

Maio de 2017

## Como identificar uma substância produzida em qualidades diferentes

### Introdução

A fragrância AH é constituída por vários isómeros. É produzida em três qualidades diferentes (qualidade X, Y e Z) que diferem no rácio desses isómeros.

### Composição

A substância, constituída por cinco isómeros (A, B, C, D e E), é fabricada com a seguinte composição:

Constituintes	Intervalos de concentração (%)			Intervalo global (%)
	Qualidade X	Qualidade Y	Qualidade Z	
<b>Isómero A:</b> 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
<b>Isómero B:</b> 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
<b>Isómero C:</b> [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
<b>Isómero D:</b> 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
<b>Isómero E:</b> 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona	0,5 - 1,5	4 - 6	10 - 15	0,5 - 15

Maio de 2017

## Identificação

### Opção 1: Registos separados para cada qualidade

Com base na regra 80/10 descrita no [Guia de orientação para a identificação e designação de substâncias no âmbito dos Regulamentos REACH e CRE](#), as três qualidades têm denominações diferentes:

- A qualidade X contém um constituinte principal (Isómero A) numa concentração igual ou superior a 80 %. Por conseguinte, é denominada como uma substância monoconstituente:

3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona

- A qualidade Y contém dois constituintes principais (Isómeros A e C) numa concentração igual ou superior a 10 % e inferior a 80 %. Por conseguinte, é denominada como uma substância multiconstituente:

mistura reacional de 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona e [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona

- A qualidade Z contém três constituintes principais (Isómeros A, C e E) numa concentração igual ou superior a 10 % e inferior a 80 %. Por conseguinte, é denominada como uma substância multiconstituente:

mistura reacional de 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona e [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona e 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona

### Opção 2: Um único registo para todas as qualidades (é necessária uma justificação)

É possível identificar a substância como uma substância multiconstituente, com base nos constituintes presentes em concentrações iguais ou superiores a 10 % nas três qualidades (ver o quadro com os valores do intervalo de concentração global). Por conseguinte, a substância será denominada como uma mistura reacional de quatro isómeros (A, B, C, E), do seguinte modo:

mistura reacional de 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona e 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona e [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona e 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona

Contudo, é obrigatória a apresentação de uma justificação para esta abordagem, devido ao desvio da regra de 80-10 % descrita no [Guia de orientação para a identificação e designação de substâncias no âmbito dos Regulamentos REACH e CRE](#).

As questões seguintes devem ser abordadas na justificação:

- Os dados de ensaio disponíveis abrangem a variabilidade das três qualidades;
- Todas as qualidades possuem propriedades físico-químicas muito idênticas;

Maio de 2017

- Todas as qualidades têm a mesma classificação e rotulagem; e
- Todas as qualidades são utilizadas de forma semelhante e possuem cenários de exposição semelhantes (por conseguinte, relatórios de segurança química semelhantes).