

## Identificazione degli agenti chimici

Tutte le sostanze chimiche sono identificabili oltre che dal loro nome IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) anche dal numero CAS. Il numero CAS è un identificativo numerico che individua in maniera univoca un composto chimico. Il Chemical Abstract Service (CAS), una divisione della American Chemical Society, assegna questi identificativi ad ogni sostanza chimica descritta in letteratura. Attualmente oltre 30 milioni di composti hanno ricevuto un numero CAS e circa 7000 vengono aggiunti ogni giorno. La maggior parte dei database chimici permettono di fare ricerche in base al numero CAS.

Il numero CAS è costituito da tre sequenze di numeri separati da trattini. Il primo gruppo è costituito da un numero variabile di cifre, fino a sei, il secondo da due cifre, mentre il terzo ed ultimo gruppo è costituito da una singola cifra che serve da codice di controllo. I numeri sono assegnati in ordine progressivo e non hanno quindi nessun significato chimico. Il codice di controllo viene calcolato moltiplicando ciascuna cifra da destra a sinistra per un numero intero progressivo (la cifra più a destra va moltiplicata per 1, quella immediatamente a sinistra per 2 e così via), sommando i vari termini e calcolando poi il modulo 10 della somma così ottenuta. Per esempio il numero CAS dell'acqua è 7732-18-5 ed il codice di controllo (5) è dato da  $(8 \times 1 + 1 \times 2 + 2 \times 3 + 3 \times 4 + 7 \times 5 + 7 \times 6) \bmod 10 = 105 \bmod 10 = 5$ . Se una molecola ha più isomeri a ciascun isomero sarà assegnato un numero CAS differente. Per esempio il numero CAS del D-glucosio è 50-99-7 mentre quello del L-glucosio è 921-60-8. In alcuni casi particolari ad una intera classe di composti è stato assegnato un unico numero CAS; per esempio tutte le alcol deidrogenasi hanno come numero CAS 9031-72-5.

Le sostanze chimiche immesse sul mercato dell'Unione Europea prima del 18 settembre 1981 sono inoltre identificabili anche da un numero EINECS (European INventory of Existing Commercial chemical Substances), mentre quelle immesse dopo tale data sono caratterizzate da un numero ELINCS (European List of Notified Chemical Substances).