



OPAQ

Conferencia de los Estados Partes

Primera Conferencia de Examen
28 de abril al 9 de mayo de 2003

RC-1/NAT.14
29 de abril de 2003
ESPAÑOL
Original: INGLÉS

REINO UNIDO DE GRAN BRETAÑA E IRLANDA DEL NORTE

LOS NÚMEROS DEL CAS EN EL CONTEXTO DE LA CONVENCION SOBRE LAS ARMAS QUÍMICAS

1. Síntesis de acción

- 1.1 El Anexo sobre sustancias químicas de la Convención sobre las Armas Químicas contiene información destinada a identificar las sustancias químicas a las que se aplica el Anexo sobre verificación de la Convención. Esta información adopta la forma sea de una descripción genérica de una clase de sustancias químicas o de un nombre químico específico con un número del Chemical Abstracts Service (CAS). Una descripción genérica puede abarcar un número muy grande – incluso millones – de sustancias químicas.
- 1.2 El intento de identificar las sustancias químicas de interés para la Convención únicamente mediante números del CAS lleva aparejadas diversas dificultades. El Chemical Abstracts Service asigna a veces a una sustancia un número temporal y después lo cambia, con la confusión consiguiente en cuanto al número del CAS correcto de una sustancia en particular. Además, los números del CAS se pueden asignar a mezclas de sustancias químicas, isómeros y sustancias marcadas con isótopos. Durante la negociación de la Convención se afirmó la necesidad de que esta abarque también esas formas de sustancias.¹ Sin embargo, el Chemical Abstracts Service no ha asignado un número a cada una de las sustancias incluidas en las Listas.
- 1.3 El recurso a los números del CAS como principal indicador de si una sustancia química figura en una Lista llevaría a una aplicación desigual de la Convención por los Estados Partes. Consideramos que el determinante principal de si una sustancia pertenece a una Lista es su estructura química manifestada por la clase genérica, si se indica, o por el nombre común o el específico de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (UIQPA). Los estereoisómeros de las sustancias incluidas en las Listas y las formas de estas marcadas con isótopos han de ser considerados como incluidos en las Listas a efectos de declaración y verificación. Los números del CAS no son apropiados para determinar si una sustancia pertenece a las Listas, ya que no sirven como medio para identificar cada sustancia individualmente ni se han asignado

¹ Ad Hoc Committee on Chemical Weapons, Identification of Chemical Substances (Comité Especial sobre Armas Químicas. Identificación de las sustancias químicas), Reino Unido de Gran Bretaña e Irlanda del Norte, CD/CW/WP.214*/12, diciembre de 1988



números del CAS a todas las sustancias pertinentes. Reconocemos, sin embargo, que la redacción de algunas entradas de las Listas limita el margen de acción de los Estados Partes para prescindir de los números del CAS a la hora de determinar si una forma determinada de una sustancia debe estar sujeta a declaración y verificación.

- 1.4 Recomendamos que el Consejo Ejecutivo estudie más detenidamente esta cuestión con el fin de encontrar soluciones que eviten el empleo de los números del CAS para determinar si una sustancia está incluida en las Listas. Esto es fundamental para una aplicación uniforme de la Convención por todos los Estados Partes. Una posible solución sería introducir una enmienda técnica en las Listas y en el Anexo sobre verificación, suprimiendo todos los números del CAS pero manteniéndolos con fines de referencia en el Manual de Declaración, el cual se podría actualizar incorporando las eventuales modificaciones de los números del CAS. En cualquier solución, el Consejo Ejecutivo debe tomar en consideración la repercusión que cualquier propuesta tendría en la legislación nacional de los Estados Partes. La solución de esta cuestión permitirá a los Estados Partes aplicar de manera uniforme las medidas de verificación, con el aumento consiguiente de la transparencia y la confianza en las disposiciones de la Convención.

2. Prefacio

- 2.1 Los grupos de sustancias químicas están repartidos en las Listas por categorías según el tipo o clase química. Ciertas sustancias están identificadas por el número que les ha asignado la UIQPA o por su nombre común y por su número de registro del CAS. Los números del CAS son identificadores numéricos asignados a las sustancias químicas para representarlas en el Sistema de Registro de Sustancias Químicas del CAS, establecido en 1965. Los números del CAS no guardan relación con la composición o la estructura molecular de la sustancia y se asignan por orden de entrada en el Sistema de Registro del CAS.
- 2.2 El presente documento expone los problemas técnicos que conlleva el empleo de números del CAS en las Listas y llega a la conclusión de que estos números son inapropiados para usarlos como identificadores primarios de las sustancias químicas de las Listas. También intenta elucidar los criterios aplicables para identificar las sustancias de las Listas, poniendo ejemplos concretos.

3. Inconvenientes de los números del CAS a efectos de identificación

- 3.1 Los números del CAS se han asignado en la mayoría de los casos a sustancias que poseen una estructura molecular completamente definida. A diferentes estereoisómeros (compuestos químicos que comparten la misma fórmula molecular, pero con una disposición espacial diferente de sus átomos componentes) y sales (en general, una forma estabilizada de una sustancia química, producida por reacción de esta sustancia con un ácido) de un compuesto químico se han asignado números del CAS diferentes, aun cuando tengan esencialmente las mismas propiedades químicas. Por ejemplo, el (+)-estereoisómero del tabún tiene el número del CAS [93957-08-5], y el (-)-estereoisómero tiene el número del CAS [93957-09-6], mientras que la mezcla racémica (una mezcla de ambos isómeros) tiene el número del CAS [77-81-6].

- 3.2 Sin embargo, un número del CAS no siempre designa una sustancia única o identificada sin la menor ambigüedad. Por ejemplo, no se establece diferencia entre los polímeros (moléculas grandes formadas por cadenas de monómeros que se repiten), que difieren solo por su peso molecular, longitud de la cadena, proporción de los monómeros o composición porcentual; en estos casos se da el mismo número del CAS a todas las formas variantes. En ocasiones se asigna un número del CAS a sustancias cuya estructura no se puede definir, o de hecho no ha sido definida, con la precisión suficiente para establecer fórmulas químicas. En otros casos, se ha asignado a mezclas un número del CAS propio, sin especificar la proporción de los compuestos en la mezcla.
- 3.3 Es posible que se asignen temporalmente números del CAS y luego los cambien. Esto puede crear confusión en cuanto al número del CAS correcto de una sustancia determinada.² Los cambios de número son competencia exclusiva del Chemical Abstracts Service.
- 3.4 No todos los compuestos químicos identificados tienen asignado un número del CAS. El Chemical Abstracts Service solo asigna número a un compuesto, e inscribe en su registro los datos pertinentes, previa solicitud y previo pago de derechos por una entidad o persona externas.

4. Los números del CAS y las Listas.

- 4.1 El Anexo sobre sustancias químicas no aclara la importancia de los números del CAS para las sustancias enumeradas en las Listas. Sin embargo, un examen de la disposición de las sustancias en las Listas hace pensar por razones técnicas que los números del CAS tienen una importancia relativamente pequeña para determinar si una sustancia está incluida en las Listas. Cierta número de sustancias figuran en las Listas con su nombre de la UIQPA o su nombre común, juntamente con su número del CAS. Pero la inmensa mayoría de compuestos incluidos en las Listas están descritos solamente por la clase genérica a la que pertenecen: a veces se ponen ejemplos de una clase de sustancias, junto con el número del CAS correspondiente. Para la mayoría de las sustancias de cada clase genérica y para la inmensa mayoría de las sustancias de las Listas, no se indica ningún número del CAS.
- 4.2 Como ya ha señalado el Consejo Ejecutivo,³ menos del 20% de las aproximadamente 1.200 sustancias (la mayoría incluidas en las Listas) inscritas en la Base de Datos Analíticos Central de la OPAQ tienen asignado un número del CAS. Millones de sustancias químicas están incluidas en las Listas en virtud de la mención de su clase genérica: es por lo tanto probable que muchas de ellas tampoco tengan número del CAS, En realidad nunca se sintetizarán muchos de estos compuestos.
- 4.3 De ahí se deduce que el determinante principal de si una sustancia está incluida en una Lista debe ser su estructura química, reflejada en la clase genérica a la que pertenece, o su nombre específico de la UIQPA o su nombre común, si lo tiene, pero no el número del CAS.

² Sirva de ejemplo la (+)-saxitoxina, que tiene asignado el número del CAS [35523-89-8], pero a la que antes se habían asignado sucesivamente tres números diferentes [11017-04-2], [51938-46-6] y [55803-44-6], ninguno de los cuales es ahora válido.

³ Nota del Director General interino: inclusión de los números de registro del Chemical Abstracts Service en las listas de nuevos datos validados (EC-29/DG.6, de fecha 12 de junio de 2002).

- 4.4 Es necesario esclarecer las consecuencias del marcado isotópico de una sustancia de las Listas para su tratamiento en el Anexo sobre verificación. Los isótopos son formas de átomos del mismo elemento químico que contienen el mismo número de protones, pero diferente número de neutrones. Las propiedades químicas de los compuestos marcados con isótopos (en los que uno o más átomos de una molécula han sido sustituidos por un isótopo) siguen siendo esencialmente las mismas. Si la forma no marcada de una molécula encaja en la descripción estructural indicada por el nombre químico de la clase genérica, también encajará la forma marcada con isótopos, independientemente de la naturaleza atómica de un elemento en particular: la molécula como tal sigue teniendo la estructura indicada por el nombre de clase genérica y se la deberá incluir en las Listas a efectos de declaración y verificación. Lo mismo vale para las sustancias de las Listas descritas por nombres de la UIQPA o nombres comunes.
- 4.5 Los estereoisómeros son sustancias que comparten la misma estructura química, pero con una disposición espacial diferente de los átomos que los componen. En ningún caso están exentos de las medidas de declaración y verificación los estereoisómeros de sustancias incluidas en las Listas. En realidad, en condiciones normales muchas sustancias de las Listas existen como mezclas de estereoisómeros.⁴ Cabe, pues, concluir que los estereoisómeros de las sustancias de las Listas, y sus mezclas, deben estar incluidos en las Listas y ser objeto de las medidas de verificación pertinentes, sin que importe que a un estereoisómero en particular se le haya asignado un número del CAS diferente del que figura en el Anexo sobre sustancias químicas.

5. Conclusiones

- 5.1 Consideramos inapropiado basarse en el número del CAS para definir una sustancia incluida en las Listas. Aunque puede facilitar la declaración y la verificación, el número del CAS no debe utilizarse como medio para identificar una sustancia química ni para determinar si está o no incluida una sustancia en una Lista. Solo la estructura molecular de una sustancia puede determinar si se le aplica una entrada de las Listas.
- 5.2 Si una sustancia está incluida en las Listas también se deben incluir todas las formas marcadas con isótopos y los estereoisómeros de esa sustancia, independientemente de si el Chemical Abstracts Service les ha asignado o no un número del CAS que corresponda al que figura en las Listas. Las medidas descritas en el Anexo sobre verificación se aplican a esas sustancias de la misma manera que se aplican a cualquier otra sustancia de las Listas.
- 5.3 Recomendamos que el Consejo Ejecutivo estudie más detenidamente estas cuestiones y proponga soluciones que eviten el empleo de los números del CAS para determinar si una sustancia está incluida en las Listas. El Reino Unido preferiría que se introduzca una enmienda técnica en las Listas y en el Anexo sobre verificación, por la que se supriman todos los números del CAS, pero manteniéndolos con fines de

⁴ Los agentes neurotóxicos de la Lista 1 GB, GA y VX tienen cada uno dos enantiómeros (formas de un compuesto que tienen la misma estructura molecular, pero de manera que una forma es como la imagen reflejada en el espejo de la otra, como un par de guantes), mientras que el GD tiene dos pares de enantiómeros. En cada uno de estos casos, el número del CAS que figura en la Lista 1 se aplica solo a la mezcla racémica (una mezcla de los enantiómeros). Aunque cada enantiómero puede ser sintetizado o separado, muchos forman rápidamente mezclas racémicas en condiciones normales. El Reino Unido destacó este punto durante la negociación de la Convención.¹

referencia en el Manual de Declaración. En cualquier solución, el Consejo Ejecutivo debe tomar en consideración la repercusión que cualesquiera propuestas tendrían en la legislación nacional de los Estados Partes. La solución de esta cuestión permitirá a los Estados Partes aplicar de manera uniforme las medidas de verificación, de conformidad con las disposiciones del Anexo sobre verificación, con el aumento consiguiente de la transparencia y la confianza en las disposiciones de la Convención.

--- 0 ---