



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**“ACTUALIZACIÓN DE LOS DATOS DE
IDENTIDAD QUÍMICA DE NUEVAS SUSTANCIAS
A INCLUIR EN EL CATÁLOGO NACIONAL DE
SUSTANCIAS QUÍMICAS”**

TESINA

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
QUÍMICO**

PRESENTA

Luis Martín González Arizpe

ASESORA

Dra. Irma Cruz Gavilán García

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2023





Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: CASTRO ACUÑA CARLOS MAURICIO

VOCAL: GAVILÁN GARCÍA IRMA CRUZ

SECRETARIO: GARCÍA REYNOSO JOSÉ AGUSTÍN

1er. SUPLENTE: NERNAL PÉREZ ROLANDO JAVIER

2° SUPLENTE: BERISTAÍN MONTIEL ERIK

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

Unidad de Gestión Ambiental (UGA), Facultad De Química, UNAM

ASESOR DEL TEMA:

Dra. Irma Cruz Gavilán García

SUPERVISOR TÉCNICO:

Dr. Arturo Gavilán García

SUSTENTANTE:

Luis Martín González Arizpe

Agradecimientos

En primer lugar, a mi madre, por su infinito amor, por apoyar mis sueños y creer siempre en mí a pesar de mis tropiezos, sin tus sacrificios este paso no sería posible, espero estes orgullosa de la persona en la que me he convertido.

A mi hermana Allison, por brindarme risas en los momentos más necesarios, espero contar contigo siempre, así como yo estaré contigo en el momento que me necesites. Espero este logro sirva de ejemplo e inspiración para que logres alcanzar tus objetivos, para que puedas superarte y ser mejor día a día.

A Josefina, gracias por cruzarte en mi camino y elegir estar a mi lado, por el amor que me brindas, espero que sigas a mi lado y compartamos muchos más logros juntos.

A mis tías Eli y Nancy quienes nunca me dejaron solo, me han cuidado, querido y alentado a seguir mis sueños y superarme.

A mi padre, que de una u otra forma me ayudo.

A mi asesora la Dra. Irma, quien dirigió este trabajo, gracias por su apoyo, tiempo, atención y paciencia, por todas sus enseñanzas dentro y fuera de las aulas.

Al Dr. Balú, gracias por tus consejos y ayuda en la realización de este proyecto.

Bien dicen que los amigos son la familia que tú eliges, y yo fui feliz con la familia que escogí. Gracias por las incontables pláticas en las cuales me compartieron su sabiduría, además de ser la razón por la que la licenciatura se convirtió en una etapa divertida.

Por último, pero no menos importante a la UNAM porque, me abrió sus puertas desde que entre a ENP 9 y luego a la FQ, estoy agradecido porque me brindo las herramientas y la oportunidad de realizar mi sueño de ser un profesionista.

Espero seguir sumando metas y poder compartirlas con todos ustedes.

Índice

Introducción	1
Justificación	2
Objetivos	4
Objetivo general	4
Objetivos específicos	4
Alcance	5
Antecedentes	6
CAS herramienta de búsqueda	9
Metodología	16
Resultados	22
a) Listado de sustancias a revisar	24
b) Sistematización e integración de datos	30
c) Validación de la identidad química por parte del CAS	43
Conclusiones	46
Bibliografía	47

Introducción

Los productos químicos son una parte fundamental de la vida cotidiana. Hoy en día se utilizan más de 100 000 sustancias diferentes que cumplen una función en todos los sectores económicos y en casi todas las ramas de la industria, y muchos de ellos son esenciales para el bienestar de los seres humanos y el desarrollo sustentable. Sin embargo, también pueden poner en riesgo la salud humana y el medio ambiente si no se gestionan como corresponde (PNUMA, 2011).

Los gobiernos de muchos países han trabajado en el desarrollo de instrumentos regulatorios y de información para la prevención o minimización de los efectos adversos de las sustancias químicas. Entre los instrumentos regulatorios se encuentran los inventarios creados para conocer el universo de las sustancias químicas que se comercializan en un país y con esto poder tomar medidas de prevención de riesgos. En términos generales, se definen como una lista de sustancias químicas que son producidas en o importadas a un país y que se encuentran ligadas a algún tipo de registro que avala su comercialización (SEMARNAT, 2012).

El Inventario Nacional de Sustancias Químicas (INSQ), se ha desarrollado como un instrumento de información que permita a México avanzar hacia una regulación que se oriente a la prevención de la contaminación. La regulación mexicana abarca aproximadamente un 25% de las sustancias en comercio en el país, este trabajo pretende realizar la validación y actualización de la identidad química del total de las sustancias químicas del inventario mexicano actual.

Justificación

Los principales socios comerciales de México (Estados Unidos, Canadá, Europa, etc.) cuentan con una regulación de sustancias químicas que se basa en la existencia de un registro nacional y un listado de sustancias químicas en comercio. Los Estados Unidos de Norte América, cuentan con un inventario de sustancias químicas, publicado inicialmente en 1979 que actualmente tiene registradas más de 84,000 sustancias. Este inventario está sustentado legalmente por la sección 8(b) del Toxic Substances Control Act (TSCA, por sus siglas en ingles), donde se confiere a la United States Environmental Protection Agency (USEPA, por sus siglas en ingles), la autoridad para compilar, actualizar y publicar la lista de toda sustancia química que sea manufacturada o procesada en dicho país (USEPA, 2010). Por su parte, Canadá cuenta con el inventario Domestic Substance List (DLS, por sus siglas en inglés) publicado por primera vez en 1994 y que está sustentado en el artículo 46 de la Ley de Protección Ambiental Canadiense. Cuenta con registro de 23,000 sustancias manufacturadas, importadas o utilizadas dentro del territorio a escala comercial (CEPA, 2010).

Por su parte la Unión Europea (UE) cuenta con diferentes listados, European Inventory of Existing Chemical Substances (EINECS, por sus siglas en ingles), European List of Notified Chemical Substances (ELINCS, por sus siglas en inglés) y No-Longer Polymers (NLP, por su siglas en inglés), la lista del EINECS, contiene las sustancias químicas en el mercado de la UE para el período del 1 de enero 1971 al 18 septiembre de 1981, este inventario fue creado por la Directiva 67/548/CEE, relativa al etiquetado de las sustancias peligrosas, e incluye 100,204 sustancias. Adicionalmente la ELINCS es un inventario de sustancias químicas posteriores a la conclusión del EINECS, este inventario incluye 5,292 sustancias en total. Dada la definición de un polímero en la UE, algunas sustancias que se consideran polímeros de acuerdo con las normas de información para EINECS ya no se considera como polímeros. Por lo tanto, estas sustancias se denominan "ex polímeros" NLP. Las listas EINECS, ELINCS y la NLP constituyen el inventario europeo de sustancias químicas en comercio (ESIS, 2012).

Para el caso de México, el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC) de la SEMARNAT, desde el 2009 ha trabajado en la elaboración del Inventario Nacional de Sustancias Químicas (INSQ), constituido inicialmente como un instrumento de información y conformado a partir de fuentes secundarias de información. Éste contiene datos sobre la identidad química, los volúmenes de producción e importación y datos ecotoxicológicos de las sustancias. Sin embargo, aunque los esfuerzos para integrar el inventario han sido importantes, el procedimiento que ha dado origen al INSQ se basa en fuentes de información existentes y no en un registro obligatorio, dicho inventario no refleja el universo completo de sustancias. Se estima que incorpora aproximadamente la tercera parte de las sustancias que se comercializan en el país (SEMARNAT, 2012).

La última actualización del INSQ fue publicada en el 2014, dado el tiempo que ha pasado es necesaria una actualización.

Objetivos

Objetivo general

Integrar los datos de identidad química de las 3,997 nuevas sustancias identificadas en la actualización 2018-2020 del Inventario Nacional de Sustancias Químicas (INSQ) para completar el Catálogo Nacional de Sustancias Químicas.

Objetivos específicos

1. Usar el motor de búsqueda Scifinder para homologar y ordenar la nomenclatura de las sustancias químicas
2. Validar la información obtenida con el Chemical Abstract Service (CAS) de la Asociación Química America.
3. Validar la información generada mediante una consulta directa con el CAS.

Alcance

- Este trabajo se desarrolló siguiendo lo establecido en el ACUERDO por el que se aprueban los Lineamientos para el uso del Catalogo Nacional de Sustancias Químicas, el cual establece que, para cada sustancia, se deberá considerar su identificación con número, nombre y fórmula homologada con ayuda de las bases de datos del Chemical Abstract Service (CAS).
- Los datos recabados en este trabajo corresponden a la identidad específica de las sustancias químicas que se producen y comercializan en el territorio nacional considerando los años 2018-2020.

Antecedentes.

A nivel mundial, para inicios de abril de 2022, se habían identificado alrededor de 194 000 000 de sustancias químicas y se calcula que aproximadamente 15 000 sustancias nuevas son incorporadas diariamente al registro del Chemical Abstract Service (CAS) de los Estados Unidos. Las sustancias químicas permiten controlar plagas, curar enfermedades, preservar alimentos, generar energía e intervienen en multitud de actividades productivas para la generación de bienes y servicios fundamentales para sostener la civilización tal como la conocemos. Sin embargo, estas sustancias pueden traer consigo también riesgos para la salud humana y el medio ambiente, muchas veces debido a su inadecuado manejo. Pueden alterar la productividad de los suelos, deteriorar la calidad de las fuentes de abastecimiento de agua y afectar la reproducción y el desarrollo de especies acuáticas y terrestres, además de que su manejo inapropiado puede ocasionar accidentes graves como explosiones, derrames e incendios (SEMARNAT, 2012; CAS, 2022).

Dadas las tendencias internacionales, la prevención en el uso y manejo de las sustancias químicas ha venido implementándose en la regulación de las principales economías, bajo la premisa de prevención de riesgos en lugar del enfoque correctivo que se tuvo desde los 70's y que aún se mantiene en países en desarrollo y economías en transición. En México, aún se mantiene un marco legal fragmentado y que se basa en listados de sustancias para actividades consideradas riesgosas. Sin embargo, las más recientes acciones del país están orientadas a mejorar el manejo de las sustancias químicas industriales mediante la elaboración de inventario nacionales de generación. En 2012 el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC) publicó el Inventario Nacional de Sustancias Químicas: base 2009 (INSQ base 2009). Dicha publicación fue el resultado de la revisión de datos oficiales que daban cuenta de la producción e importación de las sustancias químicas. Las principales fuentes utilizadas para su integración fueron la Cédula de Operación Anual (COA) y la base de datos del Sistema de Administración Tributaria (SAT), que por su disponibilidad y periodo de actualización resultaron las fuentes más completas. El INSQ base 2009 describe la identidad química de 5,852 sustancias, así como sus cantidades reportadas en la COA, en los pedimentos de

importación del SAT y en el programa de auditorías ambientales de la Procuraduría Federal para la Protección del Ambiente (PROFEPA). (INECC, 2014)

Del ejercicio anterior, se identificó que en muchos instrumentos se listan sustancias sin llevar un sistema unificado sobre la identidad de las sustancias, lo que trae como consecuencia que no se puedan articular los instrumentos existentes a lo largo el ciclo de vida de las sustancias. Por esto, se creó el Catálogo Nacional de Sustancias Químicas como un instrumento público de uso voluntario a través del cual se identifican las sustancias químicas y su nomenclatura, tomando como base el clasificador publicado por el CAS, el cual es un referente internacional para la designación de las sustancias químicas. El Catálogo consiste en una lista de sustancias que se producen o se importan al país y toma como base la información que brindan los productores o importadores de dichas sustancias.

El Catálogo deberá cumplir las siguientes funciones:

- Generar un lenguaje común sobre los distintos tipos de sustancias químicas
- Homologar y ordenar la nomenclatura de las sustancias químicas
- Proporcionar una base científica de referencia para la generación de información de interés nacional o aquella susceptible de serlo en materia de sustancias químicas
- Sustentar la generación de instrumentos orientados a prevenir riesgos y no solamente a manejarlos
- Apoyar en la generación de instrumentos que permitan conocer las sustancias químicas en comercio en el país
- Ser un referente que permita la correcta identificación de las sustancias evitando ambigüedades e imprecisiones
- Respalda medidas de control sobre el comercio de las sustancias

Se consideran como instrumentos relevantes en la generación del Catálogo lo siguiente:

- Norma Mexicana NMX-R-019-SCFI-2011, Sistema Armonizado de Clasificación y Comunicación de Peligros de los Productos Químicos
- Norma oficial Mexicana NOM-165-SEMARNAT-2013, que establece la lista de sustancias sujetas para el registro de emisiones y transferencia de contaminantes
- Norma Oficial Mexicana NOM-052-SEMARNAT-2005, que establece las características, el procedimiento de identificación, clasificación y los listados de los residuos peligrosos

La administración del Catalogo y sus contenidos estarán a cargo de la SEMARNAT, a través del INECC, quien será el responsable de tomar las medidas necesarias para el resguardo y la difusión de la información. El administrador podrá establecer convenios de colaboración con otras unidades e instituciones públicas y privadas para realizar el intercambio de información sobre sustancias químicas (DOF, 2018).

CAS herramienta de búsqueda

El CAS es una división de la Sociedad Química de Estados Unidos (ACS por sus siglas en inglés), y es la máxima autoridad en información sobre sustancias químicas, dando hoy en día a la comunidad científica acceso a los datos más recientes en el tema, a través de sistemas de consulta como el SciFinder. Aunque el CAS inició operaciones en 1907, fue hasta 1965 que se creó el número de registro CAS, que ha sido la referencia mundial para identificar cada sustancia química sin las ambigüedades de los nombres comunes, las diferentes nomenclaturas, posibles nombres sistemáticos, genéricos, propietarios o triviales (INECC,2014).

CAS en un principio era un servicio de resúmenes donde un equipo de personas voluntarias editaba y organizaba a tiempo completo, con el paso de los años esos voluntarios fueron remplazados por un equipo selecto por la CAS introduciendo computadoras para ayudar a procesar toda la información de manera más eficiente. El equipo en cuestión trabajaba con miles de revistas, resultados de investigaciones reportadas en artículos, patentes, simposios, libros, conferencias, actas y reportes técnicos cada año (CAS,2015).

El número CAS por sí mismo no tiene un significado químico, es un número consecutivo, pero se utiliza en muchas otras bases de datos públicas y privadas, así como listados de inventarios de varios países (INECC, 2014).

Un Número de Registro CAS es un identificador numérico que puede contener hasta 10 dígitos, divididos por guiones en tres partes (ejemplo 58-08-2). Se asigna un número de registro CAS a una sustancia cuando ingresa a la base de datos del registro CAS, los números se asignan en orden secuencial a las nuevas sustancias únicas identificadas por los científicos de CAS para su inclusión en la base de datos. (CAS, 2022)

El registro CAS contiene una amplia variedad de sustancias, incluida la colección más grande del mundo de:

- Compuestos orgánicos e inorgánicos
- Metales y aleaciones

- Minerales
- Compuestos de coordinación y organometálicos
- Elementos, isótopos y partículas nucleares
- Proteínas y ácidos nucleicos
- Polímeros
- Materiales no estructurables y de composición y biológicos desconocidos o variables (UVCBs)

De manera digital podemos encontrar esta información a través de su interface más conocida “SciFinder” mediante distintas opciones de búsqueda permite encontrar y filtrar publicaciones, sustancias y reacciones. Se caracteriza por ser una herramienta versátil y sencilla de utilizar para la consulta de diferentes tópicos o temas que se requieren para diferentes motivos relacionados a la investigación, los cuales están en constante actualización (UNAM, 2021).

SciFinder empezó como una plataforma de servicio al cliente que iba desde estructuras químicas hasta literatura relacionada al alcance de científicos que no tuvieran mucha experiencia con la búsqueda de información en línea (WUL, 2021).

SciFinder engloba las bases de datos asociadas a CAS como: CAPlus, CAS REGISTRY, CAS REACT, CHEMLIST, CHEMCATS, MARPAT y CIN (Figura 1).

CAS REGISTRY®
The authoritative source for chemical substance data
CAS REGISTRY is the standard source relied upon by scientists, manufacturers, regulators, and data scientists worldwide for accurate and complete information on chemical substances and biosequences. Containing chemical names, structures, CAS Registry Numbers®, properties, and a myriad of other data for more than 258 million registered substances, CAS REGISTRY is the hub of the CAS Content Collection.

CAS REFERENCES
Insights from over a century of published scientific literature
The CAS reference collection aggregates and connects scientific knowledge from thousands of journals and other sources published globally in more than 50 languages dating back to the early 1800s.

CAS PATENTS
Accessible invention details from global intellectual property
CAS patent data covers key invention details from applications published by 64 global patent authorities. This scientist-curated resource makes complex aspects of patent documents including chemical substances, biosequences, Markush structures, claims, and classification codes searchable and accessible.

CAS REACTIONS
Synthetic details to inform planning and process optimization
The CAS reaction collection is the most trusted source for detailed and dependable synthetic, organic reaction data. Detailed substance roles, reaction conditions, yields, and catalysts for more than 139 million single- and multi-step reactions provide insight that empowers efficient synthesis planning and scale-up.

CAS COMMERCIAL SOURCES
Up-to-date Supplier Catalog Listings for Commercially Available Chemicals
CAS Commercial Sources connects researchers with chemical suppliers by providing an aggregated source of current global chemical catalog data including quantities, prices, and supplier contact information to simplify chemical sourcing and expedite research.

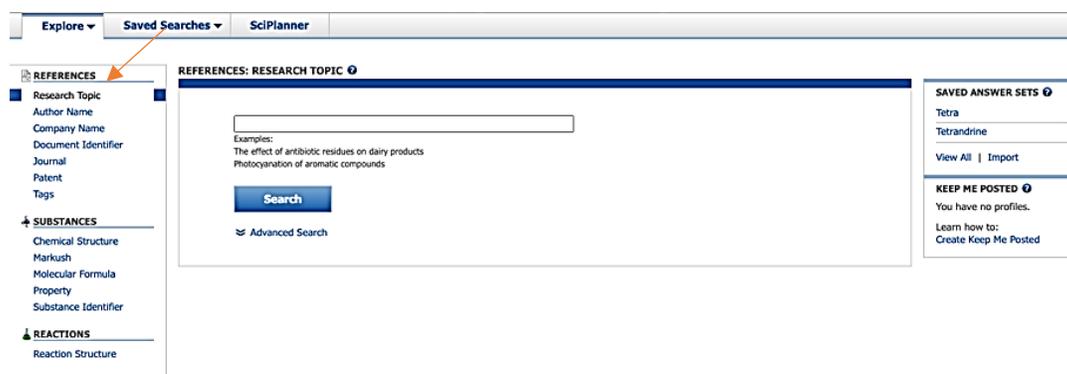
CAS FORMULATIONS
The Largest Consolidated Collection of Formulations Details
A unique collection of detailed information on formulations sourced from journals, patents, and product inserts, CAS Formulations provides the critical information researchers, formulators, and IP professionals need to get safe and effective products to market faster.

Figura 1. Diferentes bases de datos integrados al CAS, recuperado de <https://www.cas.org/cas-data>

Además de buscar y localizar información, SciFinder incluye activar notificaciones con el tema de interés mediante el correo electrónico registrado en la sesión, grupos de registros nuevos, almacena información de los registros de referencias en pdf para posteriormente exportar una lista en formato “.ris” para su uso en gestores de bibliografía, compartir búsquedas, contiene un planificador para la organización de los resultados de búsqueda y relaciona registros de otras referencias ya citadas en publicaciones.

Entre sus funciones más utilizadas se encuentra la extracción de textos de un tema en específico, búsqueda de reacciones y sustancias.

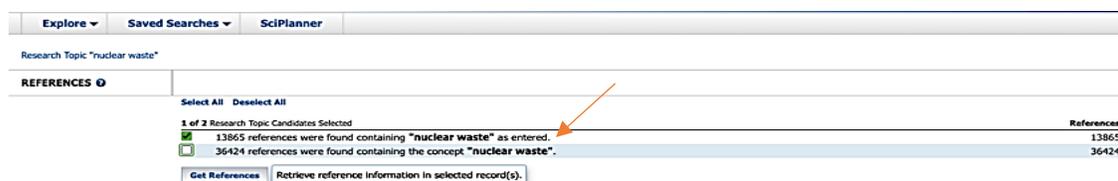
Empezando por la parte de búsqueda ingresamos a la interfase mediante una sesión personal donde podremos filtrar información mediante un tema de interés, desglosándolo en palabras clave para mejorar la búsqueda. Además de establecer búsquedas por autor se podrá hacer consultas mediante el nombre de las compañías que realizan investigaciones, números de identificación de documentos, revistas, patentes, o incluso buscar información relacionada previamente seleccionada y almacenada en el sistema por el usuario. En cada una de las opciones de búsqueda anteriormente mencionadas se podrá intercambiar según se necesite en el menú del lado izquierdo de la ventana (Figura 2).



Contact Us | Legal
Copyright © 2021 American Chemical Society. All Rights Reserved. | 京ICP备13047075号-3

Figura 2. Buscador de referencias, recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

Se introduce el tema de interés en la barra de búsqueda y presionamos en “Search”, se encontrará los documentos que contengan las palabras que introducimos en el buscador y el tema al cual se podría relacionar (Figura 3).



The screenshot shows the SciFinder interface with the search topic "nuclear waste". Under the "REFERENCES" section, there are two search results:

	References
<input checked="" type="checkbox"/> 13865 references were found containing "nuclear waste" as entered.	13865
<input type="checkbox"/> 36424 references were found containing the concept "nuclear waste".	36424

Buttons at the bottom include "Get References" and "Retrieve reference information in selected record(s)".

Contact Us | Legal
Copyright © 2021 American Chemical Society. All Rights Reserved. | 京ICP备13047075号-3

Figura 3. Referencias totales encontradas, recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

Finalmente se selecciona de la lista la referencia que necesitamos, la cual se podrá ordenar de distintas formas como:

- Número de acceso
- Autor
- Número de referencias citadas
- Año de publicación
- Orden alfabético

Para buscar compuestos en la base de datos CAS REGISTRY a través de SciFinder se utiliza el buscador mediante su estructura química, estructura de Markush, fórmula molecular, por sus propiedades experimentales y teóricas o por su número de identificación. De esta búsqueda podremos obtener información acerca del compuesto de interés o estructuras relacionada como: propiedades físicas y químicas, espectros, información de regulación en distintos países y su papel en diferentes referencias (Figura 4).

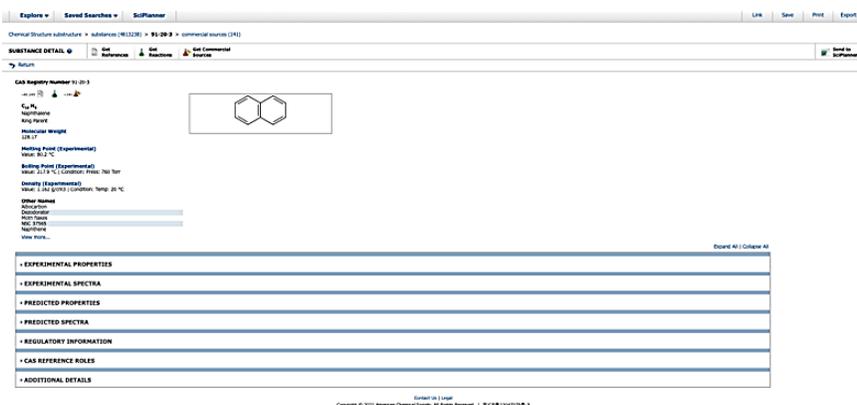


Figura 4. Información de la sustancia, recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

Para la búsqueda de reacciones, se pueden dibujar mediante un programa integrado (Figura 5) y seleccionar si se quiere tener un resultado similar o igual al que se presenta en la ventana. Podemos elegir el tipo de disolvente, grupos funcionales, número de pasos y clasificaciones como; reacciones de biotransformación, catalizadas y no catalizadas, quimiselectivas, electroquímicas, en fase gaseosa, fotoquímicas, radioquímicas, regioselectivas o estereoselectivas, además de seleccionar el tipo de fuente donde se extraerá la información de la reacción ya sea de una patente o de una referencia diferente.

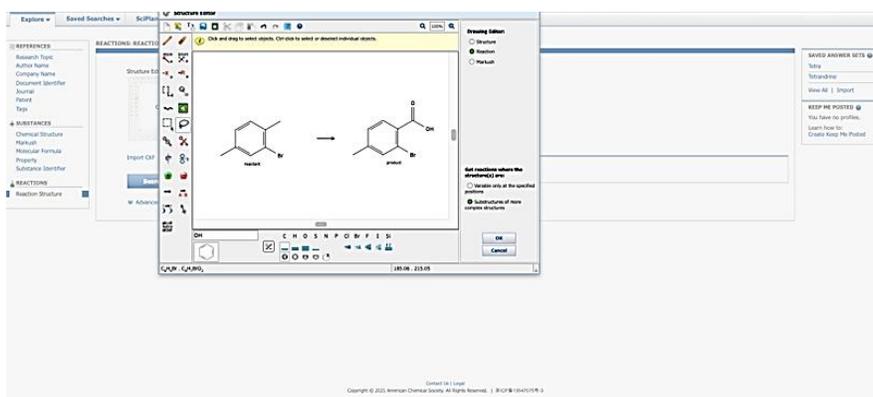


Figura 5. Ejemplo de búsqueda de reacción, recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

Los resultados de la búsqueda de reacciones se podrán ordenar en base a su procedimiento experimental, métodos de síntesis, números de pasos, rendimientos y el año en que se publicó (Figura 6). Además, podremos tener acceso al documento donde describen la información y permite buscar reacciones similares.

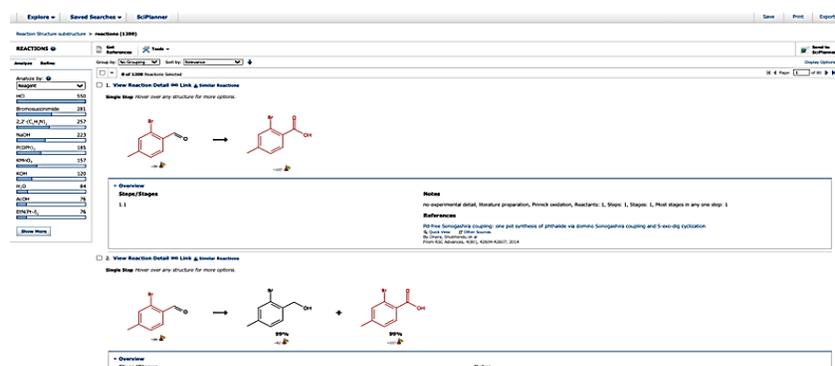


Figura 6. Reacciones encontradas por el buscador, recuperado de

<https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

En esta interfase también podemos acceder a la base de datos de patentes registradas en CAS para la búsqueda de información en estos textos. A partir del menú derecho “References” y dando clic a la opción “Patent” donde se abrirá un menú de búsqueda por número de patente, tema, nombre del inventor y año de publicación (Figura 7).

Figura 7. Menú “Patent”, recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

SciFinder está en constante actualización produciendo nuevas herramientas para mejorar la búsqueda de información en las diferentes bases de datos como: la implementación de un software que ayuda al usuario a dibujar estructuras y reacciones para realizar búsquedas más rápidas y sencillas. Recientemente una nueva plataforma llamada SciFinder N que a diferencia de la versión normal de la interfaz esta utiliza inteligencia artificial y es operada bajo la red semántica de la American Chemical Society (UNAM, 2021).

Actualmente SciFinder puede ser utilizado por personas que paguen por este servicio, estudiantes matriculados con permisos necesarios, profesorado y personal actualmente designados.

Metodología

El primer paso para el desarrollo del trabajo fue el acercamiento con el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC), organismo que publicó en 2009 el primer Inventario Nacional de Sustancias Químicas (INSQ), el cual es la fuente de información base para nuestro objetivo y que fue conformado inicialmente a partir de la consulta de las fuentes de información nacionales y complementando la revisión con las cantidades importadas o producidas en el país.

El INSQ base 2009 describió la identidad química de 5,582 sustancias, así como sus cantidades reportadas en la Cédula de Operación Anual (COA), en los pedimentos de importación del Sistema de Administración Tributaria (SAT) y en el programa de auditorías ambientales de la Procuraduría Federal para la Protección del Ambiente (PROFEPA). La última actualización para el año de 2013 pudo identificar un total de 9,489, por lo que fue necesario complementar identidad química de las 3,907 nuevas sustancias, considerando el número CAS, nombre de acuerdo con la nomenclatura CAS, fórmula condensada, nombres comunes, sinónimos y nombres comerciales.

Se revisarán registros derivados de las últimas actualizaciones del Inventario Nacional de Sustancias Químicas hasta 2020.

La metodología seguida en este trabajo se describe en el siguiente diagrama (Figura 8), el cual se explicará con detalle a continuación.

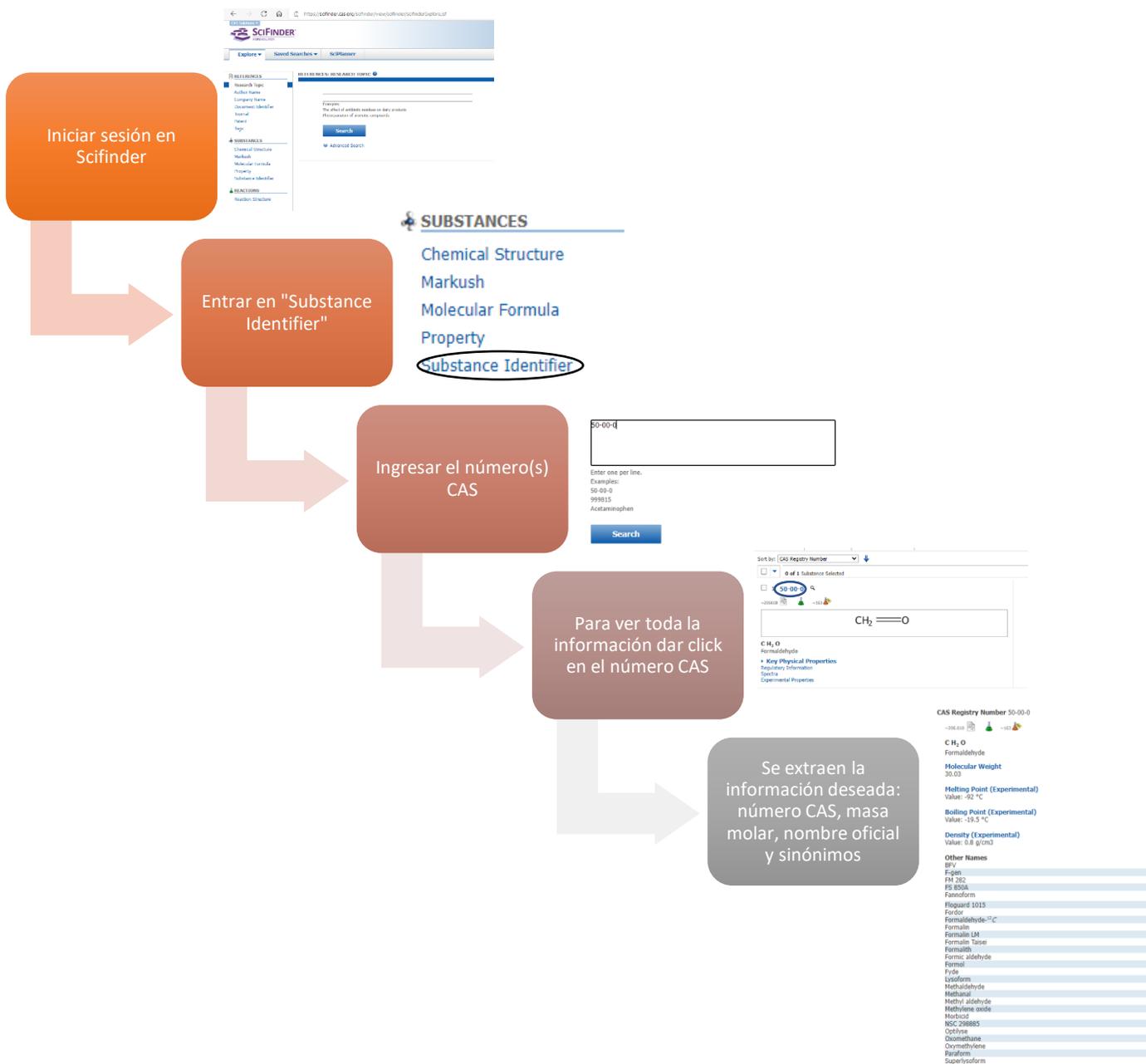


Figura 8. Metodología usada en la extracción de información de Scifinder

Al ingresar a la plataforma de Scifinder se abre una pantalla como se puede ver en la Figura 9, debemos acceder a la opción “Substance Identifier”.

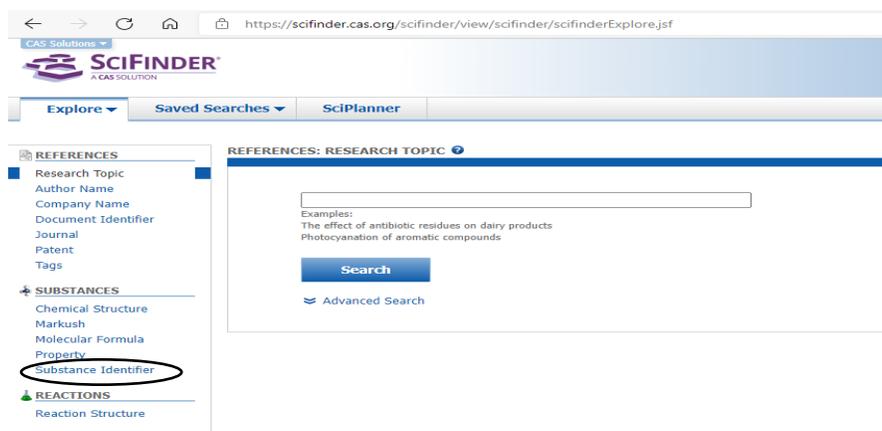


Figura 9. Pantalla de inicio Scifinder, recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

Como siguiente paso, en la pantalla de Substance Identifier se introducen los números CAS que se desean investigar (Figura 10), teniendo un máximo de 20 números CAS cada uno en una línea diferente, para proceder con la búsqueda se debe dar click en Search.

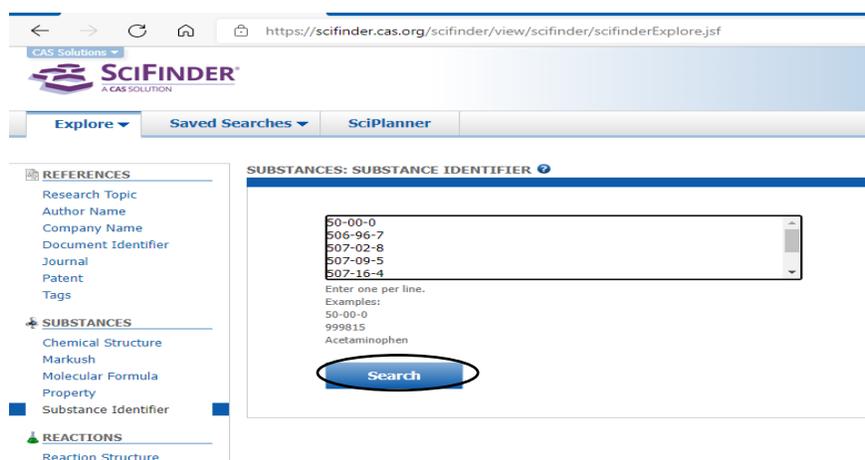


Figura 10. Pantalla de búsqueda de números CAS. recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

Los números CAS fueron verificados con la base de datos del inventario europeo de sustancias químicas de la página ECHA (European Chemical Agency)(Figura 11).

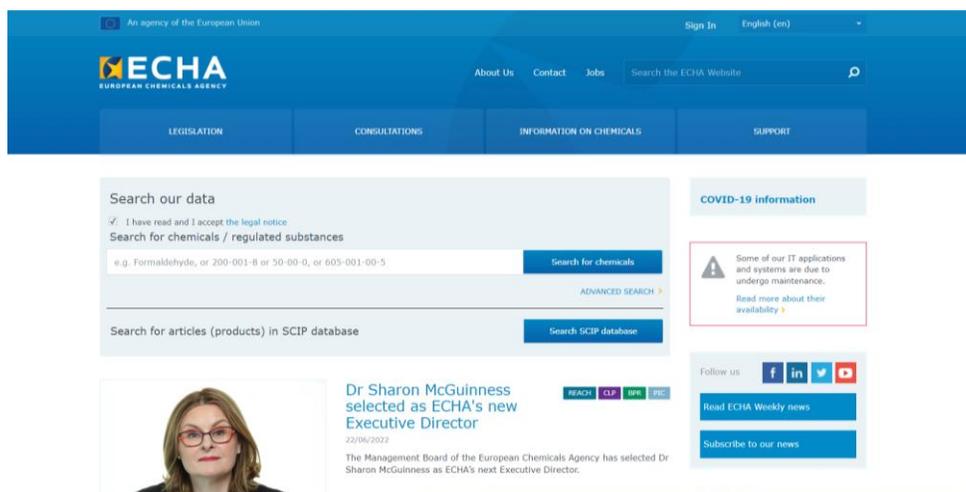


Figura 11. Página principal de ECHA, recuperado <https://echa.europa.eu/es/information-on-chemicals/registered-substances>

En la siguiente pantalla (Figura 12) se puede consultar información rápida de varios compuestos como es el número CAS, fórmula estructural condensada y nombre, para poder acceder a la información completa del compuesto es necesario dar click al número CAS del que se desea la información.

Figura 12. Pantalla de resultados de búsqueda por número CAS, recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

En la Figura 13 se puede ver el despliegado de la información al dar click en el número CAS, es en esta parte donde obtenemos la información que se busca sobre la identidad de la sustancia química: nombre, sinónimos y fórmula condensada.

The screenshot shows the SciFinder interface for the CAS number 50-00-0. The information is circled in black. The details include:

- CAS Registry Number 50-00-0
- Molecular Weight 30.03
- Melting Point (Experimental) Value: -92 °C
- Boiling Point (Experimental) Value: -19.5 °C
- Density (Experimental) Value: 0.8 g/cm3
- Other Names: FV, Fap, FH 202, F3 020A, Famaform, Fopquad 3025, Fomdal, Fomaldelhyde 11C, Formalin, Formalin LM, Formalin Taste, Fomaldel, Fomic aldehyde, Fomal, Fude, Laldelorm, Methaldelhyde, Methald, Methyl aldehyde, Methylene oxide, Methoid, MCC 00665, Optlyse, Optlyse, Superlyse.

Figura 13. Información extendida del compuesto, recuperado de <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>

Por último, como se puede ver en la Figura 14, la información extraída se almacena en una hoja de Excel, siguiendo el siguiente orden:

- Número CAS
- Fórmula condensada
- Nombre en inglés
- Nombre en español
- Sinónimos en español

	A	B	C	D	E
1	83-18-1				
2	C13H13NO				
3	1H- Pyrrole- 3- carboxaldehyde, 2, 5- dimethyl- 1- phenyl-				
4	1H- Pirrol- 3- carboxaldehido, 2, 5- dimetil- 1- fenil-				
5	Pirrol-3-carboxaldehido, 2,5-dimetil-1-fenil- (6CI, 8CI)				
6	2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol-3-carboxaldehido				
7	2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol-3-carbaldehido				
8	2,5-dimetil-1-fenilpirrol-3-carbaldehido				
9	2,5-dimetil-1-fenilpirrol-3-carboxaldehido				
10	3-formil-2,5-dimetil-1-fenilpirrol				
11	NSC 68230				
12					
13					
14					

Figura 14 Ejemplo de información extraída en Excel

La etapa final de la metodología es la validación de la identidad química de las 3,907 sustancias directamente por el CAS, la cual se realizó a través del INECC.

Posteriormente, esta información podría ser publicada en la Actualización del Catálogo Nacional de Sustancias Químicas del INEGI con la finalidad de que sea utilizada como referencia para el llenado de pedimentos aduanales, como para los diferentes instrumentos normativos que utilizan información de sustancias químicas.

Resultados

En el capítulo anterior, se ha descrito la metodología empleada para la búsqueda de los datos de la identidad química.

Como primera actividad para la revisión de la identidad química de las 3,997 nuevas sustancias, se tomó como base la lista de sustancias del INSQ proporcionado por el INECC, la lista inicial contenía 5,028 nombres químicos sin repetir (dando un total de 9,020) y la cual fue obtenida a través de la revisión de la legislación vigente de 14 ordenamientos aplicados por 6 dependencias gubernamentales, en el cuadro 1 se resumen los ordenamientos considerados.

Cuadro 1. Dependencias y ordenamientos base para el listado inicial de sustancias químicas

Dependencia	Fuente de la información	Sustancias Reguladas*
Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (381 sustancias)	<ul style="list-style-type: none">Reglamento de la Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente en Materia de Registro de Emisiones y Transferencia de Contaminantes	104
	<ul style="list-style-type: none">PROY-NOM-000-SEMARNAT-2007. Listado de actividades altamente riesgosas y criterios de clasificación.	277
Secretaría de Salud (1,813 sustancias)	<ul style="list-style-type: none">Primer listado de sustancias tóxicas de acuerdo al artículo 278, Fracción III de la Ley General de Salud, publicado por la Secretaría de Salud. Gaceta Sanitaria No. 2, octubre de 1987.	847
	<ul style="list-style-type: none">Segundo listado de sustancias tóxicas de acuerdo al artículo 278, Fracción III de la Ley General de Salud, publicado por la Secretaría de Salud. Gaceta Sanitaria No. 4, octubre de 1987.	355
	<ul style="list-style-type: none">Catálogo de plaguicidas, Cicoplafest, 2004.	427
	<ul style="list-style-type: none">Acuerdo que establece la clasificación y codificación de mercancías cuya importación y exportación está sujeta a regulación por parte de las dependencias que integran la CICOPLAFFEST, Diario Oficial de la Federación, 29 de marzo del 2002.	184
Secretaría de Hacienda y Crédito Público (Dirección de Aduanas)	<ul style="list-style-type: none">Catálogo de Combustibles minerales, aceites minerales y productos de su destilación, materias bituminosas, ceras minerales, de las Fracciones Arancelarias.	58

(197 sustancias)	<ul style="list-style-type: none"> Reglas de carácter general en materia de comercio exterior para 2007, Anexo 23 mercancías peligrosas o que requieran instalaciones y/o equipos especiales para su muestreo, DOF 27 de abril 2007. 	139
Secretaría de Gobernación (486 sustancias)	<ul style="list-style-type: none"> Ley Federal para el control de precursores químicos, productos químicos esenciales y máquinas para elaborar cápsulas, tabletas y/o comprimidos, Presidencia de la República, DOF 26 de diciembre 1997. 	24
	<ul style="list-style-type: none"> Listado de sustancias con mayor número de accidentes. Fuente: Protección Civil. 	444
Secretaría del Trabajo y Previsión Social (1,694 sustancias)	<ul style="list-style-type: none"> NOM-010-STPS-1999 Condiciones de seguridad e higiene en los centros de trabajo donde se manejen, transporten, procesen o almacenen sustancias químicas capaces de generar contaminación en el medio ambiente laboral. Diario Oficial de la Federación, 26 de febrero del 2001. 	595
	<ul style="list-style-type: none"> NOM-018-STPS-2000 Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas peligrosas en los centros de trabajo. 	931
	<ul style="list-style-type: none"> NOM-028-STPS-2004 Organización del trabajo-Seguridad en los procesos de sustancias químicas. 	168
Secretaría de Comunicaciones y Transporte (2,050 sustancias)	<ul style="list-style-type: none"> NOM-002/SCT2-2003. Listado de las sustancias y materiales peligrosos más usualmente transportados. Diario Oficial de la Federación, 03 de diciembre del 2003. 	2050

* Dentro de estas listas proporcionadas por las diferentes dependencias, se encuentran registros idénticos entre ellas, de tal manera que solo se tomaron en cuenta aquellas sustancias sin repetirse.

a) Listado de sustancias a revisar

De acuerdo a la información obtenida de las sustancias químicas listadas en las versiones anteriores de los inventarios nacionales de sustancias químicas, se procedió a completar la identidad química de las sustancias.

A continuación, en el cuadro 2 se muestra un resumen que contiene solamente los números CAS, esto como primera parte de la búsqueda para completar la identidad química de las sustancias.

Por efectos de espacio solamente se muestran los primeros 456 números CAS resultantes de la búsqueda.

Cuadro 2. Extracto de números CAS resultantes de la búsqueda

Número	No. CAS	Número	No. CAS	Número	No. CAS
1	50-00-0	153	51-43-4	305	54-71-7
2	50-01-1	154	51-52-5	306	54-85-3
3	50-02-2	155	51-61-6	307	55-03-8
4	50-03-3	156	51-63-8	308	55-18-5
5	50-06-6	157	51-64-9	309	55-38-9
6	50-07-7	158	51-65-0	310	55-55-0
7	50-14-6	159	51-66-1	311	55-56-1
8	50-18-0	160	51-74-1	312	55-63-0
9	50-21-5	161	51-75-2	313	55-68-5
10	50-23-7	162	51-77-4	314	55-86-7
11	50-27-1	163	51-78-5	315	55-91-4
12	50-28-2	164	51-79-6	316	56-04-2
13	50-29-3	165	51-80-9	317	56-06-4
14	50-32-8	166	51-82-1	318	56-12-2
15	50-33-9	167	51-83-2	319	56-18-8
16	50-34-0	168	52-01-7	320	56-23-5
17	50-36-2	169	52-28-8	321	56-29-1

Número	No. CAS	Número	No. CAS	Número	No. CAS
18	50-45-3	170	52-31-3	322	56-35-9
19	50-48-6	171	52-49-3	323	56-38-2
20	50-50-0	172	52-51-7	324	56-40-6
21	50-54-4	173	52-53-9	325	56-41-7
22	50-55-5	174	52-67-5	326	56-45-1
23	50-56-6	175	52-68-6	327	56-49-5
24	50-63-5	176	52-76-6	328	56-53-1
25	50-69-1	177	52-85-7	329	56-69-9
26	50-70-4	178	52-86-8	330	56-72-4
27	50-76-0	179	53-06-5	331	56-75-7
28	50-78-2	180	53-16-7	332	56-81-5
29	50-81-7	181	53-21-4	333	56-84-8
30	50-98-6	182	53-36-1	334	56-85-9
31	50-99-7	183	53-39-4	335	56-86-0
32	51-03-6	184	53-70-3	336	56-87-1
33	51-05-8	185	53-86-1	337	57-03-4
34	51-21-8	186	53-96-3	338	57-06-7
35	51-28-5	187	54-11-5	339	57-09-0
36	51-34-3	188	54-12-6	340	57-10-3
37	51-35-4	189	54-31-9	341	57-11-4
38	51-42-3	190	54-64-8	342	57-12-5
39	57-13-6	191	58-73-1	343	60-34-4
40	57-14-7	192	58-85-5	344	60-35-5
41	57-24-9	193	58-86-6	345	60-41-3
42	57-27-2	194	58-89-9	346	60-51-5
43	57-41-0	195	58-90-2	347	60-56-0
44	57-44-3	196	58-93-5	348	60-57-1
45	57-48-7	197	58-95-7	349	60-80-0
46	57-50-1	198	58-96-8	350	60-81-1

Número	No. CAS	Número	No. CAS	Número	No. CAS
47	57-53-4	199	58-97-9	351	61-19-8
48	57-55-6	200	59-01-8	352	61-25-6
49	57-57-8	201	59-02-9	353	61-33-6
50	57-63-6	202	59-05-2	354	61-54-1
51	57-66-9	203	59-14-3	355	61-68-7
52	57-67-0	204	59-23-4	356	61-73-4
53	57-68-1	205	59-30-3	357	61-76-7
54	57-71-6	206	59-33-6	358	61-82-5
55	57-74-9	207	59-42-7	359	61-90-5
56	57-85-2	208	59-43-8	360	62-23-7
57	57-92-1	209	59-47-2	361	62-31-7
58	57-97-6	210	59-50-7	362	62-33-9
59	58-08-2	211	59-51-8	363	62-38-4
60	58-15-1	212	59-61-0	364	62-49-7
61	58-18-4	213	59-63-2	365	62-50-0
62	58-25-3	214	59-66-5	366	62-53-3
63	58-27-5	215	59-67-6	367	62-54-4
64	58-32-2	216	59-87-0	368	62-55-5
65	58-39-9	217	59-88-1	369	62-56-6
66	58-40-2	218	59-92-7	370	62-73-7
67	58-46-8	219	60-00-4	371	62-74-8
68	58-55-9	220	60-01-5	372	62-75-9
69	58-56-0	221	60-09-3	373	62-76-0
70	58-60-6	222	60-10-6	374	63-05-8
71	58-61-7	223	60-11-7	375	63-25-2
72	58-63-9	224	60-12-8	376	63-42-3
73	58-64-0	225	60-24-2	377	63-68-3
74	58-68-4	226	60-27-5	378	63-74-1
75	58-71-9	227	60-29-7	379	63-84-3

Número	No. CAS	Número	No. CAS	Número	No. CAS
76	58-72-0	228	60-33-3	380	64-00-6
77	64-02-8	229	68-04-2	381	72-48-0
78	64-04-0	230	68-11-1	382	72-54-8
79	64-17-5	231	68-12-2	383	72-57-1
80	64-18-6	232	68-19-9	384	72-69-5
81	64-19-7	233	68-26-8	385	73-22-3
82	64-43-7	234	68-35-9	386	73-24-5
83	64-67-5	235	68-89-3	387	73-31-4
84	64-75-5	236	69-53-4	388	73-32-5
85	64-77-7	237	69-57-8	389	73-40-5
86	64-86-8	238	69-65-8	390	73-48-3
87	64-95-9	239	69-72-7	391	73-63-2
88	65-23-6	240	69-74-9	392	73-78-9
89	65-30-5	241	70-11-1	393	74-11-3
90	65-31-6	242	70-18-8	394	74-55-5
91	65-71-4	243	70-25-7	395	74-79-3
92	65-85-0	244	70-30-4	396	74-82-8
93	66-22-8	245	70-55-3	397	74-83-9
94	66-25-1	246	70-69-9	398	74-84-0
95	66-27-3	247	71-00-1	399	74-85-1
96	66-71-7	248	71-23-8	400	74-86-2
97	66-75-1	249	71-27-2	401	74-87-3
98	66-77-3	250	71-36-3	402	74-88-4
99	66-84-2	251	71-41-0	403	74-89-5
100	67-03-8	252	71-43-2	404	74-90-8
101	67-20-9	253	71-48-7	405	74-93-1
102	67-43-6	254	71-52-3	406	74-95-3
103	67-45-8	255	71-55-6	407	74-96-4
104	67-48-1	256	71-58-9	408	74-97-5

Número	No. CAS	Número	No. CAS	Número	No. CAS
105	67-52-7	257	71-63-6	409	74-98-6
106	67-56-1	258	71-73-8	410	74-99-7
107	67-63-0	259	71-78-3	411	75-00-3
108	67-64-1	260	72-17-3	412	75-01-4
109	67-66-3	261	72-18-4	413	75-02-5
110	67-68-5	262	72-19-5	414	75-04-7
111	67-71-0	263	72-20-8	415	75-05-8
112	67-72-1	264	72-33-3	416	75-07-0
113	67-92-5	265	72-43-5	417	75-08-1
114	67-97-0	266	72-44-6	418	75-09-2
115	75-10-5	267	75-69-4	419	76-60-8
116	75-12-7	268	75-71-8	420	76-93-7
117	75-15-0	269	75-72-9	421	76-99-3
118	75-16-1	270	75-73-0	422	77-02-1
119	75-18-3	271	75-74-1	423	77-06-5
120	75-19-4	272	75-75-2	424	77-08-7
121	75-20-7	273	75-76-3	425	77-09-8
122	75-21-8	274	75-77-4	426	77-10-1
123	75-25-2	275	75-78-5	427	77-19-0
124	75-27-4	276	75-79-6	428	77-21-4
125	75-28-5	277	75-83-2	429	77-26-9
126	75-29-6	278	75-85-4	430	77-36-1
127	75-31-0	279	75-86-5	431	77-38-3
128	75-33-2	280	75-87-6	432	77-47-4
129	75-34-3	281	75-88-7	433	77-48-5
130	75-35-4	282	75-89-8	434	77-54-3
131	75-36-5	283	75-91-2	435	77-58-7
132	75-37-6	284	75-94-5	436	77-62-3
133	75-38-7	285	75-98-9	437	77-65-6

Número	No. CAS	Número	No. CAS	Número	No. CAS
134	75-43-4	286	75-99-0	438	77-66-7
135	75-44-5	287	76-01-7	439	77-71-4
136	75-45-6	288	76-02-8	440	77-73-6
137	75-46-7	289	76-03-9	441	77-78-1
138	75-47-8	290	76-05-1	442	77-83-8
139	75-50-3	291	76-06-2	443	77-86-1
140	75-52-5	292	76-11-9	444	77-90-7
141	75-54-7	293	76-12-0	445	77-92-9
142	75-55-8	294	76-13-1	446	77-93-0
143	75-56-9	295	76-14-2	447	77-95-2
144	75-57-0	296	76-15-3	448	77-98-5
145	75-59-2	297	76-16-4	449	77-99-6
146	75-60-5	298	76-19-7	450	78-00-2
147	75-61-6	299	76-22-2	451	78-10-4
148	75-63-8	300	76-37-9	452	78-11-5
149	75-64-9	301	76-42-6	453	78-27-3
150	75-65-0	302	76-44-8	454	78-30-8
151	75-66-1	303	76-54-0	455	78-34-2
152	75-68-3	304	76-59-5	456	78-35-3

b) Sistematización e integración de datos

Una vez que se identificaron los números CAS se procedió a extraer la información para completar la identidad química de las sustancias, en el cual se incluye número CAS, fórmula química condensada, nombre CAS (inglés y español) y otros nombres (sinónimos).

Para efectos prácticos y de acuerdo a la recomendación del INECC se generó una base de datos en Excel que incluye los 3,997 registros.

A continuación, en el cuadro 3 se muestra un resumen de la integración de datos, el listado completo se puede consultar en <https://goo.su/Zrc71JV> donde se incluye el archivo completo con la sistematización e integración de datos.

Cuadro 3. Muestra de sistematización e integración de datos

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
50-00-0	CH2O	Formaldehyde	Formaldehido	BFV; F-gen; FM 282; FS 850A; Fannoform; Floguard 1015; Fordor; Formaldehido-12C; Formalina; Formalina LM; Formalina Taisei; Formalito; Aldehido formico; Formol; Fyde; Lysoform; Methaldehyde; Metanal; Aldehido de metilo; oxido de metileno; Morbicida; NSC 298885; Optilyse; Oxometano; Oximetileno; Paraform; Superlysoform;
50-01-1	CH5N3.CIH	Guanidine, hydrochloride (1:1)	Guanidina, clorhidrato (1: 1)	Guanidina, monoclóhidrato (8Cl, 9Cl); Tampon AL; Cloruro de guanidina; Clorhidrato de guanidina; Cloruro de guanidinio; Clorhidrato de guanidinio;
50-02-2	C22H29FO5	Pregna-1,4-diene-3,20-dione, 9-fluoro-11,17,21-trihydroxy-16-methyl-, (11b,16a)-	Pregna-1,4-dieno-3,20-diona, 9-fluoro-11,17,21-trihidroxi-16-metil-, (11b,16a)-	Pregna-1,4-dieno-3,20-diona, 9-fluoro-11b, 17,21-trihidroxi-16a-metil- (6Cl, 8Cl); (11b, 16a) -9-Fluoro-11,17,21-trihidroxi-16-metilpregna-1,4-dieno-3,20-diona; 1-deshidro-16a-metil-9a-fluorohidrocortisona; 16a-Metil-9a-fluoro-1,4-pregnadieno-11b, 17a, 21-triol-3,20-diona; 16a-Metil-9a-fluoro-11b, 17a, 21-trihidroxipregna-1,4-dieno-3,20-diona; 16a-Metil-9a-fluoro-D1-hidrocortisona; 16a-Metil-9a-fluoroprednisolona; 9-fluoro-11b, 17,21-trihidroxi-16a-metilpregna-1,4-dieno-3,20-diona; 9a-Fluoro-11b, 17a, 21-trihidroxi-16a-metil-1,4-pregnadieno-3,20-diona; 9a-Fluoro-16a-metil-1,4-pregnadieno-11b, 17a, 21-triol-3,20-diona; 9a-Fluoro-16a-metil-11b, 17,21-trihidroxipregna-1,4-dieno-3,20-diona; 9a-fluoro-16a-metilprednisolona; Adexone; Aeroseb-Dex; Aftasolon; Aftasolona; Azium; Calonat; Corsona; Cortisumman; DEX; Decacort; Decadermo; Decadron; Decadron A; Decalix; Decasone; Dekacort; Dekort; Delipos; Deltafluorene; Dergramin; Deronil; Desadreno; Desameton; Deseronil; DEXA-Cortidelt; DEXA-Mamallet; DEXA-Scheroson; DEXA-seno; Dexacort; Dexacortal; Dexacortina; Dexadeltona; Dexafarma; Dexalona; Dexaltin; Dexamet; Dexametasona; Alcohol dexametasona; Dexamonozon; Dexapolcort; Dexapos; Dexaprol; Dexaratiopharm; Dexason; Dexasona; Dexaven; Dexinoral; Dexium; Dexmethsone; DEXone; Dexonio; Dextelan; Dinormon; Diodex; Etacortilen; Fluormetilprednisolona; Fluormona; Fluorocort; Gammacorten; Gentilipos; HL-Dex; Hexadecadrol; Hexadrol; Isopto-Dex;

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
				Lokalison F; Loverine; Luxazone; MK 125; Maxidex; Millicorten; Minidex; NSC 34521; Neofordex; Oftan; Oradexon; Ozurdex; Pet-Derm III; Posurdex; Prednisolon F; Prednisolona F; Superprednol; Surodex; Visumetazona;
50-03-3	C23H32O6	Pregn-4-ene-3,20-dione, 21-(acetyloxy)-11,17-dihydroxy-, (11b)-	Pregn-4-ene-3,20-diona, 21-(acetiloxi)- 11,17-dihidroxi-, (11b) -	Acetato de cortisol (6Cl); Cortisol, 21-acetato (7Cl, 8Cl); (11b) -21-(acetiloxi) -11,17-dihidroxi-pregn-4-eno-3,20-diona; 11b, 17a, 21-Trihidroxipregn-4-eno-3,20-diona 21-acetato; 17-hidroxicorticosterona 21-acetato; Acetato de 17a-hidroxicorticosterona; 21-Acetoxi-11b, 17-dihidroxi-pregn-4-en-3,20-diona; 21-Acetoxi-11b, 17-dihidroxi-pregn-4-eno-3,20-diona; 21-Acetoxi-11b, 17a-dihidroxi-pregn-4-eno-3,20-diona; 4-pregnen-11b, 17,21-triol-3,20-diona 21-acetato; Abbcort; Anusol HC; Bambicort; Berlison F; Biocortar; CaldeCort; Quimioterapia; Colifoam; Colofoam; Cordes; Cortacream; Cortaid; Acetato de cortef; Cortell; Corticaina; Cortifoam; Acetato de cortril; Acetato de cortril AS; Efcolin; DECIR AH; Hc 45; Acetato de hipotole; Hydrin 2; Hydrocal; Acetato de hidrocorte; Hidrocortisat; 21-acetato de hidrocortisona; Acetato de hidrocortisona; Hidrocortistab; Acetato de hidrocortona; Acetato de hidroxicorticosterona; Isopto-hidrocortisona; Lanacort; Lenirit; NSC 741; Pabracort; Proctocort; Sigmacort; Sintotrat; Velopural; Wycort
50-06-6	C12 H12 N2 O3	2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-phenyl-	2,4,6 (1H, 3H, 5H)-pirimidinatriona, 5-etil-5-fenil -	Ácido Barbitúrico, 5-etil-5-fenil- (8Cl); 5-Etil-5-fenil-2,4,6(1H,3H,5H)-pirimidinatriona; 5-Etil-5-fenil-1,3-diazinane-2,4,6-triona; Ácido 5-Etil-5-fenilbarbitúrico; Ácido 5-fenil-5-etilbarbitúrico; Adonal; Agripnal; Amilofeno; Barbenil; Barbifenil; Barbipil; Barbita; Barbivis; Blu-fen; Cratecil; Dormiral; Doscalun; Duneril; Eskabarb; Etilfen; Euneril; Fenemal; Fenemal recip; Gardenal; Gardepanil; Histeps; Lepinal; Lepinaletten; Liquital; Lixofen; Lubergal; Luminal; Luminalum; NSC 128143; NSC 9848; Neurobarb; Noptil; Nunol; fenaemal; fenemal; fenobar; fenobarbital; fenobarbitona; Ácido fenobarbitúrico; fenolúrico; fenonil; Ácido feniletilbarbitúrico; feniletilmalonilurea; feniral; fob; Sedonal; Sedofen; Sevenal; Solfoton; Somonal; Stental Extentabs; Talfeno; Teolaxin; Trifenatol; Versomnal
50-07-7	C15H18N4O5	Azirino[2',3':3,4]pírrolo[1,2-a]indole-4,7-dione, 6-amino-8-[[aminocarbonil]oxi]metil]-1,1a,2,8,8a,8b-hexahidro-8a-metoxi-5-metil-, (1aS,8S,8aR,8bS)-	Azirino [2',3':3,4]pírrolo[1,2-a]indol-4,7-diona, 6-amino-8-[[aminocarbonil]oxi]metil]-1,1a,2,8,8a, 8b-hexahidro-8a-metoxi-5-metil-, (1aS,8S,8aR,8BS) -	Azirino[2',3':3,4]pírrolo[1,2-a]indol-4,7-diona, 6-amino-1,1a,2,8,8a,8b-hexahidro-8-(hidroximetil)-8a-metoxi-5-metil-, carbamato (ester) (8Cl); Azirino[2',3':3,4]pírrolo[1,2-a]indol-4,7-diona, 6-amino-8-[[aminocarbonil]oxi]metil]-1,1a,2,8,8a,8b-hexahidro-8a-metoxi-5-metil-, [1aS-(1aa,8b,8aa,8ba)]-; Mitomicina C (6Cl, 7Cl); (1aS,8S,8aR,8bS)-6-Amino-8-[[aminocarbonil]oxi]metil]-1,1a,2,8,8a,8b-hexahidro-8a-metoxi-5-metilazirino[2',3':3,4]pírrolo[1,2-a]indol-4,7-diona; Ameticina; MMC; MitoExtra; Mitocina C; Mitomicina; Mitonco; Mitoplus; Mitozytrex; Mutamicina; Mytomicina Kyowa S; NSC 26980
50-14-6	C28H44O	Ciclohexanol, 4-metileno-3-[(2E)-2-[(1R,3aS,7aR)-octahidro-7a-metil-1-[(1R,2E,4R)-1,4,5-trimetil-2-hexen-1-il]-4H-inden-4-ilideno]etilideno]-, (1S, 3Z) -	Ciclohexanol, 4-metilen-3-[(2E)-2-[(1R,3aS,7aR)-octahidro-7a-metil-1-[(1R,2E,4R)-1,4,5-trimetil-2-hexen-1-il]-4H-inden-4-ilideno]etilideno]-, (1S, 3Z) -	9,10-Secoergosta-5,7,10(19), 22-tetraen-3-ol, (3b,5Z,7E,22E) - (9Cl); Ciclohexanol, 4-metilen-3-[2-[tetrahidro-7a-metil-1-(1,4,5-trimetil-2-hexenil)-4(3aH)-indailiden] etiliden] - (6Cl); Ergocalciferol (7Cl, 8Cl); (1S,3Z)-4-Metilen-3-[(2E)-2-[(1R,3aS,7aR)-octahidro-7a-metil-1-[(1R,2E,4R)-1,4,5-trimetil-2-hexen-1-il]-4H-inden-4-iliden]etiliden]ciclohexanol; (+)-Vitamina D2; 9,10-Secoergosta-5,7,10(19), 22-tetraen-3b-ol; Bucu-D; Calciferol; Condocaps; Condol; Cristalina; D-Arthin; D-Tracetten; Davitamon D; Davitin; Concentrado De-Rat; Decaps; Dee-Osterol; Dee-Ron; Dee-Ronal; Deltalin; Deratol; Detalup; Diactol; Divit urto; Doral; Drisdol; Ercalcio; Ergorone; Ertron; Fortodyl; Geltabs; Hi-Deratol; En frente; Metadee; Mina D2; Mulsiferol; Mykostin; NSC 62792; Oleovitamina

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
		ylidene]ethylidene]-, (1S,3Z)-		D; Oleovitamina D2; Osteil; Ostelin; Radiostol; Radsterin; Rodine C; Choque-ferol; Sterogyl; Uvestero D; Vio D; Viosterol; Vitamina D2; Vitavel-D
50-18-0	C7 H15 Cl2 N2 O2 P	2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl)tetrahydro-, 2-oxide	2H-1,3,2-Oxazafosforin-2-amina, N, N-bis (2-cloroetil) tetrahidro-, 2-óxido	2H-1,3,2-Oxazafosforina, 2-[bis(2-cloroetil)amino]tetrahidro-, 2-óxido (6Cl,8Cl); (RS)-Ciclofosfamida; (±)-Ciclofosfamida; 2-[Bis(2-cloroetil)amino]tetrahidro-2H-1,3,2-oxazafosforin 2-óxido; Asta B 518; B 518; Bis(2-cloroetil)fosforamida ciclo propanolamida ester; CB 4564; CP; CPA; CTX; Ci; Clafen; Clafene; Cicloblastin; Ciclocel; Ciclofosfamid; Ciclofosfamida; Ciclofosfamido; Ciclofosfan; Ciclofosfano; Ciclostin; Cicloxan; Cicrame; Cidoxan; Cifos; Cifofosfan; Cifofosfano; Citoxan; Eldamida; Endoxan; Endoxan R; Endoxan-Asta; Endoxana; Endoxanal; Endoxano; Enduxan; Genoxal; Hexadrin; Ledoxan; Mitoxan; Ácido N,N-Bis(2-cloroetil)-N',O-propileno fosforico ester diamida; Ácido N,N-Bis(2-cloroetil)-N',O-trimetileno fosforico ester diamida; NCI C04900; NSC 26271; Neofos; Neosar; Neosar (antineoplásico); Oncomida; Procitox; Revimmune; SK 20501; Semdoxan; Sendoxan; Senduxan; Ziklofosfamid
50-21-5	C3H6O3	Propanoic acid, 2-hydroxy-	Ácido propanoico, 2-hidroxi -	Ácido láctico (7Cl, 8Cl); Ácido 2-hidroxi propanoico; Ácido (RS)-2-hidroxi propanoico; (±)-ácido láctico; Ácido 2-hidroxi-2-metilacético; Ácido 2-hidroxi propionico; Biolac; Chem-Cast; Ácido DL-láctico; E 270; HiPure 88; Kiwilustre; Lactato; Lurex; Ácido láctico Masashino 90F; Ácido de leche; Lactato de Musashino 50F; NSC 367919; Purac 55; Purac 60; Purac FCC 80; Purac FCC 88; Purac HS 100; Purac HS 50; Purac HS 88; Ácido rac-láctico; Tonsillosan; Ácido dl-láctico; Ácido a-hidroxi propanoico; Ácido a-hidroxi propionico
50-23-7	C21H30O5	Pregn-4-ene-3,20-dione, 11,17,21-trihydroxy-, (11b)-	Pregn-4-ene-3,20-diona, 11,17,21-trihidroxi-, (11b) -	Cortisol (8Cl); (11b) -11,17,21-Trihidroxipregn-4-eno-3,20-diona; 11b, 17,21-trihidroxipregn-4-eno-3,20-diona; 11b, 17,21-trihidroxiprogesterona; 11b, 17a, 21-Trihidroxipregn-4-eno-3,20-diona; 11b-hidroxicortisona; 17-hidroxicorticosterona; 17a-hidroxicorticosterona; 4-pregnen-11b, 17a, 21-triol-3,20-diona; Acticort; Aeroseb HC; Ala-Cort; Alkindi; Anflam; Hormona antiinflamatoria; CCN 90306A; Spray CaldeCort; Cetacort; Cobadex; Cort-Dome; Cortanal; Cortef; Cortenema; Corticreme; Cortifan; Cortiment; Cortispray; Cortonema; Cortril; Dermacort; Dermocortal; Dermolate; Dihidrocortisona; Diodermo; Domolene-HC; DuoCort; Efcortin; Efcortelan; Eldecort; Epiderma H; Esiderm H; Evacort; Ficortril; Genacort; HC; Heb-Cort; Hidro-Colisona; Hycort; Hycortol; Hycortole; Hydracort; Hydrasson; Hydro-Adreson; Hydrocort; Hidrocortal; Hidrocorticosterona; Hidrocortina; Hidrocortisona; Hidrocortisilo; Hidrocortona; Hydroskin; Hytone; Loción Hytone; Incortina-H; Infacort; Compuesto de Kendall F; Lacticare HC; Medicort; Mildison; NSC 10483; Nutracort; Optef; Otosona-F; Penecort; Permicort; Plenadren; Polcort H; Sustancia M de Reichstein; Sanatison; Escalpicina; Scheroson F; Signef; Synacort; Tarcortina; Texacort; Locion Texacort 25; Timocort; Topicort; Traumaide; U 1851; Zenoxona
50-27-1	C18H24O3	Estra-1,3,5(10)-triene-3,16,17-triol, (16a,17b)-	Estra-1,3,5(10)-triene-3,16,17-triol, (16a, 17b) -	Estriol (8Cl); (16a,17b)-Estra-1,3,5(10)-triene-3,16,17-triol; 13b-Metil-1,3,5(10)-gonatriene-3,16a,17b-triol; 16a,17b-estriol; 16a-estriol; 16a-hidroxiestradiol; 3,16a,17b-estriol; 3,16a,17b-Trihidroxiestra-1,3,5(10)-triene; Aacifemina; Colpogyn; Destriol; Estra-1,3,5(10)-triene-3,16a,17b-triol; Estratriol; Estriol; Hidrato de hormona folicular; Gynasan; Holin V; Hormomed; Incurin; Klimax E; Klimoral; NSC 12169; OE3; Oekolp; Estriol; Ortho-Gynest; Ovesterin; Ovestin; Ovestrion; Ovo-Vinces; Theelol; Tridestrina; Trihidroxiestrina; Triovex

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
50-28-2	C ₁₈ H ₂₄ O ₂	Estra-1,3,5(10)-triene-3,17-diol (17b)-	Estra-1,3,5(10)-triene-3,17-diol (17b) -	Estradiol (8CI); (17b)-Estra-1,3,5(10)-triene-3,17-diol; (+)-3,17b-estradiol; (8R,9S,13S,14S,17S)-13-Metil-7,8,9,11,12,13,14,15,16,17-decahidro-6H-ciclopenta[a]fenantreno-3,17-diol; 13b-Metil-1,3,5(10)-gonatriene-3,17b-ol; 17b-estradiol; 17b-estradiol E2; 17b-estradiol; 3,17-Epidihidroxiestratrieno; 3,17b-dihidroxiestra-1,3,5(10)-triene; 3,17b-estradiol; Matriz absorbente; Aerodiol; Alora; Altrad; Aquadiol; Bardiol; Benzoginecologia; Beta-estradiol; Gel Bio-E; Climadermo; Climara; Compudose; Compudose 100; Compudose 200; Compudose 365; Compudose 400; Corpagen; Dermestril; Destradiol; Hormona dihidrofolicular; Dihidrofolliculina; Dihidromenformon; Dihidrotelina; Dihidroxiestrina; Dimenformon; Diogyn; Diogynets; Divigel; E 2; Elestrim; Bis; Epiestriol 50; Estasorb; Estra-1,3,5(10)-triene-3,17-diol, (17b)-; Estra-1,3,5(10)-triene-3,17b-diol; Estrace; Estraderm; Estraderm MX; Estraderm TTS; Estraderm TTS 100; Estraderm TTS 50; Estradiol-17b; Estradot; Estraldina; Estrapatch; Estredox; Estreva; Estring; Anillo vaginal Estring; Estroclim; Estroclim 50; Estrogel; Estrogel HBF; Estropausia; Estrovita; Evamist; Evorel; FemSeven; Femanest; Femestral; Femogen; Fempatch; Folliciclina; Gelestra; Ginosedol; Gynergon; Ginodiol; Gynoestryl; IMVEXXY; Innofem; Lamdiol; Macrodiol; Menorest; Menostar; NSC 9895; Nordicol; Oesclim; Oestergon; Estra-1,3,5(10)-triene-3,17b-diol; Estradiol; Oestrogel; Estroglandol; Ovahormon; Ovasterol; Ovastevol; Ovociclina; Ovocilina; Perlatanol; Primofol; Profoliol; Profoliol B; Progynon; Progynon DH; Sandrena 1; Sprediol; Syndiol; System; TX 004HR; Theelin, dihidro-; Vagifem; Vivelle; Vivelle-Dot; Zesteem; Zumenon; b-estradiol
50-29-3	C ₁₄ H ₉ Cl ₅	Benzene, 1,1'-(2,2,2-trichloroethylidene)bis[4-chloro-	Benceno, 1,1'-(2,2,2-tricloroetilideno) bis [4-cloro -	Etano, 1,1,1-tricloro-2,2-bis(p-clorofenil)- (7CI,8CI); 1,1'-(2,2,2-tricloroetilidene)bis[4-clorobenceno]; 1,1,1-Tricloro-2,2-bis(p-clorofenil)etano; 1,1,1-Tricloro-2,2-di(p-clorofenil)etano; 1,1,1-Tricloro-2,2,2-bis(p-clorofenil)etano; 1,1-bis(4-clorofenil)-2,2,2-tricloroetano; 1,1-bis(p-clorofenil)-2,2,2-tricloroetano; 2,2,2-tricloro-1,1-bis(4-clorofenil)etano; 2,2-bis(4-clorofenil)-1,1,1-tricloroetano; 2,2-bis(p-clorofenil)-1,1,1-tricloroetano; 4,4'-DDT; 4,4'-diclorodifeniltricloroetano; Aavero-extra; Agritan; Arkotina; Azotox M 33; Benzoclorilo; Bosan supra; Bovidermol; Clorofenotano; Clorfenotano; Clorfenotaxum; Citox; Clufenotan; Clufenotano; DDT; Deoval; Detox; Detox (pesticida); Detoxan; Dibovin; Diclorodifeniltricloroetano; Dicofano; Dicophaner; Dodat; Dykol; ENT-1506; Estonar; Etano, 1,1,1-tricloro-2,2-bis(4-clorofenil)-; FWJ; Gesafid; Gesapon; Gesarex; Gesarol; Guesapon; Hildit; Ivoran; Mutoxan; NSC 8939; Neocid; Neocidol; Neocidol (sólido); PEB1; DDT Para-Para; Paraclorocidum; Pentaclorina; Penticidum; Tafidex; Triclorobis(4'-clorofenil)etano; Zerdane; o,p'-1,1,1-Tricloro-2,2,2-bis(p-clorofenil)etano; p,p'-DDT; p,p'-diclorodifeniltricloroetano; p,p'-diclorodifeniltriclorometilmetano; a,a-Bis(p-clorofenil)-b,b,b-tricloroetano
50-32-8	C ₂₀ H ₁₂	Benzo[a]pyrene	Benzo[a]pireno	3,4-Benz[a]pireno; 3,4-benzopireno; 3,4-benzpireno; 3,4-benzpireno (carcinogeno); 4,5-benzpireno; 6,7-benzopireno; Panecillo en Escocia; Benz[a]pireno; Benzo[d,e,f]criseno; Benzopireno; NSC 21914;
50-33-9	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₂	3,5-Pyrazolidinedione, 4-butyl-1,2-diphenyl-	3,5-Pirazolidinodiona, 4-butil-1,2-difenil -	4-Butil-1,2-difenil-3,5-pirazolidinadiona; 1,2-Difenil-3,5-dioxo-4-butilpirazolidina; 1,2-Difenil-3,5-dioxo-4-n-butilpirazolidina; 1,2-Difenil-4-butil-3,5-pirazolidinadiona; 3,5-Dioxo-1,2-difenil-4-n-butilpirazolidina; 4-Butil-1,2-difenil-3,5-dioxopirazolidina; 4-Butil-1,2-difenilpirazolidina-3,5-diona; 4-n-Butil-1,2-difenil-3,5-pirazolidinadiona; Alindor; Alkazona; Antadol; Anuspiramin; Arthrizon; Artrizin; Artropan; Azolid; Benzona; Betazed; Bizolin 200; Bunetzona; Butacote; Butadion; Butadiona; Butalidon; Butapirazol;

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
				Butapirazole; Butartrina; Butatron; Butazina; Butazolidin; Butazolidina; Butidiona; Butoz; Buzon; Difebuzol; Difenilbutazona; Ecobutazona; Equipalazona; Fenibutal; Fenibutazona; Fenilbutina; Fenotona; Fenilbutazon; Flexazona; G 13,871; Ia-But; Kadol; Mefabutazon; NSC 25134; febusina; fen-Buta; fenilbutazon; fenilbutazona; Pirarreumol B; Pirabutol; R-3-ZON; Reudo; Reudox; Reumazin; Reumuzol; Robizona; Shigrodin; Tencodine; Tevcodina; Ticinil; Todalgil; Uzona; VAC-10; Zolafen
50-34-0	C23H30NO3.Br	2-Propanaminium, N-methyl-N-(1-methylethyl)-N-[2-[(9H-xanten-9-ylcarbonyl)oxy]ethyl]-, bromide (1:1)	2-Propanaminio, N-metil-N-(1-metiletil)-N-[2-[(9H-xanten-9-ilcarbonyl)oxi]etil]-, bromuro (1:1)	(2-Hidroxi)etil)diisopropilmetilamonio bromida xanteno-9-carboxilato (6C1); 2-Propanaminio, N-metil-N-(1-metiletil)-N-[2-[(9H-xanten-9-ilcarbonyl)oxi]etil]-, bromida (9C1); Amonio, (2-hidroxi)etil)diisopropilmetil-, bromida, xanteno-9-carboxilato (8C1); Corrigast; Ercorax; Ercotina; Ketaman; Kivatin; L 113; L 113 (agente nivelador); Neo-Metantil; Neopepulsan; Pantas; Pantelina; Pervagal; Pro-Bantina; Pro-Gastron; Prodigamon; Propantel; Propantelina bromida; SC 3171; Ácido Xanteno-9-carboxílico, éster con (2-hidroxi)etil)diisopropilmetilamonio bromida; b-Diisopropilaminoetil xanteno-9-carboxilato metobromida
50-36-2	C17H21NO4	8-Azabicyclo[3.2.1]octane-2-carboxylic acid, 3-(benzoyloxy)-8-methyl-, methyl ester, (1R,2R,3S,5S)-	Ácido 8-azabicyclo [3.2.1] octano-2-carboxílico, 3-(benzoyloxi)-8-metil-, éster metílico, (1R, 2R, 3S, 5S) -	Ácido 1aH,5aH-Tropano-2b-carboxílico, 3b-hidroxi-, metil éster, benzoato (éster) (8C1); Ácido 8-Azabicyclo[3.2.1]octano-2-carboxílico, 3-(benzoyloxi)-8-metil-, metil éster, [1R-(exo,exo)]; (-)-Cocaina; (R)-(-)-Cocaina; (R)-Cocaina; 2b-Carbometoxi-3b-(benzoyloxi)tropano; Ácido 3b-Hidroxi-2b-tropanocarboxílico metil éster benzoato (éster); Benzoilmetilecgonina; Cocain; Cocaina; Ecgonina metil éster benzoato (éster); L-Cocaina; Neurocaina; l-Cocaina
50-45-3	C7H4Cl2O2	Benzoic acid, 2,3-dichloro-	ácido benzoico, 2, 3- dicloro-	ácido 2,3-diclorobenzoico
50-48-6	C20H23N	1-Propanamine, 3-(10,11-dihydro-5H-dibenzo[a,d]cyclohepten-5-ylidene)-N,N-dimethyl-	1-propanamina, 3-(10,11-dihidro-5H-dibenzo [a, d] ciclohepteno-5-ilideno)-N, N-dimetil -	5H-Dibenzo[a,d]ciclohepteno-d5,g-propilamina, 10,11-dihidro-N,N-dimetil- (6C1,8C1); 3-(10,11-Dihidro-5H-dibenzo[a,d]ciclohepten-5-ilideno)-N,N-dimetil-1-propanamina; 5-(3-Dimetilaminopropilideno)-5H-dibenzo[a,d]-10,11-dihidrociclohepteno; 5-(3'-Dimetilaminopropilideno)-dibenzo-[a,d][1,4]-cicloheptadieno; 5-(g-Dimetilaminopropilideno)-10,11-dihidro-5H-dibenzo[a,d]ciclohepteno; 5-(g-Dimetilaminopropilideno)-5H-dibenzo(a,d)(1,4)cicloheptadieno; Adepress; Amitriprolidina; Amitriptilín; Amitriptilina; Damilen; Damitriptilina; Flavil; MK 230; N 750; Proheptadieno; Seroten; Triptanol; Triptisol
50-50-0	C25H28O3	Estra-1,3,5(10)-triene-3,17-diol (17b)-, 3-benzoate	Estra-1,3,5(10)-triene-3,17-diol (17b)-, 3-benzoato	Estradiol, 3-benzoato (8C1); 1,3,5(10)-estratrieno-3,17b-diol 3-benzoato; 3-benzoato de 17b-estradiol; Benzoato de 17b-estradiol; 3-benzoyloxi-17b-hidroxiestra-1,3,5 (10) -triene; Agofollin; Deposito de Agofollin; Benovocilina; Benzohormovarina; Benzo-Gynoestryl; Benzoestrofol; Benzofolina; Benztrona; Cidirol; De Graafina; Difollisterol; Difoliculina; Benzoato de dimeformon; Diogyn B; Eston B; Benzoato de estradiol; Monobenzoato de estradiol; Estrogin; Femestrone; Folone; Gonadiol; Graafina; Ginecormona; Gynformone; Hidroestrón; Hormogynon; Mesalin; NSC 9566; Benzoato de estradiol; Oestroform [BDH]; Benzoato de ovahormon; Ovasterol B; Benzoato de ovociclina; Ovociclina M; Ovociclina MB; Benzoato de pelanina; Primogyn B; Primogyn B oleosum; Progynon B; Benzoato de progynon; Recthormona estradiol; Ric-BE; SY Esrone; Solestro; Unistradiol; b-estradiol 3-benzoato; benzoato de b-estradiol
50-54-4	C20H24N2O2.1/2H2O4S	Cinchonan-9-ol, 6'-methoxy-,	Cinchonan-9-ol, 6'-metoxi-, (9S) -, sulfato (2:1)	Cinchonan-9-ol, 6'-metoxi-, (9S) -, sulfato (2:1) (sal) (9C1); Quinidina, sulfato (2:1) (sal) (8C1); Sulfato de (9S) -6'-metoxicinchonan-9-ol (2:1); Sulfato de quinidina; NSC 10004;

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
		(9S)-, sulfate (2:1)		Quinocardina; Quinidate; Quinidex; Monosulfato de quinidina; Sulfato de quinidina; Sulfato de quinidina; Quinora; Sistodin
50-55-5	C33H40N2O9	Yohimban-16-carboxylic acid, 11,17-dimethoxy-18-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)oxy]-, methyl ester, (3b,16b,17a,18b,20a)-	Ácido Yohimban-16-carboxílico, 11,17-dimetoxi-18-[(3,4,5-trimetoxibenzoil)oxi] -, ester metílico, (3beta, 16beta, 17alfa, 18 beta, 20alfa) -	Ácido 3b,20a-yohimban-16b-carboxílico, 18b-hidroxi-11,17a-dimetoximetil ester 3,4,5-trimetoxibenzoato (ester) (8CI); ácido 3b,20a-yohimban-16b-carboxílico, 18b-hidroxi-11,17a-dimetoxi-, ester metílico, 3,4,5-trimetoxibenzoato (6CI); Benz[g]indolo [2,3-a] quinolizina, derivado del ácido yohimban-16-carboxílico.; (-)-Reserpina; Ester metílico del ácido 11,17-dimetoxi-18-[(3,4,5-trimetoxibenzoil)oxi]yohimban-16-carboxílico; Reserpado de metilo de 3,4,5-trimetoxibenzoilo; Anquil; Apoplón; Banasil; Bioserpina; Carpacil; Cristoserpina; Deserpine; ENT 50146; Elserpine; Eserpina; Eskaserp; Hiposerpil; Kitine; Lemiserp; Loweserp; Mayserpina; Reserpado de metilo 3,4,5-trimetoxibenzoato (ester); NSC 237659; NSC 59272; Quiescin; Rau-sed; Raucap; Raulen; Raunervil; Raupasil; Raurine; Rausedil; Rausedyl; Rausingle; Rauwasedin; Rescaps; Resercon; Reserlor; Reservado; Reserpex; Ester metílico del ácido reserpico 3,4,5-trimetoxibenzoato (ester); Reserpil; Reserpina; Reserpoide; Resina; Respital; Restran; Riserpa; Rivasin; Roxinoide; Sandril; Sedaraupin; Sedserp; Serfin; Serolfia; Serp-AFD; Serpaloide; Serpanray; Serpasil; Serpasil Serpasol; Premezcla de Serpasil; Serpasol; Serpate; Serpen; Serpentina; Serpicon; Serpiloide; Serpina; Serpina (farmaceutica); Serpipur; Sertabs; Sertina; T-Serp; Temposerpina; Triserpin; Vio-Serpina
50-56-6	C43H66N12O12S2	Oxytocin	Oxitocina	1,2-ditia-5,8,11,14,17-pentaazacicloeicosano, derivado de peptido ciclico.; 1: PN: WO0178758 SECID: 1 proteína reivindicada; 1: PN: WO2004000993 PAGINA: 53 proteína declarada; 1: PN: WO2011145051 SEQID: 1 proteína reivindicada; Vasopresina 3-isoleucina-8-leucina; 74: PN: US20090175821 PaGINA: 403 proteína reclamada; Alfa-hipoamina; Atonina O; Di-sipidina; Endopituitrina; Glicinamida, L-cisteinil-L-tirosil-L-isoleucil-L-glutaminil-L-asparaginil-L-cisteinil-L-prolil-L-leucil-, disulfuro ciclico (1-6); Hipotocina; Intertocine S; L-cisteinil-L-tirosil-L-isoleucil-L-glutaminil-L-asparaginil-L-cisteinil-L-prolil-L-leucilglicinamida ciclica (1-6) -disulfuro; Nobitocina S; Orasthin; Oxistina; Partocon; Perlacton; Pitocina; Piton S; Presoxina; Synpitan; Synpitan fuerte; Oxitocina sintetica; Sintocina; Syntocinon; Sintocinona; Uteracon; Vasopresina, 3-L-isoleucina-8-L-leucina-; [1-hemicistina] -oxitocina; a-hipoamina
50-63-5	C18 H26 Cl N3 . 2 H3 O4 P	1,4-Pentanediamine, N4-(7-chloro-4-quinolinyl)-N1,N1-diethyl-, phosphate (1:2)	1,4-Pentanediamino, N4-(7-cloro-4-quinolinil)-N1, N1-dietil-, fosfato (1:2)	Quinolina, 7-Cloro-4-[(4-dietilamino-1-metilbutil)amino]-, difosfato (6CI); Quinolina, 7-Cloro-4-[[4-(dietilamino)-1-metilbutil]amino]-, fosfato (1:2) (8CI); (±)-Cloroquina difosfato; 3377RP; Difosfato de 7-Cloro-4-[(4'-dietilamino-1-metilbutil)amino]quinolina; Alexoquina; Aralen difosfato; Aralen fosfato; Arechin; Avloclor; Bemafato; Chingamin; Chingamin fosfato; Cloroquin difosfato; Cloroquin difosfato; Cloroquina fosfato dihidrogeno (1:2); Cloroquina difosfato; Cloroquina fosfato; Cidoquina; Delagil; Gontochin fosfato; Imagon; Khingamin; Maladrin; Malaquin; NSC 14050; Nivaquina B; Quingamina; Quivaclor; Resochin; Resoquina; SN 7618; Sanoquin; Tanakan; Tanakan (antimalaria); Tresochin; WR 1522; dl-Cloroquina difosfato
50-69-1	C5H10O5	D-Ribose	D-Ribosa	Ribosa, D- (8CI); Ribosa
50-70-4	C6H14O6	D-Glucitol	D-Glucitol	Glucitol, D- (8CI); Sorbitol (7CI); (-)-Sorbitol; 7B5697N; A 5178; Brix 70; C * Sorbidex; C * Sorbidex 16100; C * Sorbidex P 16616; CSorbitol 16100; Cerestar P 16616; Colaxina; Cistosol; D(-)-Sorbitol; D-SORB 88; D-Sorbit 50M; D-sorbitol; D-Sorbol; Diakarmon; E 420; Esasorb; FP 100M; Foodol 70; Foodol D 70; Glucarina; Glucarina (jarabe de sorbitol); Glucitol; Karion; Karion

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
				(carbohidrato); Karion instantáneo; Polvo Kyowa 50M; L-gulitol; LTS P 50M; LTS-P 20M; LTS-P G 3; Merisorb 200; Meritol 121; Meritol 128; NSC 25944; Neosorb; Neosorb 20 / 60DC; Neosorb 70/02; Neosorb 70 / 02B; Neosorb 70 / 02SB; Neosorb 70/20; Neosorb 70/70; Neosorb 71 / 02SB; Neosorb P 20/60; Neosorb P 60; Neosorb P 60W; Nivitin; P 60W; Pardeck SI 150; Pardeck SI 200; Pardeck SI 400; Pardeck SI 450; Plastilys; Resulax; Sionit; Sionit K; Sionita; Sionon; Siosan; Sorbex M; Sorbex R; Sorbex Rp; Sorbex S; Sorbex X; Sorbidex 200; Sorbidex NC 16205; Sorbidex P 16616; Sorbidex S 16601; Sorbidex S 16603; Sorbierita; Sorbilande; Sorbilax; Sorbit; Sorbit D; Sorbit D 70; Sorbit D-Polvo; Sorbit DP; Sorbit DP 50; Sorbit KK; Polvo Sorbit KK 50M; Polvo Sorbit Kyowa 50M; Sorbit L 70; Sorbit LTSP; Sorbit S; Sorbit T 70; Sorbit W 70; Sorbit W-Polvo; Sorbit W-Polvo 50; Sorbit WP; Sorbita; Sorbitol 70W; Sorbitol C; Sorbitol F; Sorbitol FK; Sorbitol FP; Sorbitol FP 100M; Sorbitol Kao; Sorbitol S; Sorbitol SP; Sorbitol Ueno 20M; Jarabe de sorbitol C; Sorbitur; Sorbo; Sorbogem 712; Sorbol; Sorbostilo; Sorpart
50-76-0	C62 H86 N12 O16	Actinomycin D	Actinomicina D	3H-Fenoxazina-1,9-dicarboxamida, 2-amino-N,N'-bis(hexadecahidro-6,13-diisopropil-2,5,9-trimetil-1,4,7,11,14-pentaoxo-1H-pirrol[2,1-i][1,4,7,10,13]oxatetraazaciclohexadecin-10-il)-4,6-dimetil-3-oxo- (7CI); Actinomicina C1 (6CI); 1H-pirrol[2,1-i] [1,4,7,10,13] oxatetraazaciclohexadecina, derivado de peptido ciclico.; 3H-Fenoxazina, derivado de actinomicina D; AD; Actactinomicina A IV; Actinomicina 7; Actinomicina AIV; Actinomicina I1; Actinomicina IV; Actinomicina X1; Ácido actinomcindioico D, dilactona; C 1; Choungwhamicina B; Cosmegen; Dactinomicina; Dactinomicina D; Ácido dilactona actinomicina D; Ácido Dilactona actinomcindioico D; Lyovac cosmegen; Meractinomicina; NCI C04682; NSC 3053; Oncostatina K;
50-78-2	C9H8O4	Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-	Ácido benzoico, 2-(acetiloxi)-	Rhodina (7CI); Ácido salicílico acetato (8CI); Ácido 2-(Acetiloxi)benzoico; Ácido 2-Acetoxibenzoico; 2-Carboxifenil acetato; A.S.A. Empirin; AC 5230; ASA; Acenterina; Acesal; Acesan; Acetard; Aceticil; Acetilo acidulato; Acetisal; Acetofen; Acetosal; Ácido Acetosalico; Acetosalin; Acetilin; Acetilsal; Acetilsalicilic acid; Acetionil; Acetisal; Ácido acetilsalicilico; Acimetten; Acisal; Acilpirin; Adiro; Albil E; Angettes 75; Anopirin; Asaflow; Asagran; Asatard; Ascoden 30; Ascolong; Ascriptin; Aspalon; Aspergum; Aspidrops; Aspirin; Aspirin Protect 100; Aspirin Protect 300; Aspirin-Direkt; Aspirina; Aspirina 03; Aspirina; Aspro; Aspro Clear; Asprofarm; Asteric; Astrix; Baiaspirin; Benaspir; Bialpirina; Bialpirinia; Caprin; Cardioaspirin; Cardioaspirina; Cardiomagnil; Claradin; Colfarit; Colsprin; Contrheuma Retardado; Coraspin; Coricidin; Coricidin D; Cristar; Darvon Compuesto; Dolean f 8; Dominal; Duramax; Durlaza; ECM; Easprin; Ecopirin; Ecosprin; Ecotrin; Empirin; Endosprin; Endidol; Entericin; Enterofen; Enterosarina; Entrofen; Ewin; Extren; Gelprin; Globentil; Globoid; Helicon; IWN 11; Idragin; Istopirin; Kapsazal; Lisoprin (farmaceutica); Magnecil; Measurin; Medisil; Melhoral; Micristin; Miniasal; Micropirin; NSC 27223; NSC 406186; Neuronika; Novid; Nu-seals; Ácido O-Acetilsalicilico; Persistin; Polopirina; Rheumintabletten; Rhodina 2312; Rhodina 3040; Rhodina 3118; Rhodina 3220; Rhodina NC RP; Rhonal; Rivo; Rodina 3220; SP 189; Salacatin; Salcetogen; Saletin; Salospir; Ácido Salicilacetilsalicilico; Solpiron; Supac; Temporal; tromboASS; Toldex; Triple-sal; Trombil; Xaxa; iasta; Zorprin; Zosprin; Ácido o-(Acetiloxi)benzoico; Ácido o-Acetoxibenzoico; o-Carboxifenil acetato;

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
50-81-7	C6H8O6	L-Ascorbic acid	Ácido L- ascorbico	(+)-Ácido ascorbico; 100M; 3-oxo-L-gulofuranolactona; 3-ceto-L-gulofuranolactona; 5-(1,2-dihidroxi-etil)-3,4-dihidroxi-2(5H)-furanona; 5-(1,2-Dihidroxi-etil)-3,4-dihidroxi-5H-furan-2-ona; 5-(1,2-Dihidroxi-etil)-3,4-dihidroxi-furan-2(5H)-ona; Adenex; Allercorb; Vitamina antiescorbica; Vitamina antiescorbutica; Ascoltin; Ascorbajen; Ascorbalox; Ácido ascorbico; Ascorbicap; Ascorbutina; Ascorell; Ascorina; Ascorteal; Ascorvit; Bovi-C; C-L 6 / PW; C-Quin; C-Vimin; Cantan; Cantaxin; Catavin C; Ce-Mi-Lin; Ce-Vi-Sol; Cebicure; Cebion; Cebione; Cecon; Cegiolan; Ceglion; Ceklin; Celaskon; Celin; Celda C; Cemagyl; Cenetona; Cereon; Cergona; Cescorbat; Cetamida; Cetano; Cetane-Caps TC; Cetebe; Cetemican; Cevalin; Cevanol; Cevatine; Cevex; Cevimin; Cevalit; Ácido cevitamico; Cevitamina; Cevitan; Cevitex; Cewin; Chewcee; Ciamin; Cinal; Cipca; Citrovit; Colascor; Concemin; Davitamon C; E 300; Emvit-C; Energil C; Hicee; Hybrin; IDO-C; Juvamine; Kangbingfeng; L-(+)-Ácido ascorbico; Lactona del ácido L-3-ceto-treo-hexuronico; Ácido L-lyxoascorbico; Ácido L-xiloascorbico; Ácido L-treo-ascorbico; Ácido L-treo-Hex-2-enonico, g-lactona; Laroscorbina; Lemascorb; Liqui-Cee; Monovitan C; NSC 218455; NSC 33832; Neo-Valdrin; Novasol Cof; P 1110; Pascorbin; Planavit C; Proscorbin; Redoxon; Ribena; Ronotec 100; Rontex 100; Rovimix C; Rovimix C-EC; Scorbu C; Secorbato; Suncoat VC 40; Tanvimil C; Testascórbico; VC 40; VC 97; Vaginorm-C; Vasc; Vicelat; Vicin; Viforcit; Viscorina; Viscorina 100M; Vitace; Vitacee; Vitacimin; Vitacina; Vitamina C; Vitamina C tipo SS; Vitamina C Aflofarm; Vitamisina; Vitascorbol; Vitashure 160; Xitix; Ácido xiloascorbico, L-
50-98-6	C10H15NO.C IH	Benzenemethanol, a-[(1S)-1-(methylamino)ethyl]-, hydrochloride (1:1), (aR)-	Benzenometanol, Alfa - [(1S)-1 - (metilamino) etil] -, clorhidrato (1:1), (Alfa R) -	Benzenometanol, a-[(1S)-1-(metilamino)etil]-, clorhidrato, (aR) - (9CI); Benzenometanol, a-[1-(metilamino)etil]-, clorhidrato, [R-(R,S)] -; Efedrina, clorhidrato, (-) - (8CI); (-)-Clorhidrato de efedrina; (-)-Clorhidrato de efedrina; (1R,2S)-(-)-Clorhidrato de 2-efedrinio; (1R, 2S)-(-)-Clorhidrato de efedrina; (1R, 2S)-clorhidrato de efedrina; Altusin; CPDD 0047; Enurace; Epedrica; Clorhidrato de efedrina; Cloruro de efedrinio; Efedronguente; Clorhidrato de L-efedrina; Clorhidrato de L-eritro-efedrina; Sanedrine; clorhidrato de l-efedrina; clorhidrato de l-efedrina; Clorhidrato de alcohol l-a-[1-(metilamino)etil]bencilico
50-99-7	C6H12O6	D-Glucose	D-Glucosa	(+)-Glucosa; Dextrosa anhidra; Freno (glucosa encapsulada en pH); C * Seco GL 01934; Hidrato de CPC; Cartose; Cerelose; Cerelose 2001; Diabetes quimica; Clearsweet 95; Clintose L; Azucar de maiz; D 50W; D (+)-Glucosa; D-glucosa; Dextropur; Dextrosa; Dextrosol; FeedBead; Glucodina; Glucolina; Glucopiranososa; Glucosa; Intolerante a la glucosa; Glucosoft; Glucosteril; Goldsugar; Azucar de uva; Hola-Fructo M; Hi-Mesh; Intolerancia a la glucosa; Diabetes latente; Malabsorcion de glucosa; Gel Energetico Maxim; Meritose; Meritose 200; NSC 287045; Roclys C 30725; Roferose ST; Staleydex 111; Staleydex 130; Staleydex 333; Staleydex 95M; Azucar, uva; TDA-C; TDA-CJ; TDA-S; Tabfine 097 (HS); Tackidex 30L75; Toleran G; Vadex
51-03-6	C19H30O5	1,3-Benzodioxole, 5-[[2-(2-butoxyethoxy)methyl]-6-propyl-	1,3-benzodioxol, 5 - [[2 - (2-butoxi-etoxi) etoxi] metil]-6-propil -	toluen, a-[2-(2-butoxi-etoxi)etoxi]-4,5-(metilenedioxi)-2-propil- (8CI); 5-[[2-(2-Butoxi-etoxi)etoxi]metil]-6-propil-1,3-benzodioxole; 6-Propilpiperonil butil dietilene glicol eter; Butacida; Buticida; Butocida; Butoxida; Butoxida (sinergist); Butil carbitol 6-propilpiperonil eter; ENT 14,250; Incite; NSC 8401; PBO; Piperonil; Piperonil butoxida; Zengxiaomi; a-[2-(2-Butoxi-etoxi)etoxi]-4,5-metilenedioxi-2-propiltoluen; a-[2-(2-n-Butoxi-etoxi)-etoxi]-4,5-metilenedioxi-2-propiltoluen

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
51-05-8	C ₁₃ H ₂₀ N ₂ O 2.CIH	Benzoic acid, 4-amino-, 2-(diethylamino)ethyl ester, hydrochloride (1:1)	Ácido benzoico, 4-amino-, 2-(diethylamino)etil ester, clorhidrato (1:1)	Ácido benzoico, 4-amino-, 2-(diethylamino)etil ester, monoclorhidrato (9CI); Ácido benzoico, p-amino-, 2-(diethylamino)etil ester, monoclorhidrato (8CI); 4-aminobenzoato de 2-(Dietilamino)etilo clorhidrato; p-aminobenzoato de 2-Dietilaminoetilo clorhidrato; Alocaina; Aminocaina; Anadolor; Anesteso; Anestil; Atoxicocaina; Bernacaina; Cetain; Chlorocaina; 4-aminobenzoato de Dietilaminoetanol clorhidrato; Enpro; Etocain; Etocaina; Eugerase; Geriocaina; Gero; Gerovital; Gerovital H3; Herocaina; Irocaina; Isocain; Isocaina; Isocaina-Heisler; Jenacaina; Juvocaina; Kerocaina; Lactocaina; Medaject; Naucain; Naucaina; Neocaina; Neotonocaina; Novocain; Novocaina; Novocaina clorhidrato; Omnicain; Paracain; Planocaina; Polocaina; Procaina clorhidrato; Procaina monoclorhidrato; Rocain; Scurocaina; Sevicaina; Sincaina; Sintocain; Topokain; Westocaina
51-21-8	C ₄ H ₃ F N ₂ O ₂	2,4(1H,3H)-Pyrimidinedione, 5-fluoro	2,4(1h,3h)-pirimidinadiona, 5-fluoro-	Uracil, 5-fluoro- (8CI); 5-Fluoro-2,4(1H,3H)-pirimidinadiona; 2,4-Dihidroxi-5-fluoropirimidina; 2,4-Dioxo-5-fluoropirimidina; 5-FU; 5-Fluoracil; 5-Fluoro-1H-pirimidina-2,4-diona; 5-Fluoro-2,4-dihidroxipirimidina; 5-Fluoro-2,4-pirimidinadiona; 5-Fluoropirimidina-2,4-diol; 5-Fluorouracil; 5-Oncouracil; Adrucil; Arumel; Carac; Carzonal; DBL; Efudex; Efidix; Efurix; FU; Fluoroblastin; Fluoroplex; Fluorouracil; Fluorouracile Accord; Flurablastin; Fluracedil; Fluracil; Fluracilo; Fluri; Fluril; Ftoruracil; Kecimeton; NSC 19893; Phthoruracil; Phtoruracil; Queroplex; Ro 2-9757; Sigma 03738; Timazin; U 8953; Ulup;
51-28-5	C ₆ H ₄ N ₂ O ₅	Phenol, 2, 4-dinitro-	Fenol, 2, 4- dinitro-	2,4-dinitrofenol; 1,3-dinitro-4-hidroxi-benceno; 1-hidroxi-2,4-dinitro-benceno; 2,4-DNP; 2-nitro-4-nitrofenol; Aldifen; DNP; Dinitrofenol; Dinofan; Fenoxyl Carbon N; NSC 1532; Nitrofenol; Nitrofenol; Fenol, a-dinitro-; a-dinitrofenol;
51-34-3	C ₁₇ H ₂₁ N O ₄	Benzeneacetic acid, a-(hydroxymethyl)-, (1a,2b,4b,5a,7b)-9-methyl-3-oxa-9-azatriciclo[3.3.1.02,4]non-7-yl ester, (aS)-	Ácido Benzeneacético, - alfa (hidroximetil) -, (1alfa, 2beta, 4beta, 5alfa, 7beta)-9-metil-3-oxa-9-azatriciclo [3.3.1.02,4] non-7-il ester, (Alfa S) -	1aH,5aH-Tropan-3a-ol, 6b,7b-epoxi-, (-)-tropato (ester) (8CI); Ácido bencenacético, a-(hidroximetil)-, 9-metil-3-oxa-9-azatriciclo[3.3.1.02,4]non-7-il ester, [7(S)-(1a,2b,4b,5a,7b)]; 3-Oxa-9-azatriciclo[3.3.1.02,4]nonano, ácido bencenacético deriv.; (-)-Hioscina; (-)-Scopolamina; 6,7-Epoxitropina tropato; 6b,7b-Epoxi-3a-tropanil S(-)-tropato; 9-Metil-3-oxa-9-azatriciclo[3.3.1.02,4]nonan-7-ol (-)-tropato; Atrochin; Atroquin; Hioscina; SEE; Scop; Scopina (-)-tropato; Scopina tropate; Scopoderm TTS; Scopolamina; Transcop; Transderm-Scop; Ácido tropico ester con scopina; l-Scopolamina
51-35-4	C ₅ H ₉ N ₃ O	L-Proline, 4-hydroxy-, (4R)-	L- Prolina, 4- hidroxi-, (4R) -	L-prolina, 4-hidroxi, trans-; Prolina, 4-hidroxi-, L- (8CI); (4R)-4-hidroxi-L-prolina; (-)-Ácido 4-hidroxi-2-pirrolidincarboxílico; (2S,4R)-(-)-4-hidroxi-prolina; (2S,4R)-4-hidroxi-prolina; Ácido (2S,4R)-4-hidroxi-pirrolidin-2-carboxílico; Ácido (2S,4R)-4-hidroxi-pirrolidin-2-carboxílico; (4R,2S)-hidroxiprolina; (R)-4-hidroxi-(S)-prolina; (R)-4-hidroxi-L-prolina; (S)-hidroxiprolina; Ácido 4(R)-hidroxi-2(S)-pirrolidincarboxílico; 4(R)-hidroxiprolina; 4-hidroxi-(S)-prolina; 4-hidroxi-L-prolina; 4-hidroxi-prolina; 4-trans-hidroxi-L-prolina; Hidroxi-L-prolina; Hidroxiprolina; Hypro; L-4-hidroxi-prolina; L-hidroxi-prolina; L-Hipro; L-trans-4-hidroxi-prolina; Ls-hidroxi-prolina; NSC 46704; Prolina, 4-hidroxi; trans-(2S,4R)-4-hidroxi-L-prolina; trans-4-hidroxi-L-prolina; trans-4-hidroxi-prolina; trans-L-4-hidroxi-prolina; trans-L-hidroxi-prolina; d-hidroxi-prolina
51-42-3	C ₉ H ₁₃ N O ₃ . C ₄ H ₆ O ₆	1,2-Benzenediol, 4-[(1R)-1-hydroxy-2-(methylamino)ethyl], (2R,3R)-2,3-	1,2-benzenediol, 4 - [(1R)-1-hidroxi-2-(metilamino) etil] -, (2R, 3R) -2,3-dihidroxibutanodioato (1:1)	1,2-Bencenediol, 4-[(1R)-1-hidroxi-2-(metilamino)etil]-, (2R,3R)-2,3-dihidroxibutanodioato (1:1) (sal) (9CI); 1,2-Bencenediol, 4-[1-hidroxi-2-(metilamino)etil]-, (R)-, [R-(R,R)]-2,3-dihidroxibutanodioato (1:1) (sal); Adrenalina, tartrato (1:1) (6CI); Bencil alcohol, 3,4-dihidroxi-[(metilamino)etil]-, (-), (+)-tartrato (1:1) (sal) (8CI); tartrato ácido, compd. con adrenalina (6CI); tartrato ácido de (-)-Adrenalina; bitartrato de (-)-Adrenalina ; tartrato hidrogeno (-)-

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
		dihydroxybutane dioate (1:1)		Adrenalina; tartrato de (-)-Adrenalina; (+)-bitartrato de (-)-Epinefrina ; bitartrato de (-)-Epinefrina ; bitartrato de Adrenalina; tartrato ácido de Adrenalina; bitartrato de Adrenalina; tartrato hidrogeno Adrenalina; Adrenatab; Asmatane Mist; Asthmahaler Epitrato; Bronitin Mist; Bronkaid Mist Suspension; bitartrato Epinefrina ; d- bitartrato Epinefrina ; tartrato hidrogeno Epinefrina; tartrato de Epinefrina; Epitrato; bitartrato de L-Adrenaline; Medihaler-Epi; Primatene Mist Suspension; bitartrato de R(-)-Epinefrina; bitartrato de l-Adrenalina; bitartrato de l-Adrenalina; tartrato hidrogeno l-Adrenalina; tartrato de l-Adrenalina; bitartrato de l-Epinefrina; bitartrato de l-Epinefrina
51-43-4	C9H13NO3	1,2-Benzenediol, 4-[(1R)-1-hydroxy-2-(methylamino)ethyl]-	1,2-Benzenodiol, 4 - [(1R)-1-hidroxi-2-(metilamino) etil] -	1,2-Bencendiol, 4-[1-hidroxi-2-(metilamino)etil]-, (R)-; Bencil alcohol, 3,4-dihidroxi-[(metilamino)metil]-, (-) (8CI); 4-[(1R)-1-Hidroxi-2-(metilamino)etil]-1,2-bencendiol; (-)-(R)-Epinefrina; (-)-3,4-Dihidroxi-[2-(metilamino)etil]bencil alcohol; (-)-Adrenalina; (-)-Epinefrina; (R)-4-[1-Hidroxi-2-(metilamino)etil]bencen-1,2-diol; (R)-Adrenalina; (R)-Epinefrina; Adnefrina; Adrenal; Adrenalina; Adrenalina; Adrenina; Adrin; Ana-Kit; Bosmin; Bronkaid Mist; Chelafrin; Epifrin; Epiglaufin; Epinefrina; Epinefran; Epinefrina; Epipen; Epirenan; Eppy; Exadrin; Glauposina; Hemisina; Hemostasin; Hemostatín; Hipernefrin; Isoptoepinal; L-Adrenalina; L-Metilaminoetanolicatecol; Levoepinefrina; Levorenen; Levorenin; Levorenina; Levoreninum; Lyodrin; Metilarterenol; Mucidrina; N-[(2R)-2-(3,4-Dihidroxifenil)-2-hidroxietil]-N-metilamina; NSC 62786; Nefridina; Nieralina; Paranefrin; Primatene Mist; R(-)-Epinefrina; Renaglandin; Renaleptina; Renalina; Renoforn; Renostipticin; Renostiptin; Scurenalina; Simplena; Stiptirenal; Supracapsulin; Supranefrana; Suprarenalina; Suprarenin; Surrenina; Sur-frina; Takamina; Vasoconstrictina; Vasotonin; l-1-(3,4-Dihidroxifenil)-2-metilaminoetanol; l-Adrenalina; l-Epinefrina; l-Epirenamina
51-52-5	C7H10N2OS	4(1H)-Pyrimidinone, 2,3-dihydro-6-propy-2-thioxo-	4 (1H)-pirimidinona, 2,3-dihidro-6-propil-2-tioxo -	Uracil, 6-propil-2-tio- (7CI,8CI); 2,3-Dihidro-6-propil-2-tioxo-4(1H)-pirimidinona; 2-Mercapto-4-hidroxi-6-n-propilpirimidina; 2-Mercapto-4-hidroxi-6-propilpirimidina; 2-Mercapto-6-propilpirimidin-4-ol; 2-tio-4-oxo-6-propil-1,3-pirimidina; 2-tio-6-propil-1,3-pirimidin-4-ona; 6-Propil-2-tio-2,4(1H,3H)pirimidinadiona; 6-Propil-2-tiouracil; 6-Propil-2-tioxo-2,3-dihidro-1H-pirimidin-4-ona; 6-Propiltiouracil; 6-n-Propil-2-tiouracil; 6-n-Propiltiouracil; NSC 6498; NSC 70461; PTU; PTU (tyerostatico); Procasil; Propacil; Propicil; Propil-tiorist; Propil-tiracil; Propiltiorit; Propiltiouracil; Protiucil; Protiurona; Proticil; Protiran; Protiural; tiuragil; tireostat II
51-61-6	C8 H11 N O2	1,2-Benzenediol, 4-(2-aminoethyl)-	1,2-benzenediol, 4 - (2-aminoetil) -	Pirocatecol, 4-(2-aminoetil)- (8CI); 4-(2-Aminoetil)-1,2-bencendiol; 2-(3,4-Dihidroxifenil)-1-etanomina; 2-(3,4-Dihidroxifenil)etilamina; 3,4-Dihidroxifenetilamina; 3,4-Dihidroxifeniletilamina; 3-Hidroxitiramina; 4-(2-Aminoetil)catecol; 4-(2-Aminoetil)pirocatecol; DA; Dopamin; Dopamina; Dopamina; Duobaan; Hidroxitiramín; NSC 173182; Oxitiramina; (3,4-Dihidroxifenil)-aminoetano
51-63-8	C9 H13 N . 1/2 H2 O4 S	Benzeneethanamine, a-methyl-, (aS)-, sulfate (2:1)	Bencenoetanamina, Alfa-metil-, (Alfa S) -, sulfato (2:1)	Bencenoetanamina, a-metil-, (S) -, sulfato (2: 1); Fenetilamina, a-metil-, sulfato (2: 1), (+) - (8CI); (+)-Amitrene; (+)-Sulfato de anfetamina; (+)-Sulfato de anfetamina; (S)-sulfato de anfetamina; (S)-a-Metilbencenoetanamina sulfato; Afatin; Albemap; Amdex; Amphex; Amsustain; Ardex; Betafedrina; Betafedrina; Sulfato de D-anfetamina; D-Ate fenilo 747; DAS; Ddex; Dex-Sule; Dexalme; Dexalona; Dexampex; Sulfato de dexanfetamina; Sulfato de dexanfetamina; Dexedrina; Sulfato de dexedrina; Dexten; Sulfato de dextro-1-fenil-2-amino-propano; Sulfato de dextro-a-metilfenetilamina; Sulfato de dextro-b-fenilisopropilamina; Sulfato de dextroanfetamina; Dextrostat; Dextrosule; Diocurb; Domafato; Dura Dex; Evrodex; Fabatin; Hetamina; Sulfato de maxiton; Medex; NSC 27104; Obesedrina; Pellcap; S-(+)-Sulfato de anfetamina;

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
				Simpamina-D; Simpamin; sulfato de d-1-fenil-2-aminopropano; d-Amfetasul; sulfato de d-anfetamina; sulfato de d-anfetamina; d-Betafedrina; d-betafedrina; sulfato de d-a-metilfenetilamina; sulfato de d-b-fenilisopropilamina
51-64-9	C9 H13 N	Benzeneethanamine, a-methyl-, (aS)-	Bencenoetanamina, a-metil-, (aS) -	Bencenoetanamina, a-metil-, (S) -; Fenetilamina, a-metil-, (+) - (8CI); (aS) -a-Metilbencenoetanamina; (+) - (S) -Anfetamina; (+) - Anfetamina; (+) - fenamina; (+) - a-Metilfenetilamina; (2S) - (+) - Anfetamina; (S) - (+) - Anfetamina; (S) - (+) - b-fenilisopropilamina; (S) -1-Metil-2-feniletilamina; (S) -1-fenil-2-aminopropano; (S) -1-Fenil-2-propanamina; (S) -1-Fenil-2-propilamina; (S) -Anfetamina; (S) -a-Metilfenetilamina; D - (+) - Anfetamina; D-anfetamina; Dexadrina; Dexanfetamina; Dexanfetamina; Dextroanfetamina; Metamina; NSC 73713; d- (S) -anfetamina; d-anfetamina; d-a-metilfenetilamina
51-65-0	C9 H10 F N O2	Phenylalanine, 4-fluoro-	Fenilalanina, 4- fluoro-	Alanina, 3- (p-fluorofenil) -, DL- (8CI); DL-fenilalanina, 4-fluoro-; 4-fluorofenilalanina; (±) -4-fluorofenilalanina; ácido 2-amino-3- (4-fluorofenil) propanoico; 4-fluoro-DL-fenilalanina; Alnasid; DL-3- (p-fluorofenil) alanina; DL-4-fluorofenilalanina; DL-p-fluorofenilalanina; FPA; NSC 71433; PFFA; p-fluoro-DL-fenilalanina; p-fluorofenilalanina; ácido a-amino-4-fluorobencenopropanoico
51-66-1	C9 H11 N O2	Acetamide, N-(4-methoxyphenyl)-	Acetamida, N- (4-metoxifenil) -	p-acetanisida (4CI); p-acetanisidida (6CI, 7CI, 8CI); N- (4-metoxifenil) acetamida; 4- (acetilamino) anisol; 4-acetamidoanisol; 4-acetamidofenil metil eter; 4-metoxiacetanilida; 4-metoxianilino metil cetona; 4'-metoxiacetanilida; Aceto-p-anisidida; Acetil-p-anisidina; Metacetina; Metacetina; N- (p-metoxifenil) acetamida; N-acetil-4-metoxianilina; N-acetil-p-anisidina; N-acetil-p-metoxianilina; NSC 4687; p-acetanisidina; p-metoxiacetanilida
51-74-1	C5 H9 N3 . 2 H3 O4 P	1H-Imidazole-4-ethanamine, phosphate (1:2)	1H- Imidazol- 4- etanamina, fosfato (1: 2)	Histamina, difosfato (7CI); Histamina, fosfato (1: 2) (6CI, 8CI); Bis (fosfato) de 2- (1H-imidazol-4-il) etanamina; 4- (2-aminoetil) imidazol bis (fosfato de dihidrogeno); Fosfato diácido de 4- (2-aminoetil) imidazol; Fosfato ácido de histamina; Bifosfato de histamina; Dihidrogenofosfato de histamina; Difosfato de histamina; Fosfato de histamina; Histapon
51-75-2	C5 H11 Cl2 N	Ethanamine, 2-chloro-N-(2-chloroethyl)-N-methyl-	Etanamina, 2- cloro- N- (2-cloroetil) - N- metil-	Dietilamina, 2,2'-dicloro-N-metil- (8CI); 2-cloro-N- (2-cloroetil) -N-metiletanamina; 2,2'-dicloro-N-metildietilamina; Bis (2-cloroetil) metilamina; Bis (b-cloroetil) metilamina; Cloretazina; Clormetina; Cloramina; Di (2-cloroetil) metilamina; HN2; HN2 (amina); Ledaga; MBA; Mecloretamina; Metil-b, b-diclorodietilamina; Metilbis (2-cloroetil) amina; Metilbis (b-cloroetil) amina; Metildi (2-cloroetil) amina; Mustargen; Mustine; Nota imprescindible; N, N-Bis (2-cloroetil) metilamina; N, N-Di (cloroetil) metilamina; N-metil-2,2'-diclorodietilamina; N-metilbis (2-cloroetil) amina; N-metilbis (b-cloroetil) amina; NSC 128663; Mostaza nitrogenada (HN 2); Valclor
51-77-4	C27 H44 O2	4,8,12-Tetradecatrienoic acid, 5,9,13-trimethyl-, (2E)-3,7-dimethyl-2,6-octadien-1-yl ester, (4E,8E)-	4, 8, 12- ácido tetradecatrienoico, 5, 9, 13-trimetil-, (2E) - 3, 7- dimetil- 2, 6- octadien- 1 - ester de ilo, (4E, 8E) -	ácido 4,8,12-tetradecatrienoico, 5,9,13-trimetil-, (2E) -3,7-dimetil-2,6-octadienil ester, (4E, 8E) - (9CI); ácido 4,8,12-tetradecatrienoico, ester 5,9,13-trimetil-, 3,7-dimetil-2,6-octadienilico, (E, E, E) - (8CI); ácido 5,9,13-trimetil-4,8,12-tetradecatrienoico 3,7-dimetil-2,6-octadienil ester; Alsanato; Arsanyl; DA 688; Dixnolate; Gefanil; Gefarnate; Gefarnil; Gefarnilo; Gefulcer; Acetato de farnesilo de geranilo; Osteol; Salanil; Zackal; 5,9,13-trimetil-4,8,12-tetradecatrienoato de trans-3,7-dimetil-2,6-octadienilo
51-78-5	C6 H7 N O . Cl H	Phenol, 4-amino-, hydrochloride (1:1)	Fenol, 4- amino-, clorhidrato (1: 1)	Fenol, 4-amino-, clorhidrato (9CI); Fenol, p-amino-, clorhidrato (8CI); Clorhidrato de 4-aminofenol; Cloruro de 4-hidroxianilinio; C.I. 76551; C.I. Base de oxidacion 6A; Marron Durafur R; Furamina CP; Fournine 83; Fournine P; Furro P; Futramina P; Pelagol CP; Gris

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
				Pelagol CP; Peltol P; clorhidrato de p-aminofenol; clorhidrato de p-hidroxianilina
51-79-6	C3 H7 N O2	Carbamic acid, ethyl ester	ácido carbámico, ester etílico	Aminoformiato de etilo; Carbamato de etilo; Etiluretano; Leucetano; NSC 746; Etiluretano; Pracarbamina; Uretano; Uretano
51-80-9	C5 H14 N2	Methanediimine, N,N,N',N'-tetramethyl-	Metanodiamina, N, N, N', N'-tetrametil-	N, N, N', N'-tetrametilmetanodiamina; 2,4-dimetil-2,4-diazapentano; Bis (dimetilamino) metano; Dimetil [(dimetilamino) metil] amina; Metilénbis (dimetilamina); N, N, N', N'-tetrametildiaminometano; N, N, N', N'-tetrametilmetilendiamina; N, N'-tetrametildiaminometano; N, N'-tetrametilmetanodiamina; NSC 166169; NSC 54796; Tetrametildiaminometano; Tetrametilmetanodiamina; Tetrametilmetilendiamina; [(Dimetilamino) metil] dimetilamina
51-82-1	C6 H14 N2 S 2	Carbamodithioic acid, N,N-dimethyl-, (dimethylamino) methyl ester	ácido carbamoditioico, N, N-dimetil-, (dimetilamino) metil ester	ácido carbámico, dimetilditio-, (dimetilamino) metil ester (6Cl, 7Cl, 8Cl); ácido carbamoditioico, dimetil-, (dimetilamino) metil ester (9Cl); Metanotiol, (dimetilamino) -, dimetilditioicarbamato (ester) (8Cl); N, N-dimetilditioicarbamato de dimetilaminometilo; ester dimetilaminometílico del ácido N, N-dimetilditioicarbámico; NSC 25049
51-83-2	C6 H15 N2 O 2 . Cl	Ethanaminium, 2- [(aminocarbonyl) oxy]-N,N,N-trimethyl-, chloride (1:1)	Etanaminio, 2- [(aminocarbonyl) oxil] - N, N, N- trimetil-, cloruro (1: 1)	Colina, cloruro, carbamato (6Cl, 8Cl); Etanaminio, 2 - [(aminocarbonyl) oxil] -N, N, N-trimetil-, cloruro (9Cl); Cloruro de (2-carbamoiloxietil) trimetilamonio; Carbamato de cloruro de (2-hidroxietyl) trimetil amonio; Cloruro de carbamato de 2- (trimetilazaniumil) etilo; Carbacol; Cloruro de carbacol; Carbacholina; Carbacholina; Cloruro de carbacholina; Carbacolina; Cloruro de carbaminocolina; Cloruro de carbaminoilcolina; Carbamiotina; Cloruro de carbamoilcolina; Clorhidrato de carbamoilcolina; Cloruro de carbamilcolina; Carbastat Intraocular; Carbocol; Carbocolina; Carbocolina; Carbyl; Carcolina; Cloruro de carbamato de colina; Coletyl; Doryl; Doryl (farmaceutico); Isoptocarbacol; Jestryl; Cuaresma; Miostat; Moryl; Vasoperif; cloruro de g-carbamoil colina
52-01-7	C24H32O4S	Pregn-4-ene-21-carboxylic acid, 7-(acetylthio)-17-hydroxy-3-oxo-, g-lactone, (7a,17a)-	Ácido pregn-4-eno-21-carboxílico, 7-(acetiltio)-17-hidroxi-3-oxo-, Gamma-lactona, (7 alfa, 17alfa) -	Ácido 17a-Pregn-4-eno-21-carboxílico, 17-hidroxi-7a-mercapto-3-oxo-, g-lactona, acetato (6Cl, 8Cl); Derivado del ácido espiro[17H-ciclopenta[a]fenantreno-17,2'(5'H)-furan], pregn-4-eno-21-carboxílico; Ácido 17-hidroxi-7a-mercapto-3-oxo-17a-pregn-4-eno-21-carboxílico g-lactona 7-acetato; Ácido 3-(3-oxo-7a-acetiltio-17b-hidroxi-4-androsten-17a-il)propionico-g-lactona; Ácido 3-(3-ceto-7a-acetiltio-17b-hidroxi-4-androsten-17a-il)propionico lactona; Ácido 3'-(3-oxo-7a-acetiltio-17b-hidroxiandro-4-en-17a-il)-propionico lactona; g-lactona del ácido 7a-(acetiltio)-17-hidroxi-3-oxo-17a-pregn-4-eno-21-carboxílico; 7a-acetiltio-3-oxo-17a-pregn-4-eno-21,17b-carbolactona; Abbolactona; Aldace; Aldactone; Aldactone A; Aldopur; Almatol; Altex; Aquareduct; Berlactona; Deverol; Diatensec; Dira; Duraspiron; Euteberol; Lacalmin; Lactdene; Laractona; NSC 150399; Nefurofan; Novo-Spiroton; Osiren; Osyrol; Quimolactona; SC 9420; Sagisal; Sincomen; Espiresis; Spiretic; Spiridon; Spiro-Tablinen; Espiroctano; Espirodermo; Espirilactona; Spirolang; Espirilona; Spirone; Espironol; Espironolactona; Espironolactona A; Supra-Puren; Suracton; Uractona; Urusonin; Verospiron; Verospirona; Xenalon
52-28-8	C18H21NO3. H3O4P	Morphinan-6-ol, 7,8-didehydro-4,5-epoxy-3-methoxy-17-methyl-, (5a,6a)-, phosphate (1:1)	Morfinano-6-ol, 7,8-didehidro-4,5-epoxi-3-metoxi-17-metil-, (5a,6a) -, fosfato (1: 1)	Fosfato de codeina (6Cl, 7Cl); Morfinan-6-ol, 7,8-didehidro-4,5-epoxi-3-metoxi-17-metil-, (5a,6a) -, fosfato (1:1) (sal) (9Cl); Morfinan-6a-ol, 7,8-didehidro-4,5a-epoxi-3-metoxi-17-metil-, fosfato (1:1) (sal) (8Cl); (-)-Fosfato de codeina; Fosfato de codeina (1:1); Galcodine; Tricodina

No. de CAS	Fórmula química	CAS name	Nombre CAS	Otros Nombres
52-31-3	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₃	2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-(1-ciclohexen-1-yl)-5-ethyl-	2,4,6 (1H, 3H, 5H)-pirimidinatriona, 5 - (1-ciclohexen-1-il)-5-etil -	Ácido Barbiturico, 5-(1-ciclohexen-1-il)-5-etil- (8Cl); 5-(1-Ciclohexen-1-il)-5-etil-2,4,6(1H,3H,5H)-pirimidinetriona; Ácido 5-(1-Ciclohexen-1-il)-5-etilbarbiturico; Ácido 5-(1-Ciclohexenil)-5-etilbarbiturico; Ácido 5-Etil-5-(1-ciclohexenil)barbiturico; Adorm; Amnosed; Cavonil; Ciclobarbital; Ciclobarbitona; Ciclodorm; Ciclohexal; Etilhexabital; Fanodorm; Fanodormo; Hexadorm; Hexemal; Hipnoval; Irifan; Namuron; Palinum; fanodorm; fanotal; filodorm; Praelumin; Pralumin; Pro-Sonil; Sonaform; Sonoform; Tetrahidrofenobarbital
52-49-3	C ₂₀ H ₃₁ N O . Cl H	1-Piperidinepropanol, a-ciclohexyl-a-phenyl-, clorhidrato (1:1)	1-Piperidinopropanol, Alfa-ciclohexil-alfa-fenil-, clorhidrato (1:1)	1-Piperidinopropanol, a-ciclohexil-a-fenil-, clorhidrato (6Cl,7Cl,8Cl,9Cl); clorhidrato de (±)-Trihexifenidil; clorhidrato de 1-ciclohexil-1-fenil-3-(piperidin-1-il)propan-1-ol; clorhidrato de 1-fenil-1-ciclohexil-3-piperidil-1-propanol; clorhidrato de 3-(1-Piperidil)-1-ciclohexil-1-fenil-1-propanol; clorhidrato de 3-(1-Piperidil)-1-fenil-1-ciclohexil-1-propanol; clorhidrato de Alfa-ciclohexil-alfa-fenil-1-piperidinopropanol; Antitrem; Aparkane; Artane; Artane clorhidrato; Cloruro de benzhexol chloride; clorhidrato de Benzhexol ; Broflex; ciclodol; Pacitane; Paralest; Parcopane; Pargitan; Parkidil; Parkinane; Parkinol; Parkinsan; Parkisan; Parkopan; Partigan; Peragit; Pipanol; Romparkin; Sedrina; Tremin; Trihexi; clorhidrato de Trihexifenidil; clorhidrato de Trihexifenidil; Trifedion; Trifenidil; Tsiklodol; a-ciclohexil-a-fenil-1-piperidinopropanol clorhidrato;
52-51-7	C ₃ H ₆ BrNO ₄	1,3-Propanediol, 2-bromo-2-nitro-	1,3-propanodiol, 2-bromo-2-nitro -	2-Bromo-2-nitro-1,3-propanodiol; 2-Bromo-2-nitropropan-1,3-diol; 2-Bromo-2-nitropropano-1,3-diol; 2-Nitro-2-bromo-1,3-propanodiol; Acticida L 30; BE 6; BE 6 (bactericida); BNPD; BNPK; Bactrinashak; Bactrinol 100; Bactronol; Bioban; Bioban BP 10; Bioban BP 40; Bioban BP Plus; Bronidiol; Bronocot; Bronopol; Bronotak; Busan 1144; Canguard 409; Myacida AS; Myacida AS Plus; Myacida BT; Myacida Pharma BP; N 25; N 25 (antimicrobial); NSC 141021; Nalco 92RU093; Onyrida 500; Preventol P 100; Protectol BN; Protectol BN 98; Protectol BN 99; Pyceze; Topcida 2520; Ultra-Fresh SAB
52-53-9	C ₂₇ H ₃₈ N ₂ O ₄	Benzeneacetone nitrile, a-[3-[[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]methylamino]propyl]-3,4-dimethoxy-a-(1-methylethyl)-	Benzeneacetone nitrilo, Alfa - [3 - [[2 - (3,4-dimetoxifenil) etilo] metilamino] propil] -3,4-dimetoxi - alfa-(1-metiletil) -	Valeronitrilo, 5-[[3,4-dimetoxifenil]metilamino]-2-(3,4-dimetoxifenil)-2-isopropil- (7Cl, 8Cl); a-[3-[[2-(3,4-dimetoxifenil)etil]metilamino]propil]-3,4-dimetoxi-a-(1-metiletil)benzoacetone nitrilo; (±)-Verapamilo; 2-(3,4-dimetoxifenil)-5-[2-(3,4-dimetoxifenil)etil-metilamino]-2-propan-2-ilpentanonitrilo; 2-(3,4-dimetoxifenil)-5-[[2-(3,4-dimetoxifenil)etil](metil)amino]-2-(propan-2-il)pentanonitrilo; 2-(3,4-dimetoxifenil)-5-[[2-(3,4-dimetoxifenil)etil](metil)amino]-2-isopropilpentanonitrilo; 5-[(3,4-dimetoxifenil)metilamino]-2-(3,4-dimetoxifenil)-2-isopropilvaleronitrilo; CP 16533-1; D 365; Iproveratril; Lekoptin; NSC 272306NA; R, S-Verapamilo; VPL; Verapamilo; dl-Verapamilo;
52-67-5	C ₅ H ₁₁ NO ₂ S	D-Valine, 3-mercapto-	D-Valina, 3-mercapto-	Valina, 3-mercapto-, D-(8Cl); 3-Mercapto-D-valina; (-)-Penicilamina; Ácido (2S)-2-amino-3-metil-3-sulfanilbutanoico; Ácido (2S)-2-amino-3-metil-3-sulfanilbutanoico; (2S)-2-azaniumil-3-metil-3-sulfanilbutanoato; (S)-3,3-dimetilcisteina; (S)-Penicilamina; Ácido 2-amino-3-mercapto-3-metilbutanoico; Artamin; Cuprenil; Cuprimina; Cupripen; D-(-)-Penicilamina; D-3-mercaptovalina; D-mercaptovalina; D-penamina; D-penicilamina; DPA; Depamina; Depen; Dimetilcisteina; Kuprenil; Mercaptil; Metalcaptasa; NSC 81549; Pendramina; Penicilamina; Penicilamina; Perdotat; D-penicilamina reducida; Penicilamina reducida; Sufirtan; Trolvol; b-tiovalina;

c) Validación de la identidad química por parte del CAS

Completada la sistematización de todas las sustancias, para la validación de la identidad química se consideró como pertinente que directamente la organización del CAS realizara dicha validación para corroborar la identidad química del listado total.

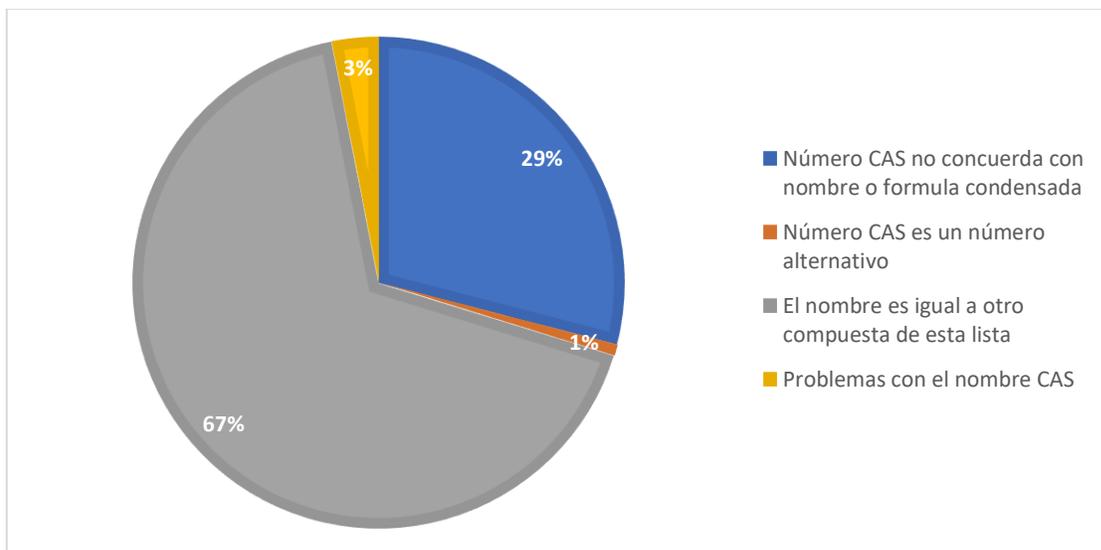
El envío de información para la validación lo realizó directamente el INECC el cual obtuvo como respuesta del CAS que 682 registros presentaban alguna irregularidad.

Las irregularidades presentadas son:

- Número CAS no concuerda con nombre o fórmula condensada.
- Número CAS es un número alternativo.
- El nombre es igual a otro compuesto de esta lista.
- Problemas con el nombre CAS.

En el gráfico 1 se pueden observar las irregularidades junto con su porcentaje. La irregularidad con mayor porcentaje es “número CAS no concuerda con nombre o fórmula condensada” seguido de “número CAS es un número alternativo”.

Gráfico 1. Diferentes irregularidades presentadas y su porcentaje



En el cuadro 3 se presentan algunos ejemplos de las irregularidades con mayor porcentaje detectadas después de la validación.

Cuadro 3. Ejemplos de errores resultantes de la validación

Tipo de error	No. de CAS	Comentarios
Número CAS no concuerda con nombre o fórmula condensada	95962-14-4	The CAS RN provided does not match the name or molecular formula provided. Is the name provided correct?
	82413-20-5	
	82461-14-1	
	82419-36-1	
	76703-62-3	
El nombre es igual a otro compuesto de esta lista	67075-37-0	The name provided is the same for the substance in line 114. Is the name provided correct?
	110152-61-9	The name provided is the same for the substance in line 149,150 & 152
	98769-75-6	The name provided is the same for the substance in line 162. Is the name provided correct?
	76023-99-9	The name provided is the same for the substance in line 173. Is the name provided correct?
	88230-35-7	The name provided is the same for the substance in line 251. Is the name provided correct?

Después de esta validación se encontró del listado total solo 7.5% (682) de las sustancias presenta algún tipo de irregularidad, sin embargo, esta cifra se ve reducida si se considera que “numero CAS es igual a otro compuesto de esta lista” se marca como irregularidad a las dos sustancias que presentan el mismo número

CAS, tomando en cuenta lo antes mencionado, el porcentaje de irregularidades total pasa a ser 6.4% (583 irregularidades).

Conclusiones

En el presente trabajo se llevó a cabo con éxito la integración de los datos de identidad química de las nuevas sustancias identificadas en la actualización del INSQ correspondiente al periodo del 2018 al 2020 con el fin de completar el Catálogo Nacional de Sustancias Químicas.

Los resultados obtenidos de la búsqueda usando la base de datos de Scifinder, permitieron homologar y ordenar la nomenclatura de las diferentes sustancias químicas considerando su nombre CAS, fórmula química condensada y sus sinónimos.

La validación de datos permitió encontrar las irregularidades en el listado final, estas anomalías se pueden atribuir a lo siguiente:

- Falla en el llenado de las celdas de Excel con la información de la identidad química de las sustancias.
- Desfase de las celdas al transferir el archivo entre diferentes dispositivos electrónicos.
- Inconsistencia en la traducción del nombre CAS de inglés al español.

Para corregir estas irregularidades identificadas por el CAS, se tiene que realizar la búsqueda de las sustancias detectadas empleando Scifinder utilizando la metodología descrita con anterioridad y comparar ambos datos, de tal forma que se puedan solucionar los comentarios obtenidos de la validación.

Esta búsqueda no es definitiva debido a que el INSQ cambia constantemente, sin embargo, este trabajo se puede tomar como referencia para futuras actualizaciones, se recomienda especial atención en las irregularidades detectadas para una búsqueda más eficiente.

Bibliografía

- American Chemical Society. (2021). CAS History. Recuperado de <https://www.cas.org/es/about/cas-history>
- American Chemical Society. (2021). PatentPak. Recuperado, de <https://www.cas.org/es/products/patentpak>
- American Chemical Society. (s.f.). Introduction to CAS a division of the American Chemical Society. Recuperado de https://www.cas.org/sites/default/files/File%20Library/Home/cas_history.pdf
- American Chemical Society. (s.f.). SciFinder Training. Recuperado de <https://www.cas.org/support/training/scifinder>
- Diario Oficial de la Federación. (2018) Acuerdo por el que se aprueban los Lineamientos para el uso del Catálogo Nacional de Sustancias Químicas con fines estadísticos y geográficos. Recuperado de https://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5541067&fecha=16/10/2018
- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. (2014) Actualización del Inventario Nacional de Sustancias Químicas 2010-2013. Recuperado de https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/191430/2014_Actualizacion_del_inventario.pdf
- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. (2018) Lineamiento para el uso del Catalogo Nacional de Sustancias Químicas. Recuperado de https://datos.abiertos.inecc.gob.mx/Datos_abiertos_INECC/CGCSA/CNSQ/CNSQ.html
- Sistema Nacional de Información Ambiental y de Recursos Naturales. (2012) Compendio de Estadísticas Ambientales Indicadores Clave y de Desempeño Ambiental. Recuperado de https://apps1.semarnat.gob.mx:8443/dgeia/informe_12/07_residuos/cap7_3.html

- Universidad Autónoma Metropolitana. (s.f.). SciFinder, Chemical Abstracts Service (CAS). Recuperado, de <https://biblioteca.xoc.uam.mx/scifinder/>
- Universidad Nacional Autónoma de México. (2021). CAS SciFinder N. Recuperado de <https://www.bidi.unam.mx/index.php/cobertura-tematica/ver-todos-los-recursos/850-scifinder-full>
- Universidad Nacional Autónoma de México. (2021). SciFinder A CAS Solution. Recuperado de <https://www.bidi.unam.mx/index.php/cobertura-tematica/ver-todos-los-recursos/292-scifinder-antes-chemical-abstracts-full>
- University of California San Diego. (2021). SciFinder-n: What Is SciFinder?. Recuperado de <https://ucsd.libguides.com/scifinder/about>
- University of Missouri-St. Louis. (2021). About Chemical Abstracts. Recuperado de <https://libguides.umsl.edu/c.php?g=857359&p=6144016>
- Wroclaw University Library. (s.f.). Chemical Abstracts. Recuperado de https://www.bu.uni.wroc.pl/en/e-sources/databases-alphabetical-order/chemical_abstracts