

Mayo de 2017

Cómo identificar una sustancia producida en calidades diferentes

Introducción

La fragancia AH consta de varios isómeros. Se produce en tres calidades diferentes (A, B y C), que difieren en la proporción de isómeros.

Composición

La sustancia, que consta de cinco isómeros (A, B, C, D y E), se fabrica con la composición siguiente:

Constituyentes	Intervalos de concentración (%)			Intervalo general (%)
	Calidad X	Calidad Y	Calidad Z	
Isómero A: 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
Isómero B: 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
Isómero C: [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
Isómero D: 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
Isómero E: 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona	0,5 - 1,5	4 - 6	10 - 15	0,5 - 15

Mayo de 2017

Identificación

Opción 1: Registros distintos para cada calidad

En virtud de la norma 80/10 descrita en el [Documento de orientación para la identificación y denominación de sustancias en REACH y CLP](#), las tres calidades reciben denominaciones diferentes, como sigue:

- La calidad X contiene un constituyente principal (isómero A) con una concentración ≥ 80 %. En consecuencia, se la denomina como una sustancia monoconstituyente.

3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona

- La calidad Y contiene dos constituyentes principales (isómeros A y C) con una concentración ≥ 10 % y < 80 %. En consecuencia, se la denomina como una sustancia multiconstituyente:

Masa de reacción de 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona y [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona

- La calidad Z contiene tres constituyentes principales (isómeros A, C y E) con una concentración ≥ 10 % y < 80 %. En consecuencia, se la denomina como una sustancia multiconstituyente:

Masa de reacción de 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona y [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona y 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona

Opción 2: Un único registro para todas las calidades (se requiere justificación)

La sustancia se puede identificar como una sustancia multiconstituyente basada en los constituyentes presentes en concentraciones ≥ 10 % en las tres calidades (véase la tabla de los valores de concentración del rango general). En consecuencia, se la denominará como una masa de reacción de cuatro isómeros (isómeros A, B, C y E), como sigue:

Masa de reacción de 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)but-3-en-2-ona y 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)but-3-en-2-ona y [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona y 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona

No obstante, para esta opción hace falta una justificación debido a la desviación de la regla del 80 % y la regla del 10 % descritas en el [Documento de orientación para la identificación y denominación de sustancias en REACH y CLP](#).

En la justificación se tienen que considerar las cuestiones siguientes:

- Los datos de ensayos disponibles cubren la variabilidad de las tres calidades.
- Todas las calidades tienen propiedades fisicoquímicas muy similares.
- Todas las calidades tienen la misma clasificación y etiquetado de peligros; y
- Todas las calidades se utilizan de una manera similar y tienen escenarios de exposición similares (por consiguiente, informes de seguridad química similares).