



# Saneantes – O que é CAS RN e sua importância regulatória para as formulações dos produtos Saneantes

Realização:

Agência Nacional de Vigilância Sanitária

Coordenação de Gestão da Transparência e Acesso à Informação - CGTAI  
Gerência-Geral de Conhecimento, Inovação e Pesquisa - GGCIIP

Coordenação de Saneantes– COSAN  
Gerência de Produtos de Higiene, Perfumes, Cosméticos e Saneantes – GHCOS



Copyright © 2021 ANVISA. All Rights Reserved.



## WEBINAR – Objetivo



**O**rientar o setor regulado a respeito das **melhores práticas relacionadas a descrição da formulação do produto Saneante no sistema de peticionamento SOLICITA**, com o objetivo de diminuir o número de notificações de exigências e indeferimentos de produtos. Para isso, será apresentado o que é CAS RN, quais os critérios de atribuição e verificação, métodos de validação, casos específicos e exemplos reais voltados para identificação de substâncias e misturas nas formulações de produtos Saneantes

# Moderador(es) Dúvidas

**Apresentação**

**Compilado de perguntas e resposta**

**Perguntas claras e objetivas**

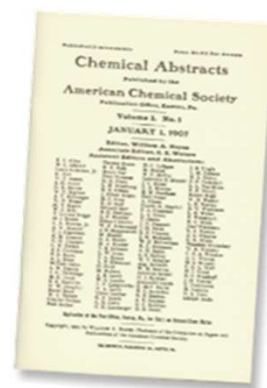
**Perguntas sobre a apresentação**

# AGENDA

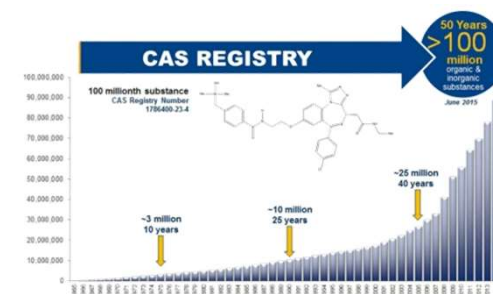


- Quem é o CAS, breve histórico
- Quem utiliza os dados do CAS e para quais propósitos
- O que é o número CAS (CAS RN) e seu significado
- Critérios para atribuição de CAS RN e quais compostos recebem
- Compostos com zero referências, segredos industriais e produtos comerciais
- Pedidos de registro de CAS RN e processamento
- Verificação e checagem de CAS RN
- Estudos de caso de Saneantes
- Erros mais comuns na descrição da fórmula

# Quem é o CAS – Chemical Abstracts Service



**Chemical Abstracts**  
Compêndio de resumos  
de artigos científicos em  
química, criado em 1907



**CAS Registry Number**  
Indexação e registro numérico  
de compostos químicos,  
implementado em 1965. Evita  
ambiguidades

# O CAS está presente em todo o ambiente regulatório



Australian Government  
Department of Health

Australian Industrial Chemicals  
Introduction Scheme



NATIONAL MEDICAL PRODUCTS ADMINISTRATION  
国家药品监督管理局



Environmental  
Protection Authority  
Te Mana Rauhi Taiao

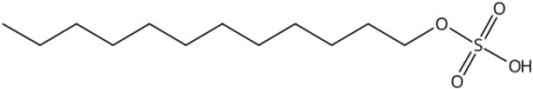


Health  
Canada



ANVISA  
Agência Nacional de Vigilância Sanitária

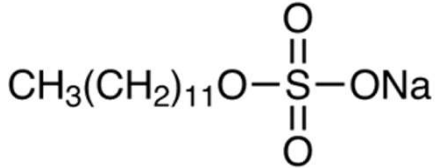
# Harmonização da informação química



• Na

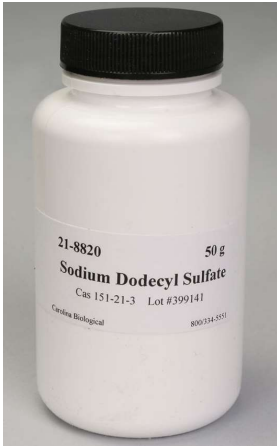
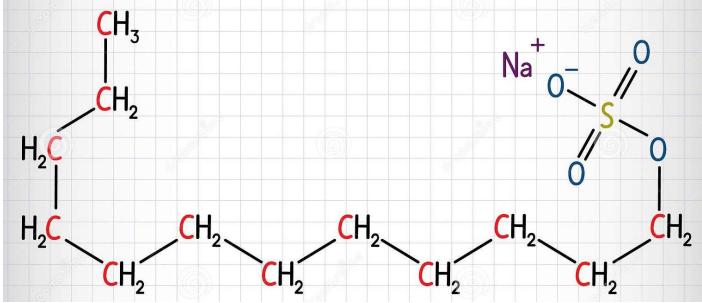


**Dodecil sulfato de sódio**



**Stepanol T 28**

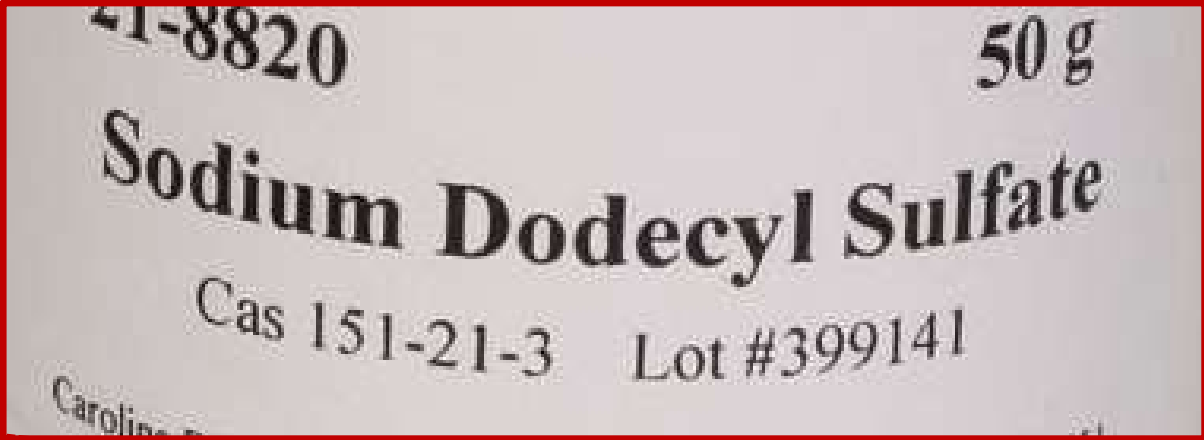
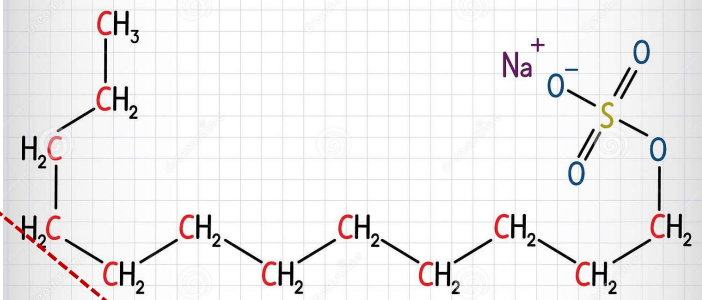
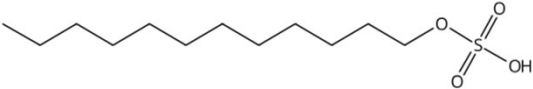
**Natriumdodecylsulfat**



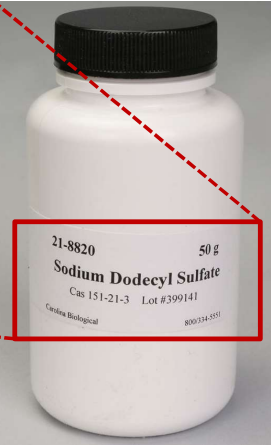
# Harmonização da informação química



151-21-3



Stepanol T 28



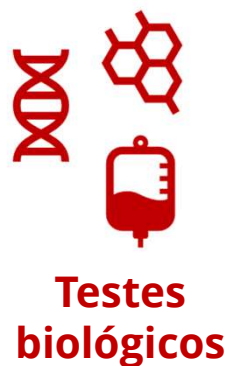
Dodecil sulfato de sódio

Natriumdodecylsulfat

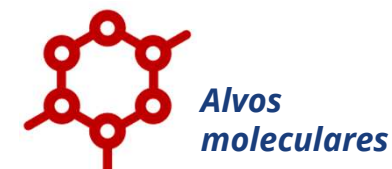




# O CAS RN conecta literatura, aplicações, propriedades



CAS Registry Number  
*CAS RN*

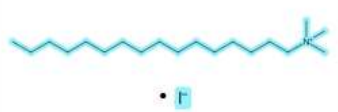

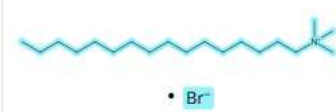
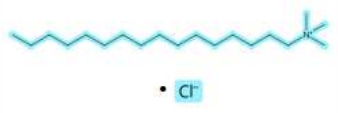

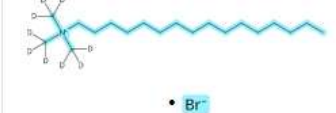




## O que é o CAS Registry Number (CAS RN)

- Um número de registro para substâncias químicas criado em **1965**
- **Intenção:** remover a ambiguidade na indexação proveniente da grande variedade de nomenclaturas, representações gráficas e outras identificações, cada substância possui um único CAS RN
- Maneira **sistemática** de, numericamente, distinguir substâncias, sem significado químico
- Atualmente há mais de **263** milhões de compostos registrados
- Cobertura desde o início dos anos 1900, contemplando compostos relatados desde o século XIX
- Atualizações diárias com inclusão de mais de 800 substâncias inéditas por hora

# Derivados e análogos possuem distintos CAS RN

<p><input type="checkbox"/> 1</p> <p>7192-88-3</p>  <p>• I<sup>-</sup></p> <p>C<sub>19</sub>H<sub>42</sub>N.I Components: 2 Component RN: 6899-10-1 Cetyltrimethylammonium iodide</p> <p>126 References   7 Reactions   7 Suppliers</p>	<p><input type="checkbox"/> 2</p> <p>289679-67-0</p>  <p>• I<sup>-</sup></p> <p>C<sub>19</sub>H<sub>42</sub>N.I Components: 2 Component RN: 754174-45-3 1-Hexadecanaminium, <i>N,N</i>-dimethyl-<i>N</i>-(methyl-<sup>14</sup>C)-, iodide</p> <p>0 References   0 Reactions   1 Supplier</p>	<p><input type="checkbox"/> 3</p> <p>57-09-0</p>  <p>• Br<sup>-</sup></p> <p>C<sub>19</sub>H<sub>42</sub>N.Br Components: 2 Component RN: 6899-10-1 Hexadecyltrimethylammonium bromide</p> <p>73K References   11K Reactions   111 Suppliers</p>
<p><input type="checkbox"/> 4</p> <p>112-02-7</p>  <p>• Cl<sup>-</sup></p> <p>C<sub>19</sub>H<sub>42</sub>N.Cl Components: 2 Component RN: 6899-10-1 Hexadecyltrimethylammonium chloride</p> <p>14K References   1.473 Reactions   90 Suppliers</p>	<p><input type="checkbox"/> 5</p> <p>14002-56-3</p>  <p>• F<sup>-</sup></p> <p>C<sub>19</sub>H<sub>42</sub>N.F Components: 2 Component RN: 6899-10-1 1-Hexadecanaminium, <i>N,N,N</i>-trimethyl-, fluoride (1:1)</p> <p>62 References   1 Reaction   6 Suppliers</p>	<p><input type="checkbox"/> 6</p> <p>95217-14-4</p>  <p>• Br<sup>-</sup></p> <p>C<sub>19</sub>H<sub>33</sub>D<sub>3</sub>N.Br Components: 2 Component RN: 752160-14-8 1-Hexadecanaminium, <i>N,N,N</i>-tri(methyl-<i>d</i><sub>3</sub>)-, bromide (1:1)</p> <p>8 References   2 Reactions   9 Suppliers</p>

# Critérios para receber um CAS RN

**O composto deve estar relatado na literatura com comprovação científica da sua obtenção ou seu registro deve ser solicitado com comprovação de síntese (referência zero). Exemplos:**

- Compostos orgânicos
- Compostos inorgânicos
- Metais
- Ligas
- Minerais
- Compostos de coordenação
- Organometálicos
- Elementos, isótopos e partículas nucleares
- Proteínas, ácidos nucleicos e sequências
- Polímeros
- UVCB – Unknown or Variable composition, Complex reaction products and Biological materials
- Misturas
- Produtos Naturais
- Formas Iônicas
- Semi-condutores
- Estereoisômeros
- Marcados isotopicamente

# Como o CAS indexa substâncias químicas

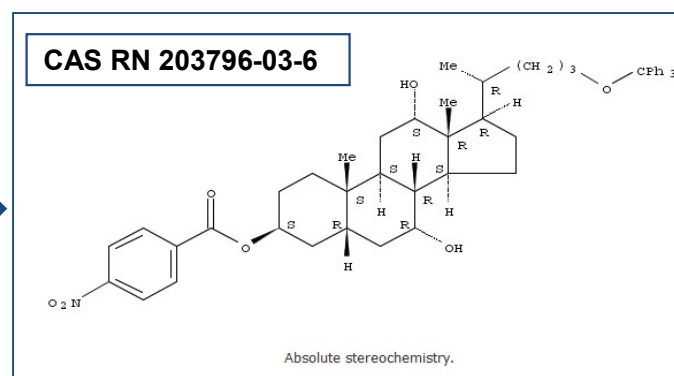


- Leitura **humana** de artigos e patentes, com **indexação manual**.
- Cobertura de mais de 55 mil **periódicos** desde 1820 e **patentes** de 64 autoridades.
- Checagem e atualização contínua e diária dos bancos de dados: **CAS REGISTRY®**
- Atribuição de CAS RN novos a substâncias inéditas, inclusão de papel (**Role**) e conexão com outras bases de dados.

Compound 34: Diisopropyl azodicarboxylate (DIAD) (1.20 mL, 6.08 mmol) was added to triphenylphosphine (1.60 g, 6.08 mmol) in THF (100 mL) at 0 °C. and was stirred for half an hour during which time the yellow solution became a paste.

Compound 14 (2.58 g, 4.06 mmol) and p-nitrobenzoic acid (0.81 g, 4.87 mmol) were dissolved in THF (50 mL) and added to the paste. The resulted mixture was stirred at ambient temperature overnight. Water (100 mL) was added and the mixture was made slightly basic by adding NaHCO<sub>3</sub> solution followed by extraction with EtOAc (3x50 mL). The combined extracts were washed with brine once and dried over anhydrous Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. **The desired product (2.72 g, 85% yield)** was obtained.

SiO<sub>2</sub> chromatography (Et<sub>2</sub>O/hexanes 1:2). m.p. 207-209 °C.; IR (KBr) 3434, 3056, 2940, 2868, 1722, 1608, 1529,1489, 1448, 1345 cm<sup>-1</sup>; <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 300 MHz) δ 8.30-8.26 (m, 2 H); 8.21-8.16 (m, 2 H); 7.46-7.42 (m, 6 H); 7.31-7.18 (m, 9 H)5.33 (bs, 1 H); 4.02 (bs, 1 H); 3.90 (bs, 1 H); 3.09-2.97 (m, 2 H); 2.68 (td, J=14.95, 2.56 Hz, 1 H); 2.29-2.19 (m, 1 H); 2.07-1.06 (series of multiplets, 24 H); 1.01 (s, 3 H); 0.98 (d, J=6.6 Hz, 3 H); 0.70 (s, 3 H); <sup>13</sup>C NMR (CDCl<sub>3</sub>, 75 MHz) δ 164.21, 150.56, 144.70, 136.79, 130.77, 128.88, 127.86, 126.98, 123.70, 86.47, 73.24, 73.00, 68.70, 64.22, 47.79, 46.79, 42.15, 39.76, 37.47, 35.52, 35.34, 34.23, 33.79, 32.46, 31.12, 28.74, 27.71, 26.85, 26.30, 25.16, 23.41, 17.98, 12.77; HRFAB-MS (thioglycerol+Na<sup>+</sup> matrix) m/e: ([M+Na]<sup>+</sup>) 808.4203 (53.8%), calcd. 808.4189.



# Substâncias com zero referências associadas

<p>1</p> <p>1374226-71-7</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: An epoxy-contg. <b>surfactant</b> (DIC Corp.) Unspecified RS 211K</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>	<p>2</p> <p>1345413-17-3</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: A nonionic <b>surfactant</b> (Witco Chemico) Unspecified Lauropol D207</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>	<p>3</p> <p>1232992-89-0</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: An anionic <b>surfactant</b> (Lion Corp.) Unspecified Lipolan PB 600</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>
<p>4</p> <p>1163717-86-9</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: A polymerizable <b>surfactant</b> Unspecified Polystep NMS 9</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>	<p>5</p> <p>908845-97-6</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: A reactive <b>surfactant</b> (Dai-Ichi Kogyo Seiyaku Co., Ltd.) Unspecified Aqualon KH 0530</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>	<p>6</p> <p>880282-28-0</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: A polymerizable ethoxylated alkylphenyl ether <b>surfactant</b> (Dai-Ichi Kogyo Seiyaku Co., Ltd.) Unspecified Noigen RN 4065</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>
<p>7</p> <p>839694-40-5</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: A reactive <b>surfactant</b> (Toagosei Co.) Unspecified UFO-MM</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>	<p>8</p> <p>757240-68-9</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: A polymerizable <b>surfactant</b> (Asahi Denka) Unspecified Adekanol SR 20N</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>	<p>9</p> <p>736994-58-4</p> <p>Image Not Available</p> <p>Notes: An anionic <b>surfactant</b> (Matsumoto Yushi Seiyaku) Unspecified SSK 25</p> <p>0 References 0 Reactions 0 Suppliers</p>

Como é possível uma substância com CAS RN definido possuir zero referências associadas?



<https://www.cas.org/cas-custom-services/registry-services/nomenclature-and-registration>

<https://www.cas.org/solutions/cas-custom-services/knowledge-management/chemist-consultation/faq>

# Critérios para novos CAS RN



## Well Defined Chemical Compounds

- Chemical structure diagram
- Systematic chemical name
- Common names
- Molecular formula

## Polymeric Substances

- Specific starting monomers (required)
- Reaction scheme
- Role of reactants (e.g., polymer backbone, initiator, terminator)
- Structural description, including the general type of polymer (e.g., graft, block, random)
- Representative structure diagram

## Complex Reaction Products

- List of reactants and nature of the reaction
- Reaction scheme
- Typical composition of the product

## Plant and Animal Products

- Genus Species as well as other unambiguous common names of the source
- Method of extraction
- Description of further chemical processing

## Products from Industrial Processes

- Precursors and method of preparation
- Schematic diagram depicting the industrial process and the point where the substance is isolated
- Process description (e.g., catalytic cracking, dewaxed)
- Carbon (alkyl) range (e.g., C<sub>4</sub> through C<sub>12</sub>)
- Physical properties (e.g., boiling range, viscosity, solid, slag)
- Principal chemical composition
- Source (e.g., petroleum, coal)

## Biotechnological Products

- Sequence data
  - protein/DNA/RNA
  - any modifications to sequence
  - complete or fragment
  - naturally occurring or synthetic
  - trivial designation
- Biological source information, including Genus Species
- Enzyme activity



CAS REGISTRY SERVICES™

# CHEMIST CONSULTATION ORDER



## CUSTOMER REQUESTING INFORMATION

Dr.  Mr.  Mrs.  Ms.  Miss

Family/Last Name \_\_\_\_\_ First Name \_\_\_\_\_

Organization \_\_\_\_\_

Address \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_

Telephone \_\_\_\_\_ Email \_\_\_\_\_

ALTERNATE CONTACT FIRST NAME / LAST NAME / PHONE / EMAIL (OPTIONAL)  
\_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_

## PAYMENT INFORMATION

VISA  MasterCard  American Express

Name on Card (Required) \_\_\_\_\_

Card # \_\_\_\_\_ Exp. Date \_\_\_\_\_

Purchase Order # \_\_\_\_\_

Email Invoice to (if different than provided at left) \_\_\_\_\_

Billing Address (same as provided at left) \_\_\_\_\_

Billing Contact/Address (if different than provided at left) \_\_\_\_\_

*Email is default delivery for results and invoice*

## CAS REGISTRY SERVICES CHEMIST CONSULTATION

CAS Registry Services Chemist Consultation provides substance identity information at a consultation rate. For CAS REGISTRY Number® retrieval or assignment, please see registration criteria, information requirements and attach a chemical structure diagram. If you would like both a CAS Registry Number and CA Index Name, please check the two appropriate boxes below.

- CA Index Names (Attach chemical structure diagram, page 2)
- Retrieval of existing CAS Registry Numbers
- Assignment of new CAS Registry Numbers. I acknowledge and understand that the identities of these substances are non-confidential and will be disclosed publicly. If a CAS Registry Number already exists, it will be retrieved.

NOTE: IF YOU REQUEST ASSIGNMENT OF A NEW CAS REGISTRY NUMBER FOR A SUBSTANCE NOT ALREADY PRESENT IN THE CAS REGISTRY SYSTEM, THAT ASSIGNMENT WILL MAKE YOUR SUBSTANCE PUBLICLY AVAILABLE IN CAS REGISTRY®. CUSTOMER IDENTITY INFORMATION WILL BE KEPT CONFIDENTIAL. IF YOU WISH TO MAINTAIN CONFIDENTIALITY FOR YOUR SUBSTANCE'S IDENTITY, YOU SHOULD REQUEST ONLY A CA INDEX NAME OR RETRIEVAL OF AN EXISTING CAS REGISTRY NUMBER.

A signature below is required before the requested Chemist Consultation will be performed. This acknowledges acceptance of the CAS Registry Services Terms and Conditions and CAS Information Use Policy.

Any proposals for additional or different terms, including, but not limit to, the terms set forth in any Purchase Order submitted by Customer, are hereby rejected. Performance of CAS Registry Services does not constitute acceptance of any additional or different terms. Acceptance of a Purchase Order by CAS will be for payment purposes only. None of the terms set forth in the Purchase Order will be binding upon CAS.

As an authorized individual, by typing my name below, I accept the above terms provided in this Order Form.

Authorized Signature \_\_\_\_\_

Date \_\_\_\_\_

CAS  
2540 Orlentangy River Road  
P.O. Box 3343 | Columbus, OH 43210-0334 | USA

cas.org

© Copyright 2021 American Chemical Society.  
All rights reserved.

Phone: +1 614.447.3870  
Phone (North America): +1 800.631.1884  
E-mail: answers@cas.org | Web: cas.org

## CHEMICAL STRUCTURE DIAGRAM OR DESCRIPTIVE INFORMATION

Unique substance identifier (limited to 20 alphanumeric characters, for example trade name, product code or sequential numbering)

\_\_\_\_\_

Provide your chemical structure diagram or descriptive information in the space below or in a separate attachment.



CAS  
2540 Orlentangy River Road  
P.O. Box 3343 | Columbus, OH 43210-0334 | USA

cas.org

© Copyright 2021 American Chemical Society.  
All rights reserved.

Phone: +1 614.447.3870  
Phone (North America): +1 800.631.1884  
E-mail: answers@cas.org | Web: cas.org



## Onde e como checar CAS RNs

- Bases de dados do CAS:
  - **CAS REGISTRY**
  - **SciFinder**
  - **STNext**
  - **CAS Common Chemistry**
- Repositórios de agências regulatórias governamentais que estejam atualizados
- Handbooks, relatórios técnicos
- Bases de dados selecionadas da Elsevier



# ESTUDOS DE CASO

Casos reais do uso do CAS RN em FISPQs de formulações  
de produtos saneantes

# 1 – Múltiplos CAS RN



## Componentes perigosos

Nome químico	Nº CAS	Classificação do GHS
Compostos de amônio quaternário, benzyl coco alquildimetil, cloretos	61789-71-7	Acute Tox. 4; H302 Categoria 1B; H314 Categoria 1; H318 Categoria 1; H400 Categoria 1; H410 Fator M (Agudo): 10 Fator M (crônico): 1
Cloreto de didecildimetilamonio	7173-51-5	Acute Tox. 3; H301 Categoria 1B; H314 Categoria 1; H318 Categoria 1; H400 Categoria 2; H411 Fator M (Agudo): 10
Dietilenoglicol	111-46-6	Acute Tox. 4; H302 Categoria 2; H373

### As substâncias seguintes têm múltiplos números CAS

Compostos de amônio quaternário, benzyl coco alquildimetil, cloretos : 85409-22-9  
68424-85-1

# 1 – Múltiplos CAS RN



## Componentes perigosos

Nome químico	Nº CAS	Classificação do GHS
Compostos de amônio quaternário, benzyl coco alquildimetil, cloretos	61789-71-7	Acute Tox. 4; H302 Categoria 1B; H314 Categoria 1; H318 Categoria 1; H400 Categoria 1; H410 Fator M (Agudo): 10 Fator M (crônico): 1
Cloreto de didecildimetilamonio	7173-51-5	Acute Tox. 3; H301 Categoria 1B; H314 Categoria 1; H318 Categoria 1; H400 Categoria 2; H411 Fator M (Agudo): 10
Dietilenoglicol	111-46-6	Acute Tox. 4; H302 Categoria 2; H373

**As substâncias segundas têm múltiplos números CAS**  
Compostos de amônio quaternário, benzyl coco alquildimetil, cloretos  
85409-22-9  
68424-85-1

## 2 – Cloreto de benzalcônio



### 3 - Composição e informações sobre os ingredientes

Tipo de Produto:	Mistura
Nome químico comum:	Cloreto de Dodecil Dimetil Benzil Amônio
Sinônimo:	Cloreto de Benzalcônio
N° CAS:	Cloreto de Benzalcônio, 8001-54-5; Água, 7732-18-5.
Ingredientes ou impurezas que Contribuam para o perigo:	Cloreto de Benzalcônio, 50%, CAS 8001-54-5.

## 2 – Cloreto de benzalcônio



### 3 - Composição e informações sobre os ingredientes

Tipo de Produto:	Mistura
Nome químico comum:	Cloreto de Dodecil Dimetil Benzil Amônio
Sinônimo:	Cloreto de Benzalcônio
N° CAS:	Cloreto de Benzalcônio, 8001-54-5; Água, 7732-18-5.
Ingredientes ou impurezas que Contribuam para o perigo:	Cloreto de Benzalcônio, 50%, CAS 8001-54-5.



# 3 – Formulação de fragrância



OXY CLEAN 20			
Versão 1.0		Data da revisão 18 MAI 2020	Data de impressão 18 MAI 2020
<b>Componentes perigosos</b>			
Nome químico	Nº CAS Nº CE	Classificação ABNT NBR 14725-2:2009	Concentração [%]
2-ciclohexilideno-2-fenilacetona	10481-98-0 423-740-1	Acute Tox. 4; H302 Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 2; H411	>= 5 - < 10
Propionato de 3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-4,7-metano-1H-inden-6-ila	69912-13-0 272-805-7	Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 2; H411	>= 5 - < 10
Acetato de 2-terc-butilciclohexila	88-41-5 201-828-7	Flam. Liq. 4; H227 Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316 Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 2; H411	>= 5 - < 10
Acetato de 4-terc-butilciclohexila	32210-23-4 250-954-9	Acute Tox. 5; H303 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401	>= 5 - < 10
3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-4,7-metano-1-inden-5(6)-yl acetate	54830-99-8 219-700-4	Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316 Aquatic Acute 3; H402	>= 2,5 - < 5
2-Hidroxibenzoato de benzila	118-58-1 204-262-9	Acute Tox. 5; H303 Eye Irrit. 2B; H320 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 3; H412	>= 2,5 - < 5
2-Hidroxibenzoato de hexila	8259-76-3 228-408-6	Skin Irrit. 3; H316 Skin Sens. 1; H317 Aquatic Acute 1; H400 Aquatic Chronic 1; H410	>= 2,5 - < 5
3,7-Dimetil-octan-3-ol	78-69-3 201-133-9	Flam. Liq. 4; H227 Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401	>= 2,5 - < 5
3,7-Dimetil-6-octen-1-ol	106-22-9 203-375-0	Acute Tox. 5; H303 Acute Tox. 5; H313 Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401	>= 2,5 - < 5

OXY CLEAN 20			
Versão 1.0		Data da revisão 18 MAI 2020	Data de impressão 18 MAI 2020
2,6-Dimetil-7-octen-2-ol	18479-68-8 242-362-4	Flam. Liq. 4; H227 Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319 Aquatic Acute 3; H402	>= 1 - < 2,5
Acetato de 2-metil-3-fenilpropan-2-ila	151-05-3 205-781-3	Acute Tox. 5; H303 Aquatic Acute 3; H402	>= 1 - < 2,5
Mistura de cis-Tetrahydro-2-isobutil-4-metilpiran-4-ol; trans-Tetrahydro-2-isobutil-4-metilpiran-4-ol	63500-71-0 405-040-6	Eye Irrit. 2A; H319	>= 1 - < 5
Dodecanal	112-54-9 203-983-6	Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319 Skin Sens. 1B; H317	>= 1 - < 5
Difenil éter	101-84-8 202-981-2	Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316 Eye Irrit. 2A; H319 Aquatic Acute 1; H400 Aquatic Chronic 3; H412	>= 1 - < 2,5
9-Decen-1-ol	13019-22-2 235-878-6	Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319	>= 1 - < 5
4-fenil-2-butanona	2550-26-7 219-847-4	Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316	>= 1 - < 5
2-metil-4-(2-metilpropil)-Benzenopropanal	1637294-12-2	Acute Tox. 4; H332 Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2B; H320 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 2; H411	>= 0,25 - < 1
(trans & cis) 2-Hexil-3-fenil-2-propenal	101-86-0 202-983-3	Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 1; H400 Aquatic Chronic 2; H411	>= 0,25 - < 1
2,2-dimetil-3-(4(2)-etilfenil)propanal	67634-15-5 266-819-2	Skin Irrit. 2; H315 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 1; H400 Aquatic Chronic 2; H411	>= 0,25 - < 1



# 3 – Formulação de fragrância



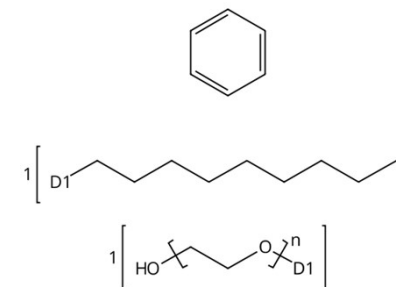
OXY CLEAN 20			
Versão 1.0		Data da revisão 18 MAI 2020	Data de impressão 18 MAI 2020
<b>Componentes perigosos</b>			
Nome químico	Nº CAS Nº CE	Classificação ABNT NBR 14725-2:2009	Concentração [%]
2-ciclohexilideno-2-fenilacetona	10481-98-0 423-740-1	Acute Tox. 4; H302 Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 2; H411	>= 5 - < 10
Propionato de 3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-4,7-metano-1H-inden-6-ila	69912-13-0 272-805-7	Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 2; H411	>= 5 - < 10
Acetato de 2-tert-butilciclohexila	88-41-5 201-828-7	Flam. Liq. 4; H227 Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316 Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 2; H411	>= 5 - < 10
Acetato de 4-tert-butilciclohexila	32210-23-4 250-954-9	Acute Tox. 5; H303 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401	>= 5 - < 10
3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-4,7-metano-1-inden-5(6)-yl acetate	54830-99-8 219-700-4	Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316 Aquatic Acute 3; H402	>= 2,5 - < 5
2-Hidroxibenzoato de benzila	118-58-1 204-262-9	Acute Tox. 5; H303 Eye Irrit. 2B; H320 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 3; H412	>= 2,5 - < 5
2-Hidroxibenzoato de hexila	8259-76-3 228-408-6	Skin Irrit. 3; H316 Skin Sens. 1; H317 Aquatic Acute 1; H400 Aquatic Chronic 1; H410	>= 2,5 - < 5
3,7-Dimetiloctan-3-ol	78-69-3 201-133-9	Flam. Liq. 4; H227 Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401	>= 2,5 - < 5
3,7-Dimetil-6-octen-1-ol	106-22-9 203-375-0	Acute Tox. 5; H303 Acute Tox. 5; H313 Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401	>= 2,5 - < 5

OXY CLEAN 20			
Versão 1.0		Data da revisão 18 MAI 2020	Data de impressão 18 MAI 2020
2,6-Dimetil-7-octen-2-ol	18479-68-8 242-362-4	Flam. Liq. 4; H227 Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319 Aquatic Acute 3; H402	>= 1 - < 2,5
Acetato de 2-metil-3-fenilpropan-2-ila	151-05-3 205-781-3	Acute Tox. 5; H303 Aquatic Acute 3; H402	>= 1 - < 2,5
Mistura de cis-Tetrahydro-2-isobutil-4-metilpiran-4-ol; trans-Tetrahydro-2-isobutil-4-metilpiran-4-ol	63500-71-0 405-040-6	Eye Irrit. 2A; H319	>= 1 - < 5
Dodecanal	112-54-9 203-983-6	Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319 Skin Sens. 1B; H317	>= 1 - < 5
Difenil éter	101-84-8 202-981-2	Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316 Eye Irrit. 2A; H319 Aquatic Acute 1; H400 Aquatic Chronic 3; H412	>= 1 - < 2,5
9-Decen-1-ol	13019-22-2 235-878-6	Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2A; H319	>= 1 - < 5
4-fenil-2-butanona	2550-26-7 219-847-4	Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316	>= 1 - < 5
2-metil-4-(2-metilpropil)-Benzenopropanal	1637294-12-2	Acute Tox. 4; H332 Skin Irrit. 2; H315 Eye Irrit. 2B; H320 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 2; H401 Aquatic Chronic 2; H411	>= 0,25 - < 1
(trans & cis) 2-Hexil-3-fenil-2-propenal	101-86-0 202-983-3	Acute Tox. 5; H303 Skin Irrit. 3; H316 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 1; H400 Aquatic Chronic 2; H411	>= 0,25 - < 1
2,2-dimetil-3-(4(2)-etilfenil)propanal	67634-15-5 266-819-2	Skin Irrit. 2; H315 Skin Sens. 1B; H317 Aquatic Acute 1; H400 Aquatic Chronic 2; H411	>= 0,25 - < 1



## 4 – Nonil fenol etoxilado, CAS RN genérico?

Nome químico	Nº CAS	Classificação de acordo com NBR 14725-2
Nonil Fenol Etoxilado 9,5EO	9016-45-9 (genérico)	Toxicidade aguda Oral, Categoria 4. H302 Toxicidade aguda, Pele, Categoria 5. H313. Corrosão/irritação à pele, Categoria 2. H315. Lesões oculares graves/irritação ocular, Categoria 2A. H319. Toxicidade à reprodução, Categoria 2, H361. Toxicidade para órgãos-alvo específicos - exposição única, Categoria 3 (irritação cardiovascular). H373. Perigo Categoria 2. Perigo Categoria 2. Perigo Categoria 2.



### 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

**Nome Químico Comum ou Genérico** Nonilfenol 9,5 EO

**Tipo de Produto** Substância.

**Sinônimos** Nonilfenol etoxilado 9,5 EO; Nonilfenol 9,5 EO; Nonoxynol 9,5 (INCI – CTEA).

**Nº CAS** 9016-45-9 (genérico).

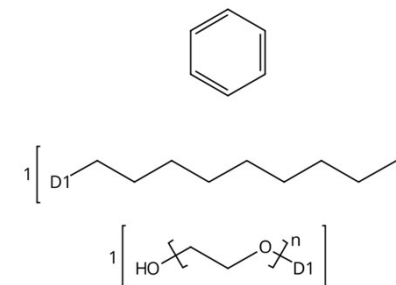
**Nº EINECS/NLP** 500-024-6 (genérico).

**Impurezas que contribuem para a classificação da substância**

Não existem impurezas que contribuem para a classificação da substância.

## 4 – Nonil fenol etoxilado, CAS RN genérico?

Nome químico	Nº CAS	Classificação de acordo com NBR 14725-2
Nonil Fenol Etoxilado 9,5EO	9016-45-9	Toxicidade aguda Oral, Categoria 4. H302 Toxicidade aguda, Pele, Categoria 5. H313. Corrosão/irritação à pele, Categoria 2. H315. Lesões oculares graves/irritação ocular, Categoria 2A. H319. Toxicidade à reprodução, Categoria 2, H361. Toxicidade para órgãos-alvo específicos - exposição única, Categoria 3 (irritação cardiovascular). H373. Perigo Categoria 2. Perigo Categoria 2. Perigo Categoria 2.



### 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

**Nome Químico Comum ou Genérico** Nonilfenol 9,5 EO

**Tipo de Produto** Substância.

**Sinônimos** Nonilfenol etoxilado 9,5 EO; Nonilfenol 9,5 EO; Nonoxynol 9,5 (INCI – CTEA).

**Nº CAS** 9016-45-9 (genérico).

**Nº EINECS/NLP** 500-024-6 (genérico).

**Impurezas que contribuem para a classificação da substância**

Não existem impurezas que contribuem para a classificação da substância.

## 5 – Nome comercial e CAS RNs



### Bardac™ 205-M

Version 6.0

Revision Date 2012.08.23

Print Date 2013.07.24

Environmental Effects

: Toxic to aquatic organisms; may cause long-term adverse effects in the aquatic environment.  
Marine pollutant.

**CAS RN ?**

#### SECTION 3. COMPOSITION/INFORMATION ON INGREDIENTS

Component	CAS-No.	Weight percent
Quaternary ammonium compounds, benzyl-C12-16-alkyldimethyl, chlorides	68424-85-1	20,00
Ethanol	64-17-5	10,00
Water	7732-18-5	40,00

**Sum of the following components:**

30 %

Decyldimethyloctylammonium chloride (CAS-No.: 32426-11-2)

Didecyldimethylammonium chloride (CAS-No.: 7173-51-5)

## 6 – Corantes com nomes comerciais

### 1 Company and Substance / Formulation Identification

- Product identifier
- Product name: **L83022 LIQUITINT RED ST**
- Product Code L83022
- Application of the substance / preparation Dyestuff/Colouring agent

### SECÇÃO 1. IDENTIFICACAO DO PRODUTO E DA SOCIEDADE

Nome do produto : LIQUITINT® PINK

### SEÇÃO 1: Identificação do Produto e da Empresa

#### 1.1. Identificação do produto

Nome comercial : LIQUITINT PG RED  
Uso recomendado : Agente de coloração, pigmento

### SECÇÃO 1. IDENTIFICACAO DO PRODUTO E DA SOCIEDADE

Nome do produto : LIQUITINT® BLUE HP  
Código do produto : 000000003000004446

### 3 Composition/information on ingredients

- Chemical characterization: **Mixtures**
- Description: Mixture of the substances listed below with nonhazardous additions.
- Hazardous components: Void

### SECÇÃO 3. COMPOSIÇÃO/ INFORMAÇÃO SOBRE OS COMPONENTES

Substância / Mistura : Mistura  
Natureza química : Mistura

### SECÇÃO 3. COMPOSIÇÃO/ INFORMAÇÃO SOBRE OS COMPONENTES

Substância / Mistura : Mistura  
Natureza química : Concentrado líquido

### Componentes perigosos

Nome Químico	No. CAS	Concentração (%)
1,4-Bis([2-(2-substituted ethoxy)ethoxy]alkylamino)-9,10-anthracenedione	Não atribuído	>= 50 - < 70

CAS RN ?

CAS RN ?

CAS RN ?

CAS RN ?

# 7 – Polímeros e monômeros



## SEÇÃO 1. IDENTIFICAÇÃO DO PRODUTO E DA EMPRESA

### Identificador do produto

Nome comercial : PVP K-30

Nome da substância : POLYVINYL PYRROLIDONE

Substância n°. N° CAS : 9003-39-8



## SEÇÃO 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

Substância / Mistura : Substância

Natureza química : orgânico

### Componentes perigosos

Nome químico	N° CAS	Classificação	Concentração (%)
PYRROLIDONE 2	616-45-5	Eye Dam. 2A; H319	>= 1.00 - < 5.00

## 8 – Materiais híbridos



1.1 Product Identifier		
<b>PRODUCT NAME:</b> A-80% + Zeolite	<b>OTHER MEANS OF IDENTIFICATION</b> Benzenesulphonic acid, Sodium salts, Sodium dodecylbenzene sulphonate with zeolite	<b>CAS No.</b> 25155-30-0

Chemical name	CAS No.	EC No.	No. UN	Components	Cas. No
Sodium Dodecyl Benzene Sulphonate 80% + Zeolite	25155-30-0	270-115-0	N/A	Dodecyl Benzene Sulfonic Acid	27176-87-0
				Sodium Hydroxide	1310-73-2
				Water	

**Zeolite CAS RN ?**

## 9 – Composto natural e produto final



### SEÇÃO 1. IDENTIFICAÇÃO DO PRODUTO E DA EMPRESA

**Identificador do produto**

Nome comercial

:

Natrosol™ 250HHR CS

Hidroxietilcelulose

™ Marca comercial, Ashland ou suas subsidiárias,  
registrada em diversos países

**CAS RN ?**

**Checar nome e  
definição**

### SEÇÃO 3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

Substância / Mistura : Mistura

Natureza química : orgânico

**Componentes perigosos**

Nenhum ingrediente perigoso.

Nenhum ingrediente perigoso.



# 10 – Segredos comerciais



## 3 COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÃO SOBRE OS INGREDIENTES

Esse material é uma mistura.

Ingrediente	No. CAS	% por peso
Água	7732-18-5	50 - 70
Óxido de alumínio (não-fibroso)	1344-28-1	10 - 30
Nafta pesada hidrotratada (Petróleo)	64742-48-9	5 - 10
Destilados de petróleo leves hidrotratados	64742-47-8	5 - 10
Etildiglicol	111-90-0	1 - 5
Glicerina	56-81-5	1 - 5
Óleo mineral branco	8042-47-5	1 - 5
Óleo Vegetal	Segredo Comercial	1 - 5
Polímero acrílico	Segredo Comercial	0.1 - 1
Estearato de glicol	Segredo Comercial	0.1 - 0.5

**CAS RN ?**

# 11 – Segredos industriais



## Mistura

Impurezas que contribuam para o perigo:

Não Disponível

Composição:

Segredo Industrial - 0% - 5% - Perigos (H317; H315; H319; H412)

Segredo Industrial - 0% - 5% - Perigos (H411)

Segredo Industrial - 10% - 20% - Perigos (H319; H315)

Segredo Industrial - 10% - 20% - Perigos (H410)

Segredo Industrial - 10% - 20% - Perigos (H317; H318; H315)

Segredo Industrial - 0% - 5% - Perigos (H412)

Segredo Industrial - 0% - 5% - Perigos (H319; H315)

Segredo Industrial - 0% - 5% - Perigos (H302)

Segredo Industrial - 5% - 10% - Perigos (H302; H317; H373)

Segredo Industrial - 5% - 10% - Perigos (H412)

Segredo Industrial - 5% - 10% - Perigos (H319)

Segredo Industrial - 10% - 20% - Perigos (H411; H319; H317)

Segredo Industrial - 0% - 5% - Perigos (H411)

Segredo Industrial - 0% - 5% - Perigos (H302; H311; H315; H319; H410)

# CAS RN ?



## Importância regulatória do CAS RN

- O **CAS RN** providencia um elo de confiança entre vários sistemas de **nomenclaturas**: nome IUPAC, variações de nomes científicos, nomes comuns, registros de marcas, códigos internos.
- Um número CAS **é único e específico** para apenas uma substância, independente de quantas maneiras a substância pode ser descrita
- Há uma **validação manual** e científica feita pela equipe de cientistas do CAS
- Congrega **outros sistemas** de representação química
- É uma chave para literatura relacionada, propriedades, aplicações, regulamentações, fornecedores, reações, atividade biológica, formulações, etc.

## Considerações finais



- O **registro** de produtos e formulações depende de uma identificação precisa dos seus componentes
- O **CAS RN** é o padrão global de fácil representação, validação e acesso
- Os **impactos regulatórios** podem ser mitigados com a correta atribuição de CAS RNs
- A verificação de CAS RNs faz parte do levantamento de evidências em uma Análise de Impacto Regulatório
- Há **ferramentas**, como o SciFinder, que removem a ambiguidade das representações químicas
- A consulta a **fontes de confiança** traz mais celeridade e segurança ao processo de desenvolvimento e leva seu produto mais rapidamente ao mercado

# SISTEMA SOLICITA

Como declarar uma formulação no Formulário de Dados  
Técnicos do Produto – Fórmula do Produto

### ❑ ERROS MAIS COMUNS

- ✓ Não declarar o componente pelo nome químico ou genérico e não informar o número do CAS RN

ID	Componentes da Fórmula	Quantidade (% p/p)	Função	Inscrição (CAS ou CI)
1	MISTURA (BLEND) DE QUATERNÁRIOS DE AMÔNIO	2,00	Ativo	
2	MISTURA (BLEND) CONSERVANTE	0,0015	Conservante	

## SANEANTES – Erros mais comuns

### ❑ ERROS MAIS COMUNS

- ✓ Não declarar o componente pelo nome químico ou genérico e não informar o número do CAS RN; e
- ✓ Juntar dois componentes em um único campo.

ID	Componentes da Fórmula	Quantidade (% p/p)	Função	Inscrição (CAS ou CI)
	MISTURA (BLEND) DE QUATERNÁRIOS 1 DE AMÔNIO	2,00	Ativo	68424-85-1 / 7173-51-5
	Cloreto de Alquil dimetil benzil amônio (c12-c16) / Cloreto de didecil dimetil 2amônio	2,00	Ativo	68424-85-1 / 7173-51-5

## ❑ FORMA CORRETA

- ✓ Os componentes devem ser declarados individualmente, pelo nome químico ou genérico, com seu respectivo número CAS e na concentração final

ID	Componentes da Fórmula	Quantidade (% p/p)	Função	Inscrição (CAS ou CI)
1	Cloreto de Alquil dimetil benzil amônio (c12-c16)	1,00	Ativo	68424-85-1
2	Cloreto de didecil dimetil amônio	1,00	Ativo	7173-51-5



### ❑ ERROS MAIS COMUNS

- ✓ Não declarar o corante pelo nome químico ou genérico e informar o CAS ou CI

ID	Componentes da Fórmula	Quantidade (% p/p)	Função	Inscrição (CAS ou CI)
1	Corante	0,30	Corante	17372-87-1
2	<b>Forma Correta de declarar</b> Vermelho ácido 87	0,30	Corante	17372-87-1

# Dúvidas sobre o CAS e o CAS RN

---



## **CAS Customer Center**

help@cas.org

## **CAS Brasil**

brazil@acs-i.org

www.cas.org



Coordenação de Gestão da Transparência e Acesso à Informação - CGTAI  
Gerência-Geral de Conhecimento, Inovação e Pesquisa - GGCIIP



# Obrigado

Realização:

Agência Nacional de Vigilância Sanitária

Coordenação de Saneantes– COSAN  
Gerência de Produtos de Higiene, Perfumes, Cosméticos e Saneantes – GHCOS

