CAS-, EG- en EG-indexnummers

Het CAS-nummer (x…x-xx-x)

Het CAS-registratienummer is een nummer dat uniek toegekend wordt aan elke stof die geregistreerd is bij Chemical Abstracts Service (een onderdeel van American Chemical Society). Elk nummer verwijst naar een unieke stof maar sommige stoffen hebben meer dan één CAS-nummer. CAS-nummers worden ook af en toe aangepast waardoor sommige nummers verouderd zijn.
Het CAS-nummer is het meest verspreide identificatienummer ter wereld. Het dekt nagenoeg alle stoffen die gekend zijn. Er is geen verband tussen het toegekende nummer en de samenstelling of aard van de stof.
Meer informatie over het CAS-nummer vind je hier.

De structuur van het CAS-nummer

Elk CAS-nummer telt 5 tot 10 cijfers in drie groepen, gescheiden door koppeltekens. De eerste groep telt minimaal 2 en maximaal 7 cijfers. De tweede groep telt steeds 2 cijfers en de laatste groep 1 cijfer. Het laatste cijfer is een controlecijfer dat als volgt berekend wordt:

$N_i…N_3 – N_2N_1 – \mathbf{R}$ (i = 4 tot 9)

$$\frac{(i \times N_i) + … + (3 \times N_3) + (2 \times N_2) + (1 \times N_1)}{10} = Q + \frac{\mathbf{R}}{10}$$

waarbij Q het integer gedeelte en $\frac{R}{10}$ het decimaal gedeelte is van de uitkomst.

Bv.: 22205-45-**4** (koper(I)sulfide)

$$\frac{(7 \times 2) + (6 \times 2) + (5 \times 2) + (4 \times 0) + (3 \times 5) + (2 \times 4) + (1 \times 5)}{10} = \frac{64}{10} = 6{,}4 = 6 + \frac{\mathbf{4}}{10}$$

Het EG-nummer (xxx-xxx-x)

Het EG-nummer (European Community number – EC-number) is het Europees identificatienummer voor stoffen. Er is geen verband tussen het toegekende nummer en de samenstelling of aard van de stof.
Dit nummer mag niet verward worden met het *'Enzyme Commission number'*, een nummer dat gebruikt wordt voor de indeling van enzymen.
Meer informatie over het EG-nummer vind je hier.

De structuur van het EG-nummer

Elk EG-nummer telt 7 cijfers in drie groepen, gescheiden door koppeltekens. De eerste twee groepen tellen 3 cijfers, de laatste groep 1 cijfer. Het laatste cijfer is een controlecijfer dat als volgt berekend wordt:

$N_1N_2N_3 – N_4N_5N_6 – \mathbf{R}$

$$\frac{(1 \times N_1) + (2 \times N_2) + (3 \times N_3) + (4 \times N_4) + (5 \times N_5) + (6 \times N_6)}{11} = Q + \frac{\mathbf{R}}{11}$$

waarbij Q het integer gedeelte en $\frac{R}{11}$ het decimaal gedeelte is van de uitkomst.

Bv.: 215-127-**9** (bariumoxide)

$$\frac{(1 \times 2) + (2 \times 1) + (3 \times 5) + (4 \times 1) + (5 \times 2) + (6 \times 7)}{11} = \frac{75}{11} = 6{,}8181… = 6 + \frac{\mathbf{9}}{11}$$

Het EG-indexnummer (xxx-xxx-xx-x)

Het EG-indexnummer of ook kortweg indexnummer genoemd, wordt toegekend aan stoffen of groepen van stoffen die in de EG geharmoniseerd zijn. Deze stoffen zijn opgenomen in een bijlage van de CLP-verordening en krijgen een voorgeschreven indeling in gevarenklassen. In tegenstelling tot het CAS- of EG-nummer zijn alle stoffen waaraan een EG-indexnummer toegekend is, ingedeeld als gevaarlijk. Dit betekent echter niet dat alle gevaarlijke stoffen een indexnummer hebben (dus geharmoniseerd zijn).

De structuur van het indexnummer

Het indexnummer telt 9 cijfers in 4 groepen, gescheiden door koppeltekens. De eerste twee groepen tellen 3 cijfers, de derde groep 2 cijfers en tenslotte nog één cijfer na het laatste koppelteken. Voor anorganische verbindingen en sommige organische verbindingen geeft de eerste groep cijfers het atoomnummer van het meest karakteristieke element in de verbinding(en) weer (bv. alle verbindingen met als eerste drie cijfers 011 zijn natriumverbindingen). Voor de meeste organische verbindingen is het eerste cijfer steeds 6 en de twee volgende cijfers duiden meestal de meest karakteristieke functionele groep aan (bv. 601 zijn de koolwaterstoffen, 602 de halogeenkoolwaterstoffen, 607 de organische zuren en derivaten, …).
De tweede reeks van 3 cijfers vormen een volgnummer binnen bovenstaande groepen. De volgende 2 cijfers worden gebruikt om een onderscheid te maken tussen verschillende vormen waarin eenzelfde stof (dus eerste 6 cijfers identiek) in de handel gebracht wordt.
Het laatste cijfer van het indexnummer tenslotte is een controlecijfer dat als volgt berekend wordt:

$N_1N_2N_3 - N_4N_5N_6 - N_7N_8 - \mathbf{R}$

$$\frac{(1 \times N_1) + (2 \times N_2) + (3 \times N_3) + (4 \times N_4) + (5 \times N_5) + (6 \times N_6) + (7 \times N_7) + (8 \times N_8)}{11} = Q + \frac{\mathbf{R}}{11}$$

waarbij Q het integer gedeelte en $\frac{R}{11}$ het decimaal gedeelte is van de uitkomst.

Als R = 10 wordt X gebruikt als controlecijfer.

Bv.: 607-135-00-**X** (butaanzuur)

$$\frac{(1 \times 6) + (2 \times 0) + (3 \times 7) + (4 \times 1) + (5 \times 3) + (6 \times 5) + (7 \times 0) + (8 \times 0)}{11} = \frac{76}{11} = 6{,}9090... = 6 + \frac{\mathbf{10}}{11}$$