

CAFEÍNA

1,3,7-trimetilpurina-2,6-diona

Fórmula	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂
Peso mol.	194.0804 g/mol
InChIKey	RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N

1. ESTRUCTURA MOLECULAR 2D



2. IDENTIFICACIÓN DE PELIGROS (GHS / SGA)

Palabra señal: **WARNING**

Pictogramas de peligro:



Irritante

Declaraciones de peligro (H)

- H360: May damage fertility or the unborn child [Danger Reproductive toxicity]

Declaraciones de precaución (P)

- P203, P261, P264, P270, P271, P280, P301+P316, P304+P340, P317, P318, P321, P330, P405, and P501

3. SISTEMA NFPA 704

Datos NFPA 704 no disponibles.

4. TOXICIDAD AGUDA

Datos de LD50 no disponibles.

5. PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS RELEVANTES

Propiedad	Valor	Unidad	Fuente
Punto de ebullición	352 °F at 760 mmHg (sublimes) (NTP, 1992)	—	pubchem_pugview

Densidad	1.23 at 64 °F (NTP, 1992) - Denser than water; will sink	—	pubchem_pugview
LogP (experimental)	log Kow = -0.07	—	pubchem_pugview
Punto de fusión	460 °F (NTP, 1992)	—	pubchem_pugview
Presión de vapor	0.00000001 [mmHg]	—	pubchem_pugview
Solubilidad en agua	10 to 50 mg/mL at 73 °F (NTP, 1992)	—	pubchem_pugview

AVISO LEGAL IMPORTANTE

Este documento es un RESUMEN ORIENTATIVO DE PROPIEDADES DE SEGURIDAD generado automaticamente a partir de datos de PubChem (National Institutes of Health, EE.UU.). NO es una Ficha de Datos de Seguridad (FDS/SDS) oficial ni cumple con los requisitos del Sistema Globalmente Armonizado (GHS/SGA), OSHA HazCom, REACH (UE), ni ninguna normativa nacional equivalente. NO debe utilizarse como unico documento de referencia en entornos industriales, laboratorios profesionales ni para evaluacion de riesgos laborales. Consulte siempre la FDS oficial del proveedor del compuesto y la normativa local aplicable antes de cualquier manipulacion.

Fuentes de FDS oficiales:

- Sigma-Aldrich (Merck): <https://www.sigmaaldrich.com/search#q=cafeína>
- Fisher Scientific: <https://www.fishersci.com/us/en/catalog/search/sds?query=cafeína>
- PubChem (datos fuente): <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/#query=cafeína>
- GESTIS (base de datos): <https://gestis-database.dguv.de/>

Generado por ChemAtlas - chematlas.app - 2026-10-22