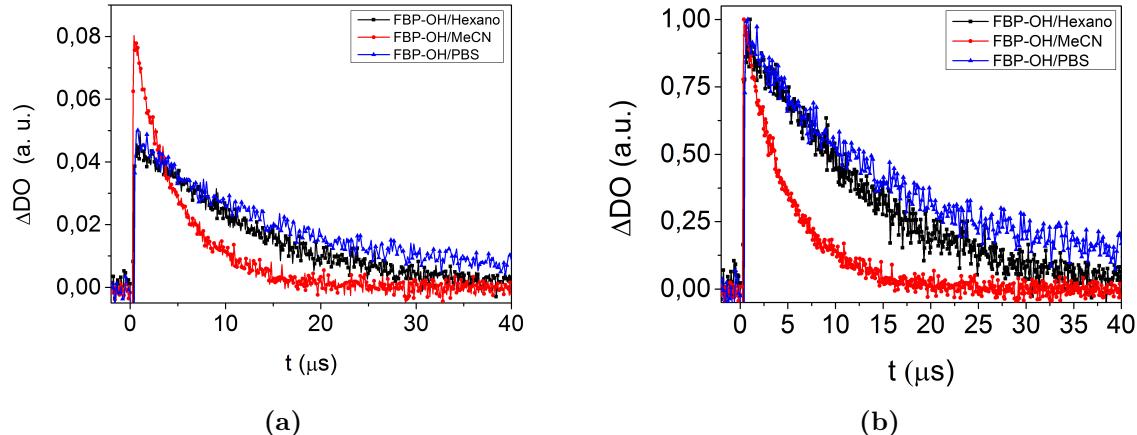
Este ensayo se realiza con las mismas disoluciones a la misma concentración ( $2 \cdot 10^{-5} M$ ) en atmósfera inerte (N<sub>2</sub>), para detectar las especies transitorias de PP-2

La Figura 6.22 muestra los espectros de absorción transitoria de PP-2 en hexano, acetonitrilo y PBS.



**Figura 6.22:** Espectro de absorción transitorio de PP-2

Se observa que PP-2 en acetonitrilo y hexano aparece una especie transitoria con máximo a 380 nm cuando se excita a una longitud de onda de 266 nm. Es por ello que para conocer las desactivaciones de las especies transitorias se ha monitorizado a  $\lambda = 380$  nm (Figura 6.23).



**Figura 6.23:** (a) Desapariciones de PP-2 (b) Desapariciones normalizadas de PP-2 excitadas a 266 nm y monitorizadas a 380 nm en diferentes disolventes a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5}$  M en una atmósfera inerte.

Se observa claramente, una vez normalizadas las desactivaciones de PP-2, la especie transitoria en PBS tiene una vida más larga que en hexano, y éste más larga que en acetonitrilo.

A continuación, en la Tabla 6.9 se recogen los tiempos de vida de las especies transitorias obtenidas a partir del ajuste monoexponencial de la ecuación 6.4 en la

página 42.

Disolvente	$\tau_{trans}(\mu s)$
Hexano	14.4
MeCN	7.3
PBS	17.1

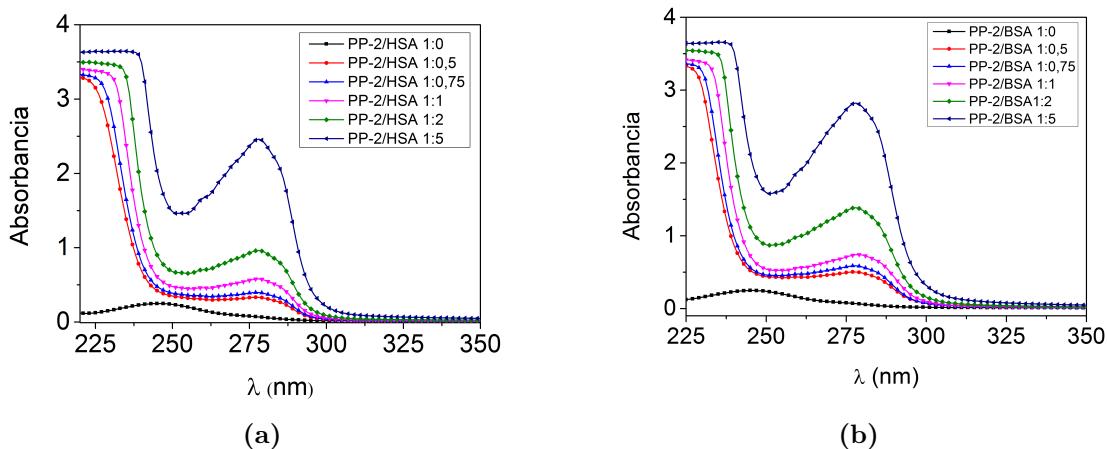
**Tabla 6.9:** Tiempos de vida de las especies transitorias de PP-2 en disolución y en atmósfera de N<sub>2</sub>.  
Medidas obtenidas a  $\lambda_{max} = 380$  nm.

#### 6.2.4. Estudio en proteínas

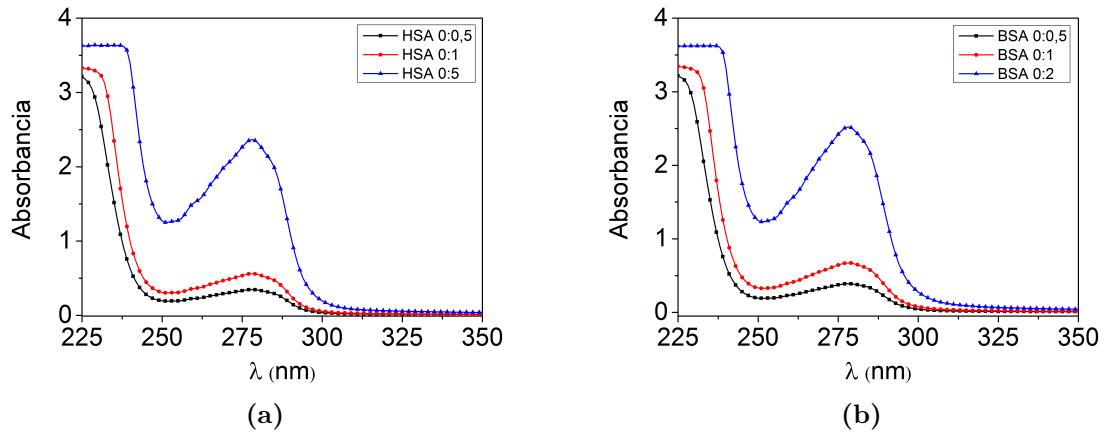
Para este estudio, se prepararon disoluciones con distintas proporciones de PP-2 y proteína, manteniendo constante la concentración de PP-2 y variando la concentración de albúmina sérica, tanto humana como bovina. Se realizaron, como en el caso de PP-1, fijando la concentración de fotoproducto a  $2 \cdot 10^{-5}$  M y añadiendo la proteína a las mismas relaciones molares 1:0, 1:0.5, 1:0.75, 1:1, 1:2 y 1:5.

##### Espectro de absorción en estado estacionario

Se registran los espectros de absorción PP-2/SA a distintas relaciones molares y se compara con la proteína sola. Los resultados se muestran en la Figuras 6.24 y 6.25.

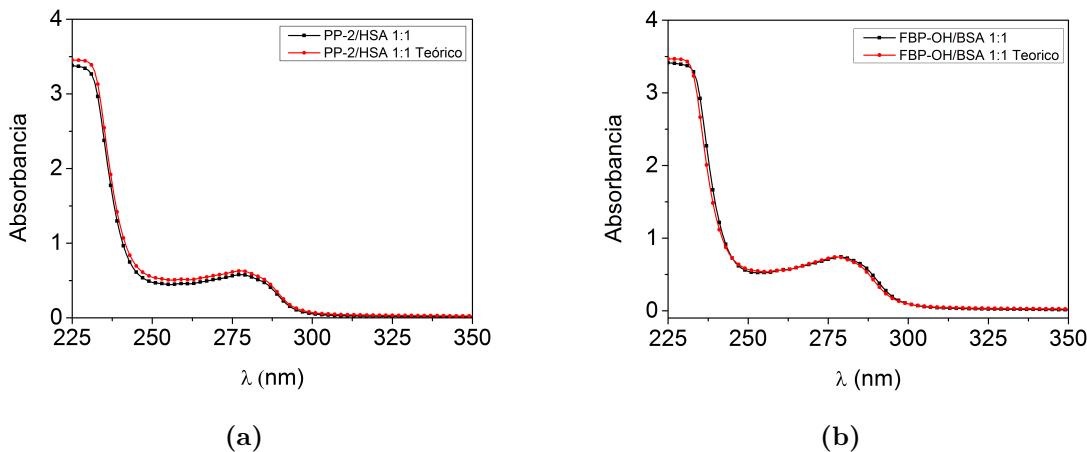


**Figura 6.24:** (a) Espectro UV-visible de PP-2 en HSA (b) Espectro UV-visible de PP-2 en BSA a diferentes proporciones



**Figura 6.25:** (a) Espectro UV-visible de HSA (b) Espectro UV-visible de BSA en diferentes proporciones

Además, se comprueba si la absorción teórica (suma de la absorción de PP-2 y las SA por separado) coinciden con la de la mezcla.

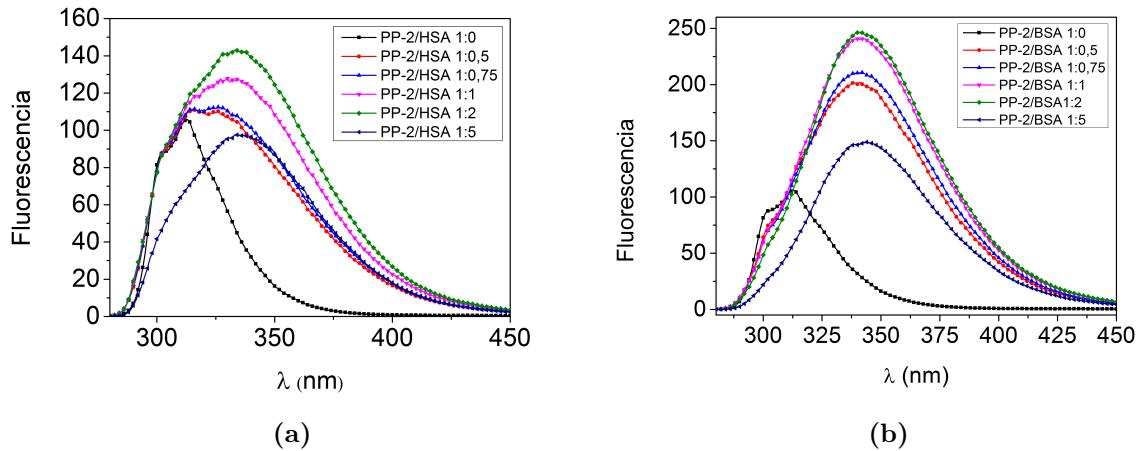


**Figura 6.26:** (a) Espectro UV-visible de PP-2 en HSA (1:1) (b) Espectro UV-visible de PP-2 en BSA (1:1) y sus respectivos cálculos teóricos (suma de ambas por separado).

En las gráficas de la Figura 6.26 se comprueba que la suma de la absorción del PP-2 y SA, tanto de la humana como bovina, medida por separado coincide con la absorción de ambos compuestos juntos, lo que demuestra que no hay interacciones en estado fundamental.

## Fluorescencia

A continuación, se registran los espectros de fluorescencia de PP-2/SA a distintas relaciones molares. Los resultados se muestran en la Figuras 6.27.

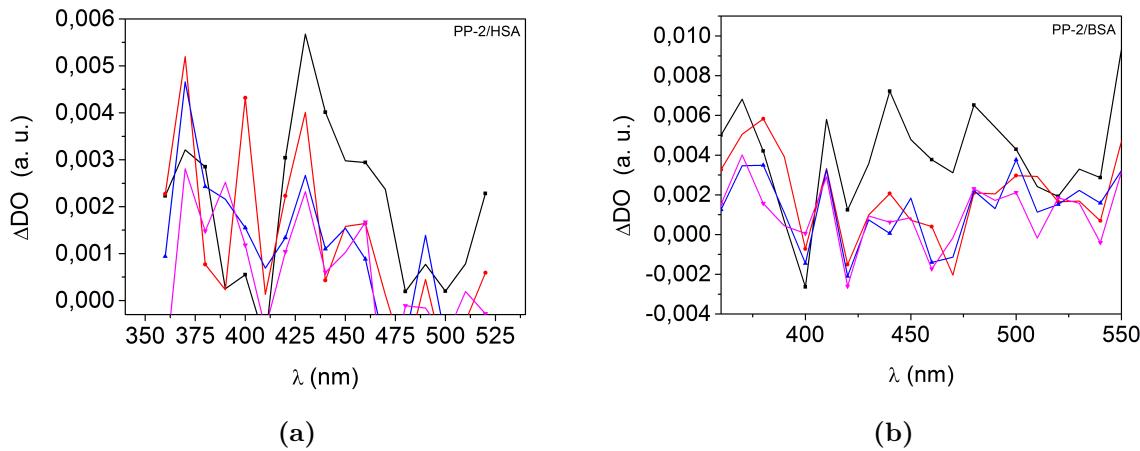


**Figura 6.27:** (a)Espectro de fluorescencia de PP-2 en HSA (b)Espectro de fluorescencia de PP-2 en BSA a distintas concentraciones

Se observa que a medida que aumentamos la concentración de proteína aumenta la fluorescencia. Además, el máximo se va desplazando hacia longitudes de onda más alta acercándose así al máximo de la proteína.

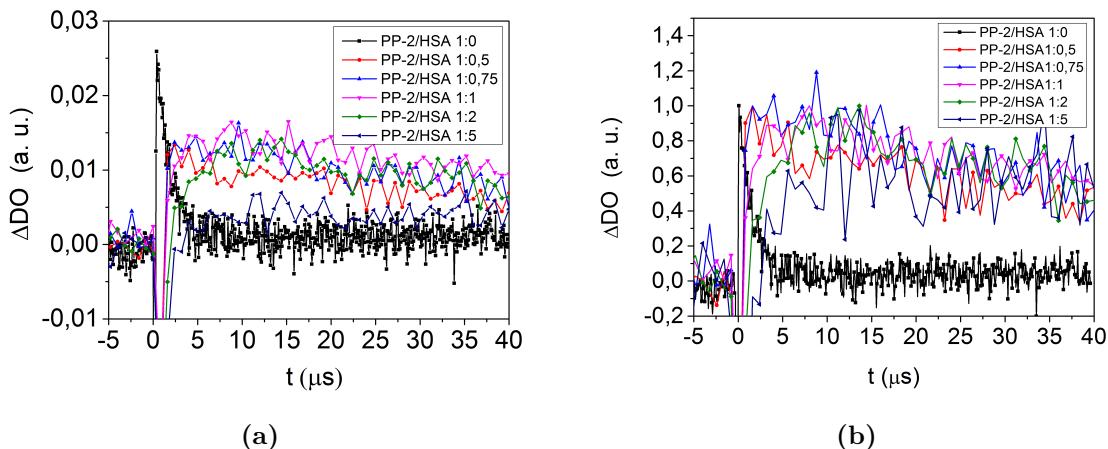
## Fotólisis de destello láser (FDL)

En la Figura 6.28 se muestra el espectro de absorción en estado transitorio.

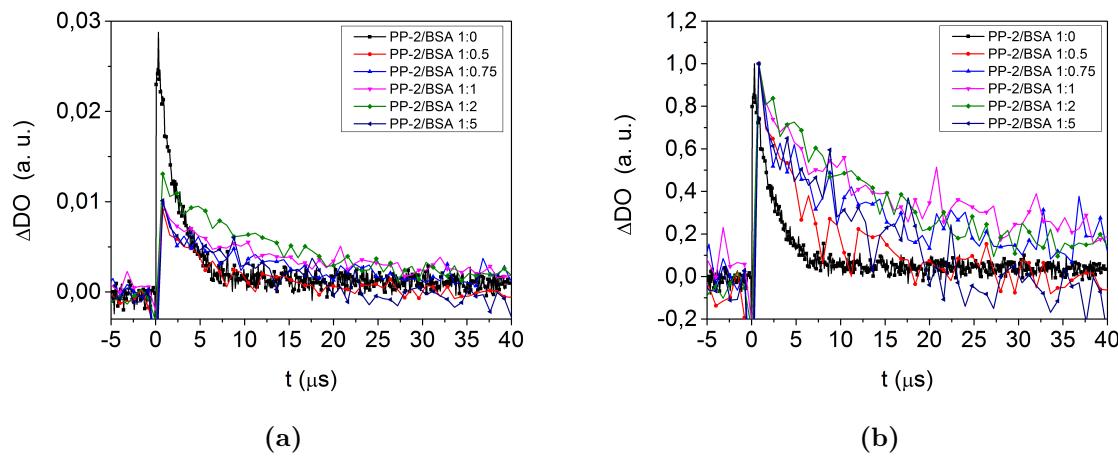


**Figura 6.28:** (a) Espectro de absorción transitorio de PP-2/HSA (b) Espectro de absorción transitorio de PP-2/BSA

Los datos obtenidos sobre la desactivación de PP-2 en presencia de HSA y BSA se recogen a 380 nm puesto que es donde aparece la especie transitoria (Figuras 6.29 y 6.30).



**Figura 6.29:** (a) Desactivaciones monitorizadas a 450nm de PP-2 en HSA (b) Desactivaciones normalizadas monitorizadas a 380 nm de PP-2 en HSA



**Figura 6.30:** (a)Desactivaciones monitorizadas a 450nm del PP-2 en BSA (b) Desactivaciones normalizadas monitorizadas a 380nm del PP-2 en BSA

Se observa que para PP-2 hay mucho más ruido que en PP-1, aunque sigue la misma tendencia; a medida que aumenta la concentración de proteína el tiempo de vida del triplete de PP-2 aumenta.

Del mismo modo que para PP-1, se han ajustado las desactivaciones a funciones exponenciales para obtener así los tiempos de vida de las especies transitorias.

En el caso de PP-2 no se ha podido ajustar a una biexponencial, debido a que no están los enantiómeros puros, sino una sustancia racémica.

## 6.3. 4-etil-2fluor-1,1'-bifenilo

### 6.3.1. Introducción

El siguiente fotoproducto que se pretende estudiar es el etilo (PP-3).



**Figura 6.31:** Estructura del FBP y uno de sus fotoproductos (PP-3)

### 6.3.2. Obtención

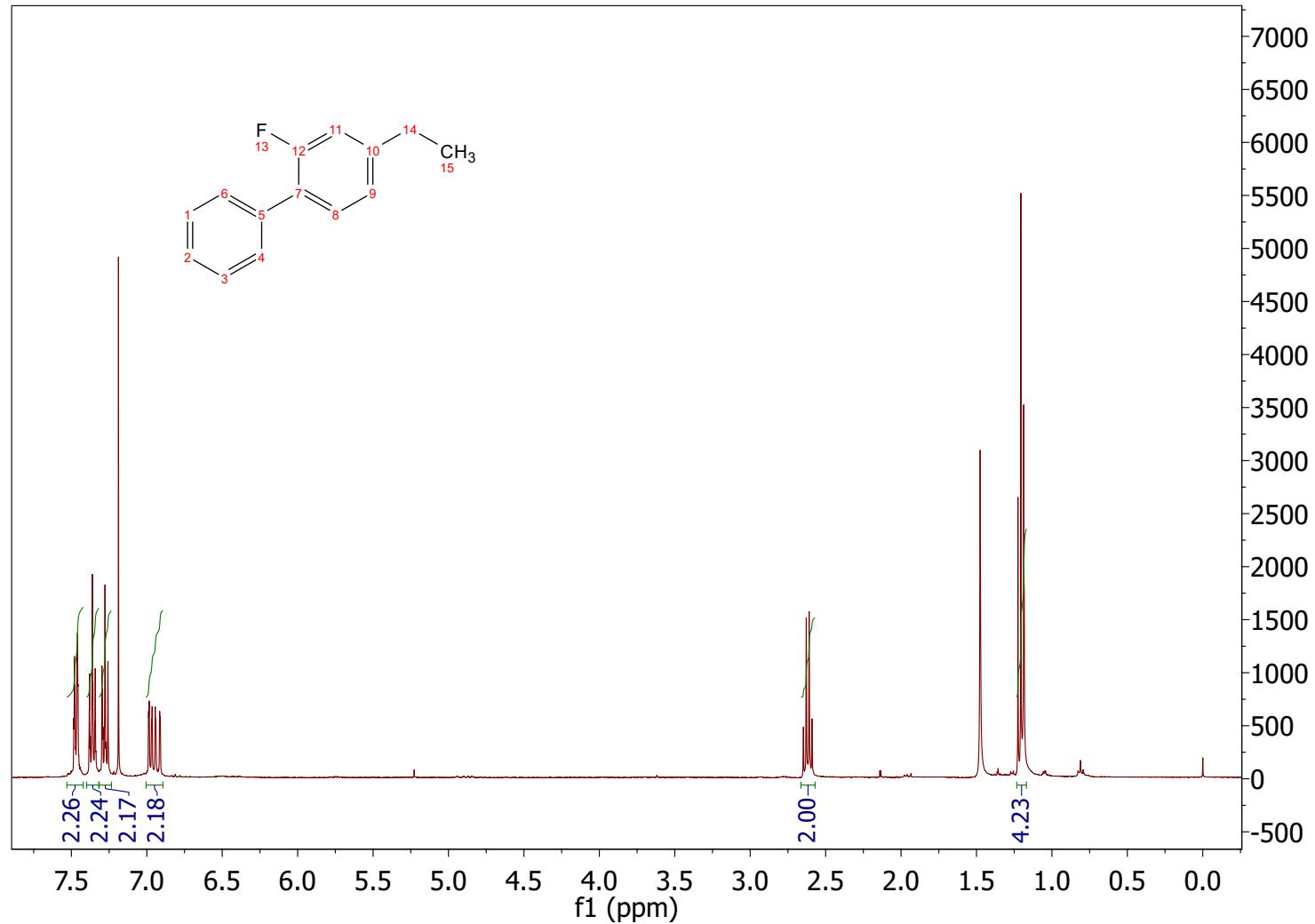
El tercer fotoproducto estudiado, PP-3, se ha obtenido del mismo modo que los dos fotoproductos anteriores, irradiando FBP durante 16 horas, pero con la diferencia de que en este caso el disolvente empleado es PBS y no acetonitrilo como PP-1 y PP-2. Tras su obtención, se purifica mediante PLC y HPLC para que el fotoproducto tenga la pureza necesaria para realizar los ensayos fotoquímicos.

Se ha partido de 200 mg de FBP en PBS y se ha obtenido 4.2 mg de PP-3 tras la purificación, lo que supone un rendimiento de 2.56 %.

A continuación, se muestra el espectros de RMN-<sup>1</sup>H como criterio de pureza y caracterización del compuesto.

RMN-<sup>1</sup>H (CDCl<sub>3</sub>) δ(ppm): 7.48-7.46 (m, 2H), 7.38-7.34 (m, 2H), 7.30-7.26 (m, 2H), 7.99-7.91 (m, 2H), 2.65-2.59 (q, 2H, J<sub>1</sub>=7.61 Hz, J<sub>2</sub>=7.61 Hz, J<sub>3</sub>=7.60 Hz), 1.23-1.19 (t, 3H, J<sub>1</sub>=7.62 Hz, J<sub>2</sub>=7.62 Hz).

62



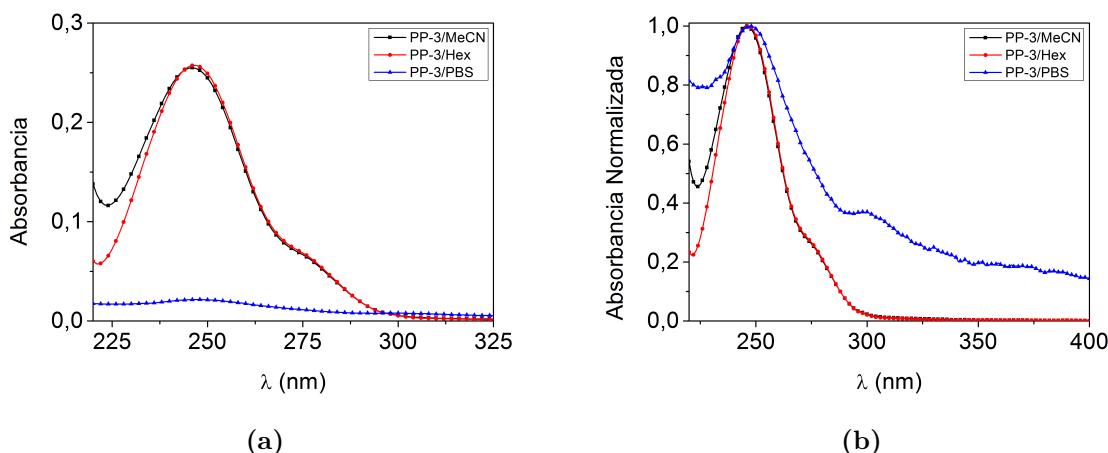
### 6.3.3. Estudio en disolución

En este apartado se muestran los resultados obtenidos para PP-3 en hexano, acetona y PBS.

Al igual que para el resto de fotoproductos, se prepararon disoluciones a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5} M$  y se realizaron medidas de absorción, fluorescencia y absorción transitoria.

#### Espectros de absorción en estado estacionario

Primero, se mide la absorbancia para conocer su  $\varepsilon$ , en la figura 6.32:



**Figura 6.32:** Espectro de absorción UV-visible de PP-3 en diferentes disolventes. (a) a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5} M$  (b) Normalizado.

Destacar de la figura 6.32 la baja absorción de PP-3 en PBS, puesto que es debido al carácter apolar de este fotoproducto lo cual hace que no se disuelve en PBS.

Para la determinación del  $\varepsilon$  se ha utilizado la ecuación 6.1, que se muestra en el apartado 6.1.3. En la Tabla 6.10, se recogen los  $\varepsilon$  obtenidos.

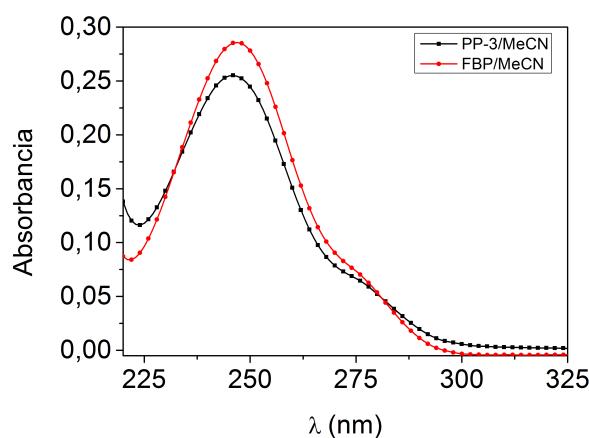
Disolvente	Abs	$\varepsilon \left( \frac{mol}{cm^2} \right)$
MeCN	0,09762	$4,88 \cdot 10^6$
Hexano	0,10014	$5,01 \cdot 10^6$
PBS	0,01471	$7,36 \cdot 10^5$

**Tabla 6.10:** Valor de  $\varepsilon$  a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5} M$  y a  $\lambda=266\text{nm}$

También, se midió la absorción en atmósfera inerte pues los ensayos se realizaron en presencia de nitrógeno, pero no se observaron cambios.

Se puede observar que la banda de absorción para PP-3 es similar a la del FBP, puesto que tiene el máximo a 246nm y presenta un pequeño hombro a 275nm, ambos compuestos en acetonitrilo (Figura 6.33).

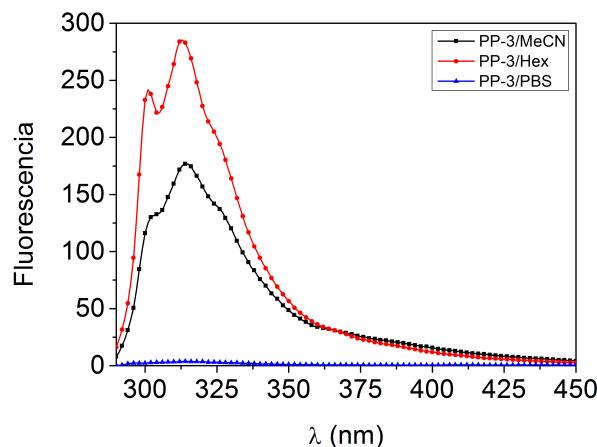
Además, una vez normalizados, se observa que el espectro tanto en acetonitrilo como en hexano coinciden. En cambio, debido a la diferente polaridad entre PP-3 y PBS se comprueba que no se disuelve nada bien, puesto que no se observa prácticamente absorción y es por ello que al normalizar la banda que se observa no es coherente.



**Figura 6.33:** Comparación del espectro UV-visible de PP-1 con su precursor el FBP en acetonitrilo

## Fluorescencia

Después de medir la absorción del compuesto, se mide la emisión desde de su estado singlete ( $\lambda_{exc} = 266$  nm,  $N_2$  ). Para este fotoproducto, PP-3, sí que se observa emisión debido a la fluorescencia como se comprueba en la Figura 6.34.



**Figura 6.34:** Espectro de fluorescencia del PP-3 en los distintos disolventes

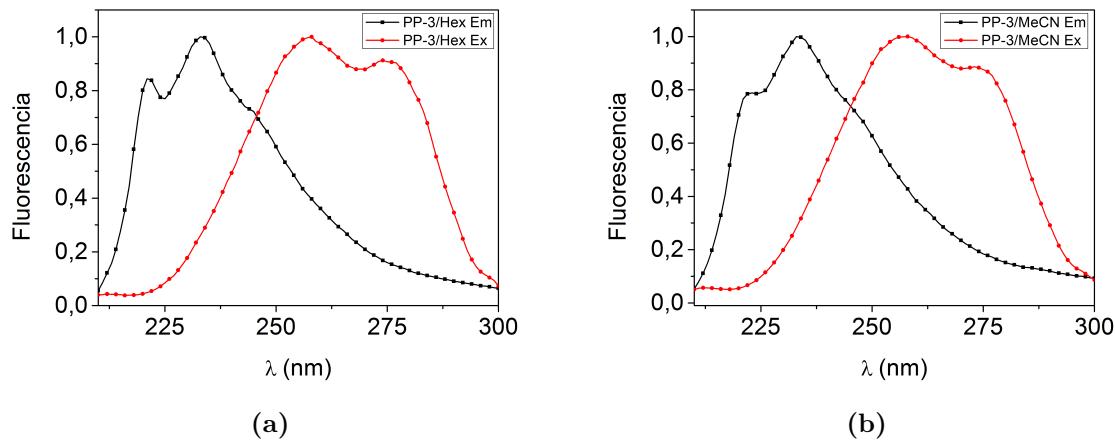
En la fluorescencia, también se observa que en PBS prácticamente nada de PP-3 se disuelve, ya que la emisión es mínima.

Respecto a los rendimientos cuánticos de fluorescencia ( $\phi_F$ ) se determinaron en los tres disolventes disolventes empleados. Para su cálculo se hace uso de la ecuación 6.2, en el apartado 6.1.3, tomando en mismo compuesto de referencia, el FBP.

Disolvente	$\phi_F$
Hexano	0,32
MeCN	0,25
PBS	0,05

**Tabla 6.11:** Propiedades fotofísicas derivadas del primer estado excitado singlete del PP-2 en disolución y en atmósfera de N<sub>2</sub>. Medidas obtenidas excitando a 266 nm.

Para la determinación de las energías de singlete, se extrae del gráfico 6.35 la longitud de onda de corte de ambas curvas, la de emisión y excitación.



**Figura 6.35:** Espectro de emisión de PP-3 ( $\lambda_{exc} = 267$  nm) y excitación ( $\lambda_{exc} = 310$  nm)(a) Hexano (b) MeCN.

Para obtener la energía de singlete, se requiere la  $\lambda$  de corte entre el espectro de emisión y excitación una vez normalizados los datos. Con dicha  $\lambda$  se utiliza la relación de Planck (Ecuación 6.8), empleada también para la determinación de la energía triplete.

$$E_S = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (6.8)$$

En la Tabla 6.12, se muestra la  $\lambda$  de corte y la energía singlete obtenida con dicha  $\lambda$  disuelto en hexano y acetonitrilo ya que en PBS no se consiguió disolver PP-3.

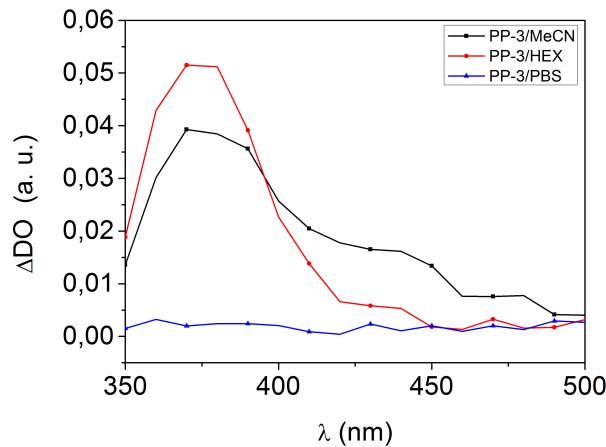
Disolvente	$\lambda_{corte}$ (nm)	$E_S$ (kcal/mol)
Hexano	245.5	116.54
MeCN	245.2	116.68

**Tabla 6.12:** Energías de singlete del PP-3 en disolución y en atmósfera de N<sub>2</sub>. Medidas obtenidas excitando a 266 nm.

### Fotólisis de destello láser

Este ensayo se realiza con las mismas disoluciones a la misma concentración ( $2 \cdot 10^{-5}$ M) en atmósfera inerte (N<sub>2</sub>), para detectar las especies transitorias de PP-3.

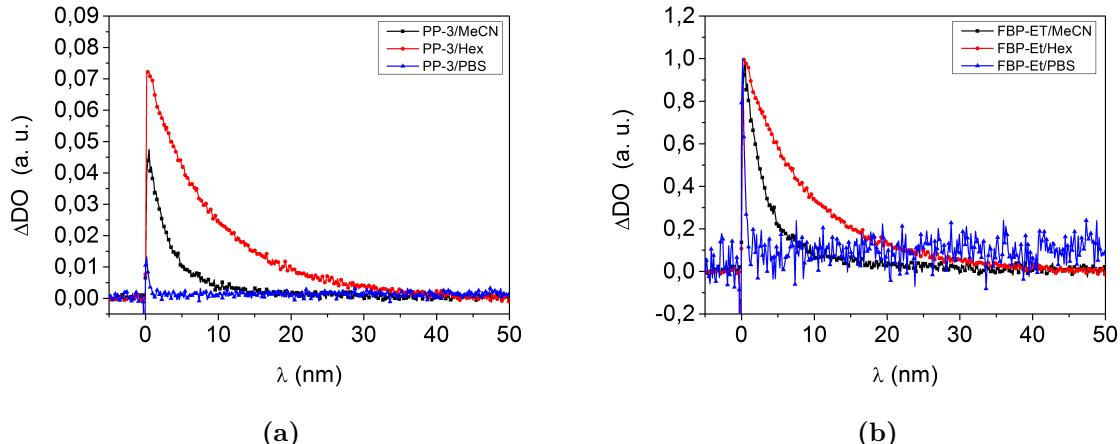
En la Figura 6.36 se muestra el espectro de absorción en estado transitorio.



**Figura 6.36:** Espectro de absorción transitorio de PP-3

Se observa que PP-3 en acetonitrilo y hexano aparece una especie transitoria con máximo a 380 nm cuando se excita a una longitud de onda de 266 nm, como en el resto de fotoproductos. Además, en PBS no aparece ninguna especie transitoria, puesto que como ya se ha comentado, PP-3 no se disuelve en PBS.

Es por ello que para conocer las desactivaciones de las especies transitorias se ha monitorizado a  $\lambda = 380\text{nm}$  (Figura 6.37).



**Figura 6.37:** (a)Desapariciones de PP-3 (b) Desapariciones normalizadas de PP-3 excitadas a 266 nm y monitorizadas a 380 nm en diferentes disolventes a una concentración de  $2 \cdot 10^{-5}\text{M}$  en atmósfera inerte.

Se observa claramente, una vez normalizadas las desactivaciones de PP-3, que la especie transitoria en hexano tiene una vida más larga que en acetonitrilo. En el caso

de PBS, se observa una especie transitoria pero debido a la dificultad en su disolución la desaparición es muy rápida.

A continuación, en la Tabla 6.13 se recogen los tiempos de vida de las especies transitorias obtenidas a partir del ajuste monoexponencial de la ecuación 6.4 en la página 42.

Disolvente	$\tau_{trans}(\mu s)$
Hexano	8.4
MeCN	3.0
PBS	0.3

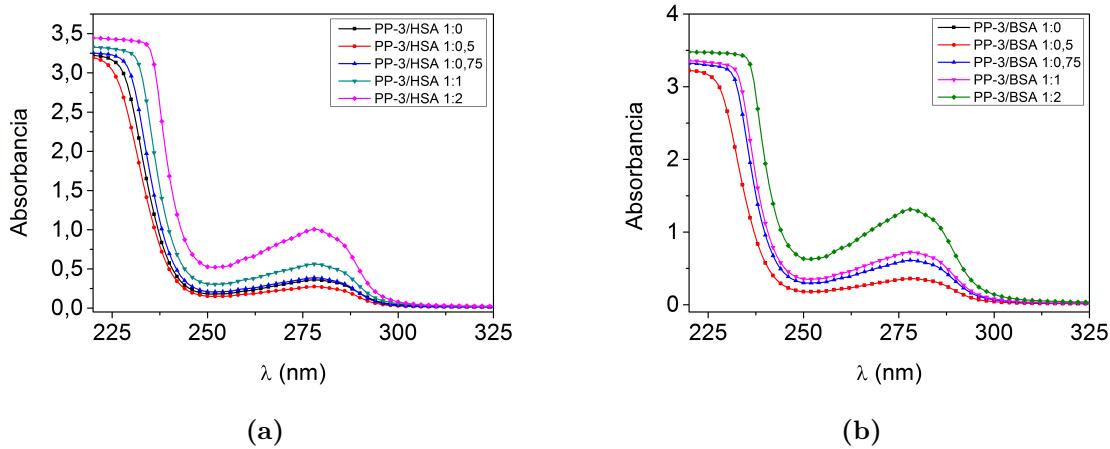
**Tabla 6.13:** Tiempos de vida de las especies transitorias de PP-3 en disolución y en atmósfera de N<sub>2</sub>. Medidas obtenidas monitorizando a 380 nm.

### 6.3.4. Estudio en proteínas

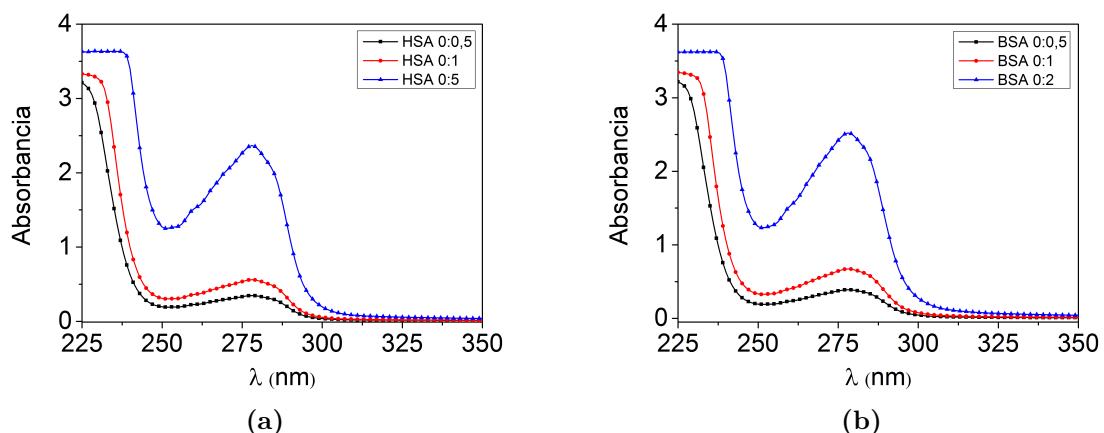
Para este estudio, se prepararon disoluciones con distintas proporciones de PP-3 y proteína, tanto albúmina sérica humana como bovina. Se realizaron como en los otros fotoproductos, fijando la concentración de fotoproducto a  $2 \cdot 10^{-5} M$  y añadiendo la proteína a las mismas relaciones molares 1:0, 1:0.5, 1:0.75, 1:1, 1:2 y 1:5.

#### Espectro de absorción en estado estacionario

Se registran los espectros de absorción PP-3/SA a distintas relaciones molares y se compara con la proteína sola. Los resultados se muestran en la Figuras 6.38 y 6.39.



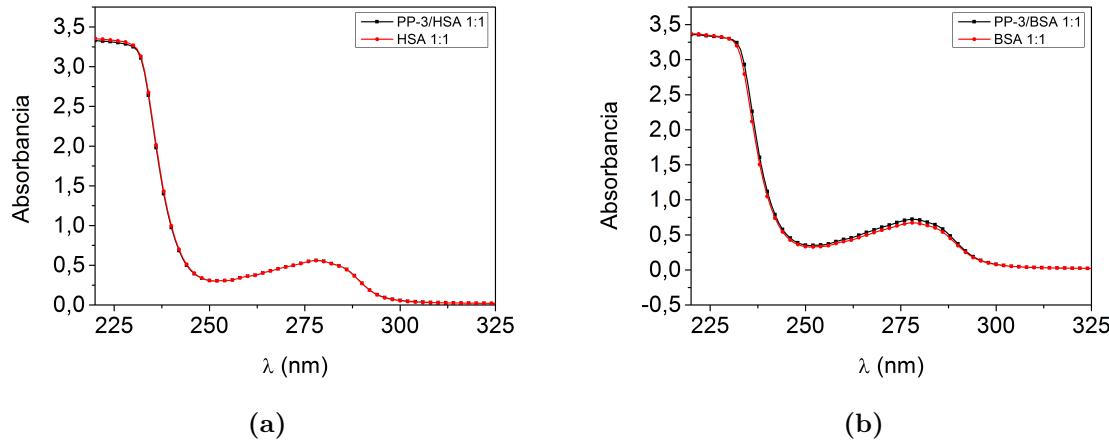
**Figura 6.38:** (a) Espectro UV-visible de PP-3 en HSA (b) Espectro UV-visible del PP-3 en BSA a diferentes proporciones



**Figura 6.39:** (a)Espectro UV-visible de HSA (b) Espectro UV-visible de BSA en diferentes proporciones

Además, se comprueba si la absorción de la proteína sola coincide con la de la mezcla (Figura 6.40).

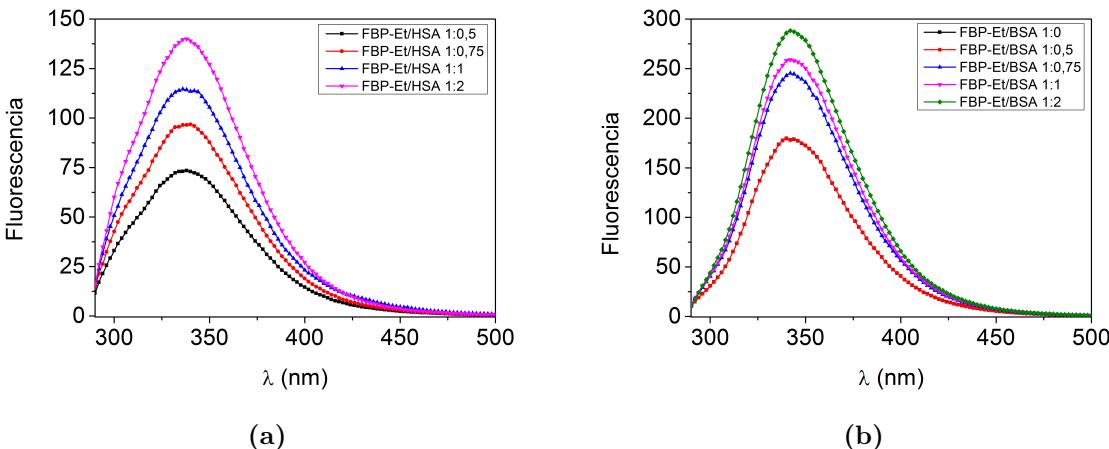
En las gráficas de la Figura 6.26 se comprueba que la absorción del PP-3 , tanto de la humana como bovina, coincide con la absorción de la proteína aislada. Lo que indica que PP-3 no se ha disuelto.



**Figura 6.40:** (a)Espectro UV-visible del PP-3 con HSA (1:1) (b)Espectro UV-visible del PP-3 con BSA (1:1) y la proteína sola a la misma concentración (0:1).

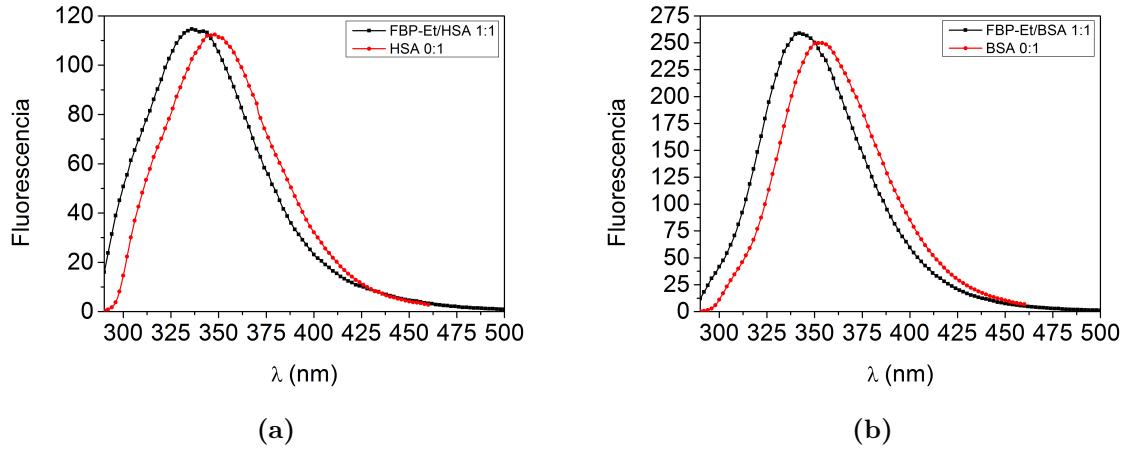
### Fluorescencia

A continuación, se registran los espectros de fluorescencia de PP-3/SA a distintas relaciones molares y se compara con la proteína sola. Los resultados se muestran en la Figura 6.41.



**Figura 6.41:** (a)Espectro de fluorescencia del PP-3 con HSA (b)Espectro de fluorescencia del PP-3 con BSA a distintas concentraciones

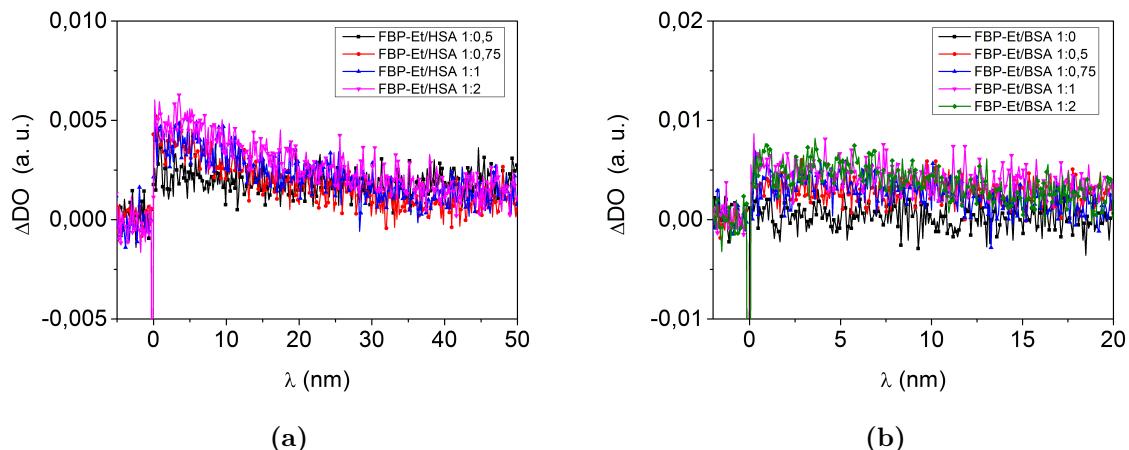
Se observa que a medida que aumentamos la concentración de proteína aumenta la fluorescencia. A continuación, se comprueba si la fluorescencia de la mezcla PP-3/SA coincide con la fluorescencia de SA aislada (Figura 6.42).



**Figura 6.42:** (a)Espectro UV-visible del PP-3 con HSA (1:1) (b)Espectro UV-visible del PP-3 con BSA (1:1) y su respectiva proteína

### Fotólisis de destello láser (FDL)

Los datos obtenidos sobre la desactivación de PP-3 en presencia de HSA y BSA se recogen a 380 nm puesto que es donde absorbe la especie transitoria (Figura 6.43).



**Figura 6.43:** (a)Desactivación monitorizadas a 380nm de PP-3 con HSA (b) Desactivación monitorizadas a 450nm de PP-3 con BSA

Se observa que para PP-3 hay también mucho ruido, y que la especie transitoria es muy débil y se desactiva muy rápido.

Para PP-3 no se ha podido ajustar a una biexponencial, debido al ruido,



# **Capítulo 7**

## **Presupuesto**

El presupuesto que se muestra en este capítulo contiene un cálculo aproximado del coste de la realización de este estudio, atendiendo tanto a los reactivos, material, instrumentación como al trabajo realizado por el operario de laboratorio.

## 7.1. Coste de la materia prima

Materia Prima	Empresa suministradora	Envase	Coste (€)	Cantidad empleada	Subtotal (€)
Flurbiprofeno racémico	Sigma-Aldrich	5 g	289.50	5 g	289.50
Albumina sérica humana	Sigma-Aldrich	25 g	1640.00	1 g	65.60
Albumina sérica bobina	Sigma-Aldrich	10 g	283.50	1 g	28.35
PBS	Sigma-Aldrich	100 Tabletas	124.00	2 Tabletas	2.48
Silica Gel 60	Merck	2.5 kg	218.00	2.5 kg	218.00
Diclorometano	Scharlab	5 L	18.96	15 L	56.88
Metanol (HPLC)	Scharlab	2.5 L	9.00	1 L	3.60
Etanol (HPLC)	Scharlab	2.5 L	44.64	0.2 L	3.57
Acetato de etilo	Scharlab	5 L	28.53	10 L	57.06
Hexano	Scharlab	5 L	29.96	10 L	59.92
Acetonitrilo (HPLC)	Scharlab	2.5 L	18.00	10 L	72.00
Cloroformo Deuterado	Merck	500 mL	276.00	250 mL	138.00
Acetona	Scharlab	5 L	15.00	20 L	60.00
<b>Coste total por reactivos</b>					<b>1054.96</b>

**Tabla 7.1:** Estimación del coste de los reactivos y disolventes empleados en este proyecto

## 7.2. Coste de los equipos

75

Equipo	Coste (€)	Amortización del producto* (€/h)	Horas empleadas	Subtotal (€)
Balanza digital	3000	0.0342	4	0.14
Baño de ultrasonidos con temporizador	5000	0,0579	4	0.23
Espectrómetro de masas	70000	0.7991	32	25.57
Espectrómetro de RMN	300000	3.4247	12	41.10
HPLC Semiseparativo	35000	0.3995	32	12.79
Fotorreactor con lámparas 254 nm	35000	0.3740	80	21.92
Espectrofotómetro de doble haz UV-VIS	10000	0.1142	32	3.65
Espectrofotómetro de fluorescencia y fosforescencia	28000	0.3196	32	10.23
Fotólisis de destello láser (FDL)	40000	0.4630	32	14.81
<b>Coste total de los equipos</b>				<b>130.44</b>

**Tabla 7.2:** Estimación del coste de los equipos empleados en este proyecto.

\*La amortización se ha calculado suponiendo una vida útil media de todos los equipos de 10 años (86400 horas).

### 7.3. Coste del material

Material	Unidades	Precio unitario (€)	Factor de corrección	Subtotal (€)
Matraz Esférico 50 mL F/Redondo ESM. H-29/32	2	18.46	0.25	8.23
Matraz Esférico 100 mL F/Redondo ESM. H-29/32	1	29.67	0.25	7.42
Matraz Esférico 500 mL F/Redondo ESM. H-29/32	1	48.76	0.25	12.19
Matraz Erlenmeyer PYREX 100 mL Cuello Estrecho	2	8.50	0.25	4.25
Matraz Erlenmeyer PYREX 250 mL Cuello Estrecho	3	8.80	0.25	6.60
Matraz Erlenmeyer PYREX 500 mL Cuello Estrecho	1	11.30	0.25	2.83
Probeta Graduada 10 mL	1	7.05	0.25	1.76
Probeta Graduada 250 mL	1	14.55	0.25	3.64
Probeta Graduada 500 mL	1	24.24	0.25	6.06
Vial B/Rosca, Transparente, 40mL 1x100	2	75.3	0.25	37.65
Vial B/Rosca, Transparente, 22mL 1x100	2	72.7	0.25	36.35
Vial de Gases Masas 1x100	0.1	73.00	0.25	1.83

Tabla 7.3: Estimación del coste del material empleado en este proyecto

Material	Unidades	Precio unitario (€)	Factor de corrección	Subtotal (€)
Pipeta Automática Tipo Fijo Reference EPPENDORF Volumen 2-20 $\mu$ L	1	219.70	0.05	10.99
Pipeta Automática Tipo Fijo Reference EPPENDORF Volumen 100-1000 $\mu$ L	1	212.50	0.05	10.63
Pipeta Automática Tipo Fijo Reference EPPENDORF Volumen 500-5000 $\mu$ L	1	200.9	0.05	10.05
Punta Pipeta 2-200 $\mu$ L Amarilla 1x1000	0.025	19.50	1	0.49
Punta Pipeta 100-1000 $\mu$ L Azul 1x500	0.05	23.50	1	1.18
Punta Pipeta 500-5000 $\mu$ L Blanca 1x250	0.1	27.00	1	2.70
Micropipetas Desechables Certificadas	1	28.62	1	28.62
Gradilla de Alambre Plastificado en PVC	1	9.32	0.05	0.47
Tubos de Ensayo Cuarzo	8	37.20	0.05	14.88
Tubos Cuarzo RMN	2	67.60	0.25	16.90
Cubetas de Cuarzo Tipo3 Roscado Paso de Luz 10nm	2	357.11	0.05	35.72
TLC Silica Gel 60 F254 1x25	1	194.00	1	194.00
PLC Silica Gel 60 F254, 2 mm 1x12	1	418.00	1	418.00
Cubeta de desarrollo (TLC)	1	75.62	0.25	18.91
Cubeta de desarrollo (PLC)	1	200.00	0.05	10.00

**Tabla 7.4:** Estimación del coste del material empleado en este proyecto

Material	Empresa suministradora	Unidades	Precio unitario (€)	Subtotal (€)
Microespátula Cuchara-Plana acero inox. 150 mm		1	3.26	0.05 0.16
Espátula Cuchara-Plana 210 mm L. acero inox.		1	3.99	0.05 0.20
Pipeta Pasteur Vidrio Larga 230 mm 1x250		1	18.21	1 18.21
Tetinas de Gomas Látex		2	0.90	0.05 0.09
Agujas Estériles 0.8x40 LUER 1x100		0.3	9.47	1 2.84
Jeringa Plástico 2 mL Estéril sin Aguja C/LUER 1x100		0.2	15.63	1 3.13
Filtros de Jeringa 50 unid.		0.2	185.72	1 37.14
Bata Calidad 2		1	45.00	1 45.00
Gafas Seguridad MILLENIA		1	74.83	1 74.83
Columna para Cromatografía		1	150.37	0.25 37.59
Soporte con Placa Porosa Dm.40 poro 1 H-40/38		2	209.43	0.25 104.72
Embudo Decantación 250 mL H-29/32		1	118.27	0.25 29.57

**Tabla 7.5:** Estimación del coste del material empleado en este proyecto

Material	Empresa suministradora	Unidades	Precio unitario (€)	Subtotal (€)
Soporte	1	22.50	0.05	1.13
Pinza Universal	6	9.30	0.05	2.79
Aro de Corcho para Matracez	4	6.35	0.05	1.27
Tapón Propileno P/Vial 40 mL 24 mm 1x100	0.5	102.00	0.25	5.25
Tapón Propileno P/Vial 22 mL 24 mm 1x100	0.5	51.10	0.25	6.39
Tapón de Goma Tipo Septum 30,7	2	27.12	1	27.12
<b>Coste total por material</b>				<b>1223.20</b>

**Tabla 7.6:** Estimación del coste del material empleado en este proyecto

## 7.4. Mano de obra

En la tabla 7.7 se muestra el coste estimado del operario de laboratorio. Para realizar el calculo de los honorarios se ha considerado el sueldo de un becario que está aproximadamente por los 1000€/mes trabajando durante 8h/día.

Nº operarios	Sueldo (€/h)	Tiempo empleado (h)	Precio real (€)
1	6.25	400.00	2500.00

**Tabla 7.7:** Estimación del coste de la mano de obra empleada en este proyecto

## 7.5. Coste final del proyecto

Finalmente, se recoge el coste total del presupuesto resultado de la suma de todos los anteriores.

Coste total por reactivos y disolventes	1054.96 €
Coste total por instrumentación	130.44 €
Coste total por material	1223.20 €
Coste total por mano de obra	2500.00 €
<b>Coste total del proyecto</b>	<b>4908.60 €</b>

**Tabla 7.8:** Estimación del coste de la mano de obra empleada en este proyecto

# Capítulo 8

## Normativa

Al tratarse de un proyecto de investigación no existe normativa específica al respecto. En cuanto a la normativa específica en laboratorios de España es muy escasa, con excepción de la que se refiere a Buenas Prácticas de Laboratorio, BPL, (Real Decreto 822/1993 y Real Decreto 1369/2000), pero no hay disposiciones legales cuyo ámbito de aplicación esté centrado únicamente en los laboratorios.

La escasez de disposiciones legales específicas no significa en absoluto que no haya normativa legal aplicable a los laboratorios, pues lo que sucede es que además de aplicarse a los laboratorios, puede aplicarse también en otros ámbitos, como la Ley de Prevención de Riesgos Laborales (Ley 31/1995) incluyendo los reglamentos de aplicación y desarrollo de esta ley como Real Decreto 374/2001 sobre la protección de la salud y seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo; o Real Decreto 485/1997 sobre disposiciones mínimas en materia de señalización de seguridad y salud en el trabajo.

Respecto a los residuos generados en el laboratorio, se han seguido las indicaciones descritas en el NTP480 (Notas Técnicas de Prevención) del instituto nacional de seguridad e higiene en el trabajo [32]. En nuestro caso, los residuos se han depositado en dos bidones distintos con sus respectivos etiquetados:

- **Grupo I: Disolventes halogenados.**

Se entiende por tales, los productos líquidos orgánicos que contienen más del 2 % de algún halógeno. Se trata de productos muy tóxicos e irritantes y, en algún caso, cancerígenos. Se incluyen en este grupo también las mezclas de disolventes halogenados y no halogenados, siempre que el contenido en halógenos de la mezcla sea superior al 2 %. Ejemplos: Cloruro de metileno, bromoformo, etc.

■ **Grupo II: Disolventes no halogenados.**

Se clasifican aquí los líquidos orgánicos inflamables que contengan menos de un 2% en halógenos. Son productos inflamables y tóxicos y, entre ellos, se pueden citar los alcoholes, aldehídos, amidas, cetonas, ésteres, glicoles, hidrocarburos alifáticos, hidrocarburos aromáticos y nitrilos. Es importante, dentro de este grupo, evitar mezclas de disolventes que sean inmiscibles ya que la aparición de fases diferentes dificulta el tratamiento posterior.

Además, en el Anexo B se recogen todas las fichas de seguridad de las materias primas y disolventes empleados para este estudio.

# Capítulo 9

## Conclusiones

El objeto principal de este proyecto consistía en caracterizar los tres principales fotoproductos del FBP. En primer lugar, se han obtenido los tres fotoproductos con la pureza suficiente para realizar los ensayos físico-químicos. Tras esto, se han caracterizado tanto en disolventes puros como con proteínas.

De los ensayos realizados únicamente con disolventes puros, se puede comentar lo siguiente:

- El primer fotoproducto analizado, PP-1, se podría considerar como un agente fotoactivo ya que absorbe luz por encima de los 300 nm, con lo cual podría generar algún daño en el organismo. En cambio, los otros fotoproductos no absorben apenas a esas longitudes de onda.
- Respecto a la emisión, PP-1 no emite prácticamente desde su estado singlete, pero se desactiva desde su estado triplete, mediante fosforescencia, lo cual está de acuerdo con el comportamiento de una cetona aromática. Los otros dos fotoproductos emiten tanto por fluorescencia como por fosforescencia.
- En el ensayo de fotólisis de destello láser, se analizan las especies transitorias y su tiempo de vida. Se observa que tanto para PP-1 y PP-2, disueltos en PBS, el tiempo de vida de las especies transitorias es mayor que en el resto de disolventes. En cambio, PP-3 no se disuelve en PBS debido a su carácter apolar.

Centrándonos en los ensayos con proteínas de PP-1 y PP-2, ya que como PP-3 no se disuelve en PBS no puede analizarse junto con proteínas, puesto que éstas deben estar en un medio con un pH cercano al fisiológico. De estos ensayos cabe destacar:

## Capítulo 9. Conclusiones

---

- Generalizando para ambos fotoproductos al aumentar la cantidad de proteína tanto en HSA como BSA la absorción y fluorescencia(solo para el caso de PP-2) aumenta. En cuanto al ensayo de fotólisis de destello láser conforme se aumenta la cantidad de proteína el tiempo de vida de la especie transitoria también se ve incrementado debido a la formación de un complejo ligando@proteína.
- En cuanto a PP-1, si se compara ambas proteínas, se observa que con HSA tiene mayor proporción de fotoproducto unido que libre para la misma proporción.

Por ultimo, anotar que para próximos proyectos se puede seguir investigando en este campo, en la separación de los enantiómeros de PP-2 para así conocer exactamente las proporciones de unión como se ha podido realizar en PP-1.

# **ANEXOS**



# **Anexo A**

## **Experimentación**

En este anexo se especifica detalladamente los pasos seguidos en el laboratorio para la obtención de los fotoproductos, así como las especificaciones de los equipos utilizados.

### **A.1. Obtención de los fotoproductos**

En el caso de PP-1 y PP-2 se han obtenido a la vez, irradiando a 254 nm el FBP en acetonitrilo durante 16 horas. En cambio, para PP-3 se irradia en PBS en las mismas condiciones a 254nm y durante 16 horas.

A continuación, se separan los fotoproductos mediante PLC pero antes se suben varias TLC con distintos disolventes y proporciones para conseguir la mejor separación de los mismos. En el caso de PP-1 y PP-2 se evapora el acetonitrilo en el rotavapor y se sube 2 veces la PLC al 60 % de diclorometano y 40 % de hexano.

En el caso de PP-3, se extrae el fotoproducto de la disolución de PBS por extracción líquido-líquido con diclorometano. Y se sube 2 veces la PLC al 80 % de diclorometano y 20 % de hexano.

Tras la PLC, los fotoproductos siguen sin estar suficientemente puros con lo que se purifican por cromatografía líquida de alta resolución (HPLC). Se usó un HPLC isocrático Waters modelo 6000A con detector de ultravioleta (UV/Vis), provisto de una columna semipreparativa de fase reversa. Las condiciones de operación que se utilizaron fueron las siguientes:

- Q = 1.5 L/min
- P = 49-50 MPa
- Disolvente: Acetonitrilo

## A.2. Obtención de las disoluciones

Para la obtención de las disoluciones se emplea una disolución madre en diclorometano muy concentrada y a partir de ésta se prepara la disolución de  $2 \cdot 10^{-5} M$  siguiendo la ecuación A.1:

$$[C]_1 \cdot V_1 = [C]_2 \cdot V_2 \quad (\text{A.1})$$

Respecto a las disoluciones con proteínas, se prepara una disolución de SA con una concentración de  $6 \cdot 10^{-3} M$ . A continuación, se preparan disoluciones de 3mL cada una con distintas proporciones (Fotoproducto:Proteína):

- 1:0 a la disolución de fotoproducto de  $2 \cdot 10^{-5} M$  se añade  $0 \mu L$  de la disolución de proteína de  $6 \cdot 10^{-3} M$
- 1:0.5 a la disolución de fotoproducto de  $2 \cdot 10^{-5} M$  se añade  $5 \mu L$  de la disolución de proteína de  $6 \cdot 10^{-3} M$
- 1:0.75 a la disolución de fotoproducto de  $2 \cdot 10^{-5} M$  se añade  $7.5 \mu L$  de la disolución de proteína de  $6 \cdot 10^{-3} M$
- 1:1 a la disolución de fotoproducto de  $2 \cdot 10^{-5} M$  se añade  $10 \mu L$  de la disolución de proteína de  $6 \cdot 10^{-3} M$
- 1:2 a la disolución de fotoproducto de  $2 \cdot 10^{-5} M$  se añade  $20 \mu L$  de la disolución de proteína de  $6 \cdot 10^{-3} M$
- 1:5 a la disolución de fotoproducto de  $2 \cdot 10^{-5} M$  se añade  $50 \mu L$  de la disolución de proteína de  $6 \cdot 10^{-3} M$

## A.3. Especificaciones de los equipos

Tras obtener los fotoproductos puros se comprueban mediante el análisis de **cro-matografía de gases-espectrometría de masas** que fueron registrados con un espectrómetro Hewlett Packard HP 6869, además de la resonancia magnética nuclear. Los **espectros de resonancia magnética nuclear** de protón y carbono (RMN-<sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C) se registraron en un espectrómetro Varian Gemini de 300 MHz, utilizando como disolvente cloroformo deuteroado. Los valores de desplazamiento químico (*d*) están expresados en partes por millón (ppm), y son relativos a la señal del tetrametilsilano

(TMS), escogido como referencia para el caso del cloroformo. Los valores de las constantes de acoplamiento ( $J$ ) se indican en hercios (Hz).

Respecto a los equipos fotoquímicos que se emplearon para el análisis de los tres fotoproductos ya puros son los siguientes:

- Los **espectros de absorción ultravioleta-visible (UV-vis)** se registraron en un espectrofotómetro Perkin Elmer Lambda 35.
- La **irradiación fotoquímica en estado estacionario** de los compuestos se realizó en un fotorreactor multilámpara Luzchem, provisto con 16 lámparas, 8 de las cuales están situadas en los laterales del fotorreactor (4 en cada lateral), y las otras 8 lámparas se encuentran en la parte superior del mismo. Cada lámpara posee una potencia de 8 W. Las longitudes de onda de emisión máxima con las que se puede irradiar son de 254, 300 y 350 nm, en este caso se emplearon lámparas de 254 nm. El sistema posee un ventilador para la refrigeración de la muestra y un agitador magnético para favorecer la homogeneización de la misma.
- En los experimentos de **fotólisis de destello láser (FDL)**, el sistema utilizado consistió en un láser pulsado de Nd-YAG (Quantel Brilliant, de 266 ó 355 nm, donde los pulsos simples tienen una duración aproximada de 5 ns fwhm) acoplado a un equipo miniaturizado mLFP-111 Luzchem, provisto de un monocromador en el rango de longitudes de onda entre 800-200 nm. Los espectros de las especies transitorias se registraron empleando una cubeta de cuarzo 10 x 10 mm<sup>2</sup> con una capacidad volumétrica de 4 mL.
- Para los experimentos de **fluorescencia en estado estacionario** se utilizó un instrumento de Photon Technology International (PTI), modelo LPS-220B, equipado con una lámpara de Xenon de 75 W, provisto de un monocromador tipo Czerny-Turner, modelo 101 y un detector Photomultiplier Detection System, modelo 814. Los espectros se registraron empleando una cubeta Suprasil de cuarzo 10 x 10 mm<sup>2</sup> con una capacidad volumétrica de 4 mL.



## **Anexo B**

### **Fichas de seguridad**

En este anexo se muestran las fichas de seguidad de las materias primas y disolventes empleados [33] [34].

**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD**

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 5.1 Fecha de revisión 24.09.2013

Fecha de impresión 13.01.2014

**SECCIÓN 1: Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa****1.1 Identificadores del producto**

Nombre del producto : Fluriprofeno

Referencia : F8514

Marca : Sigma

REACH No. : Un número de registro no está disponible para esta sustancia, ya que la sustancia o sus usos están exentos del registro, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior

No. CAS : 5104-49-4

**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**

Usos identificados : Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**Compañía : Sigma-Aldrich Quimica, S.L.  
Ronda de Poniente, 3  
Aptdo.Correos 278  
E-28760 TRES CANTOS -MADRID

Teléfono : +34 91 6619977

Fax : +34 91 6619642

E-mail de contacto : eurtechserv@sial.com

**1.4 Teléfono de emergencia**

Teléfono de Urgencia : 704100087

**SECCIÓN 2: Identificación de los peligros****2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla****Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**

Toxicidad aguda, Oral (Categoría 3), H301

Para el texto integral de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

**Clasificación de acuerdo con las Directivas de la UE 67/548/CEE ó 1999/45/CE**

T Tóxico R25

El texto completo de las frases R mencionadas en esta Sección, se indica en la Sección 16.

**2.2 Elementos de la etiqueta****Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**

Pictograma



Palabra de advertencia : Peligro

Indicación(es) de peligro H301 : Tóxico en caso de ingestión.

Declaración(es) de prudencia P301 + P310 : EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar inmediatamente a un CENTRO DE INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA o a un médico.

Declaración Suplementaria del Peligro ninguno(a)

## 2.3 Otros Peligros - ninguno(a)

### SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes

#### 3.1 Sustancias

Descripción química	:	Producto natural
Sinónimos	:	(±)-2-Fluoro-α-methyl-4-biphenylacetic acid L-790,330
Formula	:	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> FO <sub>2</sub>
Peso molecular	:	244,26 g/mol
No. CAS	:	5104-49-4
No. CE	:	225-827-6

#### Ingredientes peligrosos de acuerdo con el Reglamento (CE) Nº 1272/2008

Componente	Clasificación	Concentración
<b>Flurbiprofen</b>		
No. CAS	5104-49-4	Acute Tox. 3; H301
No. CE	225-827-6	<= 100 %

#### Ingrediente peligroso según la Directiva 1999/45/CE

Componente	Clasificación	Concentración
<b>Flurbiprofen</b>		
No. CAS	5104-49-4	T, R25
No. CE	225-827-6	<= 100 %

Para el texto completo de las frases de Riesgo y Seguridad mencionadas en esta Sección, ver la Sección 16

### SECCIÓN 4: Primeros auxilios

#### 4.1 Descripción de los primeros auxilios

##### Recomendaciones generales

Consultar a un médico. Mostrar esta ficha de seguridad al doctor que esté de servicio.

##### Si es inhalado

Si aspiró, mueva la persona al aire fresco. Si ha parado de respirar, hacer la respiración artificial. Consultar a un médico.

##### En caso de contacto con la piel

Eliminar lavando con jabón y mucha agua. Llevar al afectado en seguida a un hospital. Consultar a un médico.

##### En caso de contacto con los ojos

Lavarse abundantemente los ojos con agua como medida de precaución.

##### Si es tragado

Nunca debe administrarse nada por la boca a una persona inconsciente. Enjuague la boca con agua. Consultar a un médico.

#### 4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Los síntomas y efectos más importantes conocidos se describen en la etiqueta (ver sección 2.2) y / o en la sección 11

#### 4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

sin datos disponibles

---

## **SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios**

### **5.1 Medios de extinción**

#### **Medios de extinción apropiados**

Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco o dióxido de carbono.

### **5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**

Óxidos de carbono, Fluoruro de hidrógeno

### **5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**

Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

### **5.4 Otros datos**

sin datos disponibles

---

## **SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental**

### **6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Usar protección respiratoria. Evite la formación de polvo. Evitar respirar los vapores, la neblina o el gas. Asegúrese una ventilación apropiada. Evacuar el personal a zonas seguras. Evitar respirar el polvo. Equipo de protección individual, ver sección 8.

### **6.2 Precauciones relativas al medio ambiente**

Impedir nuevos escapes o derrames si puede hacerse sin riesgos. No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

### **6.3 Métodos y material de contención y de limpieza**

Recoger y preparar la eliminación sin originar polvo. Limpiar y traspalar. Guardar en contenedores apropiados y cerrados para su eliminación.

### **6.4 Referencia a otras secciones**

Para eliminación de desechos ver sección 13.

---

## **SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento**

### **7.1 Precauciones para una manipulación segura**

Evítese el contacto con los ojos y la piel. Evítese la formación de polvo y aerosoles.

Debe disponer de extracción adecuada en aquellos lugares en los que se forma polvo. Disposiciones normales de protección preventivas de incendio.

Ver precauciones en la sección 2.2

### **7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**

Almacenar en un lugar fresco. Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado.

### **7.3 Usos específicos finales**

Aparte de los usos mencionados en la sección 1.2 no se estipulan otros usos específicos

---

## **SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual**

### **8.1 Parámetros de control**

#### **Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.**

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

### **8.2 Controles de la exposición**

#### **Controles técnicos apropiados**

Evitar el contacto con la piel, ojos y ropa. Lávense las manos antes de los descansos e inmediatamente después de manipular la sustancia.

#### **Protección personal**

##### **Protección de los ojos/ la cara**

Caretas de protección y gafas de seguridad. Use equipo de protección para los ojos probado y aprobado según las normas gubernamentales correspondientes, tales como NIOSH (EE.UU.) o EN 166 (UE).

### **Protección de la piel**

Manipular con guantes. Los guantes deben ser inspeccionados antes de su uso. Utilice la técnica correcta de quitarse los guantes (sin tocar la superficie exterior del guante) para evitar el contacto de la piel con este producto. Deseche los guantes contaminados después de su uso, de conformidad con las leyes aplicables y buenas prácticas de laboratorio. Lavar y secar las manos.

Los guantes de protección seleccionados deben de cumplir con las especificaciones de la Directiva de la UE 89/686/CEE y de la norma EN 374 derivado de ello.

#### **Sumersión**

Material: Caucho nitrílo

espesura mínima de capa: 0,11 mm

Tiempo de perforación: 480 min

Material probado:Dermatril® (KCL 740 / Aldrich Z677272, Talla M)

#### **Salpicaduras**

Material: Caucho nitrílo

espesura mínima de capa: 0,11 mm

Tiempo de perforación: 480 min

Material probado:Dermatril® (KCL 740 / Aldrich Z677272, Talla M)

origen de datos: KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Teléfono +49 (0)6659 87300, e-mail sales@kcl.de, Método de prueba: EN374

Si es utilizado en solución, o mezclado con otras sustancias, y bajo condiciones diferentes de la EN 374, pornerse en contacto con el proveedor de los guantes aprobados CE. Esta recomendación es meramente aconsejable y deberá ser evaluada por un responsable de seguridad e higiene industrial familiarizado con la situación específica de uso previsto por nuestros clientes. No debe interpretarse como una aprobación de oferta para cualquier escenario de uso específico.

### **Protección Corporal**

Traje de protección completo contra productos químicos, El tipo de equipamiento de protección debe ser elegido según la concentración y la cantidad de sustancia peligrosa al lugar específico de trabajo.

### **Protección respiratoria**

Donde el asesoramiento de riesgo muestre que los respiradores purificadores de aire son apropiados, usar un respirador que cubra toda la cara tipo N99 (EEUU) o tipo P2 (EN 143) y cartuchos de respuesto para controles de ingeniería. Si el respirador es la única protección, usar un respirador suministrado que cubra toda la cara Usar respiradores y componenetes testados y aprobados bajo los estandards gubernamentales apropiados como NIOSH (EEUU) o CEN (UE)

### **Control de exposición ambiental**

Impedir nuevos escapes o derrames si puede hacerse sin riesgos. No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

---

## **SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas**

### **9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**

- |  |  |
|--|--|
| a) Aspecto   | Forma: sólido                                  |
| b) Olor  | sin datos disponibles                          |
| c) Umbral olfativo                                       | sin datos disponibles                          |
| d) pH  | sin datos disponibles                          |
| e) Punto de fusión/ punto de congelación                 | Punto/intervalo de fusión: 110 - 112 °C - lit. |
| f) Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición | sin datos disponibles                          |
| g) Punto de inflamación                                  | sin datos disponibles                          |
| h) Tasa de evaporación                                   | sin datos disponibles                          |

i)	Inflamabilidad (sólido, gas)	sin datos disponibles
j)	Inflamabilidad superior/inferior o límites explosivos	sin datos disponibles
k)	Presión de vapor	sin datos disponibles
l)	Densidad de vapor	sin datos disponibles
m)	Densidad relativa	sin datos disponibles
n)	Solubilidad en agua	sin datos disponibles
o)	Coeficiente de reparto n-octanol/agua	sin datos disponibles
p)	Temperatura de auto-inflamación	sin datos disponibles
q)	Temperatura de descomposición	sin datos disponibles
r)	Viscosidad	sin datos disponibles
s)	Propiedades explosivas	sin datos disponibles
t)	Propiedades comburentes	sin datos disponibles

## 9.2 Otra información de seguridad

sin datos disponibles

---

## SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

### 10.1 Reactividad

sin datos disponibles

### 10.2 Estabilidad química

Estable bajo las condiciones de almacenamiento recomendadas.

### 10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

sin datos disponibles

### 10.4 Condiciones que deben evitarse

sin datos disponibles

### 10.5 Materiales incompatibles

Agentes oxidantes fuertes

### 10.6 Productos de descomposición peligrosos

Otros productos de descomposición peligrosos - sin datos disponibles

En caso de incendio: véase sección 5

---

## SECCIÓN 11: Información toxicológica

### 11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

#### Toxicidad aguda

DL50 Oral - rata - 117 mg/kg

Observaciones: Conducta: Ataxia Diarrea Hematológicos: Anemia normocítica

#### Corrosión o irritación cutáneas

sin datos disponibles

#### Lesiones o irritación ocular graves

sin datos disponibles

#### Sensibilización respiratoria o cutánea

sin datos disponibles

**Mutagenicidad en células germinales**

sin datos disponibles

**Carcinogenicidad**

IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos.

**Toxicidad para la reproducción**

Toxicidad para el desarrollo - rata - Oral

Anormalidades Específicas del Desarrollo: Sistema Cardiovascular (circulatorio)

**Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única**

sin datos disponibles

**Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas**

sin datos disponibles

**Peligro de aspiración**

sin datos disponibles

**Información Adicional**

RTECS: DU8341000

Trastornos gastrointestinales, Trastornos neurológicos, Trastornos de la sangre, Irregularidades cardíacas, Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.

---

**SECCIÓN 12: Información ecológica****12.1 Toxicidad**

sin datos disponibles

**12.2 Persistencia y degradabilidad**

sin datos disponibles

**12.3 Potencial de bioacumulación**

sin datos disponibles

**12.4 Movilidad en el suelo**

sin datos disponibles

**12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB**

La valoración de PBT / mPmB no está disponible ya que la evaluación de la seguridad química no es necesaria / no se ha realizado

**12.6 Otros efectos adversos**

sin datos disponibles

---

**SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación****13.1 Métodos para el tratamiento de residuos****Producto**

Ofertar el sobrante y las soluciones no-aprovechables a una compañía de vertidos acreditada. Para la eliminación de este producto, dirigirse a un servicio profesional autorizado. Disolver o mezclar el producto con un solvente combustible y quemarlo en un incinerador apto para productos químicos provisto de postquemador y lavador.

**Envases contaminados**

Eliminar como producto no usado.

---

**SECCIÓN 14: Información relativa al transporte****14.1 Número ONU**

ADR/RID: 2811

IMDG: 2811

IATA: 2811

- |  |   |           |  |
|--|---|-----------|--|
| <b>14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas</b> |   |           |  |
| ADR/RID:   | SÓLIDO ORGÁNICO TÓXICO, N.E.P. (Flurbiprofen) |           |  |
| IMDG:  | TOXIC SOLID, ORGANIC, N.O.S. (Flurbiprofen)   |           |  |
| IATA:  | Toxic solid, organic, n.o.s. (Flurbiprofen)   |           |  |
| <b>14.3 Clase(s) de peligro para el transporte</b>                   |   |           |  |
| ADR/RID: 6.1   | IMDG: 6.1                                     | IATA: 6.1 |  |
| <b>14.4 Grupo embalaje</b>   |   |           |  |
| ADR/RID: III   | IMDG: III                                     | IATA: III |  |
| <b>14.5 Peligros para el medio ambiente</b>                          |   |           |  |
| ADR/RID: no  | IMDG Marine pollutant: no                     | IATA: no  |  |
| <b>14.6 Precauciones particulares para los usuarios</b>              |   |           |  |
| sin datos disponibles  |   |           |  |

## **SECCIÓN 15: Información reglamentaria**

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

### **15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla**

sin datos disponibles

## 15.2 Evaluación de la seguridad química

Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química

## **SECCIÓN 16: Otra información**

## **Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.**

Acute Tox. Toxicidad aguda  
H301 Tóxico en caso de ingestión.

**El texto completo de las frases-R referidas en los puntos 2 y 3**

T Tóxico  
R25 Tóxico por ingestión.

### Otros datos

Copyright 2013 Sigma-Aldrich Co. LLC. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. La información contenida en este documento está basada en el presente estado de nuestro conocimiento y es aplicable a las precauciones de seguridad apropiadas para el producto. No representa ninguna garantía de las propiedades del producto. La Corporación Sigma-Aldrich y sus Compañías Afiliadas, no responderán por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Diríjase a [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) y/o a los términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega.

**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD**

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 5.0 Fecha de revisión 26.10.2012

Fecha de impresión 13.01.2014

**1. IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA****1.1 Identificadores del producto**

Nombre del producto : Albumin, from human serum

Referencia : A1887

Marca : Sigma

No. CAS : 70024-90-7

**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**

Usos identificados : Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**Compañía : Sigma-Aldrich Quimica, S.L.  
Ronda de Poniente, 3  
Aptdo.Correos 278  
E-28760 TRES CANTOS -MADRID

Teléfono : +34 91 6619977

Fax : +34 91 6619642

E-mail de contacto : eurtechserv@sial.com

**1.4 Teléfono de emergencia**

Teléfono de Urgencia : 704100087

**2. IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS****2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla**

No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) nº 1272/2008

Esta sustancia no está clasificada como peligrosa según la Directiva 67/548/CEE.

**2.2 Elementos de la etiqueta**

El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.

**2.3 Otros Peligros - ninguno(a)****3. COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES****3.1 Sustancias**

Sinónimos : HSA

**4. PRIMEROS AUXILIOS****4.1 Descripción de los primeros auxilios****Si es inhalado**

Si aspiró, mueva la persona al aire fresco. Si ha parado de respirar, hacer la respiración artificial.

**En caso de contacto con la piel**

Eliminar lavando con jabón y mucha agua.

**En caso de contacto con los ojos**

Lavarse abundantemente los ojos con agua como medida de precaución.

**Si es tragado**

Nunca debe administrarse nada por la boca a una persona inconsciente. Enjuague la boca con agua.

**4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados****4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

sin datos disponibles

---

**5. MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS****5.1 Medios de extinción****Medios de extinción apropiados**

Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco o dióxido de carbono.

**5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**

Se desconoce la naturaleza de los productos de la descomposición.

**5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**

Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

**5.4 Otros datos**

sin datos disponibles

---

**6. MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL****6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Evitar respirar los vapores, la neblina o el gas.

**6.2 Precauciones relativas al medio ambiente**

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

**6.3 Métodos y material de contención y de limpieza**

Guardar en contenedores apropiados y cerrados para su eliminación.

**6.4 Referencia a otras secciones**

Para eliminación de desechos ver sección 13.

---

**7. MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO****7.1 Precauciones para una manipulación segura**

Disposiciones normales de protección preventivas de incendio.

**7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**

Almacenar en un lugar fresco. Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado. Los contenedores que se abren deben volverse a cerrar cuidadosamente y mantener en posición vertical para evitar pérdidas.

Temperatura de almacenaje recomendada: 2 - 8 °C

**7.3 Usos específicos finales**

sin datos disponibles

---

**8. CONTROLES DE EXPOSICIÓN/ PROTECCIÓN INDIVIDUAL****8.1 Parámetros de control****Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.**

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

**8.2 Controles de la exposición****Controles técnicos apropiados**

Procedimiento general de higiene industrial.

**Protección personal****Protección de los ojos/ la cara**

Use equipo de protección para los ojos probado y aprobado según las normas gubernamentales correspondientes, tales como NIOSH (EE.UU.) o EN 166 (UE).

### **Protección de la piel**

Manipular con guantes. Los guantes deben ser controlados antes de la utilización. Utilice la técnica correcta de quitarse los guantes (sin tocar la superficie exterior del guante) para evitar el contacto de la piel con este producto. Deseche los guantes contaminados después de su uso, de conformidad con las leyes aplicables y buenas prácticas de laboratorio. Lavar y secar las manos.

Los guantes de protección seleccionados deben de cumplir con las especificaciones de la Directiva de la UE 89/686/CEE y de la norma EN 374 derivado de ello.

### **Protección Corporal**

Indumentaria impermeable, El tipo de equipamiento de protección debe ser elegido según la concentración y la cantidad de sustancia peligrosa al lugar específico de trabajo.

### **Protección respiratoria**

No se requiere protección respiratoria. Para exposiciones molestas use cartuchos de respirador de tipo OV / AG (EE.UU.) o ABEK (UE EN 14387). Usar respiradores y componenentes testados y aprobados bajo los estandares gubernamentales apropiados como NIOSH (EEUU) o CEN (UE)

---

## **9. PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS**

### **9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**

a) Aspecto	Forma: líquido
b) Olor	sin datos disponibles
c) Umbral olfativo	sin datos disponibles
d) pH	sin datos disponibles
e) Punto de fusión/ punto de congelación	sin datos disponibles
f) Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	sin datos disponibles
g) Punto de inflamación	sin datos disponibles
h) Tasa de evaporación	sin datos disponibles
i) Inflamabilidad (sólido, gas)	sin datos disponibles
j) Inflamabilidad superior/inferior o límites explosivos	sin datos disponibles
k) Presión de vapor	sin datos disponibles
l) Densidad de vapor	sin datos disponibles
m) Densidad relativa	sin datos disponibles
n) Solubilidad en agua	sin datos disponibles
o) Coeficiente de reparto n-octanol/agua	sin datos disponibles
p) Temperatura de auto-inflamación	sin datos disponibles
q) Temperatura de descomposición	sin datos disponibles
r) Viscosidad	sin datos disponibles
s) Propiedades explosivas	sin datos disponibles
t) Propiedades comburentes	sin datos disponibles

### **9.2 Otra información de seguridad**

sin datos disponibles

---

## **10. ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD**

- 10.1 Reactividad**  
sin datos disponibles
  - 10.2 Estabilidad química**  
sin datos disponibles
  - 10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas**  
sin datos disponibles
  - 10.4 Condiciones que deben evitarse**  
sin datos disponibles
  - 10.5 Materiales incompatibles**  
Agentes oxidantes fuertes
  - 10.6 Productos de descomposición peligrosos**  
Otros productos de descomposición peligrosos - sin datos disponibles
- 

## **11. INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA**

### **11.1 Información sobre los efectos toxicológicos**

**Toxicidad aguda**  
sin datos disponibles

**Corrosión o irritación cutáneas**  
sin datos disponibles

**Lesiones o irritación ocular graves**  
sin datos disponibles

**Sensibilización respiratoria o cutánea**  
sin datos disponibles

**Mutagenicidad en células germinales**  
sin datos disponibles

**Carcinogenicidad**

IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos.

**Toxicidad para la reproducción**

sin datos disponibles

**Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única**  
sin datos disponibles

**Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas**  
sin datos disponibles

**Peligro de aspiración**  
sin datos disponibles

**Efectos potenciales sobre la salud**

<b>Inhalación</b>	Puede ser nocivo si se inhala. Puede provocar una irritación en el tracto respiratorio.
-------------------	---

<b>Ingestión</b>	Puede ser nocivo si es tragado.
------------------	---------------------------------

<b>Piel</b>	Puede ser nocivo si es absorbido por la piel. Puede provocar una irritación de la piel.
-------------	---

<b>Ojos</b>	Puede provocar una irritación en los ojos.
-------------	--

**Información Adicional**

RTECS: sin datos disponibles

---

## **12. INFORMACIÓN ECOLÓGICA**

- 12.1 Toxicidad**  
sin datos disponibles
  - 12.2 Persistencia y degradabilidad**  
sin datos disponibles
  - 12.3 Potencial de bioacumulación**  
sin datos disponibles
  - 12.4 Movilidad en el suelo**  
sin datos disponibles
  - 12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB**  
sin datos disponibles
  - 12.6 Otros efectos adversos**  
sin datos disponibles
- 

## **13. CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN**

### **13.1 Métodos para el tratamiento de residuos**

#### **Producto**

Ofertar el sobrante y las soluciones no-aprovechables a una compañía de vertidos acreditada.

#### **Envases contaminados**

Eliminar como producto no usado.

---

## **14. INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE**

### **14.1 Número ONU**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

### **14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**

ADR/RID: Mercancía no peligrosa

IMDG: Not dangerous goods

IATA: Not dangerous goods

### **14.3 Clase(s) de peligro para el transporte**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

### **14.4 Grupo embalaje**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

### **14.5 Peligros para el medio ambiente**

ADR/RID: no IMDG Marine pollutant: no IATA: no

### **14.6 Precauciones particulares para los usuarios**

sin datos disponibles

---

## **15. INFORMACIÓN REGLAMENTARIA**

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

### **15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla**

sin datos disponibles

### **15.2 Evaluación de la seguridad química**

sin datos disponibles

---

## **16. OTRA INFORMACIÓN**

#### **Otros datos**

Copyright 2012 Sigma-Aldrich Co. LLC. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. La información contenida en este documento está basada en el presente estado de nuestro conocimiento y es aplicable a las precauciones de seguridad apropiadas para el producto. No representa ninguna garantía de las propiedades del producto. La Corporación Sigma-Aldrich y sus Compañías Afiliadas, no responderán por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Diríjase a [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) y/o a los términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega.

---

**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD**

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 5.2 Fecha de revisión 04.02.2013

Fecha de impresión 13.01.2014

**SECCIÓN 1: Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa****1.1 Identificadores del producto**

Nombre del producto : Albumina de suero bovino

Referencia : A7030

Marca : Sigma

REACH No. : Un número de registro no está disponible para esta sustancia, ya que la sustancia o sus usos están exentos del registro, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior

No. CAS : 9048-46-8

**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**

Usos identificados : Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**Compañía : Sigma-Aldrich Quimica, S.L.  
Ronda de Poniente, 3  
Aptdo.Correos 278  
E-28760 TRES CANTOS -MADRID

Teléfono : +34 91 6619977

Fax : +34 91 6619642

E-mail de contacto : eurtechserv@sial.com

**1.4 Teléfono de emergencia**

Teléfono de Urgencia : 704100087

**SECCIÓN 2: Identificación de los peligros****2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla**No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008.  
Esta sustancia no está clasificada como peligrosa según la Directiva 67/548/CEE.**2.2 Elementos de la etiqueta**

El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.

**2.3 Otros Peligros - ninguno(a)****SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes****3.1 Sustancias**Sinónimos : Bovine albumin  
BSA

No. CAS : 9048-46-8

No. CE : 232-936-2

Según la normativa aplicable no es necesario divulgar ninguno de los componentes.

---

## **SECCIÓN 4: Primeros auxilios**

### **4.1 Descripción de los primeros auxilios**

#### **Si es inhalado**

Si aspiró, mueva la persona al aire fresco. Si ha parado de respirar, hacer la respiración artificial.

#### **En caso de contacto con la piel**

Eliminar lavando con jabón y mucha agua.

#### **En caso de contacto con los ojos**

Lavarse abundantemente los ojos con agua como medida de precaución.

#### **Si es tragado**

Nunca debe administrarse nada por la boca a una persona inconsciente. Enjuague la boca con agua.

### **4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

Los síntomas y efectos más importantes conocidos se describen en la etiqueta (ver sección 2.2) y / o en la sección 11

### **4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

sin datos disponibles

---

## **SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios**

### **5.1 Medios de extinción**

#### **Medios de extinción apropiados**

Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco o dióxido de carbono.

### **5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**

Se desconoce la naturaleza de los productos de la descomposición.

### **5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**

Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

### **5.4 Otros datos**

sin datos disponibles

---

## **SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental**

### **6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Evite la formación de polvo. Evitar respirar los vapores, la neblina o el gas.  
Equipo de protección individual, ver sección 8.

### **6.2 Precauciones relativas al medio ambiente**

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

### **6.3 Métodos y material de contención y de limpieza**

Limpiar y traspalar. Guardar en contenedores apropiados y cerrados para su eliminación.

### **6.4 Referencia a otras secciones**

Para eliminación de desechos ver sección 13.

---

## **SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento**

### **7.1 Precauciones para una manipulación segura**

Debe disponer de extracción adecuada en aquellos lugares en los que se forma polvo.  
Ver precauciones en la sección 2.2

### **7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**

Almacenar en un lugar fresco. Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado.

Temperatura de almacenaje recomendada: 2 - 8 °C

### **7.3 Usos específicos finales**

Aparte de los usos mencionados en la sección 1.2 no se estipulan otros usos específicos

---

## **SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual**

### **8.1 Parámetros de control**

#### **Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.**

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

### **8.2 Controles de la exposición**

#### **Controles técnicos apropiados**

Procedimiento general de higiene industrial.

#### **Protección personal**

##### **Protección de los ojos/ la cara**

Use equipo de protección para los ojos probado y aprobado según las normas gubernamentales correspondientes, tales como NIOSH (EE.UU.) o EN 166 (UE).

##### **Protección de la piel**

Manipular con guantes. Los guantes deben ser inspeccionados antes de su uso. Utilice la técnica correcta de quitarse los guantes (sin tocar la superficie exterior del guante) para evitar el contacto de la piel con este producto. Deseche los guantes contaminados después de su uso, de conformidad con las leyes aplicables y buenas prácticas de laboratorio. Lavar y secar las manos.

Los guantes de protección seleccionados deben de cumplir con las especificaciones de la Directiva de la UE 89/686/CEE y de la norma EN 374 derivado de ello.

##### **Sumersión**

Material: Caucho nitrílo

espesura mínima de capa: 0,11 mm

Tiempo de perforación: 480 min

Material probado:Dermatril® (KCL 740 / Aldrich Z677272, Talla M)

##### **Salpicaduras**

Material: Caucho nitrílo

espesura mínima de capa: 0,11 mm

Tiempo de perforación: 480 min

Material probado:Dermatril® (KCL 740 / Aldrich Z677272, Talla M)

origen de datos: KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Teléfono +49 (0)6659 87300, e-mail sales@kcl.de, Método de prueba: EN374

Si es utilizado en solución, o mezclado con otras sustancias, y bajo condiciones diferentes de la EN 374, pornerse en contacto con el proveedor de los guantes aprobados CE. Esta recomendación es meramente aconsejable y deberá ser evaluada por un responsable de seguridad e higiene industrial familiarizado con la situación específica de uso previsto por nuestros clientes. No debe interpretarse como una aprobación de oferta para cualquier escenario de uso específico.

##### **Protección Corporal**

Elegir la protección para el cuerpo según sus características, la concentración y la cantidad de sustancias peligrosas, y el lugar específico de trabajo., El tipo de equipamiento de protección debe ser elegido según la concentración y la cantidad de sustancia peligrosa al lugar específico de trabajo.

##### **Protección respiratoria**

Protección respiratoria no requerida. Donde la protección sea deseada Usar respiradores y compartenetes testados y aprobados bajo los estandards gubernamentales apropiados como NIOSH (EEUU) o CEN (UE)

##### **Control de exposición ambiental**

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

---

## **SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas**

### **9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**

a) Aspecto

Forma: polvo

b)	Olor	sin datos disponibles
c)	Umbral olfativo	sin datos disponibles
d)	pH	4,8 - 7,5
e)	Punto de fusión/ punto de congelación	sin datos disponibles
f)	Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	sin datos disponibles
g)	Punto de inflamación	sin datos disponibles
h)	Tasa de evaporación	sin datos disponibles
i)	Inflamabilidad (sólido, gas)	sin datos disponibles
j)	Inflamabilidad superior/inferior o límites explosivos	sin datos disponibles
k)	Presión de vapor	sin datos disponibles
l)	Densidad de vapor	sin datos disponibles
m)	Densidad relativa	sin datos disponibles
n)	Solubilidad en agua	soluble/leigeramente soluble
o)	Coeficiente de reparto n-octanol/agua	sin datos disponibles
p)	Temperatura de auto-inflamación	sin datos disponibles
q)	Temperatura de descomposición	sin datos disponibles
r)	Viscosidad	sin datos disponibles
s)	Propiedades explosivas	sin datos disponibles
t)	Propiedades comburentes	sin datos disponibles

## 9.2 Otra información de seguridad

sin datos disponibles

## SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

**10.1 Reactividad**  
sin datos disponibles

**10.2 Estabilidad química**  
Estable bajo las condiciones de almacenamiento recomendadas.

**10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas**  
sin datos disponibles

**10.4 Condiciones que deben evitarse**  
sin datos disponibles

**10.5 Materiales incompatibles**  
Agentes oxidantes fuertes

**10.6 Productos de descomposición peligrosos**  
Otros productos de descomposición peligrosos - sin datos disponibles  
En caso de incendio: véase sección 5

---

## **SECCIÓN 11: Información toxicológica**

### **11.1 Información sobre los efectos toxicológicos**

#### **Toxicidad aguda**

sin datos disponibles

Inhalación: sin datos disponibles

Cutáneo: sin datos disponibles

sin datos disponibles

#### **Corrosión o irritación cutáneas**

sin datos disponibles

#### **Lesiones o irritación ocular graves**

sin datos disponibles

#### **Sensibilización respiratoria o cutánea**

sin datos disponibles

#### **Mutagenicidad en células germinales**

sin datos disponibles

#### **Carcinogenicidad**

IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos.

#### **Toxicidad para la reproducción**

sin datos disponibles

#### **Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única**

sin datos disponibles

#### **Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas**

sin datos disponibles

#### **Peligro de aspiración**

sin datos disponibles

#### **Información Adicional**

RTECS: sin datos disponibles

Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.

---

## **SECCIÓN 12: Información ecológica**

### **12.1 Toxicidad**

sin datos disponibles

### **12.2 Persistencia y degradabilidad**

sin datos disponibles

### **12.3 Potencial de bioacumulación**

sin datos disponibles

### **12.4 Movilidad en el suelo**

sin datos disponibles

### **12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB**

La valoración de PBT / mPmB no está disponible ya que la evaluación de la seguridad química no es necesaria / no se ha realizado

### **12.6 Otros efectos adversos**

sin datos disponibles

---

## **SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación**

### **13.1 Métodos para el tratamiento de residuos**

#### **Producto**

Ofertar el sobrante y las soluciones no-aprovechables a una compañía de vertidos acreditada.

#### **Envases contaminados**

Eliminar como producto no usado.

---

## **SECCIÓN 14: Información relativa al transporte**

### **14.1 Número ONU**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

### **14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**

ADR/RID: Mercancía no peligrosa

IMDG: Not dangerous goods

IATA: Not dangerous goods

### **14.3 Clase(s) de peligro para el transporte**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

### **14.4 Grupo embalaje**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

### **14.5 Peligros para el medio ambiente**

ADR/RID: no IMDG Marine pollutant: no IATA: no

### **14.6 Precauciones particulares para los usuarios**

sin datos disponibles

---

## **SECCIÓN 15: Información reglamentaria**

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

### **15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla**

sin datos disponibles

### **15.2 Evaluación de la seguridad química**

Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química

---

## **SECCIÓN 16: Otra información**

#### **Otros datos**

Copyright 2013 Sigma-Aldrich Co. LLC. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. La información contenida en este documento esta basada en el presente estado de nuestro conocimiento y es aplicable a las precauciones de seguridad apropiadas para el producto. No representa ninguna garantía de las propiedades del producto. La Corporación Sigma-Aldrich y sus Compañías Afiliadas, no responderán por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Diríjase a [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) y/o a los términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega.

---

**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD**

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 5.0 Fecha de revisión 12.07.2012

Fecha de impresión 13.01.2014

**1. IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA****1.1 Identificadores del producto**

Nombre del producto : Solución salina tamponada con fosfato

Referencia : P4417  
Marca : Sigma**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**

Usos identificados : Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**Compañía : Sigma-Aldrich Quimica, S.L.  
Ronda de Poniente, 3  
Aptdo.Correos 278  
E-28760 TRES CANTOS -MADRIDTeléfono : +34 91 6619977  
Fax : +34 91 6619642  
E-mail de contacto : eurtechserv@sial.com**1.4 Teléfono de emergencia**

Teléfono de Urgencia : 704100087

**2. IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS****2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla**No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008.  
No es una sustancia o mezcla peligrosa según la Directiva de la CE 67/548/CEE ó 1999/45/CE.**2.2 Elementos de la etiqueta**

El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.

**2.3 Otros Peligros - ninguno(a)****3. COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES****3.2 Mezclas**

Sinónimos : PBS

Según la normativa aplicable no es necesario divulgar ninguno de los componentes.

**4. PRIMEROS AUXILIOS****4.1 Descripción de los primeros auxilios****Recomendaciones generales**

Consultar a un médico. Mostrar esta ficha de seguridad al doctor que esté de servicio.

**Si es inhalado**Si aspiró, mueva la persona al aire fresco. Si ha parado de respirar, hacer la respiración artificial.  
Consultar a un médico.**En caso de contacto con la piel**

Eliminar lavando con jabón y mucha agua. Consultar a un médico.

**En caso de contacto con los ojos**

Lávese a fondo con agua abundante durante 15 minutos por lo menos y consulte al médico.

**Si es tragado**

Nunca debe administrarse nada por la boca a una persona inconsciente. Enjuague la boca con agua. Consultar a un médico.

**4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

Vómitos, Diarrea, Una deshidratación y una congestión pueden ocurrir en los órganos internos. Las soluciones de sal hipertónicas pueden producir reacciones inflamatorias en el aparato gastrointestinal., Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.

**4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

sin datos disponibles

---

**5. MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS****5.1 Medios de extinción****Medios de extinción apropiados**

Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco o dióxido de carbono.

**5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**

Oxidos de fósforo, Gas cloruro de hidrógeno, Óxidos de potasio, Oxidos de sodio

**5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**

Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

**5.4 Otros datos**

sin datos disponibles

---

**6. MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL****6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Utilícese equipo de protección individual. Evite la formación de polvo. Evitar respirar los vapores, la neblina o el gas. Asegúrese una ventilación apropiada. Evitar respirar el polvo.

**6.2 Precauciones relativas al medio ambiente**

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

**6.3 Métodos y material de contención y de limpieza**

Recoger y preparar la eliminación sin originar polvo. Limpiar y traspalar. Guardar en contenedores apropiados y cerrados para su eliminación.

**6.4 Referencia a otras secciones**

Para eliminación de desechos ver sección 13.

---

**7. MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO****7.1 Precauciones para una manipulación segura**

Evítese el contacto con los ojos y la piel. Evítense la formación de polvo y aerosoles.

Debe disponer de extracción adecuada en aquellos lugares en los que se forma polvo.

**7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**

Almacenar en un lugar fresco. Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado.

**7.3 Usos específicos finales**

sin datos disponibles

---

**8. CONTROLES DE EXPOSICIÓN/ PROTECCIÓN INDIVIDUAL****8.1 Parámetros de control****Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.**

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

## 8.2 Controles de la exposición

### Controles técnicos apropiados

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad. Lávense las manos antes de los descansos y después de terminar la jornada laboral.

### Protección personal

#### Protección de los ojos/ la cara

Gafas de seguridad con protecciones laterales conformes con la EN166 Use equipo de protección para los ojos probado y aprobado según las normas gubernamentales correspondientes, tales como NIOSH (EE.UU.) o EN 166 (UE).

#### Protección de la piel

Manipular con guantes. Los guantes deben ser controlados antes de la utilización. Utilice la técnica correcta de quitarse los guantes (sin tocar la superficie exterior del guante) para evitar el contacto de la piel con este producto. Deseche los guantes contaminados después de su uso, de conformidad con las leyes aplicables y buenas prácticas de laboratorio. Lavar y secar las manos.

Los guantes de protección seleccionados deben de cumplir con las especificaciones de la Directiva de la UE 89/686/CEE y de la norma EN 374 derivado de ello.

#### Protección Corporal

Indumentaria impermeable, El tipo de equipamiento de protección debe ser elegido según la concentración y la cantidad de sustancia peligrosa al lugar específico de trabajo.

#### Protección respiratoria

Para exposiciones molestas use respirador de partículas tipo P95 (EE.UU.) o tipo P1 (UE EN 143). Para un nivel de protección mayor use cartuchos de respirador tipo OV/AG/P99 (EE.UU.) o ABEK-P2 (UE EN 143). Usar respiradores y compartenetes testados y aprobados bajo los estandards gubernamentales apropiados como NIOSH (EEUU) o CEN (UE)

---

## 9. PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

### 9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

- |  |                       |
|--|-----------------------|
| a) Aspecto   | Forma: sólido         |
| b) Olor  | sin datos disponibles |
| c) Umbral olfativo                                       | sin datos disponibles |
| d) pH  | 7,2 - 7,6 a 25 °C     |
| e) Punto de fusión/ punto de congelación                 | sin datos disponibles |
| f) Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición | sin datos disponibles |
| g) Punto de inflamación                                  | no aplicable          |
| h) Tasa de evaporación                                   | sin datos disponibles |
| i) Inflamabilidad (sólido, gas)                          | sin datos disponibles |
| j) Inflamabilidad superior/inferior o límites explosivos | sin datos disponibles |
| k) Presión de vapor                                      | sin datos disponibles |
| l) Densidad de vapor                                     | sin datos disponibles |
| m) Densidad relativa                                     | sin datos disponibles |
| n) Solubilidad en agua                                   | sin datos disponibles |
| o) Coeficiente de reparto n-octanol/agua                 | sin datos disponibles |

- p) Temperatura de auto-inflamación sin datos disponibles
- q) Temperatura de descomposición sin datos disponibles
- r) Viscosidad sin datos disponibles
- s) Propiedades explosivas sin datos disponibles
- t) Propiedades comburentes sin datos disponibles

## **9.2 Otra información de seguridad**

sin datos disponibles

---

## **10. ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD**

### **10.1 Reactividad**

sin datos disponibles

### **10.2 Estabilidad química**

sin datos disponibles

### **10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas**

sin datos disponibles

### **10.4 Condiciones que deben evitarse**

sin datos disponibles

### **10.5 Materiales incompatibles**

Agentes oxidantes fuertes, Ácidos fuertes

### **10.6 Productos de descomposición peligrosos**

Otros productos de descomposición peligrosos - sin datos disponibles

---

## **11. INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA**

### **11.1 Información sobre los efectos toxicológicos**

#### **Toxicidad aguda**

sin datos disponibles

Cutáneo: sin datos disponibles

#### **Corrosión o irritación cutánea**

sin datos disponibles

#### **Lesiones o irritación ocular graves**

sin datos disponibles

#### **Sensibilización respiratoria o cutánea**

sin datos disponibles

#### **Mutagenicidad en células germinales**

sin datos disponibles

#### **Carcinogenicidad**

IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos.

#### **Toxicidad para la reproducción**

sin datos disponibles

#### **Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única**

sin datos disponibles

#### **Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas**

sin datos disponibles

**Peligro de aspiración**  
sin datos disponibles

**Efectos potenciales sobre la salud**

<b>Inhalación</b>	Puede ser nocivo si se inhala. Puede provocar una irritación en el tracto respiratorio.
<b>Ingestión</b>	Puede ser nocivo si es tragado.
<b>Piel</b>	Puede ser nocivo si es absorbido por la piel. Puede provocar una irritación de la piel.
<b>Ojos</b>	Provoca una irritación en los ojos.

**Signos y Síntomas de la Exposición**

Vómitos, Diarrea, Una deshidratación y una congestión pueden ocurrir en los órganos internos. Las soluciones de sal hipertónicas pueden producir reacciones inflamatorias en el aparato gastrointestinal., Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.

**Información Adicional**

RTECS: sin datos disponibles

---

**12. INFORMACIÓN ECOLÓGICA**

**12.1 Toxicidad**

sin datos disponibles

**12.2 Persistencia y degradabilidad**

sin datos disponibles

**12.3 Potencial de bioacumulación**

sin datos disponibles

**12.4 Movilidad en el suelo**

sin datos disponibles

**12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB**

sin datos disponibles

**12.6 Otros efectos adversos**

sin datos disponibles

---

**13. CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN**

**13.1 Métodos para el tratamiento de residuos**

**Producto**

Ofertar el sobrante y las soluciones no-aprovechables a una compañía de vertidos acreditada. Disolver o mezclar el producto con un solvente combustible y quemarlo en un incinerador apto para productos químicos provisto de postquemador y lavador.

**Envases contaminados**

Eliminar como producto no usado.

---

**14. INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE**

**14.1 Número ONU**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

**14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**

ADR/RID: Mercancía no peligrosa

IMDG: Not dangerous goods

IATA: Not dangerous goods

**14.3 Clase(s) de peligro para el transporte**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

**14.4 Grupo embalaje**

ADR/RID: - IMDG: - IATA: -

**14.5 Peligros para el medio ambiente**

ADR/RID: no

IMDG Marine pollutant: no

IATA: no

**14.6 Precauciones particulares para los usuarios**

sin datos disponibles

---

**15. INFORMACIÓN REGLAMENTARIA**

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

**15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla**

sin datos disponibles

**15.2 Evaluación de la seguridad química**

sin datos disponibles

---

**16. OTRA INFORMACIÓN****Otros datos**

Copyright 2012 Sigma-Aldrich Co. LLC. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. La información contenida en este documento esta basada en el presente estado de nuestro conocimiento y es aplicable a las precauciones de seguridad apropiadas para el producto. No representa ninguna garantía de las propiedades del producto. La Corporación Sigma-Aldrich y sus Compañías Afiliadas, no responderán por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Diríjase a [www.sigma-aldrich.com](http://www.sigma-aldrich.com) y/o a los términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega.

---

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**

- **Identificador del producto**
- **Nombre comercial:** Diclorometano, "analytical grade", estabilizado con aprox. 50 ppm de amileno, ACS, Reag. Ph Eur
- **Número del artículo:** CL0348
- **Número CAS:**  
75-09-2
- **Número CE:**  
200-838-9
- **Número de clasificación:**  
602-004-00-3
- **Número de registro** 01-2119480404-41-XXXX
- **Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**
- **Sector de utilización**  
SU10 Formulación [mezcla] de preparados y/o reenvasado (sin incluir aleaciones)
- **Categoría de productos** PC21 Productos químicos de laboratorio
- **Categoría de procesos**  
PROC5 Mezclado en procesos por lotes para la formulación de preparados y artículos (fases múltiples y/o contacto significativo)  
PROC8a Transferencia de sustancias o preparados (carga/descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones no especializadas  
PROC9 Transferencia de sustancias o preparados en pequeños contenedores (líneas de llenado especializadas, incluido el pesaje)  
PROC15 Uso como reactivo de laboratorio
- **Utilización del producto / de la elaboración:** Reactivo de laboratorio
- **Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**
- **Fabricante/distribuidor:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) SPAIN  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Representante regional:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) ESPAÑA  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Área de información:** Departamento técnico
- **Teléfono de emergencia:** Scharlab, S.L. (+34) 93 715 18 11

**2 Identificación de los peligros**

- **Clasificación de la sustancia o de la mezcla**
- **Clasificación con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**



GHS08 peligro para la salud

Carc. 2 H351 Se sospecha que provoca cáncer.

- **Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE**



Xn; Nocivo

R40: Posibles efectos cancerígenos.

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Diclorometano, "analytical grade", estabilizado con aprox. 50 ppm de amileno, ACS, Reag. Ph Eur

( viene de la página 1 )

Carc. Cat. 3

**Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente:** Nulo**Elementos de la etiqueta****Etiquetado con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**

La sustancia se ha clasificado y etiquetado de conformidad con el reglamento CLP.

**Pictogramas de peligro**

GHS08

**Palabra de advertencia** Atención**Indicaciones de peligro**

H351 Se sospecha que provoca cáncer.

**Consejos de prudencia**

P281 Utilizar el equipo de protección individual obligatorio.

P201 Pedir instrucciones especiales antes del uso.

P202 No manipular la sustancia antes de haber leído y comprendido todas las instrucciones de seguridad.

P308+P313 EN CASO DE exposición manifiesta o presunta: Consultar a un médico.

P405 Guardar bajo llave.

P501 Eliminar el contenido o el recipiente conforme a la reglamentación local/regional/nacional/internacional.

**Otros peligros****Resultados de la valoración PBT y mPmB****PBT:** No aplicable.**mPmB:** No aplicable.

### 3 Composición/información sobre los componentes

**Caracterización química: Sustancias****Denominación Nº CAS**

75-09-2 diclorometano

**Número(s) de identificación****Número CE:** 200-838-9**Número de clasificación:** 602-004-00-3

### 4 Primeros auxilios

**Descripción de los primeros auxilios****En caso de inhalación del producto:**

Suministrar aire fresco. En caso de trastornos, consultar al médico.

**En caso de contacto con la piel:** Por regla general, el producto no irrita la piel.**En caso de contacto con los ojos:**

Limpiar los ojos abiertos durante varios minutos con agua corriente.

**En caso de ingestión:** Consultar un médico si los trastornos persisten.**Indicaciones para el médico:****Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

No existen más datos relevantes disponibles.

( continúa en la página 3 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Diclorometano, "analytical grade", estabilizado con aprox. 50 ppm de amileno, ACS, Reag. Ph Eur

( viene de la página 2 )

- Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**  
No existen más datos relevantes disponibles.

## 5 Medidas de lucha contra incendios

- Medios de extinción**
- Sustancias extintoras apropiadas:**  
CO<sub>2</sub>, polvo extintor o chorro de agua rociada. Combatir incendios mayores con chorro de agua rociada o espuma resistente al alcohol.
- Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**
- Equipo especial de protección:** No se requieren medidas especiales.

## 6 Medidas en caso de vertido accidental

- Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**  
No es necesario.

- Precauciones relativas al medio ambiente:**  
Evitar que penetre en la canalización /aguas de superficie /agua subterráneas.

- Métodos y material de contención y de limpieza:**  
Quitar con material absorbente (arena, kieselgur, aglutinante de ácidos, aglutinante universal, aserrín).

Desechar el material contaminado como vertido según item 13.

Asegurar suficiente ventilación.

- Referencia a otras secciones**

Ver capítulo 7 para mayor información sobre una manipulación segura.

Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.

Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

## 7 Manipulación y almacenamiento

- Manipulación:**

- Precauciones para una manipulación segura**

Asegurar suficiente ventilación /aspiración en el puesto de trabajo.

Evitar la formación de aerosoles.

- Prevención de incendios y explosiones:** No se requieren medidas especiales.

- Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**

- Almacenamiento:**

- Exigencias con respecto al almacén y los recipientes:** No se requieren medidas especiales.

- Normas en caso de un almacenamiento conjunto:** No es necesario.

- Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:** Ningunos, -as.

- Usos específicos finales** No existen más datos relevantes disponibles.

## 8 Controles de exposición/protección individual

- Instrucciones adicionales para el acondicionamiento de instalaciones técnicas:**

Sin datos adicionales, ver punto 7.

( continúa en la página 4 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Diclorometano, "analytical grade", estabilizado con aprox. 50 ppm de amileno, ACS, Reag. Ph Eur

( viene de la página 3 )

**· Parámetros de control****· Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:****75-09-2 diclorometano**LEP () Valor de larga duración: 177 mg/m<sup>3</sup>, 50 ppm  
r, VLB**· Componentes con valores límite biológicos:****75-09-2 diclorometano**

VLB () 0,3 mg/l

Muestra: orina

Momento de Muestreo: Final de la jornada laboral

Indicador Biológico: Diclorometano

**· Indicaciones adicionales:**

Como base se han utilizado las listas vigentes en el momento de la elaboración.

**· Controles de la exposición****· Equipo de protección individual:****· Medidas generales de protección e higiene:**

Mantener alejado de alimentos, bebidas y alimentos para animales.

Lavarse las manos antes de las pausas y al final del trabajo.

**· Protección respiratoria:**

Si la exposición va a ser breve o de poca intensidad, colocarse una máscara respiratoria. Para una exposición más intensa o de mayor duración, usar un aparato de respiración autónomo.

**· Protección de manos:**

Guantes de protección

El material del guante deberá ser impermeable y resistente al producto / substancia / preparado. Ante la ausencia de tests específicos, no se puede recomendar ningún material específico para guantes de protección contra el producto / preparado / mezcla de substancias químicas.

Selección del material de los guantes en función de los tiempos de rotura, grado de permeabilidad y degradación.

**· Material de los guantes**

La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro.

**· Tiempo de penetración del material de los guantes**

El tiempo de resistencia a la penetración exacto deberá ser pedido al fabricante de los guantes.

Este tiempo debe ser respetado.

**· Protección de ojos:** Gafas de protección**9 Propiedades físicas y químicas****· Información sobre propiedades físicas y químicas básicas****· Datos generales****· Aspecto:****Forma:**

Líquido

**Color:**

Incoloro

**· Olor:**

Similar al cloro

**· Umbral olfativo:**

No determinado.

**· valor pH:**

No determinado.

**· Cambio de estado****Punto de fusión /campo de fusión:** 120° 95,1 °C

( continúa en la página 5 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Diclorometano, "analytical grade", estabilizado con aprox. 50 ppm de amileno, ACS, Reag. Ph Eur

( viene de la página 4 )

<b>Punto de ebullición /campo de ebullición:</b>	40 °C
<b>Punto de inflamación:</b>	No aplicable.
<b>Inflamabilidad (sólido, gaseiforme):</b>	No aplicable.
<b>Temperatura de ignición:</b>	605 °C
<b>Temperatura de descomposición:</b>	No determinado.
<b>Autoinflamabilidad:</b>	No determinado.
<b>Peligro de explosión:</b>	El producto no es explosivo.
<b>Límites de explosión:</b>	
<b>Inferior:</b>	13 Vol %
<b>Superior:</b>	22 Vol %
<b>Presión de vapor a 20 °C:</b>	453 hPa
<b>Densidad a 20 °C:</b>	1,33 g/cm <sup>3</sup>
<b>Densidad relativa</b>	No determinado.
<b>Densidad de vapor</b>	No determinado.
<b>Velocidad de evaporación</b>	No determinado.
<b>Solubilidad en / miscibilidad con agua a 20 °C:</b>	20 g/l
<b>Coeficiente de reparto (n-octanol/agua):</b>	No determinado.
<b>Viscosidad:</b>	
<b>Dinámica a 22 °C:</b>	0,43 mPas
<b>Cinemática:</b>	No determinado.
<b>Información adicional</b>	No existen más datos relevantes disponibles.

## 10 Estabilidad y reactividad

- Reactividad**
- Estabilidad química**
- Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:**  
No se descompone al emplearse adecuadamente.
- Posibilidad de reacciones peligrosas** No se conocen reacciones peligrosas.
- Condiciones que deben evitarse** No existen más datos relevantes disponibles.
- Materiales incompatibles:** No existen más datos relevantes disponibles.
- Productos de descomposición peligrosos:**  
No se conocen productos de descomposición peligrosos.

## 11 Información toxicológica

- Información sobre los efectos toxicológicos**
- Toxicidad aguda:**
- Valores LD/LC50 (dosis letal /dosis letal = 50%) relevantes para la clasificación:**  
Oral LD50 1600 mg/kg (rata)  
Inhalatorio LC50/4 h 88 mg/l (rata)
- Efecto estimulante primario:**
- en la piel:** No produce irritaciones.
- en el ojo:** No produce irritaciones.
- Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizante.

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Diclorometano, "analytical grade", estabilizado con aprox. 50 ppm de amileno, ACS, Reag. Ph Eur

- ( viene de la página 5 )
- **Efectos CMR (carcinogenicidad, mutagenicidad y toxicidad para la reproducción)**  
Carc. 2

## 12 Información ecológica

- **Toxicidad**
- **Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Persistencia y degradabilidad** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Comportamiento en sistemas ecológicos:**
- **Potencial de bioacumulación** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Movilidad en el suelo** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicaciones medioambientales adicionales:**
- **Indicaciones generales:**  
Nivel de riesgo para el agua 2 (clasificación de listas): peligroso para el agua  
No dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados.  
Una cantidad mínima vertida en el subsuelo ya representa un peligro para el agua potable.
- **Resultados de la valoración PBT y mPmB**
- **PBT:** No aplicable.
- **mPmB:** No aplicable.
- **Otros efectos adversos** No existen más datos relevantes disponibles.

## 13 Consideraciones relativas a la eliminación

- **Métodos para el tratamiento de residuos**
- **Recomendación:** No debe desecharse con la basura doméstica. No debe llegar al alcantarillado.
- **Embalajes sin limpiar:**
- **Recomendación:** Eliminar conforme a las disposiciones oficiales.

## 14 Información relativa al transporte

- **Número UN**
- **ADR, IMDG, IATA**
- **Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**
- **ADR**
- **IMDG, IATA**
- **Clase(s) de peligro para el transporte**
- **ADR**



UN1593

1593 DICLOROMETANO

DICHLOROMETHANE

- **Clase**
- **Etiqueta**

6.1 Materias tóxicas  
6.1

- **IMDG, IATA**
- **Class**
- **Label**

6.1 Toxic substances.  
1226.1

( continúa en la página 7 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Diclorometano, "analytical grade", estabilizado con aprox. 50 ppm de amileno, ACS, Reag. Ph Eur

( viene de la página 6 )	
<b>· Grupo de embalaje</b>	III
<b>· ADR, IMDG, IATA</b>	
<b>· Peligros para el medio ambiente:</b>	No
<b>· Contaminante marino:</b>	Atención: Materias tóxicas
<b>· Precauciones particulares para los usuarios</b>	60
<b>· Número Kemler:</b>	F-A,S-A
<b>· Número EMS:</b>	Liquid halogenated hydrocarbons
<b>· Segregation groups</b>	
<b>· Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC</b>	No aplicable.
<b>· Transporte/datos adicionales:</b>	
<b>· ADR</b>	
<b>· Cantidades limitadas (LQ)</b>	5L
<b>· Categoría de transporte</b>	2
<b>· Código de restricción del túnel</b>	E
<b>· "Reglamentación Modelo" de la UNECE:</b>	UN1593, DICLOROMETANO, 6.1, III

## 15 Información reglamentaria

**· Evaluación de la seguridad química:**

Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

## 16 Otra información

Los datos se fundan en el estado actual de nuestros conocimientos, pero no constituyen garantía alguna de cualidades del producto y no generan ninguna relación jurídica contractual.

**· Departamento de creación de MSDS:** Departamento de seguridad de productos

**· Interlocutor:** msds@scharlab.com

**· Abreviaturas y acrónimos:**

RID: Règlement international concernant le transport des marchandises dangereuses par chemin de fer (Regulations Concerning the International Transport of Dangerous Goods by Rail)

ICAO: International Civil Aviation Organization

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods

IATA: International Air Transport Association

GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

LC50: Lethal concentration, 50 percent

LD50: Lethal dose, 50 percent

**1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**

- **Identificador del producto**
- **Nombre comercial:** Metanol, purísimo, Ph Eur, NF
- **Número del artículo:** ME0301
- **Número CAS:**  
67-56-1
- **Número CE:**  
200-659-6
- **Número de clasificación:**  
603-001-00-X
- **Número de registro** 01-2119433307-44-XXXX
- **Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Utilización del producto / de la elaboración:** Reactivo de laboratorio
- **Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**
- **Fabricante/distribuidor:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) SPAIN  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Representante regional:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) ESPAÑA  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Área de información:** Departamento técnico
- **Teléfono de emergencia:** Scharlab, S.L. (+34) 93 715 18 11

**2 Identificación de los peligros**

- **Clasificación de la sustancia o de la mezcla**
- **Clasificación con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**



GHS02 llama

Flam. Liq. 2 H225 Líquido y vapores muy inflamables.



GHS06 calavera y tibias cruzadas

Acute Tox. 3 H301 Tóxico en caso de ingestión.

Acute Tox. 3 H311 Tóxico en contacto con la piel.

Acute Tox. 3 H331 Tóxico en caso de inhalación.



GHS08 peligro para la salud

STOT SE 1 H370 Provoca daños en los órganos.

( continúa en la página 2 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, purísimo, Ph Eur, NF

( viene de la página 1 )

**Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE**

T; Tóxico

R23/24/25-39/23/24/25: Tóxico por inhalación, por ingestión y en contacto con la piel. Tóxico: peligro de efectos irreversibles muy graves por inhalación, contacto con la piel e ingestión.



F; Fácilmente inflamable

R11: Fácilmente inflamable.

**Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente:** Nulo**Elementos de la etiqueta****Etiquetado con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**

La sustancia se ha clasificado y etiquetado de conformidad con el reglamento CLP.

**Pictogramas de peligro**

GHS02



GHS06



GHS08

**Palabra de advertencia** Peligro**Indicaciones de peligro**

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H301+H311+H331 Tóxico en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.

H370 Provoca daños en los órganos.

**Consejos de prudencia**

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. - No fumar.

P301+P310 EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar inmediatamente a un CENTRO DE INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA o a un médico.

P303+P361+P353 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL (o el pelo): Quitarse inmediatamente las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua o ducharse.

P361 Quitarse inmediatamente las prendas contaminadas.

P405 Guardar bajo llave.

P501 Eliminar el contenido o el recipiente conforme a la reglamentación local/regional/nacional/internacional.

**Otros peligros****Resultados de la valoración PBT y mPmB**

• **PBT:** No aplicable.

• **mPmB:** No aplicable.

**3 Composición/información sobre los componentes****Caracterización química: Sustancias****Denominación Nº CAS**

67-56-1 metanol

**Número(s) de identificación**

• **Número CE:** 200-659-6

• **Número de clasificación:** 603-001-00-X

( continúa en la página 3 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, purísimo, Ph Eur, NF

( viene de la página 2 )

## 4 Primeros auxilios

**· Descripción de los primeros auxilios****· Instrucciones generales:**

Quitarse de inmediato toda prenda contaminada con el producto.

Antes de quitarse la protección respiratoria, quítese la ropa contaminada.

En caso de respiración irregular o apnea (paro respiratorio), hágase la respiración artificial.

**· En caso de inhalación del producto:**

Suministrar aire fresco u oxígeno; solicitar ayuda médica.

Las personas desmayadas deben tenderse y transportarse de lado con la suficiente estabilidad.

**· En caso de contacto con la piel:** Lavar inmediatamente con agua y jabón y enjuagar bien.**· En caso de contacto con los ojos:**

Limpiar los ojos abiertos durante varios minutos con agua corriente y consultar un médico.

**· En caso de ingestión:** No provocar el vómito y solicitar asistencia médica inmediata.**· Indicaciones para el médico:****· Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

No existen más datos relevantes disponibles.

**· Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

No existen más datos relevantes disponibles.

## 5 Medidas de lucha contra incendios

**· Medios de extinción****· Sustancias extintoras apropiadas:**

CO<sub>2</sub>, polvo extintor o chorro de agua rociada. Combatir incendios mayores con chorro de agua rociada o espuma resistente al alcohol.

**· Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**

No existen más datos relevantes disponibles.

**· Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios****· Equipo especial de protección:** Colocarse la protección respiratoria.

## 6 Medidas en caso de vertido accidental

**· Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Llevar puesto equipo de protección. Mantener alejadas las personas sin protección.

**· Precauciones relativas al medio ambiente:**

Diluir con mucha agua.

Evitar que penetre en la canalización /aguas de superficie /agua subterráneas.

**· Métodos y material de contención y de limpieza:**

Quitar con material absorbente (arena, kieselgur, aglutinante de ácidos, aglutinante universal, aserrín).

Desechar el material contaminado como vertido según item 13.

Asegurar suficiente ventilación.

**· Referencia a otras secciones**

Ver capítulo 7 para mayor información sobre una manipulación segura.

Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.

Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

( continúa en la página 4 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, purísimo, Ph Eur, NF

( viene de la página 3 )

## 7 Manipulación y almacenamiento

- **Manipulación:**
- **Precauciones para una manipulación segura**  
Asegurar suficiente ventilación /aspiración en el puesto de trabajo.  
Abrir y manejar el recipiente con cuidado.
- **Prevención de incendios y explosiones:**  
Mantener alejadas las fuentes de encendido. No fumar.  
Tomar medidas contra las cargas electrostáticas.  
Tener preparados los aparatos respiratorios.
- **Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**
- **Almacenamiento:**
- **Exigencias con respecto al almacén y los recipientes:** Almacenar en un lugar fresco.
- **Normas en caso de un almacenamiento conjunto:** No es necesario.
- **Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:**  
Mantener el recipiente cerrado herméticamente.  
Almacenarlo en envases bien cerrados en un lugar fresco y seco.
- **Usos específicos finales** No existen más datos relevantes disponibles.

## 8 Controles de exposición/protección individual

- **Instrucciones adicionales para el acondicionamiento de instalaciones técnicas:**  
Sin datos adicionales, ver punto 7.
- **Parámetros de control**
- **Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:**  
**67-56-1 metanol**  
LEP () Valor de larga duración: 266 mg/m<sup>3</sup>, 200 ppm  
vía dérmica, VLB, VLI
- **Componentes con valores límite biológicos:**  
**67-56-1 metanol**  
VLB () 15 mg/l  
Muestra: orina  
Momento de Muestreo: Final de la jornada laboral  
Indicador Biológico: Metanol
- **Indicaciones adicionales:**  
Como base se han utilizado las listas vigentes en el momento de la elaboración.
- **Controles de la exposición**
- **Equipo de protección individual:**
- **Medidas generales de protección e higiene:**  
Mantener alejado de alimentos, bebidas y alimentos para animales.  
Quitarse de inmediato la ropa ensuciada o impregnada.  
Lavarse las manos antes de las pausas y al final del trabajo.  
Guardar la ropa protectora por separado.  
Evitar el contacto con los ojos y la piel.
- **Protección respiratoria:**  
Si la exposición va a ser breve o de poca intensidad, colocarse una máscara respiratoria. Para una exposición más intensa o de mayor duración, usar un aparato de respiración autónomo.
- **Protección de manos:**



Guantes de protección

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, purísimo, Ph Eur, NF

( viene de la página 4 )

El material del guante deberá ser impermeable y resistente al producto / substancia / preparado. Ante la ausencia de tests específicos, no se puede recomendar ningún material específico para guantes de protección contra el producto / preparado / mezcla de substancias químicas.

Selección del material de los guantes en función de los tiempos de rotura, grado de permeabilidad y degradación.

**• Material de los guantes**

La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro.

**• Tiempo de penetración del material de los guantes**

El tiempo de resistencia a la penetración exacto deberá ser pedido al fabricante de los guantes.

Este tiempo debe ser respetado.

**• Protección de ojos:**

Gafas de protección herméticas

**9 Propiedades físicas y químicas****• Información sobre propiedades físicas y químicas básicas****• Datos generales****• Aspecto:****Forma:**

Líquido

**Color:**

Incoloro

**Olor:**

Similar al del alcohol

**Umbral olfativo:**

No determinado.

**• valor pH:**

No determinado.

**• Cambio de estado****Punto de fusión /campo de fusión:** -98 °C**Punto de ebullición /campo de ebullición:** 64,7 °C**• Punto de inflamación:**

11 °C

**• Inflamabilidad (sólido, gaseiforme):**

No aplicable.

**• Temperatura de ignición:**

455 °C

**• Temperatura de descomposición:**

No determinado.

**• Autoinflamabilidad:**

No determinado.

**• Peligro de explosión:**

El producto no es explosivo; sin embargo, pueden formarse mezclas explosivas de vapor / aire.

**• Límites de explosión:****Inferior:** 5,5 Vol %**Superior:** 44 Vol %**• Presión de vapor a 20 °C:**

128 hPa

**• Densidad a 20 °C:**0,79 g/cm<sup>3</sup>**• Densidad relativa**

No determinado.

**• Densidad de vapor**

No determinado.

**• Velocidad de evaporación**

No determinado.

**• Solubilidad en / miscibilidad con agua:**

Completamente mezclable.

( continúa en la página 6 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, purísimo, Ph Eur, NF

( viene de la página 5 )

- **Coeficiente de reparto (*n*-octanol/agua):** No determinado.
- **Viscosidad:**
  - Dinámica:** No determinado.
  - Cinemática:** No determinado.
- **Información adicional** No existen más datos relevantes disponibles.

## 10 Estabilidad y reactividad

- **Reactividad**
- **Estabilidad química**
- **Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:** No se descompone al emplearse adecuadamente.
- **Posibilidad de reacciones peligrosas** No se conocen reacciones peligrosas.
- **Condiciones que deben evitarse** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Materiales incompatibles:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Productos de descomposición peligrosos:** No se conocen productos de descomposición peligrosos.

## 11 Información toxicológica

- **Información sobre los efectos toxicológicos**
- **Toxicidad aguda:**
- **Valores LD/LC50 (dosis letal /dosis letal = 50%) relevantes para la clasificación:**
  - Oral LD50 5628 mg/kg (rata)
  - Dermal LD50 15800 mg/kg (conejo)
- **Efecto estimulante primario:**
  - **en la piel:** No produce irritaciones.
  - **en el ojo:** No produce irritaciones.
- **Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizante.

## 12 Información ecológica

- **Toxicidad**
- **Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Persistencia y degradabilidad** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Comportamiento en sistemas ecológicos:**
- **Potencial de bioacumulación** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Movilidad en el suelo** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicaciones medioambientales adicionales:**
  - **Indicaciones generales:** Nivel de riesgo para el agua 1 (clasificación de listas): escasamente peligroso para el agua  
En estado no diluido o no neutralizado, no dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados.
  - **Resultados de la valoración PBT y mPmB**
  - **PBT:** No aplicable.
  - **mPmB:** No aplicable.
  - **Otros efectos adversos** No existen más datos relevantes disponibles.

( continúa en la página 7 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, purísimo, Ph Eur, NF

( viene de la página 6 )

**13 Consideraciones relativas a la eliminación**

- **Métodos para el tratamiento de residuos**
- **Recomendación:** No debe desecharse con la basura doméstica. No debe llegar al alcantarillado.
- **Embalajes sin limpiar:**
- **Recomendación:** Eliminar conforme a las disposiciones oficiales.
- **Producto de limpieza recomendado:** Agua, eventualmente añadiendo productos de limpieza.

**14 Información relativa al transporte**

- **Número UN**

UN1230

- **ADR, IMDG, IATA**

1230 METANOL

- **Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**

METHANOL

- **ADR**



- **Clase**

3 Líquidos inflamables

- **Etiqueta**

3+6.1

- **IMDG, IATA**



- **Class**

3 Flammable liquids.

- **Label**

3+6.1

- **Grupo de embalaje**

II

- **ADR, IMDG, IATA**

- **Peligros para el medio ambiente:**

No

- **Contaminante marino:**

Atención: Líquidos inflamables

- **Precauciones particulares para los usuarios**

336

- **Número Kemler:**

F-E,S-D

- **Número EMS:**

- **Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC** No aplicable.

- **Transporte/datos adicionales:**

- **ADR**

1L

- **Cantidades limitadas (LQ)**

2

- **Categoría de transporte**

D/E

- **Código de restricción del túnel**

UN1230, METANOL, 3 (6.1), II

- **"Reglamentación Modelo" de la UNECE:**

( continúa en la página 8 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, purísimo, Ph Eur, NF

( viene de la página 7 )

**15 Información reglamentaria****Evaluación de la seguridad química:**

Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

**16 Otra información**

Los datos se fundan en el estado actual de nuestros conocimientos, pero no constituyen garantía alguna de cualidades del producto y no generan ninguna relación jurídica contractual.

**Departamento de creación de MSDS:** Departamento de seguridad de productos**Interlocutor:** msds@scharlab.com**Abreviaturas y acrónimos:**

RID: Règlement international concernant le transport des marchandises dangereuses par chemin de fer (Regulations Concerning the International Transport of Dangerous Goods by Rail)

ICAO: International Civil Aviation Organization

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods

IATA: International Air Transport Association

GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

LC50: Lethal concentration, 50 percent

LD50: Lethal dose, 50 percent

**1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**

- **Identificador del producto**
- **Nombre comercial:** Metanol, para HPLC de fluorescencia
- **Número del artículo:** ME0317
- **Número CAS:**  
67-56-1
- **Número CE:**  
200-659-6
- **Número de clasificación:**  
603-001-00-X
- **Número de registro** 01-2119433307-44-XXXX
- **Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Utilización del producto / de la elaboración:** Reactivo de laboratorio
- **Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**
- **Fabricante/distribuidor:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) SPAIN  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Representante regional:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) ESPAÑA  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Área de información:** Departamento técnico
- **Teléfono de emergencia:** Scharlab, S.L. (+34) 93 715 18 11

**2 Identificación de los peligros**

- **Clasificación de la sustancia o de la mezcla**
- **Clasificación con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**



GHS02 llama

Flam. Liq. 2 H225 Líquido y vapores muy inflamables.



GHS06 calavera y tibias cruzadas

Acute Tox. 3 H301 Tóxico en caso de ingestión.

Acute Tox. 3 H311 Tóxico en contacto con la piel.

Acute Tox. 3 H331 Tóxico en caso de inhalación.



GHS08 peligro para la salud

STOT SE 1 H370 Provoca daños en los órganos.

( continúa en la página 2 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, para HPLC de fluorescencia

( viene de la página 1 )

**Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE**

T; Tóxico

R23/24/25-39/23/24/25: Tóxico por inhalación, por ingestión y en contacto con la piel. Tóxico: peligro de efectos irreversibles muy graves por inhalación, contacto con la piel e ingestión.



F; Fácilmente inflamable

R11: Fácilmente inflamable.

**Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente:** Nulo**Elementos de la etiqueta****Etiquetado con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**

La sustancia se ha clasificado y etiquetado de conformidad con el reglamento CLP.

**Pictogramas de peligro**

GHS02



GHS06



GHS08

**Palabra de advertencia** Peligro**Indicaciones de peligro**

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H301+H311+H331 Tóxico en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.

H370 Provoca daños en los órganos.

**Consejos de prudencia**

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. - No fumar.

P301+P310 EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar inmediatamente a un CENTRO DE INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA o a un médico.

P303+P361+P353 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL (o el pelo): Quitarse inmediatamente las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua o ducharse.

P361 Quitarce inmediatamente las prendas contaminadas.

P405 Guardar bajo llave.

P501 Eliminar el contenido o el recipiente conforme a la reglamentación local/regional/nacional/internacional.

**Otros peligros****Resultados de la valoración PBT y mPmB**

• **PBT:** No aplicable.

• **mPmB:** No aplicable.

**3 Composición/información sobre los componentes****Caracterización química: Sustancias****Denominación Nº CAS**

67-56-1 metanol

**Número(s) de identificación**

• **Número CE:** 200-659-6

• **Número de clasificación:** 603-001-00-X

( continúa en la página 3 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, para HPLC de fluorescencia

( viene de la página 2 )

## 4 Primeros auxilios

**· Descripción de los primeros auxilios****· Instrucciones generales:**

Quitarse de inmediato toda prenda contaminada con el producto.

Antes de quitarse la protección respiratoria, quítese la ropa contaminada.

En caso de respiración irregular o apnea (paro respiratorio), hágase la respiración artificial.

**· En caso de inhalación del producto:**

Suministrar aire fresco u oxígeno; solicitar ayuda médica.

Las personas desmayadas deben tenderse y transportarse de lado con la suficiente estabilidad.

**· En caso de contacto con la piel:** Lavar inmediatamente con agua y jabón y enjuagar bien.**· En caso de contacto con los ojos:**

Limpiar los ojos abiertos durante varios minutos con agua corriente y consultar un médico.

**· En caso de ingestión:** No provocar el vómito y solicitar asistencia médica inmediata.**· Indicaciones para el médico:****· Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

No existen más datos relevantes disponibles.

**· Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

No existen más datos relevantes disponibles.

## 5 Medidas de lucha contra incendios

**· Medios de extinción****· Sustancias extintoras apropiadas:**

CO<sub>2</sub>, polvo extintor o chorro de agua rociada. Combatir incendios mayores con chorro de agua rociada o espuma resistente al alcohol.

**· Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**

No existen más datos relevantes disponibles.

**· Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios****· Equipo especial de protección:** Colocarse la protección respiratoria.

## 6 Medidas en caso de vertido accidental

**· Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Llevar puesto equipo de protección. Mantener alejadas las personas sin protección.

**· Precauciones relativas al medio ambiente:**

Diluir con mucha agua.

Evitar que penetre en la canalización /aguas de superficie /agua subterráneas.

**· Métodos y material de contención y de limpieza:**

Quitar con material absorbente (arena, kieselgur, aglutinante de ácidos, aglutinante universal, aserrín).

Desechar el material contaminado como vertido según item 13.

Asegurar suficiente ventilación.

**· Referencia a otras secciones**

Ver capítulo 7 para mayor información sobre una manipulación segura.

Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.

Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

( continúa en la página 4 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, para HPLC de fluorescencia

( viene de la página 3 )

## 7 Manipulación y almacenamiento

- **Manipulación:**
- **Precauciones para una manipulación segura**  
Asegurar suficiente ventilación /aspiración en el puesto de trabajo.  
Abrir y manejar el recipiente con cuidado.
- **Prevención de incendios y explosiones:**  
Mantener alejadas las fuentes de encendido. No fumar.  
Tomar medidas contra las cargas electrostáticas.  
Tener preparados los aparatos respiratorios.
- **Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**
- **Almacenamiento:**
- **Exigencias con respecto al almacén y los recipientes:** Almacenar en un lugar fresco.
- **Normas en caso de un almacenamiento conjunto:** No es necesario.
- **Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:**  
Mantener el recipiente cerrado herméticamente.  
Almacenarlo en envases bien cerrados en un lugar fresco y seco.
- **Usos específicos finales** No existen más datos relevantes disponibles.

## 8 Controles de exposición/protección individual

- **Instrucciones adicionales para el acondicionamiento de instalaciones técnicas:**  
Sin datos adicionales, ver punto 7.
- **Parámetros de control**
- **Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:**  
**67-56-1 metanol**  
LEP () Valor de larga duración: 266 mg/m<sup>3</sup>, 200 ppm  
vía dérmica, VLB, VLI
- **Componentes con valores límite biológicos:**  
**67-56-1 metanol**  
VLB () 15 mg/l  
Muestra: orina  
Momento de Muestreo: Final de la jornada laboral  
Indicador Biológico: Metanol
- **Indicaciones adicionales:**  
Como base se han utilizado las listas vigentes en el momento de la elaboración.
- **Controles de la exposición**
- **Equipo de protección individual:**
- **Medidas generales de protección e higiene:**  
Mantener alejado de alimentos, bebidas y alimentos para animales.  
Quitarse de inmediato la ropa ensuciada o impregnada.  
Lavarse las manos antes de las pausas y al final del trabajo.  
Guardar la ropa protectora por separado.  
Evitar el contacto con los ojos y la piel.
- **Protección respiratoria:**  
Si la exposición va a ser breve o de poca intensidad, colocarse una máscara respiratoria. Para una exposición más intensa o de mayor duración, usar un aparato de respiración autónomo.
- **Protección de manos:**



Guantes de protección

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, para HPLC de fluorescencia

( viene de la página 4 )

El material del guante deberá ser impermeable y resistente al producto / substancia / preparado. Ante la ausencia de tests específicos, no se puede recomendar ningún material específico para guantes de protección contra el producto / preparado / mezcla de substancias químicas. Selección del material de los guantes en función de los tiempos de rotura, grado de permeabilidad y degradación.

**• Material de los guantes**

La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro.

**• Tiempo de penetración del material de los guantes**

El tiempo de resistencia a la penetración exacto deberá ser pedido al fabricante de los guantes. Este tiempo debe ser respetado.

**• Protección de ojos:**

Gafas de protección herméticas

**9 Propiedades físicas y químicas****• Información sobre propiedades físicas y químicas básicas****• Datos generales****• Aspecto:****Forma:**

Líquido

**Color:**

Incoloro

**• Olor:**

Similar al del alcohol

**• Umbral olfativo:**

No determinado.

**• valor pH:**

No determinado.

**• Cambio de estado****Punto de fusión /campo de fusión:** -98 °C**Punto de ebullición /campo de ebullición:** 64,7 °C**• Punto de inflamación:**

11 °C

**• Inflamabilidad (sólido, gaseiforme):**

No aplicable.

**• Temperatura de ignición:**

455 °C

**• Temperatura de descomposición:**

No determinado.

**• Autoinflamabilidad:**

No determinado.

**• Peligro de explosión:**

El producto no es explosivo; sin embargo, pueden formarse mezclas explosivas de vapor / aire.

**• Límites de explosión:****Inferior:** 5,5 Vol %**Superior:** 44 Vol %**• Presión de vapor a 20 °C:**

128 hPa

**• Densidad a 20 °C:**0,79 g/cm<sup>3</sup>**• Densidad relativa**

No determinado.

**• Densidad de vapor**

No determinado.

**• Velocidad de evaporación**

No determinado.

**• Solubilidad en / miscibilidad con agua:**

Completamente mezclable.

( continúa en la página 6 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, para HPLC de fluorescencia

( viene de la página 5 )

- **Coeficiente de reparto (*n*-octanol/agua):** No determinado.
- **Viscosidad:**
  - Dinámica:** No determinado.
  - Cinemática:** No determinado.
- **Información adicional** No existen más datos relevantes disponibles.

## 10 Estabilidad y reactividad

- **Reactividad**
- **Estabilidad química**
- **Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:** No se descompone al emplearse adecuadamente.
- **Posibilidad de reacciones peligrosas** No se conocen reacciones peligrosas.
- **Condiciones que deben evitarse** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Materiales incompatibles:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Productos de descomposición peligrosos:** No se conocen productos de descomposición peligrosos.

## 11 Información toxicológica

- **Información sobre los efectos toxicológicos**
- **Toxicidad aguda:**
- **Valores LD/LC50 (dosis letal /dosis letal = 50%) relevantes para la clasificación:**
  - Oral LD50 5628 mg/kg (rata)
  - Dermal LD50 15800 mg/kg (conejo)
- **Efecto estimulante primario:**
  - **en la piel:** No produce irritaciones.
  - **en el ojo:** No produce irritaciones.
- **Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizante.

## 12 Información ecológica

- **Toxicidad**
- **Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Persistencia y degradabilidad** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Comportamiento en sistemas ecológicos:**
- **Potencial de bioacumulación** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Movilidad en el suelo** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicaciones medioambientales adicionales:**
  - **Indicaciones generales:** Nivel de riesgo para el agua 1 (clasificación de listas): escasamente peligroso para el agua  
En estado no diluido o no neutralizado, no dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados.
  - **Resultados de la valoración PBT y mPmB**
  - **PBT:** No aplicable.
  - **mPmB:** No aplicable.
  - **Otros efectos adversos** No existen más datos relevantes disponibles.

( continúa en la página 7 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, para HPLC de fluorescencia

( viene de la página 6 )

**13 Consideraciones relativas a la eliminación**

- **Métodos para el tratamiento de residuos**
- **Recomendación:** No debe desecharse con la basura doméstica. No debe llegar al alcantarillado.
- **Embalajes sin limpiar:**
- **Recomendación:** Eliminar conforme a las disposiciones oficiales.
- **Producto de limpieza recomendado:** Agua, eventualmente añadiendo productos de limpieza.

**14 Información relativa al transporte**

- **Número UN**

UN1230

- **ADR, IMDG, IATA**

1230 METANOL

- **Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**

METHANOL

- **ADR**



- **Clase**

3 Líquidos inflamables

- **Etiqueta**

3+6.1

- **IMDG, IATA**



- **Class**

3 Flammable liquids.

- **Label**

3+6.1

- **Grupo de embalaje**

II

- **ADR, IMDG, IATA**

- **Peligros para el medio ambiente:**

No

- **Contaminante marino:**

Atención: Líquidos inflamables

- **Precauciones particulares para los usuarios**

- **Número Kemler:**

336

- **Número EMS:**

F-E,S-D

- **Transporte a granel con arreglo al anexo II**

del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC

No aplicable.

- **Transporte/datos adicionales:**

- **ADR**

1L

- **Cantidades limitadas (LQ)**

2

- **Categoría de transporte**

D/E

- **Código de restricción del túnel**

UN1230, METANOL, 3 (6.1), II

- **"Reglamentación Modelo" de la UNECE:**

( continúa en la página 8 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Metanol, para HPLC de fluorescencia

( viene de la página 7 )

**15 Información reglamentaria****Evaluación de la seguridad química:**

Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

**16 Otra información**

Los datos se fundan en el estado actual de nuestros conocimientos, pero no constituyen garantía alguna de cualidades del producto y no generan ninguna relación jurídica contractual.

**Departamento de creación de MSDS:** Departamento de seguridad de productos**Interlocutor:** msds@scharlab.com**Abreviaturas y acrónimos:**

RID: Règlement international concernant le transport des marchandises dangereuses par chemin de fer (Regulations Concerning the International Transport of Dangerous Goods by Rail)

ICAO: International Civil Aviation Organization

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods

IATA: International Air Transport Association

GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

LC50: Lethal concentration, 50 percent

LD50: Lethal dose, 50 percent

### 1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

- **Identificador del producto**
- **Nombre comercial:** Etanol absoluto, para HPLC en gradiente
- **Número del artículo:** ET0010
- **Número CAS:**  
64-17-5
- **Número CE:**  
200-578-6
- **Número de clasificación:**  
603-002-00-5
- **Número de registro** 01-2119457610-43-XXXX
- **Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Utilización del producto / de la elaboración:** Reactivo de laboratorio
- **Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**
- **Fabricante/distribuidor:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) SPAIN  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Representante regional:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) ESPAÑA  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Área de información:** Departamento técnico
- **Teléfono de emergencia:** Scharlab, S.L. (+34) 93 715 18 11

### 2 Identificación de los peligros

- **Clasificación de la sustancia o de la mezcla**
- **Clasificación con arreglo al Reglamento (CE) nº 1272/2008**



GHS02 llama

Flam. Liq. 2 H225 Líquido y vapores muy inflamables.

- **Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE**



F; Fácilmente inflamable

R11: Fácilmente inflamable.

- **Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente:** Nulo

- **Elementos de la etiqueta**

- **Etiquetado con arreglo al Reglamento (CE) nº 1272/2008**

La sustancia se ha clasificado y etiquetado de conformidad con el reglamento CLP.

( continúa en la página 2 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Etanol absoluto, para HPLC en gradiente

**· Pictogramas de peligro**



GHS02

( viene de la página 1 )

**· Palabra de advertencia** Peligro

**· Indicaciones de peligro**

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

**· Consejos de prudencia**

- P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. - No fumar.  
P241 Utilizar un material eléctrico, de ventilación o de iluminación/antideflagrante.  
P280 Llevar guantes/prendas/gafas/máscara de protección.  
P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.  
P303+P361+P353 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL (o el pelo): Quitarse inmediatamente las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua o ducharse.  
P501 Eliminar el contenido o el recipiente conforme a la reglamentación local/regional/nacional/internacional.

**· Otros peligros**

**· Resultados de la valoración PBT y mPmB**

**PBT:** No aplicable.

**mPmB:** No aplicable.

### 3 Composición/información sobre los componentes

**· Caracterización química: Sustancias**

**· Denominación Nº CAS**

64-17-5 etanol

**· Número(s) de identificación**

**· Número CE:** 200-578-6

**· Número de clasificación:** 603-002-00-5

### 4 Primeros auxilios

**· Descripción de los primeros auxilios**

**· En caso de inhalación del producto:**

Suministrar aire fresco. En caso de trastornos, consultar al médico.

**· En caso de contacto con la piel:** Por regla general, el producto no irrita la piel.

**· En caso de contacto con los ojos:**

Limpiar los ojos abiertos durante varios minutos con agua corriente.

**· En caso de ingestión:** Consultar un médico si los trastornos persisten.

**· Indicaciones para el médico:**

**· Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

No existen más datos relevantes disponibles.

**· Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

No existen más datos relevantes disponibles.

( continúa en la página 3 )

**Ficha de datos de seguridad  
según 1907/2006/CE, Artículo 31 (REACH)**

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Etanol absoluto, para HPLC en gradiente

( viene de la página 2 )

**5 Medidas de lucha contra incendios**

- **Medios de extinción**
- **Sustancias extintoras apropiadas:**  
CO<sub>2</sub>, polvo extintor o chorro de agua rociada. Combatir incendios mayores con chorro de agua rociada o espuma resistente al alcohol.
- **Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**
- **Equipo especial de protección:** No se requieren medidas especiales.

**6 Medidas en caso de vertido accidental**

- **Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**  
Llevar puesto equipo de protección. Mantener alejadas las personas sin protección.
- **Precauciones relativas al medio ambiente:**  
Diluir con mucha agua.  
Evitar que penetre en la canalización /aguas de superficie /agua subterráneas.
- **Métodos y material de contención y de limpieza:**  
Quitar con material absorbente (arena, kieselgur, aglutinante de ácidos, aglutinante universal, aserrín).  
Asegurar suficiente ventilación.
- **Referencia a otras secciones**  
Ver capítulo 7 para mayor información sobre una manipulación segura.  
Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.  
Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

**7 Manipulación y almacenamiento**

- **Manipulación:**
- **Precauciones para una manipulación segura**  
Si se manipulan correctamente, no se requieren medidas especiales.
- **Prevención de incendios y explosiones:**  
Mantener alejadas las fuentes de encendido. No fumar.  
Tomar medidas contra las cargas electrostáticas.
- **Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**
- **Almacenamiento:**
- **Exigencias con respecto al almacén y los recipientes:** Almacenar en un lugar fresco.
- **Normas en caso de un almacenamiento conjunto:** No es necesario.
- **Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:**  
Mantener el recipiente cerrado herméticamente.  
Almacenarlo en envases bien cerrados en un lugar fresco y seco.
- **Usos específicos finales** No existen más datos relevantes disponibles.

**8 Controles de exposición/protección individual**

- **Instrucciones adicionales para el acondicionamiento de instalaciones técnicas:**  
Sin datos adicionales, ver punto 7.

( continúa en la página 4 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Etanol absoluto, para HPLC en gradiente

( viene de la página 3 )

- **Parámetros de control**
- **Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:**

**64-17-5 etanol**

LEP () Valor de corta duración: 1910 mg/m<sup>3</sup>, 1000 ppm  
s

- **Indicaciones adicionales:**

Como base se han utilizado las listas vigentes en el momento de la elaboración.

- **Controles de la exposición**

- **Equipo de protección individual:**

- **Medidas generales de protección e higiene:**

Lavarse las manos antes de las pausas y al final del trabajo.

- **Protección respiratoria:** No es necesario.

- **Protección de manos:**

El material del guante deberá ser impermeable y resistente al producto / substancia / preparado.

Ante la ausencia de tests específicos, no se puede recomendar ningún material específico para guantes de protección contra el producto / preparado / mezcla de substancias químicas.

Selección del material de los guantes en función de los tiempos de rotura, grado de permeabilidad y degradación.

- **Material de los guantes**

La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro.

- **Tiempo de penetración del material de los guantes**

El tiempo de resistencia a la penetración exacto deberá ser pedido al fabricante de los guantes.

Este tiempo debe ser respetado.

- **Protección de ojos:**



Gafas de protección herméticas

**9 Propiedades físicas y químicas**

- **Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**

- **Datos generales**

- **Aspecto:**

**Forma:**

Líquido

**Color:**

Incoloro

- **Olor:**

Similar al del alcohol

- **Umbral olfativo:**

No determinado.

- **valor pH:**

No determinado.

- **Cambio de estado**

**Punto de fusión /campo de fusión:** -114,5 °C

**Punto de ebullición /campo de ebullición:** 78 °C

- **Punto de inflamación:**

12 °C

- **Inflamabilidad (sólido, gaseiforme):**

No aplicable.

- **Temperatura de ignición:**

425 °C

- **Temperatura de descomposición:**

No determinado.

- **Autoinflamabilidad:**

No determinado.

( continúa en la página 5 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Etanol absoluto, para HPLC en gradiente

( viene de la página 4 )

<b>Peligro de explosión:</b>	El producto no es explosivo; sin embargo, pueden formarse mezclas explosivas de vapor / aire.
<b>Límites de explosión:</b>	
<b>Inferior:</b>	3,5 Vol %
<b>Superior:</b>	15 Vol %
<b>Presión de vapor a 20 °C:</b>	59 hPa
<b>Densidad a 20 °C:</b>	0,79 g/cm <sup>3</sup>
<b>Densidad relativa</b>	No determinado.
<b>Densidad de vapor</b>	No determinado.
<b>Velocidad de evaporación</b>	No determinado.
<b>Solubilidad en / miscibilidad con agua a 20 °C:</b>	1 g/l
<b>Coeficiente de reparto (n-octanol/agua):</b>	No determinado.
<b>Viscosidad:</b>	
<b>Dinámica a 20 °C:</b>	1,2 mPas
<b>Cinemática:</b>	No determinado.
<b>Información adicional</b>	No existen más datos relevantes disponibles.

## 10 Estabilidad y reactividad

- Reactividad**
- Estabilidad química**
- Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:**  
No se descompone al emplearse adecuadamente.
- Posibilidad de reacciones peligrosas** No se conocen reacciones peligrosas.
- Condiciones que deben evitarse** No existen más datos relevantes disponibles.
- Materiales incompatibles:** No existen más datos relevantes disponibles.
- Productos de descomposición peligrosos:**  
No se conocen productos de descomposición peligrosos.

## 11 Información toxicológica

- Información sobre los efectos toxicológicos**
- Toxicidad aguda:**
- Valores LD/LC50 (dosis letal /dosis letal = 50%) relevantes para la clasificación:**  
Oral LD50 7060 mg/kg (rata)  
Inhalatorio LC50/4 h 20000 mg/l (rata)
- Efecto estimulante primario:**
  - en la piel:** No produce irritaciones.
  - en el ojo:** No produce irritaciones.
- Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizante.

## 12 Información ecológica

- Toxicidad**
- Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.
- Persistencia y degradabilidad** No existen más datos relevantes disponibles.
- Comportamiento en sistemas ecológicos:**
- Potencial de bioacumulación** No existen más datos relevantes disponibles.

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Etanol absoluto, para HPLC en gradiente

- **Movilidad en el suelo** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicaciones medioambientales adicionales:**
- **Indicaciones generales:**  
Nivel de riesgo para el agua 1 (clasificación de listas): escasamente peligroso para el agua  
En estado no diluido o no neutralizado, no dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados.
- **Resultados de la valoración PBT y mPmB**
- **PBT:** No aplicable.
- **mPmB:** No aplicable.
- **Otros efectos adversos** No existen más datos relevantes disponibles.

( viene de la página 5 )

## 13 Consideraciones relativas a la eliminación

- **Métodos para el tratamiento de residuos**
- **Recomendación:** No debe desecharse con la basura doméstica. No debe llegar al alcantarillado.
- **Embalajes sin limpiar:**
- **Recomendación:** Eliminar conforme a las disposiciones oficiales.
- **Producto de limpieza recomendado:** Agua, eventualmente añadiendo productos de limpieza.

## 14 Información relativa al transporte

- **Número UN** UN1170
- **ADR, IMDG, IATA**
- **Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas** 1170 ETANOL (ALCOHOL ETÍLICO)
- **ADR** ETHANOL (ETHYL ALCOHOL)
- **IMDG** ETHANOL
- **IATA**
- **Clase(s) de peligro para el transporte**

**ADR**

- **Clase** 3 Líquidos inflamables
- **Etiqueta** 3

**IMDG, IATA**

- **Class** 3 Flammable liquids.
- **Label** 3
- **Grupo de embalaje** II
- **ADR, IMDG, IATA**
- **Peligros para el medio ambiente:**
- **Contaminante marino:** No
- **Precauciones particulares para los usuarios** Atención: Líquidos inflamables
- **Número Kemler:** 33
- **Número EMS:** F-E,S-D
- **Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC** No aplicable.

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Etanol absoluto, para HPLC en gradiente

( viene de la página 6 )

**• Transporte/datos adicionales:****ADR****Cantidades limitadas (LQ)****Categoría de transporte****Código de restricción del túnel****"Reglamentación Modelo" de la UNECE:**

1L

2

D/E

UN1170, ETANOL (ALCOHOL ETÍLICO), 3, II

**15 Información reglamentaria****• Evaluación de la seguridad química:**

Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

**16 Otra información**

Los datos se fundan en el estado actual de nuestros conocimientos, pero no constituyen garantía alguna de cualidades del producto y no generan ninguna relación jurídica contractual.

**• Departamento de creación de MSDS:** Departamento de seguridad de productos**• Interlocutor:** msds@scharlab.com**• Abreviaturas y acrónimos:**

RID: Règlement international concernant le transport des marchandises dangereuses par chemin de fer (Regulations Concerning the International Transport of Dangerous Goods by Rail)

ICAO: International Civil Aviation Organization

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods

IATA: International Air Transport Association

GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

LC50: Lethal concentration, 50 percent

LD50: Lethal dose, 50 percent

**1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa****· Identificador del producto**

· **Nombre comercial:** Acetonitrilo, para HPLC en gradiente, BASIC

· **Número del artículo:** AC0378

· **Número CAS:**

75-05-8

· **Número CE:**

200-835-2

· **Número de clasificación:**

608-001-00-3

· **Número de registro** 01-2119471307-38-XXXX

· **Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**

**· Sector de utilización**

SU3 Usos industriales: Usos de sustancias como tales o en preparados en emplazamientos industriales

SU8 Fabricación de productos químicos a granel a gran escala (incluidos los productos del petróleo)

SU9 Fabricación de productos químicos finos

**· Categoría de productos**

PC19 Sustancias intermedias

PC20 Productos como reguladores del ph, agentes floculantes, precipitantes y neutralizantes

PC35 Productos de lavado y limpieza (incluidos los productos que contienen disolventes)

PC40 Disolventes de extracción

**· Categoría de procesos**

PROC1 Uso en procesos cerrados, exposición improbable

PROC2 Utilización en procesos cerrados y continuos con exposición ocasional controlada

PROC3 Uso en procesos por lotes cerrados (síntesis o formulación)

PROC4 Utilización en procesos por lotes y de otro tipo (síntesis) en los que se puede producir la exposición

PROC5 Mezclado en procesos por lotes para la formulación de preparados y artículos (fases múltiples y/o contacto significativo)

PROC8a Transferencia de sustancias o preparados (carga/descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones no especializadas

PROC8b Transferencia de sustancias o preparados (carga/descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones especializadas

PROC9 Transferencia de sustancias o preparados en pequeños contenedores (líneas de llenado especializadas, incluido el pesaje)

PROC15 Uso como reactivo de laboratorio

**· Categoría de liberación en el medioambiente**

ERC1 Fabricación de sustancias

ERC2 Formulación de preparados

ERC4 Uso industrial de aditivos en procesos y productos, que no forman parte de artículos

ERC6a Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)

ERC6b Uso industrial de aditivos del procesado reactivos

ERC7 Uso industrial de sustancias en sistemas cerrados

**· Utilización del producto / de la elaboración:** Reactivo de laboratorio**· Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad****· Fabricante/distribuidor:**

Scharlab, S.L.

C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa

08181 Sentmenat (Barcelona) SPAIN

Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65

email: scharlab@scharlab.com

Internet Web Site: www.scharlab.com

**· Representante regional:**

Scharlab, S.L.

C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa

fecha de impresión 31.10.2013

Revisión: 31.10.2013

**Nombre comercial:** Acetonitrilo, para HPLC en gradiente, BASIC

08181 Sentmenat (Barcelona) ESPAÑA  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com

( viene de la página 1 )

- **Área de información:** Departamento técnico
- **Teléfono de emergencia:** Scharlab, S.L. (+34) 93 715 18 11

### 2 Identificación de los peligros

- **Clasificación de la sustancia o de la mezcla**
- **Clasificación con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**



GHS02 llama

Flam. Liq. 2 H225 Líquido y vapores muy inflamables.



GHS07

Acute Tox. 4 H302 Nocivo en caso de ingestión.

Acute Tox. 4 H312 Nocivo en contacto con la piel.

Acute Tox. 4 H332 Nocivo en caso de inhalación.

Eye Irrit. 2 H319 Provoca irritación ocular grave.

- **Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE**



Xn; Nocivo

R20/21/22: Nocivo por inhalación, por ingestión y en contacto con la piel.



Xi; Irritante

R36: Irrita los ojos.



F; Fácilmente inflamable

R11: Fácilmente inflamable.

- **Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente:** Nulo

- **Elementos de la etiqueta**

- **Etiquetado con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**

La sustancia se ha clasificado y etiquetado de conformidad con el reglamento CLP.

- **Pictogramas de peligro**



GHS02



GHS07

- **Palabra de advertencia** Peligro

- **Indicaciones de peligro**

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H302+H312+H332 Nocivo en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.

H319 Provoca irritación ocular grave.

( continúa en la página 3 )

fecha de impresión 31.10.2013

Revisión: 31.10.2013

**Nombre comercial:** Acetonitrilo, para HPLC en gradiente, BASIC**Consejos de prudencia**

- P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. - No fumar.
- P241 Utilizar un material eléctrico, de ventilación o de iluminación/antideflagrante.
- P261 Evitar respirar el polvo/el humo/el gas/la niebla/los vapores/el aerosol.
- P303+P361+P353 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL (o el pelo): Quitarse inmediatamente las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua o ducharse.
- P305+P351+P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando.
- P501 Eliminar el contenido o el recipiente conforme a la reglamentación local/regional/nacional/internacional.

( viene de la página 2 )

**Otros peligros****Resultados de la valoración PBT y mPmB****PBT:** No aplicable.**mPmB:** No aplicable.**3 Composición/información sobre los componentes****Caracterización química: Sustancias****Denominación Nº CAS**

75-05-8 acetonitrilo

**Número(s) de identificación****Número CE:** 200-835-2**Número de clasificación:** 608-001-00-3**4 Primeros auxilios****Descripción de los primeros auxilios****Instrucciones generales:**

Los síntomas de intoxicación pueden presentarse después de muchas horas, por lo que se requiere una supervisión médica durante un mínimo de 48 horas después del accidente.

**En caso de inhalación del producto:**

Suministrar aire fresco; eventualmente hacer respiración artificial, calor. Si los trastornos persisten, consultar al médico.

Las personas desmayadas deben tenderse y transportarse de lado con la suficiente estabilidad.

**En caso de contacto con la piel:** Por regla general, el producto no irrita la piel.**En caso de contacto con los ojos:**

Limpiar los ojos abiertos durante varios minutos con agua corriente. En caso de trastornos persistentes consultar un médico.

**En caso de ingestión:** Consultar inmediatamente un médico.**Indicaciones para el médico:****Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

No existen más datos relevantes disponibles.

**Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

No existen más datos relevantes disponibles.

( continúa en la página 4 )

fecha de impresión 31.10.2013

Revisión: 31.10.2013

**Nombre comercial:** Acetonitrilo, para HPLC en gradiente, BASIC

( viene de la página 3 )

**5 Medidas de lucha contra incendios**

- **Medios de extinción**
- **Sustancias extintoras apropiadas:**  
CO<sub>2</sub>, polvo extintor o chorro de agua rociada. Combatir incendios mayores con chorro de agua rociada o espuma resistente al alcohol.
- **Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**
- **Equipo especial de protección:** Colocarse la protección respiratoria.

**6 Medidas en caso de vertido accidental**

- **Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**  
Llevar puesto equipo de protección. Mantener alejadas las personas sin protección.
- **Precauciones relativas al medio ambiente:**  
Diluir con mucha agua.  
Evitar que penetre en la canalización /aguas de superficie /agua subterráneas.
- **Métodos y material de contención y de limpieza:**  
Quitar con material absorbente (arena, kieselgur, aglutinante de ácidos, aglutinante universal, aserrín).  
Desechar el material contaminado como vertido según item 13.  
Asegurar suficiente ventilación.
- **Referencia a otras secciones**  
Ver capítulo 7 para mayor información sobre una manipulación segura.  
Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.  
Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

**7 Manipulación y almacenamiento**

- **Manipulación:**
- **Precauciones para una manipulación segura**  
Asegurar suficiente ventilación /aspiración en el puesto de trabajo.
- **Prevención de incendios y explosiones:**  
Mantener alejadas las fuentes de encendido. No fumar.  
Tomar medidas contra las cargas electrostáticas.
- **Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**
- **Almacenamiento:**
- **Exigencias con respecto al almacén y los recipientes:** Almacenar en un lugar fresco.
- **Normas en caso de un almacenamiento conjunto:** No es necesario.
- **Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:**  
Mantener el recipiente cerrado herméticamente.  
Almacenarlo en envases bien cerrados en un lugar fresco y seco.
- **Usos específicos finales** No existen más datos relevantes disponibles.

**8 Controles de exposición/protección individual**

- **Instrucciones adicionales para el acondicionamiento de instalaciones técnicas:**  
Sin datos adicionales, ver punto 7.

( continúa en la página 5 )

fecha de impresión 31.10.2013

Revisión: 31.10.2013

**Nombre comercial:** Acetonitrilo, para HPLC en gradiente, BASIC

( viene de la página 4 )

**· Parámetros de control****· Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:****75-05-8 acetonitrilo**LEP () Valor de larga duración: 68 mg/m<sup>3</sup>, 40 ppm  
vía dérmica, VLI**· Indicaciones adicionales:**

Como base se han utilizado las listas vigentes en el momento de la elaboración.

**· Controles de la exposición****· Equipo de protección individual:****· Medidas generales de protección e higiene:**

Mantener alejado de alimentos, bebidas y alimentos para animales.

Quitarse de inmediato la ropa ensuciada o impregnada.

Lavarse las manos antes de las pausas y al final del trabajo.

Evitar el contacto con los ojos.

Evitar el contacto con los ojos y la piel.

**· Protección respiratoria:**

Si la exposición va a ser breve o de poca intensidad, colocarse una máscara respiratoria. Para una exposición más intensa o de mayor duración, usar un aparato de respiración autónomo.

**· Protección de manos:**

Guantes de protección

El material del guante deberá ser impermeable y resistente al producto / substancia / preparado.

Ante la ausencia de tests específicos, no se puede recomendar ningún material específico para guantes de protección contra el producto / preparado / mezcla de substancias químicas.

Selección del material de los guantes en función de los tiempos de rotura, grado de permeabilidad y degradación.

**· Material de los guantes**

La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro.

**· Tiempo de penetración del material de los guantes**

El tiempo de resistencia a la penetración exacto deberá ser pedido al fabricante de los guantes. Este tiempo debe ser respetado.

**· Protección de ojos:**

Gafas de protección herméticas

**9 Propiedades físicas y químicas****· Información sobre propiedades físicas y químicas básicas****· Datos generales****· Aspecto:****Forma:**

Líquido

**Color:**

Incoloro

**Olor:**

Ligero

**· Umbral olfativo:**

No determinado.

**· valor pH:**

No determinado.

**· Cambio de estado****Punto de fusión /campo de fusión:**

-191 °C

( continúa en la página 6 )

fecha de impresión 31.10.2013

Revisión: 31.10.2013

**Nombre comercial:** Acetonitrilo, para HPLC en gradiente, BASIC

( viene de la página 5 )

<b>Punto de ebullición /campo de ebullición:</b> 81 °C	
<b>Punto de inflamación:</b>	2 °C
<b>Inflamabilidad (sólido, gaseiforme):</b>	No aplicable.
<b>Temperatura de ignición:</b>	525 °C
<b>Temperatura de descomposición:</b>	No determinado.
<b>Autoinflamabilidad:</b>	No determinado.
<b>Peligro de explosión:</b>	El producto no es explosivo; sin embargo, pueden formarse mezclas explosivas de vapor / aire.
<b>Límites de explosión:</b>	
<b>Inferior:</b>	4,4 Vol %
<b>Superior:</b>	16 Vol %
<b>Presión de vapor a 20 °C:</b>	97 hPa
<b>Densidad a 20 °C:</b>	0,7822 g/cm³
<b>Densidad relativa</b>	No determinado.
<b>Densidad de vapor</b>	No determinado.
<b>Velocidad de evaporación</b>	No determinado.
<b>Solubilidad en / miscibilidad con agua:</b>	Completamente mezclable.
<b>Coeficiente de reparto (n-octanol/agua):</b>	No determinado.
<b>Viscosidad:</b>	
<b>Dinámica a 20 °C:</b>	0,39 mPas
<b>Cinemática:</b>	No determinado.
<b>Información adicional</b>	No existen más datos relevantes disponibles.

## 10 Estabilidad y reactividad

- Reactividad**
- Estabilidad química**
- Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:**  
No se descompone al emplearse adecuadamente.
- Posibilidad de reacciones peligrosas** No se conocen reacciones peligrosas.
- Condiciones que deben evitarse** No existen más datos relevantes disponibles.
- Materiales incompatibles:** No existen más datos relevantes disponibles.
- Productos de descomposición peligrosos:**  
No se conocen productos de descomposición peligrosos.

## 11 Información toxicológica

- Información sobre los efectos toxicológicos**
- Toxicidad aguda:**
- Valores LD/LC50 (dosis letal /dosis letal = 50%) relevantes para la clasificación:**  
Oral LD50 2730 mg/kg (rata)  
Dermal LD50 1250 mg/kg (conejo)
- Efecto estimulante primario:**
- en la piel:** No produce irritaciones.
- en el ojo:** Produce irritaciones.

( continúa en la página 7 )

**Ficha de datos de seguridad  
según 1907/2006/CE, Artículo 31 (REACH)**

fecha de impresión 31.10.2013

Revisión: 31.10.2013

**Nombre comercial:** Acetonitrilo, para HPLC en gradiente, BASIC

( viene de la página 6 )

- **Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizante.

**12 Información ecológica**

- **Toxicidad**
- **Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Persistencia y degradabilidad** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Comportamiento en sistemas ecológicos:**
- **Potencial de bioacumulación** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Movilidad en el suelo** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicaciones medioambientales adicionales:**
- **Indicaciones generales:**  
Nivel de riesgo para el agua 2 (clasificación de listas): peligroso para el agua  
No dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados.  
Una cantidad mínima vertida en el subsuelo ya representa un peligro para el agua potable.
- **Resultados de la valoración PBT y mPmB**
- **PBT:** No aplicable.
- **mPmB:** No aplicable.
- **Otros efectos adversos** No existen más datos relevantes disponibles.

**13 Consideraciones relativas a la eliminación**

- **Métodos para el tratamiento de residuos**
- **Recomendación:** No debe desecharse con la basura doméstica. No debe llegar al alcantarillado.
- **Embalajes sin limpiar:**
- **Recomendación:** Eliminar conforme a las disposiciones oficiales.
- **Producto de limpieza recomendado:** Agua, eventualmente añadiendo productos de limpieza.

**14 Información relativa al transporte**

- **Número UN**

UN1648

- **ADR, IMDG, IATA**

1648 ACETONITRILIO

- **Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**

ACETONITRILE

- **ADR**



- **Clase**
- **Etiqueta**

3 Líquidos inflamables

3

- **IMDG, IATA**



- **Class**
- **Label**

3 Flammable liquids.

3

153

( continúa en la página 8 )

fecha de impresión 31.10.2013

Revisión: 31.10.2013

**Nombre comercial:** Acetonitrilo, para HPLC en gradiente, BASIC

( viene de la página 7 )

· <b>Grupo de embalaje</b>	
· <b>ADR, IMDG, IATA</b>	II
· <b>Peligros para el medio ambiente:</b>	
· <b>Contaminante marino:</b>	No
· <b>Precauciones particulares para los usuarios</b>	Atención: Líquidos inflamables
· <b>Número Kemler:</b>	33
· <b>Número EMS:</b>	F-E,S-D
· <b>Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC</b>	No aplicable.
· <b>Transporte/datos adicionales:</b>	
· <b>ADR</b>	
· <b>Cantidades limitadas (LQ)</b>	1L
· <b>Categoría de transporte</b>	2
· <b>Código de restricción del túnel</b>	D/E
· <b>"Reglamentación Modelo" de la UNECE:</b>	UN1648, ACETONITRILIO, 3, II

## 15 Información reglamentaria

- **Evaluación de la seguridad química:**

Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

## 16 Otra información

Los datos se fundan en el estado actual de nuestros conocimientos, pero no constituyen garantía alguna de cualidades del producto y no generan ninguna relación jurídica contractual.

- **Departamento de creación de MSDS:** Departamento de seguridad de productos

- **Interlocutor:** msds@scharlab.com

- **Abreviaturas y acrónimos:**

RID: Règlement international concernant le transport des marchandises dangereuses par chemin de fer (Regulations Concerning the International Transport of Dangerous Goods by Rail)

ICAO: International Civil Aviation Organization

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods

IATA: International Air Transport Association

GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

LC50: Lethal concentration, 50 percent

LD50: Lethal dose, 50 percent

**1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa****· Identificador del producto**

· **Nombre comercial:** Hexano, mezcla de alcanos, purísimo

· **Número del artículo:** HE0220

· **Número CAS:**

92112-69-1

· **Número CE:**

203-777-6

· **Número de registro** 01-2119474209-33-XXXX

· **Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**

**· Sector de utilización**

SU10 Formulación [mezcla] de preparados y/o reenvasado (sin incluir aleaciones)

**· Categoría de procesos**

PROC5 Mezclado en procesos por lotes para la formulación de preparados y artículos (fases múltiples y/o contacto significativo)

PROC8a Transferencia de sustancias o preparados (carga/descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones no especializadas

PROC9 Transferencia de sustancias o preparados en pequeños contenedores (líneas de llenado especializadas, incluido el pesaje)

PROC15 Uso como reactivo de laboratorio

· **Utilización del producto / de la elaboración:** Reactivo de laboratorio

**· Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad****· Fabricante/distribuidor:**

Scharlab, S.L.

C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa

08181 Sentmenat (Barcelona) SPAIN

Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65

email: scharlab@scharlab.com

Internet Web Site: www.scharlab.com

**· Representante regional:**

Scharlab, S.L.

C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa

08181 Sentmenat (Barcelona) ESPAÑA

Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65

email: scharlab@scharlab.com

Internet Web Site: www.scharlab.com

· **Área de información:** Departamento técnico

· **Teléfono de emergencia:** Scharlab, S.L. (+34) 93 715 18 11

**2 Identificación de los peligros****· Clasificación de la sustancia o de la mezcla****· Clasificación con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**

GHS02 llama

Flam. Liq. 1

H224 Líquido y vapores extremadamente inflamables.



GHS08 peligro para la salud

Repr. 2

H361 Se sospecha que perjudica la fertilidad o daña al feto.

( continúa en la página 2 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Hexano, mezcla de alkanos, purísimo

( viene de la página 1 )

STOT RE 2 H373 Puede provocar daños en los órganos tras exposiciones prolongadas o repetidas.

Asp. Tox. 1 H304 Puede ser mortal en caso de ingestión y penetración en las vías respiratorias.



GHS09 medio ambiente

Aquatic Chronic 2 H411 Tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.



GHS07

Skin Irrit. 2 H315 Provoca irritación cutánea.

STOT SE 3 H336 Puede provocar somnolencia o vértigo.

**Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE**

Xn; Nocivo

R48/20-62-65: Nocivo: riesgo de efectos graves para la salud en caso de exposición prolongada por inhalación. Posible riesgo de perjudicar la fertilidad. Nocivo: si se ingiere puede causar daño pulmonar.



Xi; Irritante

R38: Irrita la piel.



F; Fácilmente inflamable

R11: Fácilmente inflamable.



N; Peligroso para el medio ambiente

R51/53: Tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.

R67: La inhalación de vapores puede provocar somnolencia y vértigo.

**Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente:** Nulo**Elementos de la etiqueta****Etiquetado con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**

La sustancia se ha clasificado y etiquetado de conformidad con el reglamento CLP.

**Pictogramas de peligro**

GHS02



GHS07



GHS08



GHS09

**Palabra de advertencia** Peligro**Indicaciones de peligro**

H224 Líquido y vapores extremadamente inflamables.

H315 Provoca irritación cutánea.

H361 Se sospecha que perjudica la fertilidad o daña al feto.

H336 Puede provocar somnolencia o vértigo.

H373 Puede provocar daños en los órganos tras exposiciones prolongadas o repetidas.

H304 Puede ser mortal en caso de ingestión y penetración en las vías respiratorias.

H411 Tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.

( continúa en la página 3 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Hexano, mezcla de alkanos, purísimo

( viene de la página 2 )

**• Consejos de prudencia**

- P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. - No fumar.
- P241 Utilizar un material eléctrico, de ventilación o de iluminación/antideflagrante.
- P301+P310 EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar inmediatamente a un CENTRO DE INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA o a un médico.
- P303+P361+P353 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL (o el pelo): Quitarse inmediatamente las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua o ducharse.
- P405 Guardar bajo llave.
- P501 Eliminar el contenido o el recipiente conforme a la reglamentación local/regional/nacional/internacional.

**• Otros peligros****• Resultados de la valoración PBT y mPmB****• PBT:** No aplicable.**• mPmB:** No aplicable.**3 Composición/información sobre los componentes****• Caracterización química: Sustancias****• Denominación Nº CAS**

92112-69-1 Hexano, mezcla de alkanos

**• Número(s) de identificación****• Número CE:** 203-777-6**4 Primeros auxilios****• Descripción de los primeros auxilios****• Instrucciones generales:**

Los síntomas de intoxicación pueden presentarse después de muchas horas, por lo que se requiere una supervisión médica durante un mínimo de 48 horas después del accidente.

**• En caso de inhalación del producto:**

Las personas desmayadas deben tenderse y transportarse de lado con la suficiente estabilidad.

**• En caso de contacto con la piel:** Lavar inmediatamente con agua y jabón y enjuagar bien.**• En caso de contacto con los ojos:**

Limpiar los ojos abiertos durante varios minutos con agua corriente.

**• En caso de ingestión:** Consultar un médico si los trastornos persisten.**• Indicaciones para el médico:****• Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**

No existen más datos relevantes disponibles.

**• Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**

No existen más datos relevantes disponibles.

**5 Medidas de lucha contra incendios****• Medios de extinción****• Sustancias extintoras apropiadas:**

CO<sub>2</sub>, polvo extintor o chorro de agua rociada. Combatir incendios mayores con chorro de agua rociada o espuma resistente al alcohol.

**• Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**

No existen más datos relevantes disponibles.

( continúa en la página 4 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Hexano, mezcla de alkanos, purísimo

( viene de la página 3 )

- **Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**
- **Equipo especial de protección:** No se requieren medidas especiales.

## 6 Medidas en caso de vertido accidental

- **Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**  
Llevar puesto equipo de protección. Mantener alejadas las personas sin protección.
- **Precauciones relativas al medio ambiente:**  
No dejar que se introduzca en el alcantarillado ni que contamine las aguas.  
Al penetrar en las aguas o en el alcantarillado, avisar a las autoridades pertinentes.  
Evitar que penetre en la canalización /aguas de superficie /agua subterráneas.
- **Métodos y material de contención y de limpieza:**  
Quitar con material absorbente (arena, kieselgur, aglutinante de ácidos, aglutinante universal, aserrín).  
Desechar el material contaminado como vertido según item 13.  
Asegurar suficiente ventilación.
- **Referencia a otras secciones**  
Ver capítulo 7 para mayor información sobre una manipulación segura.  
Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.  
Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

## 7 Manipulación y almacenamiento

- **Manipulación:**
- **Precauciones para una manipulación segura**  
Si se manipulan correctamente, no se requieren medidas especiales.
- **Prevención de incendios y explosiones:**  
Mantener alejadas las fuentes de encendido. No fumar.  
Tomar medidas contra las cargas electrostáticas.
- **Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**
- **Almacenamiento:**
- **Exigencias con respecto al almacén y los recipientes:** Almacenar en un lugar fresco.
- **Normas en caso de un almacenamiento conjunto:** No es necesario.
- **Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:**  
Mantener el recipiente cerrado herméticamente.  
Almacenarlo en envases bien cerrados en un lugar fresco y seco.
- **Usos específicos finales** No existen más datos relevantes disponibles.

## 8 Controles de exposición/protección individual

- **Instrucciones adicionales para el acondicionamiento de instalaciones técnicas:**  
Sin datos adicionales, ver punto 7.
- **Parámetros de control**
- **Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:**  
Nulo.
- **Indicaciones adicionales:**  
Como base se han utilizado las listas vigentes en el momento de la elaboración.
- **Controles de la exposición**
- **Equipo de protección individual:**
- **Medidas generales de protección e higiene:**  
Mantener alejado de alimentos, bebidas y alimentos para animales.  
Quitarse de inmediato la ropa ensuciada o impregnada.

198

( continúa en la página 5 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Hexano, mezcla de alkanos, purísimo

( viene de la página 4 )

Lavarse las manos antes de las pausas y al final del trabajo.

Evitar el contacto con la piel.

Evitar el contacto con los ojos y la piel.

**• Protección respiratoria:**

Si la exposición va a ser breve o de poca intensidad, colocarse una máscara respiratoria. Para una exposición más intensa o de mayor duración, usar un aparato de respiración autónomo.

**• Protección de manos:**

Guantes de protección

El material del guante deberá ser impermeable y resistente al producto / substancia / preparado.

Ante la ausencia de tests específicos, no se puede recomendar ningún material específico para guantes de protección contra el producto / preparado / mezcla de substancias químicas.

Selección del material de los guantes en función de los tiempos de rotura, grado de permeabilidad y degradación.

**• Material de los guantes**

La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro.

**• Tiempo de penetración del material de los guantes**

El tiempo de resistencia a la penetración exacto deberá ser pedido al fabricante de los guantes.

Este tiempo debe ser respetado.

**• Protección de ojos:**

Gafas de protección herméticas

**9 Propiedades físicas y químicas****• Información sobre propiedades físicas y químicas básicas****• Datos generales****• Aspecto:****Forma:**

Líquido

**Color:**

Incoloro

**• Olor:**

Similar a la gasolina

**• Umbral olfativo:**

No determinado.

**• valor pH:**

No determinado.

**• Cambio de estado****Punto de fusión /campo de fusión:** Indeterminado.**Punto de ebullición /campo de ebullición:** Indeterminado.**• Punto de inflamación:**

-22 °C

**• Inflamabilidad (sólido, gaseiforme):**

No aplicable.

**• Temperatura de ignición:**

No determinado.

**Temperatura de descomposición:**

No determinado.

**• Autoinflamabilidad:**

El producto no es explosivo; sin embargo, pueden formarse mezclas explosivas de vapor / aire.

**• Peligro de explosión:**

No determinado.

**• Límites de explosión:****Inferior:**

( continúa en la página 6 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Hexano, mezcla de alkanos, purísimo

<b>Superior:</b>	No determinado.	( viene de la página 5 )
· <b>Presión de vapor:</b>	No determinado.	
· <b>Densidad:</b>	Indeterminado.	
· <b>Densidad relativa</b>	No determinado.	
· <b>Densidad de vapor</b>	No determinado.	
· <b>Velocidad de evaporación</b>	No determinado.	
· <b>Solubilidad en / miscibilidad con agua a 20 °C:</b>	0,0095 g/l	
· <b>Coeficiente de reparto (n-octanol/agua):</b>	No determinado.	
· <b>Viscosidad:</b>	No determinado.	
<b>Dinámica:</b>	No determinado.	
<b>Cinemática:</b>	No determinado.	
· <b>Información adicional</b>	No existen más datos relevantes disponibles.	

## 10 Estabilidad y reactividad

- **Reactividad**
- **Estabilidad química**
- **Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:**  
No se descompone al emplearse adecuadamente.
- **Posibilidad de reacciones peligrosas** No se conocen reacciones peligrosas.
- **Condiciones que deben evitarse** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Materiales incompatibles:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Productos de descomposición peligrosos:**  
No se conocen productos de descomposición peligrosos.

## 11 Información toxicológica

- **Información sobre los efectos toxicológicos**
- **Toxicidad aguda:**
- **Efecto estimulante primario:**
- **en la piel:** Irrita la piel y las mucosas.
- **en el ojo:** No produce irritaciones.
- **Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizante.
- **Efectos CMR (carcinogenicidad, mutagenicidad y toxicidad para la reproducción)**  
Repr. 2

## 12 Información ecológica

- **Toxicidad**
- **Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Persistencia y degradabilidad** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Comportamiento en sistemas ecológicos:**
- **Potencial de bioacumulación** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Movilidad en el suelo** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Efectos ecotóxicos:**
- **Observación:** Tóxico para peces.
- **Indicaciones medioambientales adicionales:**
- **Indicaciones generales:**  
Nivel de riesgo para el agua 3 (autoclasificación): muy peligroso para el agua

**Nombre comercial:** Hexano, mezcla de alkanos, purísimo

( viene de la página 6 )

No dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados, ni siquiera en pequeñas cantidades.

Una cantidad ínfima vertida en el subsuelo ya representa un peligro para el agua potable.

Vertido en aguas superficiales, también es tóxico para los peces y el plancton.

tóxico para organismos acuáticos

**• Resultados de la valoración PBT y mPmB****• PBT:** No aplicable.**• mPmB:** No aplicable.**• Otros efectos adversos** No existen más datos relevantes disponibles.**13 Consideraciones relativas a la eliminación****• Métodos para el tratamiento de residuos****• Recomendación:** No debe desecharse con la basura doméstica. No debe llegar al alcantarillado.**• Embalajes sin limpiar:****• Recomendación:** Eliminar conforme a las disposiciones oficiales.**14 Información relativa al transporte****• Número UN**

UN1208

**• ADR, IMDG, IATA****• Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas****• ADR**1208 HEXANOS, PELIGROSO PARA EL MEDIO AMBIENTE  
HEXANES**• IMDG, IATA****• Clase(s) de peligro para el transporte****• ADR****• Clase**

3 Líquidos inflamables

**• Etiqueta**

3

**• IMDG, IATA****• Class**

3 Flammable liquids.

**• Label**

3

**• Grupo de embalaje**

II

**• ADR, IMDG, IATA**

Sustancia líquida potencialmente peligrosa para el medio ambiente

**• Peligros para el medio ambiente:**

No

**• Contaminante marino:**

Símbolo (pez y árbol)

**• Marcado especial (ADR):**

Atención: Líquidos inflamables

**• Precauciones particulares para los usuarios**

F-E,S-D

**• Número EMS:****• Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC** No aplicable.

( continúa en la página 8 )

fecha de impresión 01.11.2013

Revisión: 01.11.2013

**Nombre comercial:** Hexano, mezcla de alkanos, purísimo

( viene de la página 7 )

**• Transporte/datos adicionales:**

• ADR

• Cantidades limitadas (LQ)

• Categoría de transporte

• Código de restricción del túnel

• "Reglamentación Modelo" de la UNECE:

1L

2

D/E

UN1208, HEXANOS, PELIGROSO PARA EL MEDIO AMBIENTE, 3, II

### 15 Información reglamentaria

**• Evaluación de la seguridad química:**

Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

### 16 Otra información

Los datos se fundan en el estado actual de nuestros conocimientos, pero no constituyen garantía alguna de cualidades del producto y no generan ninguna relación jurídica contractual.

• **Departamento de creación de MSDS:** Departamento de seguridad de productos

• **Interlocutor:** msds@scharlab.com

**• Abreviaturas y acrónimos:**

RID: Règlement international concernant le transport des marchandises dangereuses par chemin de fer (Regulations Concerning the International Transport of Dangerous Goods by Rail)

ICAO: International Civil Aviation Organization

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods

IATA: International Air Transport Association

GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

### 1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

- **Identificador del producto**

- **Nombre comercial:** Etilo acetato, para síntesis

- **Número del artículo:** AC0140

- **Número CAS:**

141-78-6

- **Número CE:**

205-500-4

- **Número de clasificación:**

607-022-00-5

- **Número de registro** 01-2119475103-46-XXXX

- **Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**

No existen más datos relevantes disponibles.

- **Utilización del producto / de la elaboración:** Reactivo de laboratorio

- **Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**

- **Fabricante/distribuidor:**

Scharlab, S.L.

C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa

08181 Sentmenat (Barcelona) SPAIN

Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65

email: scharlab@scharlab.com

Internet Web Site: www.scharlab.com

- **Representante regional:**

Scharlab, S.L.

C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa

08181 Sentmenat (Barcelona) ESPAÑA

Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65

email: scharlab@scharlab.com

Internet Web Site: www.scharlab.com

- **Área de información:** Departamento técnico

- **Teléfono de emergencia:** Scharlab, S.L. (+34) 93 715 18 11

### 2 Identificación de los peligros

- **Clasificación de la sustancia o de la mezcla**

- **Clasificación con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**



GHS02 llama

Flam. Liq. 2 H225 Líquido y vapores muy inflamables.



GHS07

Eye Irrit. 2 H319 Provoca irritación ocular grave.

STOT SE 3 H336 Puede provocar somnolencia o vértigo.

- **Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE**



Xi; Irritante

R36: Irrita los ojos.



F; Fácilmente inflamable

( continúa en la página 2 )

fecha de impresión 30.10.2013

Revisión: 30.10.2013

**Nombre comercial:** Etilo acetato, para síntesis

( viene de la página 1 )

R11: Fácilmente inflamable.

R66-67: La exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel. La inhalación de vapores puede provocar somnolencia y vértigo.

**· Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente:**

Debido al efecto desengrasante del disolvente, el contacto prolongado o repetido con la piel puede provocar una dermatitis (inflamación de la piel).

**· Elementos de la etiqueta****· Etiquetado con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**

La sustancia se ha clasificado y etiquetado de conformidad con el reglamento CLP.

**· Pictogramas de peligro**

GHS02 GHS07

**· Palabra de advertencia** Peligro**· Indicaciones de peligro**

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H319 Provoca irritación ocular grave.

H336 Puede provocar somnolencia o vértigo.

**· Consejos de prudencia**

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. - No fumar.

P241 Utilizar un material eléctrico, de ventilación o de iluminación/antideflagrante.

P303+P361+P353 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL (o el pelo): Quitarse inmediatamente las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua o ducharse.

P305+P351+P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando.

P405 Guardar bajo llave.

P501 Eliminar el contenido o el recipiente conforme a la reglamentación local/regional/nacional/internacional.

**· Datos adicionales:**

EUH066 La exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel.

**· Otros peligros****· Resultados de la valoración PBT y mPmB****· PBT:** No aplicable.**· mPmB:** No aplicable.**3 Composición/información sobre los componentes****· Caracterización química: Sustancias****· Denominación Nº CAS**

141-78-6 acetato de etilo

**· Número(s) de identificación****· Número CE:** 205-500-4**· Número de clasificación:** 607-022-00-5

( continúa en la página 3 )

fecha de impresión 30.10.2013

Revisión: 30.10.2013

**Nombre comercial:** Etilo acetato, para síntesis

( viene de la página 2 )

## 4 Primeros auxilios

- **Descripción de los primeros auxilios**
- **En caso de inhalación del producto:**  
Suministrar aire fresco. En caso de trastornos, consultar al médico.
- **En caso de contacto con la piel:** Por regla general, el producto no irrita la piel.
- **En caso de contacto con los ojos:**  
Limpiar los ojos abiertos durante varios minutos con agua corriente. En caso de trastornos persistentes consultar un médico.
- **En caso de ingestión:** Consultar un médico si los trastornos persisten.
- **Indicaciones para el médico:**
- **Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**  
No existen más datos relevantes disponibles.

## 5 Medidas de lucha contra incendios

- **Medios de extinción**
- **Sustancias extintoras apropiadas:**  
CO<sub>2</sub>, polvo extintor o chorro de agua rociada. Combatir incendios mayores con chorro de agua rociada o espuma resistente al alcohol.
- **Sustancias extintoras inapropiadas por razones de seguridad:** Agua a pleno chorro
- **Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**
- **Equipo especial de protección:** No se requieren medidas especiales.

## 6 Medidas en caso de vertido accidental

- **Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**  
Llevar puesto equipo de protección. Mantener alejadas las personas sin protección.
- **Precauciones relativas al medio ambiente:**  
Evitar que penetre en la canalización /aguas de superficie /agua subterráneas.
- **Métodos y material de contención y de limpieza:**  
Quitar con material absorbente (arena, kieselgur, aglutinante de ácidos, aglutinante universal, aserrín).  
Asegurar suficiente ventilación.
- **Referencia a otras secciones**  
Ver capítulo 7 para mayor información sobre una manipulación segura.  
Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.  
Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

## 7 Manipulación y almacenamiento

- **Manipulación:**
- **Precauciones para una manipulación segura**  
Si se manipulan correctamente, no se requieren medidas especiales.
- **Prevención de incendios y explosiones:**  
Mantener alejadas las fuentes de encendido. No fumar.  
Tomar medidas contra las cargas electrostáticas.

fecha de impresión 30.10.2013

Revisión: 30.10.2013

**Nombre comercial:** Etilo acetato, para síntesis

( viene de la página 3 )

- **Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**
- **Almacenamiento:**
- **Exigencias con respecto al almacén y los recipientes:** Almacenar en un lugar fresco.
- **Normas en caso de un almacenamiento conjunto:** No es necesario.
- **Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:**  
Mantener el recipiente cerrado herméticamente.  
Almacenarlo en envases bien cerrados en un lugar fresco y seco.
- **Usos específicos finales** No existen más datos relevantes disponibles.

## 8 Controles de exposición/protección individual

- **Instrucciones adicionales para el acondicionamiento de instalaciones técnicas:**  
Sin datos adicionales, ver punto 7.
- **Parámetros de control**
- **Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:**  
**141-78-6 acetato de etilo**  
LEP () Valor de larga duración: 1460 mg/m<sup>3</sup>, 400 ppm
- **Indicaciones adicionales:**  
Como base se han utilizado las listas vigentes en el momento de la elaboración.
- **Controles de la exposición**
- **Equipo de protección individual:**
- **Medidas generales de protección e higiene:**  
Mantener alejado de alimentos, bebidas y alimentos para animales.  
Quitarse de inmediato la ropa ensuciada o impregnada.  
Lavarse las manos antes de las pausas y al final del trabajo.  
Evitar el contacto con los ojos.  
Evitar el contacto con los ojos y la piel.
- **Protección respiratoria:** No es necesario.
- **Protección de manos:**  
El material del guante deberá ser impermeable y resistente al producto / substancia / preparado.  
Ante la ausencia de tests específicos, no se puede recomendar ningún material específico para guantes de protección contra el producto / preparado / mezcla de substancias químicas.  
Selección del material de los guantes en función de los tiempos de rotura, grado de permeabilidad y degradación.
- **Material de los guantes**  
La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro.
- **Tiempo de penetración del material de los guantes**  
El tiempo de resistencia a la penetración exacto deberá ser pedido al fabricante de los guantes.  
Este tiempo debe ser respetado.
- **Protección de ojos:**



Gafas de protección herméticas

## 9 Propiedades físicas y químicas

- **Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**
- **Datos generales**
- **Aspecto:**

**Forma:**

166 Líquido

( continúa en la página 5 )

fecha de impresión 30.10.2013

Revisión: 30.10.2013

**Nombre comercial:** Etilo acetato, para síntesis

		( viene de la página 4 )
<b>Color:</b>	Incoloro	
<b>Olor:</b>	Similar al de las frutas	
<b>Umbral olfativo:</b>	No determinado.	
<b>valor pH:</b>	No determinado.	
<b>Cambio de estado</b>		
<b>Punto de fusión /campo de fusión:</b>	-83,57 °C	
<b>Punto de ebullición /campo de ebullición:</b>	77-78 °C	
<b>Punto de inflamación:</b>	-4 °C	
<b>Inflamabilidad (sólido, gaseiforme):</b>	No aplicable.	
<b>Temperatura de ignición:</b>	460 °C	
<b>Temperatura de descomposición:</b>	No determinado.	
<b>Autoinflamabilidad:</b>	No determinado.	
<b>Peligro de explosión:</b>	El producto no es explosivo; sin embargo, pueden formarse mezclas explosivas de vapor / aire.	
<b>Límites de explosión:</b>		
<b>Inferior:</b>	2,1 Vol %	
<b>Superior:</b>	11,5 Vol %	
<b>Presión de vapor a 20 °C:</b>	97 hPa	
<b>Densidad a 20 °C:</b>	0,9 g/cm³	
<b>Densidad relativa</b>	No determinado.	
<b>Densidad de vapor</b>	No determinado.	
<b>Velocidad de evaporación</b>	No determinado.	
<b>Solubilidad en / miscibilidad con agua a 20 °C:</b>	79 g/l	
<b>Coeficiente de reparto (n-octanol/agua):</b>	No determinado.	
<b>Viscosidad:</b>		
<b>Dinámica a 20 °C:</b>	0,44 mPas	
<b>Cinemática:</b>	No determinado.	
<b>Información adicional</b>	No existen más datos relevantes disponibles.	

## 10 Estabilidad y reactividad

- Reactividad**
- Estabilidad química**
- Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:**  
No se descompone al emplearse adecuadamente.
- Posibilidad de reacciones peligrosas** No se conocen reacciones peligrosas.
- Condiciones que deben evitarse** No existen más datos relevantes disponibles.
- Materiales incompatibles:** No existen más datos relevantes disponibles.
- Productos de descomposición peligrosos:**  
No se conocen productos de descomposición peligrosos.

( continúa en la página 6 )

fecha de impresión 30.10.2013

Revisión: 30.10.2013

**Nombre comercial:** Etilo acetato, para síntesis

( viene de la página 5 )

## 11 Información toxicológica

- **Información sobre los efectos toxicológicos**
- **Toxicidad aguda:**
- **Valores LD/LC50 (dosis letal /dosis letal = 50%) relevantes para la clasificación:**  
Oral LD50 5620 mg/kg (conejo)  
Inhalatorio LC50/4 h 1600 mg/l (rata)
- **Efecto estimulante primario:**
- **en la piel:** No produce irritaciones.
- **en el ojo:** Produce irritaciones.
- **Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizante.

## 12 Información ecológica

- **Toxicidad**
- **Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Persistencia y degradabilidad** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Comportamiento en sistemas ecológicos:**
- **Potencial de bioacumulación** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Movilidad en el suelo** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicaciones medioambientales adicionales:**
- **Indicaciones generales:**  
Nivel de riesgo para el agua 1 (clasificación de listas): escasamente peligroso para el agua  
En estado no diluido o no neutralizado, no dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados.
- **Resultados de la valoración PBT y mPmB**
- **PBT:** No aplicable.
- **mPmB:** No aplicable.
- **Otros efectos adversos** No existen más datos relevantes disponibles.

## 13 Consideraciones relativas a la eliminación

- **Métodos para el tratamiento de residuos**
- **Recomendación:** No debe desecharse con la basura doméstica. No debe llegar al alcantarillado.
- **Embalajes sin limpiar:**
- **Recomendación:** Eliminar conforme a las disposiciones oficiales.

## 14 Información relativa al transporte

- |   |                       |
|---|-----------------------|
| · <b>Número UN</b>  | UN1173                |
| · <b>ADR, IMDG, IATA</b>  |                       |
| · <b>Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas</b> |                       |
| · <b>ADR</b>  | 1173 ACETATO DE ETILO |
| · <b>IMDG, IATA</b>   | ETHYL ACETATE         |
| · <b>Clase(s) de peligro para el transporte</b>                   |                       |
| · <b>ADR</b>  |                       |



- **Clase**

1683 Líquidos inflamables

( continúa en la página 7 )

fecha de impresión 30.10.2013

Revisión: 30.10.2013

**Nombre comercial:** Etilo acetato, para síntesis

- **Etiqueta**
- **IMDG, IATA**



3

( viene de la página 6 )

- **Class** 3 Flammable liquids.
- **Label** 3

- **Grupo de embalaje** II

- **ADR, IMDG, IATA**

- **Peligros para el medio ambiente:**

- **Contaminante marino:** No

- **Precauciones particulares para los usuarios** Atención: Líquidos inflamables

- **Número Kemler:** 33

- **Número EMS:** F-E,S-D

- **Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC** No aplicable.

- **Transporte/datos adicionales:**

- **ADR**

1L

- **Cantidades limitadas (LQ)**

2

- **Categoría de transporte**

D/E

- **Código de restricción del túnel**

UN1173, ACETATO DE ETILO, 3, II

- **"Reglamentación Modelo" de la UNECE:**

## 15 Información reglamentaria

- **Evaluación de la seguridad química:**

Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

## 16 Otra información

Los datos se fundan en el estado actual de nuestros conocimientos, pero no constituyen garantía alguna de cualidades del producto y no generan ninguna relación jurídica contractual.

- **Departamento de creación de MSDS:** Departamento de seguridad de productos

- **Interlocutor:** msds@scharlab.com

- **Abreviaturas y acrónimos:**

RID: Règlement international concernant le transport des marchandises dangereuses par chemin de fer (Regulations Concerning the International Transport of Dangerous Goods by Rail)  
ICAO: International Civil Aviation Organization

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods

IATA: International Air Transport Association

GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

LC50: Lethal concentration, 50 percent

LD50: Lethal dose, 50 percent

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

### 1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

- **Identificador del producto**
- **Nombre comercial:** Sodio sulfato anhidro, polvo, purísimo, Ph Eur
- **Número del artículo:** SO0665
- **Número CAS:**  
7757-82-6
- **Número CE:**  
231-820-9
- **Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Utilización del producto / de la elaboración:** Reactivo de laboratorio
- **Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**
- **Fabricante/distribuidor:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) SPAIN  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Representante regional:**  
Scharlab, S.L.  
C/Gato Pérez, 33. Pol.Ind. Mas d'en Cisa  
08181 Sentmenat (Barcelona) ESPAÑA  
Tel: (+34) 93 745 64 00 - FAX: (+34) 93 715 27 65  
email: scharlab@scharlab.com  
Internet Web Site: www.scharlab.com
- **Área de información:** Departamento técnico
- **Teléfono de emergencia:** Scharlab, S.L. (+34) 93 715 18 11

### 2 Identificación de los peligros

- **Clasificación de la sustancia o de la mezcla**
- **Clasificación con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008**  
La sustancia no se ha clasificado de conformidad con el reglamento CLP.
- **Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE** Nulo
- **Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente:** Nulo
- **Elementos de la etiqueta**
- **Etiquetado con arreglo al Reglamento (CE) n° 1272/2008** suprimido
- **Pictogramas de peligro** suprimido
- **Palabra de advertencia** suprimido
- **Indicaciones de peligro** suprimido
- **Otros peligros**
- **Resultados de la valoración PBT y mPmB**
- **PBT:** No aplicable.
- **mPmB:** No aplicable.

### 3 Composición/información sobre los componentes

- **Caracterización química: Sustancias**
- **Denominación Nº CAS**  
7757-82-6 sulfato de sodio

( continúa en la página 2 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Sodio sulfato anhídrico, polvo, purísimo, Ph Eur

- **Número(s) de identificación**
- **Número CE:** 231-820-9

( viene de la página 1 )

### 4 Primeros auxilios

- **Descripción de los primeros auxilios**
- **Instrucciones generales:** No se precisan medidas especiales.
- **En caso de inhalación del producto:**  
Suministrar aire fresco. En caso de trastornos, consultar al médico.
- **En caso de contacto con la piel:** Por regla general, el producto no irrita la piel.
- **En caso de contacto con los ojos:**  
Limpiar los ojos abiertos durante varios minutos con agua corriente.
- **En caso de ingestión:** Consultar un médico si los trastornos persisten.
- **Indicaciones para el médico:**
- **Principales síntomas y efectos, agudos y retardados**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente**  
No existen más datos relevantes disponibles.

### 5 Medidas de lucha contra incendios

- **Medios de extinción**
- **Sustancias extintoras apropiadas:**  
CO<sub>2</sub>, polvo extintor o chorro de agua rociada. Combatir incendios mayores con chorro de agua rociada o espuma resistente al alcohol.
- **Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla**  
No existen más datos relevantes disponibles.
- **Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**
- **Equipo especial de protección:** No se requieren medidas especiales.

### 6 Medidas en caso de vertido accidental

- **Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**  
No es necesario.
- **Precauciones relativas al medio ambiente:**  
Evitar que penetre en la canalización /aguas de superficie /agua subterráneas.
- **Métodos y material de contención y de limpieza:** Recoger mecánicamente.
- **Referencia a otras secciones**  
No se desprenden sustancias peligrosas.  
Ver capítulo 7 para mayor información sobre una manipulación segura.  
Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.  
Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

### 7 Manipulación y almacenamiento

- **Manipulación:**
- **Precauciones para una manipulación segura** No se requieren medidas especiales.
- **Prevención de incendios y explosiones:** No se requieren medidas especiales.
- **Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades**
- **Almacenamiento:**
- **Exigencias con respecto al almacén y los recipientes:** No se requieren medidas especiales.  
( continúa en la página 3 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Sodio sulfato anhídrico, polvo, purísimo, Ph Eur

( viene de la página 2 )

- **Normas en caso de un almacenamiento conjunto:** No es necesario.
- **Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:** Ningunos, -as.
- **Usos específicos finales** No existen más datos relevantes disponibles.

## 8 Controles de exposición/protección individual

- **Instrucciones adicionales para el acondicionamiento de instalaciones técnicas:**  
Sin datos adicionales, ver punto 7.
- **Parámetros de control**
- **Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:**  
Nulo.
- **Indicaciones adicionales:**  
Como base se han utilizado las listas vigentes en el momento de la elaboración.
- **Controles de la exposición**
- **Equipo de protección individual:**
- **Medidas generales de protección e higiene:**  
Se deben observar las medidas de seguridad para el manejo de productos químicos.
- **Protección respiratoria:** No es necesario.
- **Protección de manos:**  
El material del guante deberá ser impermeable y resistente al producto / substancia / preparado.  
Ante la ausencia de tests específicos, no se puede recomendar ningún material específico para guantes de protección contra el producto / preparado / mezcla de substancias químicas.  
Selección del material de los guantes en función de los tiempos de rotura, grado de permeabilidad y degradación.
- **Material de los guantes**  
La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro.
- **Tiempo de penetración del material de los guantes**  
El tiempo de resistencia a la penetración exacto deberá ser pedido al fabricante de los guantes.  
Este tiempo debe ser respetado.
- **Protección de ojos:** No es necesario.

## 9 Propiedades físicas y químicas

- **Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**

- **Datos generales**

- **Aspecto:**

- **Forma:**

- **Color:**

- **Olor:**

- **Umbral olfativo:**

- **valor pH:**

Sólido

Blanco

Característico

No determinado.

No aplicable.

- **Cambio de estado**

- **Punto de fusión /campo de fusión:** Indeterminado.

- **Punto de ebullición /campo de ebullición:** Indeterminado.

- **Punto de inflamación:**

No aplicable.

- **Inflamabilidad (sólido, gaseiforme):**

La sustancia no es inflamable.

- **Temperatura de ignición:**

- **Temperatura de descomposición:** No determinado.

( continúa en la página 4 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Sodio sulfato anhídrico, polvo, purísimo, Ph Eur

( viene de la página 3 )

· <b>Autoinflamabilidad:</b>	No determinado.
· <b>Peligro de explosión:</b>	El producto no es explosivo.
· <b>Límites de explosión:</b>	
<b>Inferior:</b>	No determinado.
<b>Superior:</b>	No determinado.
· <b>Presión de vapor:</b>	No aplicable.
· <b>Densidad a 20 °C:</b>	1,7 g/cm <sup>3</sup>
· <b>Densidad relativa</b>	No determinado.
· <b>Densidad de vapor</b>	No aplicable.
· <b>Velocidad de evaporación</b>	No aplicable.
· <b>Solubilidad en / miscibilidad con agua a 20 °C:</b>	200 g/l
· <b>Coeficiente de reparto (n-octanol/agua):</b>	No determinado.
· <b>Viscosidad:</b>	
<b>Dinámica:</b>	No aplicable.
<b>Cinemática:</b>	No aplicable.
· <b>Información adicional</b>	No existen más datos relevantes disponibles.

## 10 Estabilidad y reactividad

- **Reactividad**
- **Estabilidad química**
- **Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:**  
No se descompone al emplearse adecuadamente.
- **Posibilidad de reacciones peligrosas** No se conocen reacciones peligrosas.
- **Condiciones que deben evitarse** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Materiales incompatibles:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Productos de descomposición peligrosos:**  
No se conocen productos de descomposición peligrosos.

## 11 Información toxicológica

- **Información sobre los efectos toxicológicos**
- **Toxicidad aguda:**
- **Valores LD/LC50 (dosis letal /dosis letal = 50%) relevantes para la clasificación:**  
Oral LD50 5989 mg/kg (ratón)
- **Efecto estimulante primario:**
- **en la piel:** No produce irritaciones.
- **en el ojo:** No produce irritaciones.
- **Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizante.
- **Indicaciones toxicológicas adicionales:**  
Según nuestra experiencia y las informaciones que tenemos al respecto, el producto no produce ningún efecto perjudicial para la salud cuando se maneja adecuadamente y se emplea con los fines especificados.  
El producto no requiere etiquetaje conforme a la última versión de las Listas de la CE.

( continúa en la página 5 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Sodio sulfato anhídrico, polvo, purísimo, Ph Eur

( viene de la página 4 )

## 12 Información ecológica

- **Toxicidad**
- **Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Persistencia y degradabilidad** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Comportamiento en sistemas ecológicos:**
- **Potencial de bioacumulación** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Movilidad en el suelo** No existen más datos relevantes disponibles.
- **Indicaciones medioambientales adicionales:**
- **Indicaciones generales:**  
Nivel de riesgo para el agua 1 (clasificación de listas): escasamente peligroso para el agua  
En estado no diluido o no neutralizado, no dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados.
- **Resultados de la valoración PBT y mPmB**
- **PBT:** No aplicable.
- **mPmB:** No aplicable.
- **Otros efectos adversos** No existen más datos relevantes disponibles.

## 13 Consideraciones relativas a la eliminación

- **Métodos para el tratamiento de residuos**
- **Recomendación:** Pequeñas cantidades pueden ser desechadas con la basura doméstica.
- **Embalajes sin limpiar:**
- **Recomendación:** Eliminar conforme a las disposiciones oficiales.

## 14 Información relativa al transporte

- **Número UN**
- **ADR, ADN, IMDG, IATA** suprimido
- **Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**
- **ADR, ADN, IMDG, IATA** suprimido
- **Clase(s) de peligro para el transporte**
- **ADR, ADN, IMDG, IATA**
- **Clase** suprimido
- **Grupo de embalaje**
- **ADR, IMDG, IATA** suprimido
- **Peligros para el medio ambiente:**
- **Contaminante marino:** No
- **Precauciones particulares para los usuarios** No aplicable.
- **Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC** No aplicable.
- **"Reglamentación Modelo" de la UNECE:** -

## 15 Información reglamentaria

- **Evaluación de la seguridad química:**  
Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

( continúa en la página 6 )

fecha de impresión 02.11.2013

Revisión: 02.11.2013

**Nombre comercial:** Sodio sulfato anhídrico, polvo, purísimo, Ph Eur

( viene de la página 5 )

**16 Otra información**

Los datos se fundan en el estado actual de nuestros conocimientos, pero no constituyen garantía alguna de cualidades del producto y no generan ninguna relación jurídica contractual.

• **Departamento de creación de MSDS:** Departamento de seguridad de productos

• **Interlocutor:** msds@scharlab.com

• **Abreviaturas y acrónimos:**

RID: Règlement international concernant le transport des marchandises dangereuses par chemin de fer (Regulations Concerning the International Transport of Dangerous Goods by Rail)

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

LC50: Lethal concentration, 50 percent

LD50: Lethal dose, 50 percent



# Bibliografía

- [1] Loza E., AINES en la práctica clínica: lo que hay que saber. IT del Sistema Nacional de Salud. Volumen 35, N° 3/2011.
- [2] Kaiser, D. G., Brooks, C. D., Lomen, P. L. Am. J. Med. 1986; 80: 10-5.
- [3] Rovensky, J., Micekova, D. Drug. Exp. Clin. Res. 2000; 26: 19-24.
- [4] Bellamy, N., Bensen, W. G., Ford, P. M., Huang, S. H., Lang, J. Y. Clin. Invest. Med. 1992; 15: 427-434.
- [5] Muckle, D. S. Am. J. Med. 1986; 80: 76-80.
- [6] Solomon, G. D., Kunkel, R. S. Clev. Clin. J. Med. 1993; 60: 43-48.
- [7] Tan, P., Flowers, F. P., Araujo, O. E., Doering, P. Drug Intel. Clin. Pharm. 1986; 20: 496-499.
- [8] Greig, M. E., Griffin, R. L. J. Med. Chem. 1975; 18: 112-116.
- [9] Turro, N. J., Modern Molecular Photochemistry. University Science Books: Sausalito, California, 1991.
- [10] Vane, J. and Botting, R. M. FASEB. J. 1987; 1: 89-96.
- [11] Stone, E. Philos. Trans. R. Soc. London. 1763; 53: 195-200.
- [12] Gibson, T. J. Rheumatol. 1990; 27: 87- 90.
- [13] Silverstein, F. E. Dig. Dis. Sci. 1998; 43: 447-458.
- [14] Rovensky, J., Micekova, D. Drug. Exp. Clin. Res. 2000; 26: 19-24.
- [15] Bellamy, N., Bensen, W. G., Ford, P. M., Huang, S. H., Lang, J. Y. Clin. Invest. Med. 1992; 15: 427-433.

## Bibliografía

---

- [16] Muckle, D. S. Am. J. Med. 1986; 80: 76-80.
- [17] Barrett, G.C.; Davies, J.S. Amino Acids, Peptides and Proteins; Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2004; Vol. 34.
- [18] Petsko, G., Ringe, D. 2003. Protein Structure and Function. Blackwell Publishing.
- [19] Branden, C., Tooze, J. 1999. Introduction to Protein Structure. Taylor and Francis eds.
- [20] Peters, T. Adv. Protein Chem. 1985; 37: 161.
- [21] Yamada, H., Shimizu, S. Angew. Chem. Int. Ed. Eng. 1988; 27: 622.
- [22] Wong, C. H. Science. 1989; 244: 1145.
- [23] Kragh-Hansen, U., Chuang, V. T. G., Otagiri, M. Biol. Pharm. Bull. 2002; 25: 695-704.
- [24] Sudlow, G., Birkett, D. J., Wade, D. N. Mol. Pharmacol. 1976; 12: 1052.
- [25] Garrett, R.H., Grisham, C.M. Biochemistry, Harcourt College Pub., 1996.
- [26] Cardellá, R. Bioquímica médica, Editorial Ciencias Médicas, 1999.
- [27] Kaiser, D.G., Shaw, S.R., Vangiessen, G.J. J. Pharm. Sci. 1974; 63; 567-570.
- [28] Risdall, P.C., Adams, S.S., Crampton, E.L., Marchant, B. Xenobiotica. 1978; 8; 691-704.
- [29] Kozma, C., Daffner, R. European Congress of Rheumatology, Wiesbaden. 1979.
- [30] Chalmers, T.M., Glass, R.C., Risdall, P.C. Curr. Med. Res. Op. 1977; 5; 17-20.
- [31] Kaneo, Y., Kai, A., Kiryu, S., Iguchi, S. J. Pharm. Soc. Jap. 1976; 96; 1412-1416.
- [32] Instituto nacional de seguridad e higiene en el trabajo [Consulta:3 Febrero 2015]  
(Disponible en: <http://www.insht.es>)
- [33] Sigma Aldrich [Consulta:20 Febrero 2015]  
(Disponible en: <http://www.sigmaaldrich.com/>)
- [34] Scharlab [Consulta:20 Febrero 2015]  
(Disponible en: <http://www.scharlab.com/>)