ECHA
EUROPEAN CHEMICALS AGENCY

DOCUMENTO DE ORIENTACIÓN

Documento de orientación para la identificación y denominación de las sustancias en REACH y CLP

Diciembre de 2023
Versión 3.0

AVISO LEGAL

El presente documento tiene por objeto ayudar a cumplir sus obligaciones en el marco de los Reglamentos REACH y CLP. No obstante, se recuerda a los usuarios que los textos de los Reglamentos REACH y CLP son la única referencia jurídica auténtica, y que la información de este documento no constituye asesoramiento jurídico. El uso de la información es responsabilidad exclusiva del usuario. La Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas no acepta responsabilidad alguna en relación con el uso que se pueda hacer de la información incluida en el presente documento.

Documento de orientación para la identificación y denominación de las sustancias en REACH y CLP

Referencia: ECHA-23-H-07-ES
Número cat.: ED-09-23-444-ES-N
ISBN: 978-92-9468-306-9
DOI: 10.2823/23454
Fecha de publicación: diciembre de 2023
Idioma: ES

© Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas, 2023
Portada © Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas

Si tiene alguna duda o comentario acerca de este documento, envíelos a la Agencia, indicando la referencia y la fecha de publicación, mediante el formulario de solicitud de información. Dicho formulario está disponible en la página de contacto de la ECHA en el siguiente enlace:

https://echa.europa.eu/contact

Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas

Dirección postal: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finlandia
Dirección física: Telakkakatu 6, 00150, Helsinki, Finlandia

PREFACIO

El presente documento describe cómo identificar y denominar sustancias de acuerdo con REACH y CLP. El documento se enmarca en una serie de documentos de orientación dirigidos a ayudar a todos los interesados a prepararse para cumplir las obligaciones que les incumben en virtud de los Reglamentos REACH y CLP. Estos documentos ofrecen orientación sobre toda una serie de procesos fundamentales de REACH y sobre algunos métodos científicos y/o técnicos específicos que la industria o las autoridades tienen que aplicar en virtud de dicho Reglamento.

Los documentos de orientación se han elaborado y examinado en el marco de los proyectos de aplicación del Reglamento REACH (RIP) gestionados por los servicios de la Comisión Europea, con la participación de las partes interesadas: Estados miembros, empresas y organizaciones no gubernamentales. Estos documentos de orientación se pueden obtener a través del sitio web de la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas (http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach). En este sitio web se publicarán otros documentos de orientación una vez terminados o actualizados.

HISTORIAL DEL DOCUMENTO

Versión	Observación	Fecha
Versión 1	Primera edición	Junio de 2007
Versión 1.1	Corrigendum para: - Añadir en el título y en los títulos de los capítulos una referencia al Reglamento CLP (Reglamento (CE) n.º 1272/2008 de 16 de diciembre de 2008). - Añadir texto para clarificar el ámbito del documento de orientación. Eliminar el texto redundante en todo el documento. - Incluir referencias al Reglamento CLP en todo el texto, cuando se considere necesario. - Cambiar el término «DOT» por «documento de orientación» en todo el documento. - Cambiar el término «preparación» por «mezcla» en todo el documento. - Cambiar el término «asunto» por «sección» en todo el documento. - Cambiar el término «prerregistro» por «prerregistro (tardío)» en todo el documento. - Insertar las abreviaturas EAA y CLP y eliminar las abreviaturas RIP y DOT. - Modificar las descripciones de aleación, catálogo CE e IUCLID. Introducir las definiciones de número CE, número de lista, mezcla y sustancia notificada. Eliminar la definición de «preparación». - Revisar la sección 3.2 para clarificar el contenido. - Revisar la sección 3.3 para clarificar el contenido con respecto a las obligaciones en virtud de CLP. - Cambiar en la sección 4.2.2.1 la forma de presentar los constituyentes; del porcentaje de concentración al orden alfabético, de manera que la composición relativa no puede deducirse del orden en la lista. - Cambiar el término red cristalina por cristal en la sección	Noviembre de 2011 (únicamente en inglés)

	4.2.3.1. - Revisar la sección 4.3.1.2.3 para clarificar el contenido. - Incluir en la sección 5 una referencia al Manual de presentación de datos, Parte 18 - «Cómo notificar la identidad de la sustancia en IUCLID 5 para su registro conforme a REACH». - Revisar la sección 5 para clarificar el contenido. - Cambiar la descripción de prerregistro a prerregistro (tardío) en la sección 6. - Actualizar los hiperenlaces rotos en el apéndice 1. - Eliminar la sección 4.3 del apéndice 2, ya que su contenido puede encontrarse en el sitio web correspondiente.	
Versión 1.2	Corrigendum La definición de «sustancia en fase transitoria» se ha alineado con la definición presente en el Reglamento (CE) n.º 1907/2006 incorporada en virtud del Reglamento (CE) 1354/2007 del Consejo y el Corrigendum, DO L 36, 5.2.2009, p. 84 (1907/2006). Tenga en cuenta que los cambios en la versión 1.1 y 1.2 están consolidados en una única versión 1.2 traducida para todas las lenguas excepto el inglés.	Marzo de 2012
Versión 1.3	Corrigendum Se han añadido dos fórmulas estructurales que faltaban en el capítulo 7.6.	Febrero de 2014
Versión 1.4	Corrigendum para: - Cambiar el formato del documento para que sea congruente con la identidad corporativa actual. - Eliminar el capítulo 8 en el que se facilitan instrucciones técnicas basadas en una versión obsoleta de IUCLID. - Corrección en la sección 7.5 en la descripción de la cristobalita y el cuarzo y eliminar la referencia a la Directiva 2000/30/CE. - Eliminar las referencias al capítulo 8 y al Manual de presentación de datos y añadir las referencias a los nuevos manuales de la ECHA. - Eliminar el apéndice III y trasladar la información al cuadro de la historia del documento.	Junio de 2016

	- Reparar los enlaces rotos a los sitios web y corregir los errores de redacción.	
Versión 2.0	Actualización parcial limitada a lo siguiente: - Adición del nuevo apéndice III con una descripción del concepto de perfil de identidad de la sustancia. - Adición de texto nuevo en el capítulo 1 para presentar el nuevo apéndice III. - Corrección de erratas y errores de redacción.	Diciembre de 2016
Versión 2.1	Corrección de errores tipográficos en el texto y en la información de composición de los ejemplos de la figura 2 del apéndice III.	Mayo de 2017
Versión 3.0	Actualizar para: - Adaptar a las modificaciones introducidas por el Reglamento (UE) 2022/477 de la Comisión, de 24 de marzo de 2022. - Eliminar las referencias al prerregistro (tardío). - Corregir erratas y errores de redacción. - Añadir enlaces a las páginas de asistencia técnica y de preguntas y respuestas de la ECHA. - Eliminar el apéndice III, apartado 5, sobre la transición de IUCLID 5 a IUCLID 6.	Diciembre de 2023

Índice

1. GENERAL 9
1.1. Objetivos 9
1.2. Ámbito de aplicación 10
1.3. Estructura del documento de orientación 11
2. DEFINICIONES Y ABREVIATURAS 12
2.1. Abreviaturas 12
2.2. Definiciones 14
3. DIRECTRICES PARA LA IDENTIFICACIÓN DE SUSTANCIAS EN REACH Y CLP 18
3.1. Definición de sustancia 18
3.2. Identificadores numéricos 18
3.2.1. Catálogo CE 18
3.2.2. Números de lista 20
3.3. Requisitos para la identificación de sustancias en REACH y CLP 20
4. ORIENTACIONES PARA LA IDENTIFICACIÓN Y DENOMINACIÓN DE LAS SUSTANCIAS EN REACH Y CLP 24
4.1. Introducción 24
4.2. Sustancias de composición bien definida 30
4.2.1. Sustancias monoconstituyentes 31
4.2.2. Sustancias multiconstituyentes 34
4.2.3. Sustancias de composición química definida y otros identificadores principales 37
4.3. Sustancias UVCB 38
4.3.1. Orientaciones generales sobre las sustancias UVCB 39
4.3.2. Tipos específicos de sustancias UVCB 48
5. CRITERIOS PARA COMPROBAR SI LAS SUSTANCIAS SON IGUALES 57
6. IDENTIDAD DE LA SUSTANCIA EN UNA CONSULTA 64
7. EJEMPLOS 65
7.1. Dietil peroxidicarbonato 65
7.2. ZOLIMIDINA 66
7.3. Mezcla de isómeros 66
7.4. Fragancia AH 70
7.5. Minerales 76
7.6. Aceite esencial de lavanda grosso 79
7.7. Aceite de crisantemo e isómeros aislados asociados 85
7.8. Fenol, isopropilado, fosfato 89

7.9. Compuestos de amonio cuaternario....90
7.10. Derivados del petróleo....94
7.10.1. Corriente de mezcla de gasolina (C_4-C_{12})....94
7.10.2. Gasóleos (petróleo)....95
7.11. Enzimas....96
7.11.1. Subtilisina....97
7.11.2. α-amilasa....98
APÉNDICE I - MATERIALES DE APOYO.... 100
APÉNDICE II - GUÍA TÉCNICA PARA LOS PARÁMETROS DE IDENTIFICACIÓN DE SUSTANCIAS.... 106
APÉNDICE III - IDENTIFICACIÓN DE SUSTANCIAS Y PRESENTACIÓN CONJUNTA DE DATOS.... 123

Índice de cuadros

Cuadro 1: Abreviaturas 12
Cuadro 2: Definiciones 14
Cuadro 3: Parámetros de identificación de la sustancia en el anexo VI, sección 2, de REACH 22
Cuadro 4: Agrupación de los principales identificadores para ejemplos que representan distintos tipos de sustancias similares bien definidas 25
Cuadro 5: Agrupación de los principales identificadores para ejemplos que representan distintos tipos de sustancias UVCB 26

Índice de figuras

Figura 1: Clave para guiar al usuario a los capítulos y apéndices del documento de orientación, con el fin de obtener las directrices adecuadas a los distintos tipos de sustancias 29
Figura 2 (página siguiente): Esquema de los pasos dados por los posibles solicitantes de registro desde la determinación de sus obligaciones de registro (1) hasta la definición del PIS para la identidad de la sustancia (4) y, en última instancia, la presentación de sus registros para el cumplimiento formal de las obligaciones de registrar sus sustancias (8).... 129
Figura 3: Esquema ilustrativo de la definición de un PIS (paso 4 de la Figura 2) para una sustancia de tipo UVCB identificada atendiendo a descriptores de fuente y proceso procedentes de las descripciones de fuente y proceso de la entidad jurídica individual. 132

1. General

El Reglamento REACH (Reglamento (CE) n.º 1907/2006) instaura un sistema destinado al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de sustancias y preparados químicos, y establece la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas (ECHA) como autoridad encargada de velar por su aplicación[1].

El Reglamento CLP (Reglamento (CE n.º 1272/2008) es el nuevo reglamento europeo sobre clasificación, etiquetado y envasado de las sustancias y mezclas químicas[2]. Esta norma introduce en la Unión Europea un nuevo sistema para la clasificación y el etiquetado de productos químicos basado en el Sistema Globalmente Armonizado de las Naciones Unidas (SGA de la ONU).

El Reglamento REACH se centra en las sustancias. Para garantizar un funcionamiento adecuado de los procedimientos contemplados en REACH, es esencial la correcta e inequívoca identificación de la sustancia. El presente documento de orientación sobre identificación y denominación de las sustancias aspira a servir de guía en este sentido a las empresas del sector, los Estados miembros y la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas.

El presente documento de orientación se basa en la experiencia adquirida en materia de identificación de las sustancias conforme a la normativa anterior (Directiva 67/548/CEE y Directiva 98/8/CEE). Sin embargo, las prácticas actuales para la identificación de las sustancias conforme al Reglamento REACH y el Reglamento sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas (CLP) constituyen la base de este documento de orientación. Además, llegado el caso, se han tenido en cuenta otros sistemas relativos a las sustancias químicas aplicados en terceros países.

Se ha incluido una orientación específicamente adaptada a los distintos tipos de sustancias.

El presente documento de orientación deberá utilizarse para identificar y denominar las sustancias reguladas conforme a los Reglamentos REACH y CLP.

1.1. Objetivos

El objeto del presente documento de orientación es proporcionar a los fabricantes e importadores directrices sobre el método que habrá de seguirse para consignar y notificar la identidad de una sustancia en el contexto de REACH y CLP. El documento de orientación brinda directrices sobre cómo denominar a las sustancias, elemento esencial para su identificación. También aporta directrices para determinar si una serie de sustancias pueden considerarse la misma a efectos de REACH y CLP y sobre cómo aplicar el principio de «una sustancia, un registro» (OSOR, por sus siglas en inglés) mediante la definición del «perfil de identidad de la sustancia» (PIS). Es importante determinar las sustancias idénticas que pueden identificarse con el mismo PIS a efectos de consultas, puesta en común de datos, presentación conjunta de datos, notificación al catálogo de clasificación y etiquetado, y

---

[1] Reglamento (CE) n.º 1907/2006 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 18 de diciembre de 2006, relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de las sustancias y preparados químicos, por el que se crea la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas, se modifica la Directiva 1999/45/CE y se derogan el Reglamento (CEE) n.º 793/93 del Consejo y el Reglamento (CE) n º 1488/94 de la Comisión, así como la Directiva 76/769/CEE del Consejo y las Directivas 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE y 2000/21/CE de la Comisión («REACH»).

[2] Reglamento (CE) n.º 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas, y por el que se modifican y derogan las Directivas 67/548/CEE y 1999/45/CE y se modifica el Reglamento (CE) n.º 1907/2006 (Texto pertinente a efectos del EEE) («CLP»).

armonización de la clasificación y el etiquetado.

La identificación de las sustancias debe correr preferiblemente a cargo de expertos del sector. En el caso de aquellas entidades industriales que dispongan de escasa experiencia en la identificación de las sustancias, se incluyen, en un apéndice del presente documento de orientación, directrices adicionales relativas a los parámetros de identificación.

Además, en el presente documento de orientación se enumera un listado de enlaces a herramientas relevantes para la caracterización de las sustancias y la comprobación de su identidad química.

En los manuales de la ECHA que se pueden encontrar en http://echa.europa.eu/manuals se facilitan instrucciones más detalladas sobre cómo rellenar la información relativa a la identidad de las sustancias en IUCLID, en el contexto de distintos procesos de acuerdo con REACH y CLP.

1.2. Ámbito de aplicación

Conforme al artículo 1 de REACH, el Reglamento es aplicable a la fabricación, importación, comercialización y utilización de las sustancias, como tales, en forma de mezclas o contenidas en artículos. Las mezclas y artículos como tales no están regulados por REACH.

De acuerdo con el artículo 10 de REACH, un registro obliga a que la identidad de la sustancia se consigne conforme a los parámetros especificados en la sección 2 del anexo VI de REACH (véase el Cuadro 3). Se requerirán parámetros similares (como los especificados en las secciones 2.1 a 2.3.4 del anexo VI de REACH) para consignar la identidad de la sustancia con fines de notificación, de acuerdo con el artículo 40, apartado 1 de CLP. El presente documento de orientación se centra en la identificación adecuada de las sustancias que se ajustan a la definición jurídica de sustancia en REACH y CLP, y proporciona directrices sobre los parámetros para la identificación de sustancias en la sección 2 del anexo VI de REACH. La información facilitada sobre la identidad de una sustancia deberá bastar para la identificación de cada sustancia. Si no fuera técnicamente posible o no se considerase científicamente necesario aportar la información requerida, podrán omitirse uno o varios de los parámetros de identificación de la sustancia. Los motivos para dichas omisiones deberán exponerse claramente y estar científicamente justificados.

El enfoque para la identificación de una sustancia dependerá del tipo de sustancia. Por este motivo, se remitirá al usuario de este documento de orientación a los capítulos específicos para los distintos tipos de sustancias.

Los catálogos CE utilizados en el marco de la Directiva 67/548/CEE (EINECS, ELINCS y la lista NLP) son herramientas importantes para la identificación de las sustancias. En el capítulo 3.2 se ofrece orientación sobre las funciones de estos catálogos conforme a REACH.

Las sustancias contempladas en REACH y CLP (y, por tanto, en este documento de orientación) suelen ser el resultado de reacciones químicas que a su vez son parte del proceso de fabricación de la sustancia, y pueden contener múltiples constituyentes distintos. Entre las sustancias, tal como se definen en REACH y CLP, se incluyen también aquellas derivadas químicamente o aisladas de materiales presentes de forma natural, lo que puede comprender desde un simple elemento o molécula (p. ej., metales puros o determinados minerales) hasta varios constituyentes (p. ej., aceites esenciales, matas metálicas originadas al fundirse minerales con sulfuros metálicos). Sin embargo, en determinados casos, sustancias reguladas por otra legislación comunitaria están exentas de registro conforme a REACH (véase artículo 2 de REACH). También están exentas de registro las sustancias que figuran en la lista del anexo IV de REACH y las sustancias que cumplen determinados criterios especificados en el anexo V de REACH. Debe destacarse que, si bien una sustancia puede estar exenta de

registro, ello no significa necesariamente que esté exenta de otros títulos del Reglamento REACH o de los requisitos del Reglamento CLP.

REACH exige a los solicitantes de registro de la misma sustancia que se unan para ponerse de acuerdo sobre la presentación conjunta de determinada información sobre la sustancia (principio «una sustancia, un registro»)[3]. La aplicación de tal principio requiere claridad en la definición del alcance del perfil de identidad de la sustancia por parte del solicitante de registro.

1.3. Estructura del documento de orientación

El capítulo 1 contiene información general, como los objetivos y el ámbito de aplicación de este documento de orientación; en el capítulo 2 pueden consultarse las abreviaturas y definiciones utilizadas; en el capítulo 3 se facilita información relevante sobre el marco para la identificación de sustancias en REACH, como por ejemplo la definición de sustancia y los requisitos de información en el texto jurídico.

Las orientaciones prácticas para la identificación y denominación de las sustancias se desarrollan en el capítulo 4.

- El capítulo 4.1 describe las diferencias entre sustancias «bien definidas» y «no bien definidas» y, dentro de esos grupos, los distintos tipos de sustancias que es posible reconocer, con las orientaciones específicas para su identificación. Se adjunta un diagrama clave para guiar al usuario al capítulo que contiene la orientación adecuada para la identificación de este tipo específico de sustancia.
- Los capítulos siguientes proporcionan orientación específica para cada tipo de sustancia, a modo de conjunto de normas con explicaciones y ejemplos.

El capítulo 5 brinda orientaciones para comprobar si las sustancias pueden o no considerarse la misma. Las orientaciones sobre la identidad de la sustancia en el proceso de consulta se exponen en el capítulo 6.

Además, en el capítulo 7, se desarrollan algunos ejemplos detallados, utilizando las directrices prácticas del capítulo 4.

El apéndice I ofrece un listado de enlaces a herramientas relevantes de apoyo a la caracterización de sustancias y la comprobación de su identidad química.

El apéndice II proporciona información general sobre los parámetros empleados para la identificación de sustancias individuales utilizadas en el proceso de identificación, como las normas relativas a la nomenclatura, los números CE y CAS, las notaciones de las fórmulas moleculares y estructurales y los métodos analíticos.

El apéndice III ofrece información sobre el concepto de perfil de identidad de la sustancia, la importancia de las obligaciones de presentación conjunta, y la definición y notificación de dicho perfil.

[3] En el *Documento de orientación sobre la puesta en común de datos* se ofrece información detallada acerca de la puesta en común de datos de la misma sustancia para la presentación conjunta.

2. Definiciones y abreviaturas

2.1. Abreviaturas

En el Cuadro 1 se indican y explican las principales abreviaturas utilizadas en este documento de orientación.

Cuadro 1: Abreviaturas

Abreviaturas	Significado
AISE	Asociación Internacional de de la Industria de Detergentes y Productos de Mantenimiento
CAS	Servicio de resúmenes químicos
CE	Comisión Europea
CG	Cromatografía de gases
CLP	Reglamento (CE) n.º 1272/2008 sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas.
DRX	Difracción de rayos X
EAA	Espectrometría de absorción atómica
EINECS	Catálogo Europeo de Sustancias Químicas Comercializadas
ELINCS	Lista europea de sustancias químicas notificadas
EM	Espectroscopia de masas
ENCS	Sustancias químicas nuevas y ya existentes (Japón)
ESIS	Sistema Europeo de Información sobre Sustancias Químicas
FIIS	Foro de Intercambio de Información sobre Sustancias
FRX	Fluorescencia de rayos X
HPLC	Cromatografía líquida de alta resolución
InChI	Identificador químico internacional IUPAC
INCI	Nomenclatura Internacional de Ingredientes Cosméticos
IR	Infrarrojos
ISO	Organización Internacional de Normalización
IUBMB	Unión Internacional de Bioquímica y Biología Molecular
IUCLID	Base de Datos Internacional de Información Química Uniforme.
IUPAC	Unión Internacional de Química Pura y Aplicada
NLP	Ex-polímero
p/p	peso/peso

PIS	Perfil de identidad de la sustancia
ppm	Partes por millón
REACH	Reglamento relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de las sustancias y mezclas químicas
RMN	Resonancia magnética nuclear
SGA	Sistema Globalmente Armonizado
SMILES	Sistema Simplificado de Registro de Líneas Moleculares
TSCA	Ley sobre el control de sustancias tóxicas (EE. UU.)
UE	Unión Europea
UV/VIS	Ultravioleta/visible
UVCB	Sustancias de composición desconocida o variable, productos de reacción compleja y materiales biológicos

2.2. Definiciones

En el Cuadro 2 se indican y describen las principales definiciones utilizadas en el presente documento de orientación.

Para elaborarlas se han tenido en cuenta las definiciones empleadas en el Reglamento REACH y en el Reglamento CLP. Este es el motivo por el que la definición de algunos términos varía respecto a la utilizada en la Directiva 67/548/CEE.

Cuadro 2: Definiciones

Definición	Descripción
Aditivo	Compuesto que se ha añadido intencionalmente con el fin de estabilizar la sustancia[4].
Aleación*	Material metálico, homogéneo a escala macroscópica, formado por dos o más elementos combinados de manera que no se pueden separar fácilmente por medios mecánicos. Las aleaciones están contempladas como mezclas especiales.
Artículo*	Objeto al que durante su fabricación se le da una forma, superficie o diseño concretos que determinan su función en mayor medida que lo hace su composición química.
Catálogo CE	Aunque no se encuentra legalmente definido en el Reglamento REACH, el catálogo CE está formado por el conjunto de tres listas europeas independientes y legalmente aprobadas de sustancias, procedentes del anterior marco normativo de productos químicos en la UE: el EINECS (Catálogo europeo de sustancias químicas comercializadas), la ELINCS (Lista europea de sustancias químicas notificadas) y la lista NLP (ex-polímeros). Las entradas del catálogo CE consisten en un nombre químico y un número (nombre CE y número CE), un número CAS, la fórmula molecular (si se conoce) y la descripción (para ciertos tipos de sustancias).
Componente	Sustancia añadida intencionadamente para formar una mezcla
Constituyente	Cualquier especie química presente en una sustancia que pueda caracterizarse por su identidad química única.

[4] En otros contextos, un aditivo puede tener otras funciones, como por ejemplo, un regulador del pH o un colorante. Sin embargo, en el Reglamento REACH y en este documento, un aditivo es un agente estabilizante

Constituyente principal	Constituyente de una sustancia que, sin ser un aditivo o una impureza, forma una parte importante de dicha sustancia y, por lo tanto, se utiliza en el nombre y la identificación detallada de esta sustancia.
Fabricación*	Producción o extracción de sustancias en estado natural.
Huella espectral	Representación de la composición de una sustancia a partir de la distribución característica de sus constituyentes en un cromatograma.
Impureza	Constituyente accidental presente en una sustancia después de su fabricación. Puede proceder de las materias primas o bien ser resultado de reacciones secundarias o incompletas durante el proceso de fabricación. Si bien se encuentra presente en la sustancia final, no ha sido añadido intencionalmente.
IUCLID	Base de Datos Internacional de Información Química Uniforme. IUCLID es una base de datos y un sistema de gestión para la administración de datos sobre sustancias químicas.
Mezcla*	Mezcla o solución compuesta por dos o más sustancias.
Monómero*	Sustancia capaz de formar enlaces covalentes con una secuencia de moléculas adicionales similares o distintas, en las condiciones de la reacción correspondiente de polimerización utilizada para el proceso concreto.
Número CE	El número CE es el identificador de sustancias en el catálogo CE.
Número de lista	Número asignado por la Agencia. Número asignado automáticamente por REACH-IT. Se aplica a todas las presentaciones válidas admitidas (p. ej., prerregistros, IDOPP, consultas, registros, notificaciones de clasificación y etiquetado).

Polímero*	Sustancia constituida por moléculas que se caracterizan por la secuencia de uno o varios tipos de unidades monoméricas. Dichas moléculas deben repartirse en una distribución de pesos moleculares en la que las diferencias de peso molecular puedan atribuirse principalmente a diferencias en el número de unidades monoméricas. Un polímero incluye los siguientes elementos: (a) una mayoría ponderal simple de moléculas que contienen al menos tres unidades monoméricas con enlaces de covalencia con otra unidad monomérica u otro reactante como mínimo; (b) menos de una mayoría ponderal simple de moléculas del mismo peso molecular. En el contexto de esta definición, se entenderá por «unidad monomérica» la forma reactada de una sustancia monómera en un polímero.
Sustancia intermedia*	Sustancia que se fabrica para un proceso químico, o bien se consume o utiliza en dicho proceso, para ser transformada en otra sustancia (proceso al que en lo sucesivo se hará referencia como *síntesis*): (a) sustancia intermedia no aislada significa una sustancia intermedia que, durante la síntesis, no se extrae intencionalmente (excepto para tomar muestras) del equipo en el que tiene lugar la síntesis. Dicho equipo incluye el recipiente en que tiene lugar la reacción, su equipo auxiliar y cualquier otro equipo a través del cual pasen la sustancia o sustancias en flujo continuo o en un proceso discontinuo, así como los conductos de transferencia de un recipiente a otro con el fin de pasar a la etapa siguiente de la reacción, pero quedan excluidos los depósitos u otros recipientes en que se almacenen la sustancia o sustancias tras su fabricación; (b) sustancia intermedia aislada in situ significa una sustancia intermedia que no reúne los criterios necesarios para ser considerada una sustancia intermedia no aislada, en caso de que la fabricación de la sustancia intermedia y la síntesis de otra sustancia o sustancias a partir de dicha sustancia intermedia se den en el mismo emplazamiento y sean llevadas a cabo por una o más entidades jurídicas; (c) sustancia intermedia aislada transportada significa una sustancia intermedia que no reúne los criterios necesarios para ser considerada una sustancia intermedia no aislada y que se transporta entre emplazamientos o se suministra a otros emplazamientos;
Sustancia monoconstituyente	Por regla general, una sustancia, definida en función de su composición, en la que se da un componente principal al menos en un 80 %.
Sustancia multiconstituyente	Por regla general, una sustancia, definida por su composición, en la que está presente más de un constituyente en una concentración 10 % (p/p) y menor al 80 % (p/p).

Sustancia no modificada químicamente*	Sustancia cuya estructura química se mantiene inalterada, incluso cuando ha sido objeto de un proceso o tratamiento químico, o una transformación mineralógica física, como por ejemplo, para eliminar impurezas.
Sustancia notificada*	Sustancia para la que se ha presentado una notificación y que puede comercializarse conforme a la Directiva 67/548/CEE.
Sustancia presente en la naturaleza*	Sustancia presente como tal de manera natural, no procesada o procesada solo por medios manuales, mecánicos o gravitacionales, o bien por disolución en agua, por flotación, o por extracción con agua, o por destilación con vapor o por calentamiento únicamente para eliminar el agua, o que se obtiene de la atmósfera por cualquier medio.
Sustancia*	Elemento químico y sus compuestos naturales o los obtenidos por algún proceso industrial, incluidos los aditivos necesarios para conservar su estabilidad y las impurezas que inevitablemente produzca el procedimiento, con exclusión de todos los disolventes que puedan separarse sin afectar a la estabilidad de la sustancia ni modificar su composición.

* Definiciones en virtud del artículo 3 de REACH.

3. Directrices para la identificación de sustancias en REACH y CLP

Los Reglamentos REACH y CLP incluyen una definición de sustancia, y REACH incorpora una lista de parámetros para la identificación de sustancias (anexo VI, sección 2) que deberán observarse para la identificación de la sustancia con fines de registro.

El presente capítulo describe la definición de sustancia en REACH y CLP (capítulo 3.1), proporciona directrices genéricas sobre cómo utilizar el catálogo CE procedente de marcos reguladores anteriores en el ámbito de la química (capítulo 3.2) y aporta nueva información de base sobre los requisitos especificados en REACH para la identificación de la sustancia (capítulo 3.3).

3.1. Definición de sustancia

La definición de sustancia, conforme al artículo 3, apartado 1 de REACH y el artículo 2, apartado 7 de CLP, se ajusta a los siguientes términos: Una sustancia es «un elemento químico y sus compuestos naturales o los obtenidos por algún proceso industrial, incluidos los aditivos necesarios para conservar su estabilidad y las impurezas que inevitablemente produzca el procedimiento, con exclusión de todos los disolventes que puedan separarse sin afectar a la estabilidad de la sustancia ni modificar su composición».

«sustancia»: un elemento químico y sus compuestos naturales o los obtenidos por algún proceso industrial, incluidos los aditivos necesarios para conservar su estabilidad y las impurezas que inevitablemente produzca el procedimiento, con exclusión de todos los disolventes que puedan separarse sin afectar a la estabilidad de la sustancia ni modificar su composición.

La definición de sustancia en REACH y en CLP es idéntica a la definición de sustancia utilizada en la 7ª modificación de la Directiva sobre sustancias peligrosas (Directiva 92/32/CEE por la que se modifica la Directiva 67/548/CEE). En ambos casos, la definición trasciende la de un compuesto químico puro definido por una única estructura molecular. La definición de sustancia incluye distintos constituyentes como impurezas.

3.2. Identificadores numéricos

3.2.1. Catálogo CE

Existen tres catálogos independientes instaurados en virtud de los marcos regulatorios anteriores en el ámbito químico. Se trata del Catálogo Europeo de Sustancias Químicas Comercializadas (EINECS), la Lista europea de sustancias químicas notificadas (ELINCS) y la lista de ex-polímeros (NLP).

Las sustancias presentes en el mercado europeo entre el 1 de enero de 1971 y el 18 de septiembre de 1981 se encuentran recogidas en el Catálogo Europeo de Sustancias Químicas

Comercializadas (EINECS)[5, 6, 7].

Este catálogo contiene aproximadamente 100.000 sustancias identificadas por su nombre químico (y una descripción para ciertos tipos de sustancias), un número CAS y un número de siete dígitos denominado número EINECS. Los números EINECS siempre comienzan por 2 o 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Las sustancias notificadas al catálogo EINECS han sido sometidas a un proceso de verificación que justifica su registro en dicho catálogo.

Las sustancias notificadas e introducidas en el mercado a partir del 18 de septiembre de 1981 se incluyen en la Lista europea de sustancias químicas notificadas (ELINCS)[6]. Este catálogo (lista) comprende todas las sustancias notificadas hasta el 31 de mayo de 2008, de acuerdo con la Directiva 67/548/CEE y sus modificaciones. Dichas sustancias se conocen también como «nuevas sustancias», puesto que no habían sido comercializadas en el mercado europeo antes del 18 de septiembre de 1981. La Comisión Europea ha asignado números ELINCS a las sustancias tras la revisión por parte de las autoridades competentes de los Estados miembros (ACEM). A diferencia del EINECS, la ELINCS no incluye un número CAS en sus entradas, sino el número de notificación asignado por la ACEM, el nombre comercial (si se conoce), la clasificación y el nombre IUPAC para las sustancias clasificadas. Los números ELINCS constan también de siete dígitos y empiezan siempre por 4 (4xx-xxx-x).

Los polímeros quedaron eximidos de la obligación de notificación al Catálogo EINECS y se sometieron a unas normas especiales con arreglo a la Directiva 67/548/CEE[8] [9]. El término «polímero» se redefinió en la 7ª modificación de la Directiva 67/548/CEE (Directiva 92/32/CEE). Como consecuencia de la aplicación de dicha definición, determinadas sustancias que habían sido consideradas como polímeros en virtud de las reglas de notificación al EINECS, *dejaron* de considerarse como tales en virtud de la 7ª modificación. Dado que todas las sustancias no recogidas en el EINECS eran susceptibles de notificación, todos los «*ex-polímeros*» (NLP) deberían, en teoría, haber sido notificados. Sin embargo, el Consejo de Ministros ha dictaminado claramente que estos ex-polímeros no estaban sujetos a notificación con carácter retroactivo. Se solicitó a la Comisión que presentara una lista de ex-polímeros (la lista NLP). Las sustancias que debían incluirse en dicha lista eran las comercializadas en la UE entre el 18 de septiembre de 1981 (la fecha de entrada en vigor de la Directiva 79/831/CEE, la 6ª modificación de la Directiva 67/548/CEE) y el 31 de octubre de 1993 (la fecha de entrada en vigor de la Directiva 92/32/CEE, la 7ª modificación de la Directiva 67/548/CEE) y que satisfacían los requisitos para ser consideradas como polímeros en virtud de las normas de notificación al EINECS pero que habían dejado de considerarse polímeros en virtud de la 7ª modificación. La lista NLP no es una lista exhaustiva. Las sustancias de la lista NLP se identifican mediante un nombre químico, un número CAS y un número de siete

---

5 El EINECS se basa en el **E**uropean **CO**re **IN**ventory (ECOIN), al que las empresas tienen la posibilidad de notificar información suplementaria sobre la sustancia (de acuerdo con los criterios de notificación de sustancias para el EINECS). El ECOIN se creó uniendo diferentes listas de productos químicos que se suponía estaban presentes en el mercado europeo (p. ej., TSCA). El EINECS se publicó el 15 de junio de 1990 e incluye más de 100.000 sustancias. Durante el uso, se detectaron ciertos errores en el catálogo (de impresión, como incorrecciones en el nombre químico, la fórmula o el número de registro CAS). Por este motivo se publicó un corrigendum el 1 de marzo de 2002.

6 ECB (2005). Manual de decisiones para la aplicación de las enmiendas sexta y séptima de la Directiva 67/548/CEE (Directivas 79/831/CEE y 92/32/CEE. Versión no confidencial. EUR 20519 EN. Versión actualizada en junio de 2005.

7 Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) The EINECS Inventory of existing chemical substances on the EC market. Tox Env Chem Vol. 37, p. 21-33.

8 ECB (2003). Notification of new chemical substances in accordance with Directive 67/548/EEC on the classification, packaging and labelling of dangerous substances. No Longer Polymer List. EUR 20853 EN.

9 Rasmussen K, Christ G y Davis JB (1998). Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. Tox Env Chem Vol. 67, pp. 251-261.

dígitos denominado número NLP. Un número NLP siempre comienza por 5 (5xx-xxx-x).

Estas tres listas de sustancias, el EINECS, la ELINCS y la lista NLP, se denominan en conjunto «catálogo CE». Cada sustancia de dicho catálogo posee un número CE asignado por la Comisión europea (véase la información detallada sobre el número CE en el apéndice II).

Puede obtenerse información sobre estas sustancias en el sitio web de la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas (http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory), que también mantiene y publica un catálogo de las sustancias registradas (http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances).

Los fabricantes e importadores pueden utilizar el catálogo CE como herramienta para encontrar el número CE de sus sustancias.

3.2.2. Números de lista

Cuando instauró el sistema REACH-IT, la ECHA consideró beneficioso atribuir automáticamente un número a las sustancias en todas las presentaciones entrantes técnicamente completas (prerregistros, IDOPP, consultas, registros, notificaciones de clasificación y etiquetado, etc.) para las que no se había especificado un número CE (véanse más adelante los criterios de asignación de los números de lista). Ello ha facilitado, a nivel técnico, el manejo, tratamiento posterior e identificación de las sustancias en estas presentaciones. Los denominados «números de lista» presentan un formato numérico idéntico a los utilizados en el EINECS, la ELINCS y los NLP, pero comienzan con dígitos diferentes.

El formato numérico de los números de lista es común a las entradas de EINECS, ELINCS y NLP. Y lo que es más importante, la gran mayoría de los números de lista y la identificación de las sustancias a ellos ligadas nunca se han comprobado con fines de corrección, validez y mantenimiento de los convenios descritos en el presente documento de orientación.

Preciso es subrayar que podrían haberse asignado números de lista distintos a la misma sustancia si se hubieran utilizado para ella distintos identificadores (p. ej., nombre). Por tanto, también es posible que se asigne un número de lista a una sustancia incluida en el EINECS, la ELINCS o los NLP. Esto puede ocurrir en caso de que, en una presentación a la ECHA a través de REACH-IT, se utilice un nombre de sustancia diferente del utilizado en el catálogo CE.

Los números de lista pueden comenzar, por ejemplo, por 6, 7, 8 o 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

Conviene señalar que, en ciertos registros del EINECS, la descripción de una sustancia es relativamente amplia y podría considerarse que abarca la identidad de más de una sustancia, conforme al artículo 3, apartado 1 de REACH. En tales casos, se invita al posible solicitante de registro a describir la sustancia en cuestión con mayor exactitud (p. ej., mediante el nombre IUPAC u otros identificadores). No obstante, el solicitante de registro debe indicar a qué entrada del EINECS pertenece la sustancia. En tales casos, la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas decidirá si es apropiado o no asignar un número de lista a la sustancia en cuestión.

3.3. Requisitos para la identificación de sustancias en REACH y CLP

En virtud del Reglamento REACH, si se requiere el registro, deberá incluirse información sobre la identificación de la sustancia tal como se especifica en la sección 2 del anexo VI. Esta información deberá ser adecuada y suficiente para poder identificar cada una de las sustancias. Si no es técnicamente posible o no se revela científicamente necesario facilitar información sobre alguno de los parámetros de identificación de la sustancia, se indicarán claramente los motivos, tal como se indica en la nota 1 del anexo VI.

Igualmente, en virtud del Reglamento CLP, cuando se requiera una notificación (artículo 40 de CLP), deberá incluirse información sobre la identificación de la sustancia tal como se especifica en las secciones 2.1 a 2.3.4 del anexo VI de REACH. Esta información deberá ser la adecuada para poder identificar cada una de las sustancias. Si no es técnicamente posible o no se revela científicamente necesario facilitar información sobre alguno de los parámetros de identificación de la sustancia, se indicarán claramente los motivos, tal como se indica en la nota 1 del anexo VI.

En el Cuadro 3 del anexo VI de REACH se ofrece una visión general de los parámetros de identificación de la sustancia.

Cuadro 3: Parámetros de identificación de la sustancia en el anexo VI, sección 2, de REACH

	Parámetros de identificación de la sustancia en el anexo VI, sección 2, de REACH
2.	**IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA** *La información facilitada para cada sustancia deberá ser suficiente como para poder identificarla. Cuando no resulte posible desde el punto de vista técnico facilitar información o aparentemente no sea necesario desde el punto de vista científico, se expondrá claramente el motivo.*
2.1	***Nombre u otro identificador de la sustancia***
2.1.1	*Nombre o nombres que figuran en la nomenclatura de la IUPAC. En su defecto, otro nombre o nombres químicos internacionales*
2.1.2	*Otros nombres (nombre común, nombre comercial, abreviatura).*
2.1.3	*Número CE, es decir, número EINECS, ELINCS o NLP, o número asignado por la Agencia (cuando exista y proceda)*
2.1.4	*Nombre CAS y número CAS (cuando exista)*
2.1.5	*Otro código de identidad, como el número de aduana (cuando exista)*
2.2	***Información relacionada con la fórmula molecular y estructural o con la estructura cristalina de la sustancia***
2.2.1	*Fórmula molecular y fórmula estructural (incluida la notación SMILES y otra representación, cuando exista) y descripción de la estructura o estructuras cristalinas.*
2.2.2	*Información sobre actividad óptica y la proporción típica de (estereo)isómeros (cuando exista y proceda).*
2.2.3	*Peso molecular o rango de pesos moleculares.*
2.3.	***Composición de la sustancia***
2.3.1	*Grado de pureza (%), cuando proceda.*

2.3.2	*Nombre de los constituyentes e impurezas.* *En el caso de sustancias de composición desconocida o variable, productos de reacción compleja y materiales biológicos (UVCB):* *— nombre de los constituyentes presentes en una concentración ≥ 10 %,* *— nombre de los constituyentes conocidos presentes en una concentración < 10 %,* *— en el caso de constituyentes que no puedan identificarse individualmente, descripción de los grupos de constituyentes sobre la base de la naturaleza química,* *— descripción del origen o de la procedencia y del proceso de fabricación.*
2.3.3	*Concentración típica y rango de concentración (en porcentaje) de los constituyentes, grupos de constituyentes que no pueden identificarse individualmente e impurezas, como se especifica en el punto 2.3.2.*
2.3.4	*Nombres y concentración típica y rango de concentración (en porcentaje) de los aditivos.*
2.3.5	*Todos los datos analíticos cualitativos específicos necesarios para la identificación de la sustancia, por ejemplo ultravioleta, infrarrojo, de la resonancia magnética nuclear, del espectro de masa o de difracción.*
2.3.6	*Todos los datos analíticos cuantitativos específicos necesarios para la identificación de la sustancia, por ejemplo cromatográfico, titrimético, de análisis elemental o de difracción.*
2.3.7	*Descripción de los métodos analíticos o de las referencias bibliográficas adecuadas que sean necesarios para la identificación de la sustancia (incluidas la identificación y cuantificación de sus constituyentes y, en su caso, de sus impurezas y aditivos). La descripción consistirá en los protocolos experimentales seguidos y la interpretación pertinente de los resultados comunicados con arreglo a los puntos 2.3.1 a 2.3.6. Esta información deberá ser suficiente para permitir que se reproduzcan los métodos.*
2.5	***Cualquier otra información disponible que sea pertinente para la identificación de la sustancia***

4. Orientaciones para la identificación y denominación de las sustancias en REACH y CLP

4.1. Introducción

Las reglas para la identificación y la denominación de sustancias varían en función de los diferentes tipos de sustancias. Por razones prácticas, este documento de orientación se ha estructurado de manera que, para cada tipo de sustancia, se remite al usuario al capítulo que contiene las directrices adecuadas. Para ello se ofrecen a continuación explicaciones respecto a los distintos tipos de sustancias y, por último, una clave para localizar el capítulo correspondiente.

La identificación de sustancias debe basarse, como mínimo, en los parámetros de identificación de la sustancia recogidos en la sección 2 del anexo VI de REACH (véase el Cuadro 3). Por tanto, para la identificación de una sustancia se utilizará la combinación de los parámetros de identificación adecuados:

- El nombre IUPAC y/u otros nombres e identificadores, como el número CAS o el número CE (anexo VI, sección 2.1);
- La información molecular y estructural (anexo VI, sección 2.2);
- La composición química (anexo VI, sección 2.3).

Una sustancia se entiende completamente identificada por su composición química, es decir, su identidad química y el contenido de cada constituyente. Aunque para muchas sustancias la identificación puede resultar simple, en algunos casos no es posible o no es adecuada en el ámbito de aplicación de REACH y CLP. Es tales casos se precisará información adicional sobre la sustancia.

Las sustancias pueden dividirse en dos grupos principales:

1. «Sustancias bien definidas»: sustancias con una composición cualitativa y cuantitativa definida que puedan identificarse suficientemente mediante los parámetros de identificación de la sección 2 del anexo VI de REACH.
2. «Sustancias UVCB»: sustancias de composición desconocida o variable, productos de reacción compleja y materiales biológicos. Estas sustancias no pueden identificarse suficientemente mediante los parámetros mencionados.

La variabilidad de la composición para las sustancias bien definidas se especifica mediante los límites superior e inferior del rango de concentración de cada uno de los constituyentes principales. Para las sustancias UVCB, la variabilidad es relativamente grande y/o escasamente predecible.

Es evidente que existen casos límite entre sustancias bien definidas (sustancias generadas por reacciones entre muchos constituyentes, cada uno dentro de un amplio rango) y sustancias UVCB (productos de reacción con una composición variable y poco predecible). Es responsabilidad del solicitante de registro identificar la sustancia del modo más adecuado.

Las reglas para la identificación y denominación de las «sustancias bien definidas» varían en función de que presenten uno o más constituyentes principales. Y se describen diferentes normas para identificar y denominar los diferentes tipos de sustancias que pueden catalogarse como «UVCB».

En el

Cuadro 4 y el Cuadro 5, se recogen los principales identificadores para distintos ejemplos de diversos tipos de sustancias. Tales ejemplos se agrupan de manera tal que las similitudes y diferencias para la identificación de las sustancias resultan fácilmente reconocibles.

Cuadro 4 y el Cuadro 5 no representan la lista completa de todos los posibles tipos de sustancias. Esta agrupación de sustancias con las reglas de identificación y denominación no debe considerarse como un sistema de categorización oficial de las sustancias, sino como una herramienta práctica para aplicar las reglas específicas convenientes y buscar las directrices adecuadas en el presente documento de orientación.

Cuadro 4: Agrupación de los principales identificadores para ejemplos que representan distintos tipos de sustancias similares bien definidas

Características comunes	Ejemplos representativos	Principales identificadores
Sustancias bien definidas por su composición química *[Capítulo 4.2.]*	Sustancias monoconstituyentes; p. ej., - benceno (95 %) - níquel (99 %) *[Capítulo 4.2.1]*	Composición química: un constituyente principal ≥ 80 %: - Identidad química del constituyente principal (nombre químico, número CAS, número CE, etc.) - Concentración típica y límites inferior y superior
	Sustancias multiconstituyentes; p. ej., productos de reacción definidos, como Masa de reacción de 2-, 3-, y 4-clorotolueno (30 % de cada uno) *[Capítulo 4.2.2]*	una mezcla (masa de reacción) de constituyentes principales, cada uno entre ≥ 10 y < 80 %: - Identidad química de cada constituyente principal - Concentraciones típicas y límites superior e inferior de cada constituyente y de la masa de reacción como tal
	Sustancias definidas por algo más que la composición química; p. ej., Grafito y diamante *[Capítulo 4.2.3]*	Composición química como sustancia monoconstituyente o multiconstituyente Y Otros parámetros físicos o de caracterización: p. ej., morfología cristalina, composición mineral (geológica), etc.

Cuadro 5: Agrupación de los principales identificadores para ejemplos que representan distintos tipos de sustancias UVCB

Características comunes		**Ejemplos representativos**	**Principales identificadores**		
			Fuente	***Proceso***	***Otros identificadores***
Sustancias UVCB (Sustancias de composición desconocida o variable, productos de reacción compleja y materiales biológicos) *[Capítulo 4.3]*	Materiales biológicos (B)	Extractos de materiales biológicos; p. ej., fragancias naturales, aceites naturales, pigmentos y tintes naturales	- Familia y especie de la planta o el animal - Parte de la planta o el animal	- Extracción - Fraccionamiento, concentración, aislamiento, purificación, etc. - Derivación*	- Composición conocida o genérica - Huella espectral y otras huellas - Referencia a las normas - Índice de color
		Macromoléculas biológicas complejas; p. ej., enzimas, proteínas, fragmentos de ADN o ARN, hormonas, antibióticos			- Índice enzimático estándar - Código genético - Configuración espacial - Propiedades físicas - Función/actividad - Estructura - Secuencia de aminoácidos
		Productos de fermentación antibióticos, biopolímeros, enzimas, vinazas (productos de la fermentación del azúcar), soforolípidos, etc.	- Medio de cultivo - Microorganismos utilizados	- Fermentación - Aislamiento de productos - Etapas de purificación	- Tipo de productos: p.ej., antibióticos, biopolímeros, proteínas, etc. - Composición conocida
	Sustancias minerales y químicas de composición poco	Mezclas de reacción con composición poco predecible y/o variable	Materiales de partida	Tipo de reacción química; p. ej., esterificación, alquilación e hidrogenación	- Composición conocida - Huella espectral y otras huellas - Referencia a las normas

	definida, compleja o variable (UVC)	- Fracciones o destilados; p. ej., sustancias petrolíferas - Arcilla; p. ej., bentonita - Alquitranes	- Petróleos crudos - Hulla/turba - Gases minerales - Minerales	- Fraccionamiento, destilación - <u>Conversión de fracciones</u> - Procesos físicos - Residuos	- Rangos de corte - Rango de longitud de la cadena - Proporción aromáticos/alifáticos - Composición conocida - Índice estándar
		Concentrados o fundidos; p. ej., minerales metálicos o residuos de diversos procesos de fundición o metalúrgicos; p. ej., escorias	Menas	- Fundición - Tratamiento térmico - Diversos procesos metalúrgicos	- Composición conocida o genérica - Concentración de metales

* Los procesos subrayados indican síntesis de nuevas moléculas

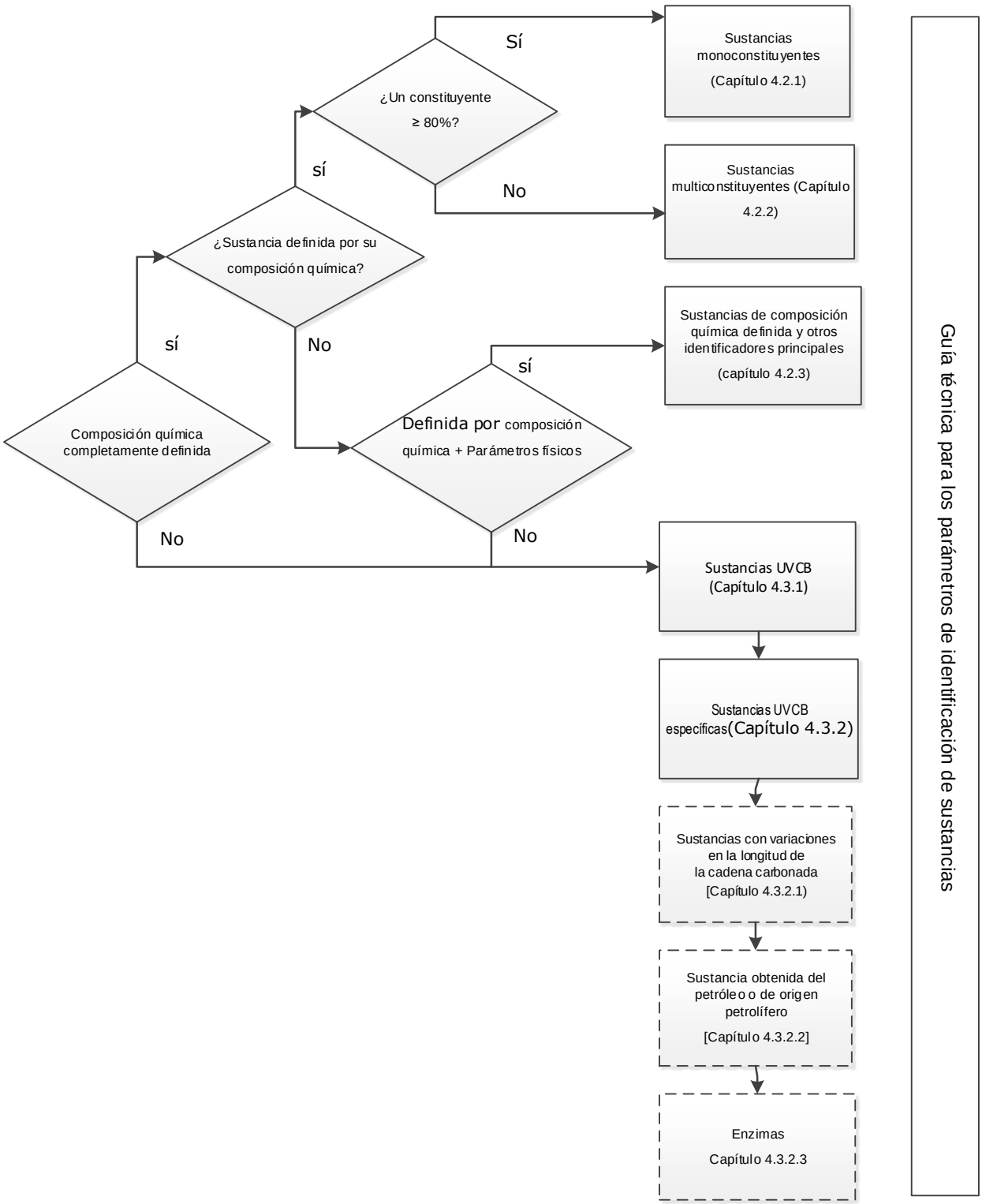
Este capítulo se divide en subcapítulos que contienen directrices específicas para la identificación de la sustancia aplicables a varios tipos de sustancias. En la Figura 1 se facilita una clave para remitir al usuario a los capítulos pertinentes.

La clave de la Figura 1 se basa en criterios de «índole práctica». Al solicitante de registro le corresponde seleccionar el capítulo más adecuado y consignar la identidad de la sustancia, de acuerdo con las reglas y criterios apropiados para ese tipo de sustancia.

La regla de base es que las sustancias se definen, en la medida de lo posible, por la composición química y la identificación de los constituyentes. Solo si esto no fuera técnicamente posible se recurriría a otros identificadores, de acuerdo con lo especificado para los distintos tipos de sustancias UVCB.

Si el solicitante de registro se aparta de las reglas y criterios para la identificación de las sustancias establecidos en el presente documento de orientación, deberá aportar una justificación. La identificación de la sustancia debe ser trasparente y responsable, y garantizar la coherencia.

Figura 1: Clave para guiar al usuario a los capítulos y apéndices del documento de orientación, con el fin de obtener las directrices adecuadas a los distintos tipos de sustancias



Debe aportarse una descripción de los métodos analíticos y/o las referencias bibliográficas adecuadas para la identificación de la sustancia y, en su caso, para la identificación de impurezas y aditivos (REACH, anexo VI, secciones 2.3.5, 2.3.6 y 2.3.7). Esta información deberá ser suficiente para permitir que se reproduzcan los métodos. También deben facilitarse los resultados típicos cuando se aplican las técnicas analíticas.

4.2. Sustancias de composición bien definida

Las sustancias de composición bien definida se denominan según su(s) constituyente(s) principal(es). Para ciertos tipos de sustancias, la composición química por sí sola no basta para la caracterización. En tales casos, a la identificación de la sustancia deben añadírsele algunos parámetros físicos adicionales relacionados con la estructura química.

Como regla general, el objetivo debe consistir en abarcar la composición al 100 %, y cada constituyente requiere una especificación química completa, en particular información estructural. Para las sustancias definidas por su composición química, debe hacerse una distinción:

- Constituyente principal: Constituyente de una sustancia que, sin ser un aditivo o una impureza, constituye una parte importante de dicha sustancia y, por lo tanto, se utiliza en el nombre y la identificación detallada de esta sustancia.
- Impureza: Constituyente accidental presente en una sustancia tal como se produce. Puede proceder de los materiales de partida o bien ser resultado de reacciones secundarias o incompletas durante el proceso de fabricación. Si bien se encuentra presente en la sustancia final, no se ha añadido intencionalmente.
- Aditivo: Compuesto que se ha añadido intencionalmente con el fin de estabilizar la sustancia.

Todos los constituyentes (excepto los aditivos) que no son el constituyente principal de una sustancia monoconstituyente o los constituyentes principales de una sustancia multiconstituyente, se consideran impurezas. Aunque en ciertos sectores suele utilizarse en la práctica el término «trazas», en este documento de orientación solo se utilizará el término «impurezas».

Los diferentes constituyentes tienen distintos requisitos de identificación:

- Los constituyentes principales intervienen en la denominación de la sustancia, y cada constituyente principal deberá identificarse con precisión.
- Las impurezas no intervienen en la denominación de la sustancia, pero cada impureza deberá identificarse con precisión.
- Los aditivos intervienen en la composición de la sustancia (pero no en la denominación) y deben identificarse siempre con precisión.
- La identificación precisa de los constituyentes principales, las impurezas y los aditivos debe consistir en un nombre IUPAC, un nombre químico, una fórmula estructural, un número CE y un número CAS, cuando exista.

Se utilizan ciertos convenios para distinguir entre sustancias monoconstituyentes y multiconstituyentes:

- Una sustancia monoconstituyente es aquella en la que está presente un constituyente a una concentración mínima del 80 % (p/p) y contiene hasta un 20 % (p/p) de impurezas.

Una sustancia monoconstituyente se denomina en función del constituyente principal;

- Una sustancia multiconstituyente es una sustancia constituida por varios constituyentes principales presentes en concentraciones de, por lo general ≥ 10 % y < 80 % (p/p).

Una sustancia multiconstituyente se nombra como la masa de reacción de dos o más constituyentes principales.

Las reglas anteriormente mencionadas se utilizan como orientación. Cualquier divergencia, para que sea aceptable, deberá ir acompañada de una sólida justificación.

Como norma general, deben especificarse las impurezas presentes en concentraciones ≥ 1 %. Sin embargo, las impurezas que resulten relevantes para la clasificación y/o la valoración PBT[10] deberán especificarse siempre, independientemente de su concentración. Por regla general, la información sobre la composición debe completarse al 100 %.

Los aditivos, en el sentido contemplado en los Reglamentos REACH y CLP y en este documento de orientación son agentes necesarios para preservar la estabilidad de la sustancia. Son, por lo tanto, constituyentes esenciales de la sustancia y deben tenerse en cuenta a la hora de hacer el balance de masa. Sin embargo, fuera de la definición de REACH y de este documento de orientación, la palabra «aditivo» se utiliza también para las sustancias que se añaden intencionadamente con otras funciones; p. ej., como reguladores del pH o agentes colorantes. No forman parte de la sustancia como tal y, por tanto, no deben tenerse en cuenta a la hora de realizar el balance de masa.

Las mezclas, tal como se definen en REACH y CLP, son mezclas intencionadas de sustancias y, en consecuencia, no deben considerarse sustancias multiconstituyente.

Pueden encontrarse orientaciones específicas sobre las sustancias monoconstituyentes en el capítulo 4.2.1, y sobre las sustancias multiconstituyentes, en el capítulo 4.2.2. Para las sustancias que requieren información adicional (p. ej., determinados minerales), las orientaciones se encuentran en el capítulo 4.2.3.

4.2.1. Sustancias monoconstituyentes

Una sustancia monoconstituyente es aquella, definida por su composición cuantitativa, en la que un constituyente principal está presente en un porcentaje de al menos el 80 % (p/p).

Convenio de nomenclatura

Una sustancia monoconstituyente se denomina con arreglo al constituyente principal. En principio, es preciso facilitar el nombre en inglés y de acuerdo con las reglas de nomenclatura IUPAC (véase el apéndice I). Además, pueden aportarse otros nombres aceptados internacionalmente.

Identificadores

Una sustancia monoconstituyente se identifica por su nombre químico y todos los demás identificadores disponibles (incluida la fórmula estructural y molecular, o estructura cristalina) del constituyente principal. Se identificará cualquier impureza o aditivo de la sustancia monoconstituyente. Deberán indicarse las concentraciones y los rangos de concentración típicos del constituyente principal y de sus impurezas o aditivos. Toda esta información deberá justificarse con información analítica.

Ejemplo

Constituyente principal	Contenido (%)	Impureza	Contenido (%)	Identidad de la sustancia
m-xileno	91	o-xileno	5	m-xileno

[10] Encontrará más información sobre la evaluación PBT y los criterios pertinentes en el Documento de orientación sobre requisitos de información y evaluación de la seguridad química, capítulo R11: evaluación PBT.

o-xileno	87	m-xileno	10	o-xileno

Por lo general, el constituyente principal se encuentra presente en cantidades > 80 % y debe especificarse completamente mediante los parámetros mencionados. La suma de concentraciones típicas del constituyente principal y las impurezas debe ser el 100 %. Las impurezas presentes en una concentración > 1 % debe especificarse por su nombre e identificadores. Las impurezas que resulten relevantes para la clasificación y/o la valoración PBT[11] deberán especificarse siempre mediante los mismos identificadores, independientemente de su concentración.

Para la correcta aplicación de la regla del 80 %, las sustancias añadidas intencionalmente, como reguladores del pH o colorantes, no podrán incluirse en el balance de masa.

Se ha aplicado la «regla del 80 %» a la notificación de nuevas sustancias (Directiva 67/548/CEE) y es aplicable en REACH. Sin embargo, cualquier alternativa a esta regla del 80 % deberá justificarse. Algunos ejemplos de una alternativa justificada son:

- Cuando el constituyente principal es < 80 % pero puede demostrarse que la sustancia posee propiedades fisicoquímicas similares y el mismo perfil de peligro que otras sustancias monoconstituyentes con las misma identidad, que cumplen la regla del 80 %.
- El rango de concentraciones para el constituyente principal y las impurezas se yuxtapone al criterio del 80 % y el constituyente principal solo ocasionalmente es ≤ 80 %.

Ejemplos

Sustancia	Constituyente principal	Contenido máximo (%)	Contenido típico (%)	Contenido mínimo (%)	Impureza	Contenido máximo (%)	Contenido típico (%)	Contenido mínimo (%)	Identidad de la sustancia
1	o-xileno	90	85	65	m-xileno	35	15	10	o-xileno
2	o-xileno m-xileno	90 35	85 15	65 10	p-xileno	5	4	1	o-xileno

Debido a los rangos de concentración del constituyente principal y las impurezas, las sustancias 1 y 2 pueden considerarse como un multiconstituyente de dos constituyentes principales, o-xileno y m-xileno, o como sustancias monoconstituyente. La decisión, en un caso así, consiste en considerar a ambas como sustancias monoconstituyentes, lo cual viene motivado por el hecho de que el contenido típico de o-xileno es > 80 %.

Información analítica

Deben aportarse datos cualitativos suficientes para confirmar la identidad de los constituyentes y las impurezas de una sustancia monoconstituyente. Se dispone de varios métodos espectroscópicos que pueden ser adecuados para confirmar la identidad de la sustancia, como las espectroscopias de absorción ultravioleta y visible (UV/Vis), de infrarrojos (IR) y de resonancia magnética nuclear (RMN), así como la espectroscopia de masas (EM). En el caso de las sustancias inorgánicas o de las sustancias orgánicas u organometálicas detectables/medibles por estructura cristalina, en la mayoría de los casos es preferible utilizar la difracción de rayos X (DXR)

Para confirmar la composición de la sustancia deberán utilizarse métodos cuantitativos, por ejemplo técnicas cromatográficas como la cromatografía de gases (CG) o la cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), junto con una técnica de detección. En el caso de las

[11] Encontrará más información sobre la evaluación PBT y los criterios pertinentes en el Documento de orientación sobre requisitos de información y evaluación de la seguridad química, capítulo R11: evaluación PBT.

sustancias inorgánicas, puede ser más adecuado utilizar la difracción de rayos X (DXR), la fluorescencia de rayos X, la espectrometría de absorción atómica (EAA), la espectrometría de emisión atómica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES) o la espectrometría de masas de plasma acoplado inductivamente (ICP-MS). Si es apropiado, deberán utilizarse también otras técnicas de separación de constituyentes validadas.

La descripción de los métodos analíticos debe incluir los protocolos experimentales seguidos y la interpretación de los resultados notificados.

Los métodos analíticos están sujetos a continuos avances y mejoras. Por tanto, es responsabilidad del solicitante de registro presentar los datos analíticos adecuados.

4.2.2. Sustancias multiconstituyentes

Una sustancia multiconstituyente es aquella, definida por su composición cuantitativa, en cuya concentración está presente más de un constituyente ≥ 10 % (p/p) y < 80 % (p/p). Las sustancias multiconstituyentes son resultado del proceso de fabricación[12].

REACH exige que la sustancia se registre tal como se produce. Si se fabrica una sustancia multiconstituyente, será ésta la sustancia que deberá registrarse[13] [14]. La decisión de establecer en qué medida las distintas etapas de la producción de una sustancia están contempladas en la definición de «fabricación» deberá ser tomada caso por caso. No es necesario comprobar la sustancia como tal, si el perfil de peligro de la misma está suficientemente descrito mediante la información de los constituyentes individuales.

Convenio de nomenclatura

Una sustancia multiconstituyente se denomina en función de la masa de reacción de los constituyentes principales de la sustancia como tal, es decir, no de los materiales de partida necesarios para producirla. El formato genérico es: «Masa de reacción de [nombre de los constituyentes principales]» Se recomienda presentar los nombres de los constituyentes por orden alfabético y separados por la conjunción «y». Solo los constituyentes principales en cantidades normalmente ≥ 10 % contribuyen al nombre. En principio, es preciso facilitar el nombre en inglés y de acuerdo con las reglas de nomenclatura IUPAC. Además, pueden aportarse otros nombres aceptados internacionalmente.

Identificadores

Una sustancia multiconstituyente se identifica por su nombre químico y todos los demás identificadores disponibles de la sustancia como tal, y por la identidad química de los constituyentes (incluida la fórmula estructural y molecular, o la estructura cristalina). Se identificará cualquier impureza o aditivo de la sustancia multiconstituyente. Deberán indicarse las concentraciones y los rangos de concentración típicos de los constituyentes y de sus impurezas o aditivos. Toda esta información deberá justificarse con información analítica.

Ejemplo

Constituyentes principales	Contenido (%)	Impureza	Contenido (%)	Identidad de la sustancia
m-xileno o-xileno	50 45	p-xileno	5	Masa de reacción de m-xileno y o-xileno

Para las sustancias multiconstituyentes, la composición química es conocida y para la identificación de la sustancia es relevante más de un constituyente principal. Además, la composición química de la sustancia es predecible, con valores y rangos típicos. Los constituyentes principales deben especificarse íntegramente empleando todos los parámetros pertinentes. La suma de concentraciones típicas de los constituyentes principales (≥ 10 %) y las impurezas (< 10 %) debe ser el 100 %.

Para la correcta identificación de la sustancia multiconstituyente, las sustancias añadidas

[12] La diferencia entre mezcla y sustancia multiconstituyente es que la mezcla se obtiene a partir de unir dos o más sustancias sin reacción química. Una sustancia multiconstituyente es el resultado de una reacción química.

[13] Varias sustancias están exentas del registro en ECHA (p.ej., las sustancias enumeradas en el anexo IV).

[14] Este planteamiento no se aplica a varias sustancias específicas como los minerales (véase el capítulo 7.5 para más detalles).

intencionalmente (por ejemplo, reguladores del pH o colorantes) no podrán incluirse en el balance de masa.

Las impurezas presentes en una concentración ≥ 1 % se especificarán por su nombre y todos los identificadores disponibles. Las impurezas que resulten relevantes para la clasificación y/o la valoración PBT deberán especificarse siempre mediante los mismos identificadores, independientemente de su concentración.

Ejemplo

Constituyente principal	Contenido máximo (%)	Contenido típico (%)	Contenido mínimo (%)	Impureza	Contenido máximo (%)	Contenido típico (%)	Contenido mínimo (%)	Identidad de la sustancia
anilina naftaleno	90 35	75 20	65 10	fenantreno	5	4	1	Masa de reacción de anilina y naftaleno

Según las reglas de este documento de orientación, se trata de una sustancia multiconstituyente. Aunque el rango de uno de los constituyentes es > 80 %, esto solo ocurre en contadas ocasiones, y la composición típica es < 80 %.

Siempre que una sustancia monoconstituyente o multiconstituyente sea ≥ 80 % o < 10 % (p/p), deberá aportarse una justificación de esta divergencia. Un ejemplo de divergencia justificada es el siguiente:

- El constituyente solo es ≥ 80 % o < 10 % ocasionalmente.

Por ejemplo, una sustancia está formada por dos constituyentes: uno al 85 % y el otro al 10 %, siendo el resto impurezas. Ambos constituyentes contribuyen y son esenciales para conseguir el efecto técnico deseado de la sustancia. En este caso, a pesar de que uno de los constituyentes está presente en una cantidad > 80 %, la sustancia puede describirse como formada por dos constituyentes.

Información analítica

Deben aportarse datos cualitativos suficientes para confirmar la identidad de los constituyentes y las impurezas de una sustancia multiconstituyente. Se dispone de varios métodos espectroscópicos que pueden ser adecuados para confirmar la identidad de la sustancia, como las espectroscopias de absorción ultravioleta y visible (UV/Vis), de infrarrojos (IR) y de resonancia magnética nuclear (RMN), así como la espectroscopia de masas (EM). En el caso de las sustancias inorgánicas o de las sustancias orgánicas u organometálicas detectables/medibles por estructura cristalina, en la mayoría de los casos es preferible utilizar la difracción de rayos X (DXR)

Para confirmar la composición de la sustancia deberán utilizarse métodos cuantitativos, por ejemplo técnicas cromatográficas como la cromatografía de gases (CG) o la cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), junto con una técnica de detección. En el caso de las sustancias inorgánicas, puede ser más adecuado utilizar la difracción de rayos X (DXR), la fluorescencia de rayos X, la espectrometría de absorción atómica (EAA), la espectrometría de emisión atómica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES) o la espectrometría de masas de plasma acoplado inductivamente (ICP-MS). Si es apropiado, deberán utilizarse también otras técnicas de separación de constituyentes validadas.

La descripción de los métodos analíticos debe incluir los protocolos experimentales seguidos y la interpretación de los resultados notificados.

Los métodos analíticos están sujetos a continuos avances y mejoras. Por tanto, es

responsabilidad del solicitante de registro presentar los datos espectrales adecuados.

Registro de constituyentes individuales de una sustancia multiconstituyente

En general, para las sustancias multiconstituyente el procedimiento que debe seguirse con fines de registro consiste en consignar la identidad de la sustancia (es decir, el registro de la sustancia multiconstituyente). Como alternativa a este procedimiento, pueden registrarse los constituyentes individuales en los casos justificados. La posibilidad de apartarse del caso estándar para identificar (y posiblemente registrar) sustancias mediante sus constituyentes individuales, puede darse cuando:

- no haya reducción de los requisitos de información;
- existan datos suficientes que justifiquen el procedimiento de registro de los constituyentes individuales, es decir, que dicho procedimiento no debe, por norma, suponer la realización de ensayos (con vertebrados) adicionales, comparado con el procedimiento estándar.
- registrar los constituyentes individuales lleve a una situación más eficiente (es decir, evitar múltiples registros de sustancias que contengan los mismos constituyentes);
- se facilite la información sobre las masas de reacción individuales.

Que exista este margen de flexibilidad no significa que deba aprovecharse para eludir los requisitos de información. En caso de, por ejemplo, 1200 toneladas por año (t/a) de una sustancia multiconstituyente «(C + D)», con una composición del 50 % de C y el 50 % de D, este procedimiento conduciría a dos registros con la siguiente información:

Sustancia C

- Tonelaje 600
- Deben cumplirse los requisitos de información para > 1000 t/a (anexo X)

Sustancia D

- Tonelaje 600
- Deben cumplirse los requisitos de información para > 1000 t/a (anexo X)

Este procedimiento deberá combinarse con los requisitos de REACH para la suma de volúmenes de la misma sustancia por entidad jurídica. El propósito es establecer los requisitos de datos como sigue:

- sumar los volúmenes totales de los constituyentes individuales (de acuerdo con las cantidades presentes en la sustancia)
- referirse al mayor volumen de una sustancia que contiene este constituyente

Los requisitos de información deben establecerse basándose en los resultados más elevados. Para la notificación de tonelajes, debe considerarse el resultado de la suma del tonelaje de cada constituyente particular. A continuación se exponen algunos ejemplos para ilustrar la aplicación práctica de este procedimiento:

Ejemplo 1

La sustancia multiconstituyente «C+D+E» es el resultado de un proceso dentro de una entidad jurídica, del cual resultan distintas sustancias:

- Sustancia 1: 50 % C, 25 % D y 25 % E, 1100 t/a
- Sustancia 2: 50 % C y 50 % D, 500 t/a

Además, en este caso el producto de reacción es el punto de partida: las dos sustancias deben registrarse como multiconstituyente. Si se sigue el procedimiento de registro de los

constituyentes individuales[15], se aplicará lo siguiente:

La notificación de la sustancia D significa, en este caso:

- Tonelaje: (25 % * 1100) + (50 % * 500) = 525 t/a

Los requisitos de información utilizados son los más exigentes. En este caso: > 1000 t/a, ya que el tonelaje total de la sustancia multiconstituyente «C+D+E» está por encima de las 1000 t/a.

Nota: en el ejemplo, las sustancias C y E deben registrarse en consecuencia.

Ejemplo 2

La sustancia multiconstituyente «G+H+I» es el resultado de un proceso dentro de una entidad jurídica, del cual resultan distintas sustancias:

- Sustancia 3: 65 % G, 15 % H y 20 % I, 90 t/a
- Sustancia 4: 60 % G y 40 % H, 90 t/a

Notificación de la sustancia G:

- Tonelaje: (65 % * 90) + (60 % * 90) = 112,5 t/a

Los requisitos de información utilizados son los más exigentes. En este caso: > 100 t/a, ya que el tonelaje total del constituyente G está por encima de las 100 t/a.

Nota: en el ejemplo, las sustancias H e I deben registrarse en consecuencia.

Además de establecer los requisitos de información mencionados, también es preciso tener en cuenta también el número de nuevos ensayos (con vertebrados) que se necesitan para ejecutarlos. Antes de decidirse por una estrategia u otra, los posibles solicitantes de registro deben considerar si existen suficientes estudios (con vertebrados) y si la flexibilidad propuesta conducirá a más o menos pruebas (con vertebrados). Se elegirá la estrategia que evite nuevos ensayos (con vertebrados).

En caso de duda, la vía estándar para consignar la identidad de la sustancia con fines de registro debe ser siempre la identificación de la sustancia tal como se fabrica.

4.2.3. Sustancias de composición química definida y otros identificadores principales

Algunas sustancias (p.ej., minerales inorgánicos) que pueden identificarse por su composición química, deben especificarse más ampliamente mediante identificadores adicionales para conseguir su propia identificación de sustancia. Puede tratarse tanto de sustancia monoconstituyente como multiconstituyente, pero, además de los parámetros de identificación de sustancias descritos en los capítulos anteriores, necesitan de otros identificadores principales para consignar su identidad de manera inequívoca.

Ejemplos

Algunos minerales no metálicos (procedentes de fuentes naturales o fabricados) con estructuras únicas también necesitan de la morfología y la composición mineral par identificar la sustancia de forma inequívoca. Un ejemplo es el caolín (CAS 1332-58-7), compuesto por caolinita, silicato de aluminio y potasio, feldespato y cuarzo.

[15] El ejemplo solo tiene como fin ilustrar el establecimiento de los requisitos de información y la notificación de los volúmenes. No aborda si el planteamiento es justificable en este caso.

El cumplimiento de las obligaciones de REACH específicas de las sustancias en «nanoformas» se explica en el *Apéndice relativo a las nanoformas aplicable al Documento de orientación sobre el registro y la identificación de las sustancias*[16]. En este documento se tratan cuestiones nanoespecíficas relacionadas con la identificación y caracterización de las nanoformas.

Convenio de nomenclatura

En principio, debe seguirse el mismo convenio en cuanto a nomenclatura para las sustancias monoconstituyentes (véase el capítulo 4.2.1) y multiconstituyentes (véase el capítulo 4.2.2).

Para los minerales inorgánicos, pueden utilizarse para los constituyentes los nombres mineralógicos. Por ejemplo, la apatita es una sustancia multiconstituyente formada por un grupo de minerales del grupo de los fosfatos, normalmente denominados hidroxiapatita, fluoroapatita y cloroapatita, en función de que contengan altas concentraciones de los iones OH^-, F^- o Cl^-, respectivamente, en el cristal. La fórmula de la mezcla de las tres especies más comunes es $Ca_5(PO_4)_3(OH, F, Cl)$. Otro ejemplo es el aragonito, una de las estructuras cristalinas especiales del carbonato cálcico.

Identificadores

Estas sustancias se identifican y denominan de acuerdo con las mismas reglas que rigen para las sustancias monoconstituyentes (véase el capítulo 4.2.1) y multiconstituyentes (véase el capítulo 4.2.2). Según la sustancia, se añadirán otros parámetros principales de identificación específicos. Como ejemplos de otro tipo de identificadores principales cabe citar la composición elemental con datos espectrales, la estructura cristalina según revela la difracción de rayos X (DRX), los picos de absorción en el infrarrojo, el índice de hinchamiento, la capacidad de intercambio catiónico u otras propiedades físicas y químicas.

En el caso de los minerales, es importante combinar los resultados de la composición elemental y los datos espectrales para identificar la composición mineralógica y la estructura cristalina. Esta se confirma entonces mediante las propiedades fisicoquímicas características, como estructura cristalina (según revela la difracción de rayos X), forma, dureza, capacidad de hinchamiento, densidad y/o área superficial.

Pueden facilitarse ejemplos de otros identificadores principales para minerales específicos, en la medida en que los minerales presenten propiedades fisicoquímicas características que hagan posible completar su identificación; p. ej., dureza muy baja para el talco, capacidad de hinchamiento de la bentonita, formas de la diatomita, densidad muy elevada de la barita y área superficial (absorción de nitrógeno).

Información analítica

El principal criterio es que debe aportarse toda la información necesaria para confirmar la estructura de la sustancia. Debe aportarse la misma información analítica para las sustancias monoconstituyentes (véase el capítulo 4.2.1) y multiconstituyentes (véase el capítulo 4.2.2).

4.3. Sustancias UVCB

Las sustancias de composición desconocida o variable, los productos de reacción compleja y los materiales biológicos (Unknown or Variable composition, Complex reaction products or

[16] Apéndice relativo a las nanoformas aplicable al Documento de orientación sobre el registro y la identificación de las sustancias, disponible en https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach

Biological materials[17, 18, 19]) no pueden identificarse completamente a partir de su composición química, debido a que:

- la cantidad de constituyentes es relativamente elevada y/o
- se desconoce la composición de una parte significativa de la misma y/o
- la variabilidad de la composición es relativamente elevada y/o poco predecible.

Por lo tanto, para la identificación de las sustancias UVCB exige otro tipo de información, aparte de la información conocida sobre su composición química.

En el Cuadro 5 puede apreciarse que los principales identificadores químicos para los diversos tipos de sustancias UVCB guardan relación con el origen de la sustancia y el procedimiento utilizado; o bien pertenecen a un grupo de «otros identificadores principales» (por ejemplo, «huella cromatográfica u otras huellas»). El número y las clases de identificadores que aparecen en el Cuadro 5 solo ilustran la variabilidad de tipos y no deben considerarse una perspectiva exhaustiva. Cuando se conoce la composición química de, por ejemplo, un producto de reacción complejo o una sustancia de origen biológico, la sustancia debe identificarse como monoconstituyente o multiconstituyente, según proceda. Definir sustancias como UVCB tiene como consecuencia el hecho de que cualquier cambio significativo en la fuente o el proceso generará probablemente una sustancia distinta que será preciso registrar de nuevo. Si una mezcla de reacción se identifica como «sustancia multiconstituyente», la sustancia podrá derivarse de una fuente distinta y/o haberse obtenido mediante procesos distintos, siempre y cuando la composición de la sustancia final se mantenga dentro del rango especificado. Por consiguiente, no se requeriría un nuevo registro.

El capítulo 4.3.1 incluye directrices genéricas sobre las sustancias UVCB, y en el capítulo 4.3.2 se facilitan orientaciones específicas sobre sustancias con variaciones en la longitud de la cadena de carbonos, sustancias obtenidas a partir del petróleo o de origen petrolífero y enzimas, como tipos específicos de sustancias UVCB.

4.3.1. Orientaciones generales sobre las sustancias UVCB

El presente capítulo del documento de orientación facilita directrices genéricas sobre cómo utilizar determinados identificadores principales, además de los parámetros de identificación de sustancias que figuran en la sección 2 del anexo VI de REACH, para identificar las sustancias UVCB.

Información sobre la composición química

Las sustancias UVCB no pueden especificarse solamente con el nombre IUPAC de los constituyentes, ya que no todos los constituyentes pueden identificarse; o podrían especificarse de forma genérica, pero la especificidad sería baja debido a la variabilidad de su composición exacta. Debido a la falta de diferenciación entre constituyentes e impurezas, los términos «constituyentes principales» e «impurezas» no deben considerarse relevantes para las sustancias UVCB.

Ahora bien, sigue siendo obligatorio indicar la composición química y la identidad de los constituyentes en la medida en que se conozcan. La descripción de la composición puede

[17] Rasmussen K, Pettauer D, Vollmer G et al. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. Tox Env Chem Vol. 69, pp. 403-416.
[18] US EPA (2005-B) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Combinations of two or more substances: complex reaction products.
[19] US EPA (2005-D) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Chemical Substances of Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Materials: UVCB Substances.

darse, a menudo, de forma más genérica; por ejemplo, «ácidos grasos C8-C16 de cadena linear» o «etoxilados de alcoholes C10-C14 con 4-10 unidades etoxiladas». Además, puede aportarse información sobre la composición química basándose en normas o muestras de referencia bien conocidas; en muchos casos, pueden utilizarse también índices y códigos existentes. Otra información genérica sobre la composición puede consistir en las llamadas "huellas dactilares», como por ejemplo imágenes cromatográficas o espectrales que muestran un patrón característico de distribución de los picos.

Para una sustancia UVCB, deben especificarse todos los constituyentes presentes en concentraciones ≥ 10 % y todos los demás constituyentes conocidos presentes en concentraciones < 10 % mediante un nombre IUPAC en inglés, con sus concentraciones y rangos de concentración típicos.

Además, cuando exista, se deberá indicar un identificador numérico de cada constituyente (número CAS o CE o número de lista).

Los constituyentes que no se puedan identificar individualmente se describirán en grupos según su naturaleza química. En este caso, se deberá especificar al menos un nombre químico por cada grupo, con su concentración y rango de concentración típicos. Además, cuando exista, se deberá aportar información estructural y molecular.

Los constituyentes que resulten relevantes para la clasificación y/o la valoración PBT[20] de la sustancia deberán especificarse siempre mediante los mismos identificadores, independientemente de su concentración.

Los constituyentes desconocidos que no contribuyan a la clasificación deberán identificarse en la medida de lo posible mediante una descripción genérica de su naturaleza química. Los aditivos deberán especificarse de manera similar a la descrita para las sustancias bien definidas.

Parámetros principales de identificación – nombre, fuente y proceso

Dado que la composición química por sí sola no es suficiente para la identificación de la sustancia, esta deberá, por regla general, identificarse por su nombre, su origen o fuente y una descripción del proceso de fabricación. Otras propiedades de la sustancia pueden constituir también identificadores importantes, bien por tratarse de identificadores genéricos relevantes (p. ej., el punto de ebullición) o como identificadores clave para grupos específicos de sustancias (p. ej., la actividad catalítica en el caso de las enzimas).

1. *Convenio de nomenclatura*

En general, el nombre de una sustancia UVCB es una combinación de la fuente y del proceso, con el formato general: primero la fuente y a continuación el/los proceso(s).

- Las sustancias procedentes de fuentes biológicas se identifican mediante el nombre de las especies.
- Las sustancias procedentes de fuentes no biológicas se identifican mediante las materias primas.
- Los procesos se identifican por el tipo de reacción química, en el caso de que haya síntesis de nuevas moléculas, o como un tipo de proceso de refinado (p. ej., extracción, fraccionamiento, concentración) o como residuo.

[20] Encontrará más información sobre la evaluación PBT y los criterios pertinentes en el Documento de orientación sobre requisitos de información y evaluación de la seguridad química, capítulo R11: evaluación PBT.

Ejemplos	
Número CE	**Nombre CE**
296-358-2	Lavanda, Lavandula hybrida, ext., acetilado
307-507-9	Lavanda, Lavandula latifolia, ext., sulfurizado, sal de paladio

En el caso de los productos de reacción, se han utilizado distintos formatos en el catálogo CE, p. ej.,

- EINECS: Material de partida principal, productos de reacción de otros materiales de partida
- ELINCS: Productos de reacción de otros materiales de partida

Ejemplos	
Número CE	**Nombre CE**
232-341-8	Ácido nitroso, productos de reacción con clorhidrato de 4-metil-1,3-bencenodiamina
263-151-3	Ácidos grasos, coco, productos de reacción con dietilentriamina
400-160-5	Productos de reacción de ácidos grasos de aceite de pino, dietanolamina y ácido bórico
428-190-4	Producto de reacción de: 2,4-diamino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-il)etil]-1,3,5-triacina y ácido cianúrico

En este documento de orientación, el formato genérico del nombre del producto o productos de reacción es «Producto(s) de reacción de [nombre de los materiales de partida]». En principio, es preciso facilitar el nombre en inglés y de acuerdo con las reglas de nomenclatura IUPAC. Además, pueden aportarse otros nombres aceptados internacionalmente. Se recomienda sustituir la palabra «reacción» en el nombre por el tipo de reacción específica descrito de una manera genérica; p. ej., esterificación, formación de sal, etc. (véanse más abajo las orientaciones para las cuatro subclases de UVCB específicas.

2. *Fuente*

Las fuentes pueden dividirse en dos grupos:

2.1. *Fuentes de naturaleza biológica*

Las sustancias de origen biológico deben definirse mediante el género, la especie y la familia; p. ej., *Pinus cembra*, *Pinaceae* significa *Pinus* (género), *cembra* (especie), *Pinaceae* (familia), y la cepa o el tipo genético, si es necesario. Cuando proceda, deberá indicarse asimismo el tejido o la parte del organismo utilizados para la extracción de la sustancia, por ejemplo, tuétano o páncreas; o tallo, semilla o raíz.

Ejemplos	
Número CE	**Nombre CE**
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ext. **Descripción CE** Extractos y sus derivados físicamente modificados, como tinturas, concretos, absolutos, aceites esenciales, oleorresinas, terpenos, fracciones libres de terpenos, destilados, residuos, etc., obtenidos de Saccharomyces cerevisiae, Saccharomycelaceae.
296-350-9	Arnica mexicana, ext. **Descripción CE** Extractos y sus derivados físicamente modificados, como tinturas, hormigones, absolutos, aceites esenciales, oleorresinas, terpenos, fracciones libres de terpenos, destilados, residuos, etc., obtenidos de Arnica mexicana, Compositae.

2.2. *Fuentes químicas o minerales*

En el caso de los productos de reacción de las reacciones químicas, los materiales de partida deben describirse mediante sus nombres IUPAC en inglés. Las fuentes minerales deben describirse en términos genéricos; p.ej., menas de fosfatos, bauxita, caolín, gas mineral, hulla, turba.

3. *Proceso*

Los procesos se identifican por el tipo de reacción química, en caso de que intervenga síntesis de nuevas moléculas, o como un tipo de proceso de refinado (p. ej., extracción, fraccionamiento o concentración) o como residuo del refinado.

Para determinadas sustancias, p. ej., derivados químicos, el proceso puede describirse como una combinación de refinado y síntesis.

3.1 *Síntesis*

Un determinado tipo de reacción química o bioquímica que tiene lugar entre los materiales de partida y que da como resultado la sustancia. Por ejemplo, la reacción de Grignard, la sulfonación, la digestión enzimática por la acción de proteasas o lipasas, etc. Muchas reacciones de derivación pertenecen también a este grupo.

En cuanto a las nuevas sustancias sintetizadas, para las que no es posible aportar la composición química, los materiales de partida son los identificadores principales, junto con una especificación de la reacción, es decir, el tipo de reacción química. El tipo de reacción química es un indicador de las moléculas que podrían intervenir en la sustancia. Existen varios tipos de reacción química final; hidrólisis, esterificación, alquilación, cloración, etc. Como la información aportada es genérica por lo que respecta a las posibles sustancias producidas, en muchos casos también será necesaria la huella espectral para la identificación y caracterización completa de la sustancia.

Ejemplos	
Números CE	**Nombre CE**
294-801-4	Aceite de linaza, epoxidado, productos de reacción con tetraetilenpentamina
401-530-9	Producto de reacción de (2-hidroxi-4-(3-propenoxi)benzofenona y trietoxisilano) con (producto de la hidrólisis de sílice y metiltrimetoxisilano)

3.2 *Refinado*

El refinado puede aplicarse de múltiples maneras a sustancias de origen natural o mineral, cuando no se altera la identidad de los constituyentes, pero sí su concentración; p. ej., procesado en frío de tejidos vegetales seguido de la extracción con alcohol.

El refinado puede definirse mejor en procesos como la extracción. La identificación de la sustancia depende del tipo de proceso:

- Para las sustancias derivadas de métodos físicos, como el refinado o el fraccionamiento, se debe especificar el intervalo de corte y los parámetros de fraccionamiento (p. ej., tamaño molecular, longitud de cadena, punto de ebullición, rango de volatilidad, etc.).
- Para las sustancias obtenidas por concentración, como los productos de los procesos metalúrgicos, precipitados obtenidos por centrifugación, residuos de procesos de filtración, etc., se debe especificar la etapa de concentración junto con la composición genérica de la sustancia resultante, en comparación con el material de partida.

Ejemplos	
Número CE	**Nombre CE**
408-250-6	Concentrado de compuesto de organowolframio (productos de reacción de hexacloruro de wolframio con 2-metilpropan-2-ol, nonilfenol y pentane-2,4-diona)

- Por lo que respecta a los residuos de una determinada reacción, como escorias, alquitranes y restos de metales pesados, el proceso se describe junto con la composición genérica de la sustancia resultante.

Ejemplos	
Número CE	**Nombre CE**
283-659-9	Estaño, residuos de fundición **Descripción CE** Sustancia resultante del uso y fabricación de estaño y sus aleaciones, obtenida a partir de fuentes principales y secundarias e incluyendo sustancias intermedias de plantas de reciclado. Está formada principalmente por compuestos de estaño y puede contener otros residuos metálicos no férreos y sus compuestos
293-693-6	Soja triturada, extr. de proteína. Residuo

	Descripción CE Subproducto, contiene principalmente hidratos de carbono, producido mediante extracción etanólica de soja desengrasada.

- En cuanto a los extractos, se debe indicar el método de extracción, así como el disolvente utilizado y las condiciones de extracción, como la temperatura o el rango de temperaturas.
- En los procesos combinados, se debe especificar cada etapa del proceso (de forma genérica), además de la información sobre la fuente. Estos procesos combinados revisten una importancia particular en el caso de las derivaciones químicas.

Ejemplos:

- El extracto procedente de una planta se destila y la fracción destilada se somete a derivación química. La sustancia resultante puede someterse a una purificación. El producto purificado podría tener una composición química bien definida, por lo que no es necesario identificar la sustancia como UVCB. Si el producto, finalmente, se considera una UVCB, el proceso combinado puede describirse como un «derivado químico purificado de la fracción destilada de un extracto de planta».
- Si el posterior procesado de un extracto solo incluye derivación física, la composición cambiará, pero sin síntesis deliberada de nuevas moléculas. No obstante, el cambio de composición originará una sustancia distinta; p. ej., un destilado o precipitado de un extracto de planta.
- Para la fabricación de productos del petróleo, a menudo se utilizan de forma conjunta la derivación química y el fraccionamiento. Por ejemplo, la destilación del aceite seguida de craqueo produce una fracción del material de partida y también nuevas moléculas. Por tanto, en este caso, deben identificarse ambos tipos de procesos, o debe especificarse el destilado como material de partida para el craqueo. Esto se aplica en especial a los derivados del petróleo que, a menudo, se producen como consecuencia de una combinación de procesos. Sin embargo, puede utilizarse un sistema específico diferenciado para la identificación de sustancias del petróleo (véase el capítulo 4.3.2.2).

Como el derivado químico de un extracto no contiene los mismos constituyentes que el extracto original, debe considerarse una sustancia distinta. La consecuencia de esta regla puede ser que la identificación mediante el nombre y la descripción se aparte del nombre y la descripción anteriores del EINECS. Cuando se estableció el catálogo del EINECS, extractos obtenidos mediante distintos procesos, distintos disolventes e, incluso, distintos derivados físicos o químicos, se incluyeron a menudo en una única entrada. Sin embargo, con arreglo a REACH estas sustancias deben registrarse como sustancias distintas.

4. *Otros parámetros de identificación de sustancias*

Además de la denominación química, la fuente y la especificación del proceso, una sustancia UVCB debe incluir cualquier otra información relevante, tal como establece la sección 2 del anexo VI de REACH.

Para tipos específicos de sustancias UVCB, en especial, pueden ser relevantes otros parámetros. Los identificadores adicionales pueden incluir:

- Descripción genérica de la composición química;
- Huella espectral y otros tipos de huellas;
- Material de referencia (p. ej., ISO);
- Parámetros fisicoquímicos (p. ej., punto de ebullición);
- Índice colorimétrico
- Número AISE.

A continuación se facilitan las reglas y criterios sobre cómo utilizar el nombre, la fuente y la información del proceso para la identificación de las sustancias UVCB, para distintos tipos de fuentes y procesos. En los párrafos siguientes se describen cuatro tipos de sustancias UVCB, como combinación de fuentes biológicas o químicas/mineralógicas y procesos (síntesis o refinado).

Sustancias UVCB del subtipo 1, cuando la fuente es biológica y el proceso es de síntesis

Las sustancias de naturaleza biológica pueden ser modificadas per procesos (bio)químicos para generar constituyentes distintos a los del material de partida; p. ej., los derivados químicos de extractos de plantas o los productos obtenidos por tratamiento enzimático de los extractos. Por ejemplo, las proteínas pueden hidrolizarse mediante proteasas para generar oligopéptidos, o la celulosa de la madera puede carboxilarse para obtener carboximetilcelulosa.

Los productos de la fermentación pueden entrar también dentro de este subtipo de UVCB. Por ejemplo, la vinaza en un producto de la fermentación del azúcar que, comparado con este, contiene muchos constituyentes distintos. Cuando los productos de la fermentación se purifican, las sustancias pueden, en algunos casos, identificarse completamente por su composición química y dejan de identificarse como sustancias UVCB.

Las enzimas son un grupo especial de sustancias que puede obtenerse por extracción y posterior refinado a partir de una fuente de origen biológico. Aunque la fuente y el proceso puedan identificarse de forma detallada, ello no genera la información específica de la enzima. Para estas sustancias se utiliza un sistema específico para la clasificación, denominación e identificación (véase el capítulo 4.3.2.3).

Para la identificación de una sustancia, debe indicarse la etapa final del proceso y/o cualquier otra etapa del mismo que resulte relevante para ello.

La descripción del proceso químico ha de ser genérica, indicando el tipo de reacción (esterificación, hidrólisis alcalina, alquilación, cloración, substitución, etc.), así como las circunstancias relevantes del proceso.

La descripción del proceso bioquímico puede ser una descripción genérica de la reacción catalizada, junto con el nombre de la enzima que la cataliza.

Para las sustancias producidas mediante fermentación o cultivos de especies, se indicarán las especies fermentadoras y el tipo y las condiciones generales de la fermentación (en lotes o continua, aerobia, anaerobia, anóxica, temperatura, pH, etc.), así como cualquier etapa del proceso encaminada a aislar los productos de fermentación (centrifugación, precipitación, extracción, etc.). Si estas sustancias se someten a un refinado posterior, el proceso podría producir una fracción, un concentrado o un residuo. Estas sustancias procesadas posteriormente se identifican con una especificación adicional de las etapas del proceso añadidas.

Sustancias UVCB del subtipo 2, cuando la fuente es química o mineral y el proceso es de síntesis

Las sustancias UVCB obtenidas a partir de fuentes químicas o minerales, derivadas mediante un proceso en el cual se sintetizan nuevas moléculas, son «productos de reacción» . Ejemplos de productos de reacción química son los productos de esterificación, alquilación o cloración. Las reacciones bioquímicas catalizadas por enzimas aisladas constituyen tipos especiales de reacciones químicas. Sin embargo, si se aplica una ruta bioquímica compleja de síntesis en la que intervienen microorganismos completos, es preferible considerar la sustancia resultante como un producto de fermentación e identificarla mediante el proceso de fermentación y las especies fermentadoras, en lugar de utilizar los materiales de partida (véase el subtipo 4 de

UVCB).

No todos los productos de reacción deben especificarse automáticamente como UVCB. Si un producto de reacción queda suficientemente definido por la composición química (incluyendo cierta variabilidad) es preferible su identificación como sustancia multiconstituyente (véase el capítulo 4.2.2). Solo cuando la composición del producto de reacción es insuficientemente conocida o poco predecible, la sustancia deberá identificarse como una sustancia UVCB («producto de reacción»). La identificación de un producto de reacción se basa en los materiales de partida para la reacción y en el proceso bioquímico a partir del cual se genera la sustancia.

Ejemplos

Número CE	Nombre EINECS	Número CAS
294-006-2	Ácido nonanodioico, productos de reacción con 2-amino-2-metil-1-propanol	91672-02-5
294-148-5	Formaldehído, productos de reacción con dietilenglicol y fenol	91673-32-4

Un identificador principal para los productos de reacción es la descripción del proceso de fabricación. Para la identificación de la sustancia se debe indicar la etapa final o más relevante del proceso. La descripción del proceso químico ha de ser genérica, indicando el tipo de reacción (p. ej., esterificación, hidrólisis alcalina, alquilación, cloración, substitución, etc.), así como las circunstancias relevantes del proceso. El proceso bioquímico se describe por el tipo de reacción, junto con el nombre de la enzima que cataliza la reacción.

UVCB subtipo 3, cuando la fuente es biológica y el proceso es de refinado

Las sustancias UVCB de origen biológico resultantes de un proceso de refinado en el cual no se generan nuevas moléculas intencionalmente, pueden ser, por ejemplo, extractos, fracciones de extractos, concentrados de extractos, extractos purificados o procesos residuales de sustancias de origen biológico.

Cuando se procesa posteriormente el extracto, la sustancia resultante no será idéntica a la de partida, sino otra sustancia que pertenecerá a otro subtipo de UVCB; p. ej., una fracción o un residuo de un extracto. Estas sustancias deben especificarse con los parámetros de procesado adicionales. Si el extracto se modifica mediante reacciones químicas o bioquímicas y se generan nuevas moléculas (derivados), la identificación de la sustancia se realiza conforme a las directrices para el subtipo 2 de UVCB o las orientaciones del capítulo 4.2 para las sustancias bien definidas.

Esta diferenciación de los extractos posteriormente procesados puede hacer que el nuevo nombre y la nueva descripción difieran de los que figuran en el catálogo del EINECS. Cuando se estableció el catálogo no se hacía este tipo de diferenciación y todos los tipos de extractos, con distintos disolventes y fases posteriores de procesado, hubieran podido englobarse en una sola entrada.

El primer identificador principal para este subtipo de sustancias UVCB es la familia, el género y la especie del organismo del cual se obtiene la sustancia. Cuando proceda, deberá indicarse el tejido o la parte del organismo utilizados para la extracción de la sustancia, por ejemplo, tuétano o páncreas; o tallo, semilla o raíz. Para las sustancias de origen microbiológico, deberá definirse la cepa y el tipo genético de la especie.

Si la sustancia UVCB se obtiene a partir de distintas especies, deberán considerarse sustancias

distintas, aunque la composición química sea similar.

Ejemplos	
Número CE	**Nombre EINECS**
290-977-1	Extracto oxidado de palo campeche (Haematoxylon campechianum) **Descripción CE** Esta sustancia está identificada en el índice de color por el índice colorimétrico nº C.I. 75290 oxidado.
282-014-9	Extractos pancreáticos, desproteinizados

El segundo identificador principal es el procesado de la sustancia; p. ej., la extracción, el fraccionamiento, la purificación o la concentración, o el proceso que influye en la composición del residuo. Por tanto, refinados de extractos realizados mediante diferentes procesos (p. ej., con distintos disolventes o mediante distintas etapas de purificación) producirán diferentes sustancias.

Cuantas más etapas se apliquen en el refinado, más factible resultará definir la sustancia por su composición química. En este caso, distintas especies fuente o diferentes modificaciones del proceso no conducirán automáticamente a una sustancia diferente.

Un parámetro de identificación principal para las sustancias de origen biológico es la descripción de los procesos relevantes. Para los extractos, el proceso de extracción se describirá con el nivel de detalle necesario para la identidad de la sustancia. Como mínimo, deberá especificarse el disolvente utilizado.

Cuando se utilicen etapas de proceso posteriores para fabricar la sustancia, como el fraccionamiento o la concentración, deberá describirse la combinación de las etapas relevantes del proceso; p. ej., la combinación de extracción y fraccionamiento incluyendo los intervalos de corte.

Sustancias UVCB del subtipo 4, cuando la fuente es química o mineral y el proceso es de refinado

Las sustancias de origen no biológico, es decir, originadas a partir de minerales, menas, hulla, gas natural y petróleo crudo, o de otros materiales en bruto utilizados por la industria química, y resultantes de un procesado sin reacciones químicas intencionadas, pueden ser fracciones (purificadas), concentrados o residuos de estos procesos.

La hulla y el petróleo crudo se procesan por destilación o gasificación para producir una amplia variedad de sustancias; p. ej., derivados del petróleo, gases combustibles, etc., y también residuos como alquitranes y escorias. Muy a menudo, los destilados y fracciones se someten inmediatamente a más procesos, incluyendo reacciones químicas. En tales casos, la identificación de sustancias debe seguir las orientaciones para las UVCB del subtipo 2, ya que el proceso es más relevante que la fuente.

Para los derivados del petróleo se utiliza un sistema de identificación especial (véase el capítulo 4.3.2.2). Las sustancias contempladas en este sistema incluyen fracciones y productos de reacción química.

Otras sustancias UVCB del subtipo 4 pueden ser menas, concentrados de mena y escorias que contienen cantidades variables de metales que pueden extraerse mediante un proceso metalúrgico.

Minerales como la bentonita o el carbonato de calcio pueden procesarse mediante, por ejemplo, disolución en ácido y/o precipitación química o en columnas de intercambio iónico. Cuando la composición química está completamente definida, los minerales deberán identificarse según las indicaciones de la parte correspondiente del capítulo 4.2. Si los minerales son procesados solo por métodos mecánicos, por ejemplo por desbastado, tamizado, centrifugación, flotación, etc., se siguen considerando los mismos minerales que se extrajeron. Los minerales originados mediante un proceso de fabricación pueden, con fines de identificación[21], considerarse los mismos que los equivalentes presentes de manera natural, dado que su composición es similar y su perfil toxicológico idéntico.

Un parámetro de identificación principal para las sustancias de origen no biológico es la descripción de las etapas relevante del proceso.

Para las fracciones, debe describirse el proceso de fraccionamiento, con los parámetros y el intervalo de corte para la fracción aislada, junto con una descripción de las etapas previas del proceso, cuando sea relevante.

Para las etapas de concentración, debe indicarse el tipo de proceso (p. ej., evaporación, precipitación, etc.) y la relación entre las concentraciones de partida y final para los constituyentes principales, además de información sobre las etapas previas del proceso.

Un parámetro de identificación principal para los residuos de origen no biológico es la descripción del proceso por el cual se han originado. Dicho proceso puede ser cualquier reacción física que genere residuos, como purificación, fraccionamiento o concentración.

Información analítica

Entre las sustancias UVCB hay muy diversos tipos de sustancias, que difieren en parámetros como la fuente o el proceso de fabricación. En consecuencia, deberán presentarse métodos analíticos adecuados para proporcionar información sobre la composición de la sustancia UVCB que dependerán de cada caso. Por otra parte, el conocimiento de cómo utilizar dichos métodos está sujeto a continuos avances y mejoras. Por tanto, es responsabilidad del solicitante de registro presentar datos analíticos adecuados, a fin de proporcionar la mejor información posible para identificar la sustancia.

Se pueden utilizar varios métodos cualitativos para caracterizar las sustancias UVCB; algunos ejemplos son las espectrometrías UV/Vis, de infrarrojos y de masas, la resonancia magnética nuclear y la difracción de rayos X.

Deben aportarse datos cuantitativos, como cromatogramas o datos de difracción, que puedan utilizarse a modo de huella para caracterizar la composición de la sustancia.

La descripción de los métodos analíticos debe incluir los protocolos experimentales seguidos y la interpretación de los resultados notificados.

4.3.2. Tipos específicos de sustancias UVCB

Esta sección ofrece orientaciones sobre grupos específicos de sustancias UVCB: sustancias con variaciones en la longitud de la cadena carbonada (4.3.2.1), sustancias obtenidas del petróleo o de origen petrolífero (4.3.2.2) y enzimas (4.3.2.3).

[21] El mismo planteamiento para la identificación de minerales presentes de manea natural y de producción química no implica necesariamente que los requisitos legales (p.ej., exenciones de registro) sean los mismos.

4.3.2.1 Sustancias con variaciones en la longitud de la cadena carbonada

Este grupo comprende sustancias de cadena alquílica larga, con variaciones en el número de carbonos de la cadena, como las parafinas y olefinas. Pueden obtenerse a partir de grasas y aceites naturales o producirse de forma sintética. Las grasas y aceites naturales pueden ser tanto de origen animal como vegetal. Las sustancias procedentes de plantas tienen, por lo general, solo un número par de carbonos en la cadena alquílica larga, mientras que las procedentes de animales pueden tener, en algunos casos, un número impar de carbonos. Las sustancias producidas de forma sintética pueden tener cualquier número de carbonos en la cadena alquílica larga, y estos pueden ser pares o impares.

Identificadores y convenio de nomenclatura

El grupo contiene sustancias en las que los constituyentes principales presentan una característica estructural común: uno o más grupos alquílicos de cadena larga, a menudo unidos a un grupo funcional. Los constituyentes se diferencian entre sí por una o más de las siguientes características de la cadena del grupo alquílico:

- Longitud de la cadena carbonada (número de carbonos)
- Saturación
- Estructura (linear y/o ramificada)
- Posición del grupo funcional

Para describir de manera suficiente la identidad química de los constituyentes y nombrarlos sistemáticamente, pueden utilizarse los tres descriptores siguientes:

- El **descriptor alquílico**, que indica el número de átomos de carbono entre los que varía la longitud de la cadena carbonada.
- El **descriptor de funcionalidad**, que indica el grupo funcional de la sustancia; p. ej., amina, amonio o ácido carboxílico.
- El **descriptor de la sal**, que indica el catión/anión que forma la sal; p. ej., sodio (Na+), carbonato (CO32-) o cloruro (Cl-).

Descriptor alquílico

- En general, el descriptor alquílico C_{x-y} se refiere a cadenas alquílicas lineales y saturadas, de cualquier longitud, entre «x» e «y»; p. ej., C_{8-12} correspondería a las cadenas C_8, C_9, C_{10}, C_{11} y C_{12}.
- Si el descriptor alquílico se refiere solo a cadenas alquílicas con número de carbonos par o impar, debe indicarse; p. ej., $C_{8-12\ (números\ impares)}$
- Si el descriptor alquílico se refiere (también) a cadenas alquílicas ramificadas, debe indicarse; p. ej., $C_{8-12\ (ramificada)}$ o $C_{8-12\ (lineal\ y\ ramificada)}$
- Si el descriptor alquílico se refiere (también) a cadenas alquílicas insaturadas, debe indicarse; p. ej., $C_{12-22(C18\ insaturado)}$
- Una distribución de longitudes de la cadena alquílica limitada no cubre otra más amplia, y viceversa; p. ej., C_{10-14} no corresponde a C_{8-18}
- El descriptor alquílico puede referirse también a la fuente de las cadenas alquílicas; p. ej., coco o sebo. Sin embargo, la distribución de longitudes de la cadena alquílica debe corresponder a la de la fuente.

El sistema que acabamos de exponer debe utilizarse para describir sustancias con variaciones en la longitud de la cadena carbonada. No es adecuado para sustancias bien definidas, que pueden identificarse mediante una estructura química concreta.

La información aportada por el descriptor alquílico, el descriptor de funcionalidad y el descriptor de la sal constituye la base para denominar a este tipo de sustancias UVCB.

Además, puede ser útil la información sobre la fuente y el proceso, con el fin de identificar la sustancia con mayor exactitud.

Ejemplos		
Descriptores		**Nombre**
Descriptor alquílico **Descriptor de funcionalidad** **Descriptor de la sal**	longitudes de cadena alquílica C_{10-18} ácidos grasos (ácido carboxílico) sales de cadmio	sales de cadmio de ácidos grasos (C10-18)
Descriptor alquílico **Descriptor de funcionalidad** **Descriptor de la sal**	di-C_{10-18}-alquil-dimetil amonio cloruro	cloruro de di-C10-18-alquil-dimetilamonio
Descriptor alquílico **Descriptor de funcionalidad** **Descriptor de la sal**	trimetil sebo-alquil amonio cloruro	cloruro de trimetil-seboalquil-amonio

4.3.2.2 Sustancias obtenidas del petróleo o de origen petrolífero

Las sustancias obtenidas del petróleo (derivados del petróleo) o de origen petrolífero (p. ej., hulla) son muy complejas y variables o tienen una composición parcialmente no definida. Es este capítulo se utilizan los derivados del petróleo para demostrar cómo puede identificarse este tipo específico de sustancias UVCB. No obstante, el mismo enfoque podría aplicarse a otras sustancias obtenidas de fuente de origen petrolífero, como la hulla.

Los materiales de partida utilizados en las refinerías petrolíferas pueden ser petróleo crudo o bien cualquier corriente de refinería específica obtenida por medio de uno o más procesos. La composición de los productos finales dependerá del crudo (puesto que su composición varía según el lugar de origen) utilizado para la fabricación y del correspondiente proceso en la refinería. Por tanto, existe una variación natural, independiente del proceso, en la composición de los derivados del petróleo[17].

1. *Convenio de nomenclatura*

Para la identificación de los derivados del petróleo se recomienda utilizar un sistema de nomenclatura establecido[22]. Este nombre está formado normalmente por el proceso en la refinería, el origen de la corriente y la composición o características generales. Si la sustancia contiene más del 5 % (p/p) de hidrocarburos aromáticos con 4 a 6 anillos condensados, dicha información debe incluirse en la descripción. Para los derivados del petróleo con un número EINECS, deberá utilizarse el nombre que figura en el catálogo CE.

---

[22] US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Candidate list of chemicals substances Addendum I. Generic terms covering petroleum refinery process streams. US EPA, Office of Toxic Substances, Washington DC 20460.

2. *Identificadores*

Los términos y definiciones para la identificación de los derivados del petróleo incluyen el origen de corriente, el proceso en la refinería, la composición general, el número de carbonos, el intervalo de ebullición u otras características físicas apropiadas, y el tipo de hidrocarburo predominante[22].

Deben proporcionarse los parámetros de identificación del (anexo VI, sección 2, de REACH. Se sabe que los derivados del petróleo se fabrican según las especificaciones de funcionamiento, no según las especificaciones de composición. Por tanto, características como el nombre, intervalo de la longitud de la cadena carbonada, punto de ebullición, viscosidad, valores de corte y otras propiedades físicas suelen ser de más ayuda que la información sobre la composición, a la hora de identificar el derivado del petróleo lo más claramente posible.

Aunque la composición química no es el principal identificador para las sustancias UVCB, deben facilitarse todos los constituyentes con una concentración ≥ 10 % y los constituyentes conocidos con una concentración < 10 %, y debe describirse la composición en términos genéricos, por ejemplo, intervalo de peso molecular, alifáticos o aromáticos, grado de hidrogenación y otra información esencial. Los grupos de constituyentes que no puedan identificarse individualmente también deberán describirse con los mismos parámetros. Además, debe identificarse, mediante el nombre y la concentración típica, cualquier otro constituyente en concentraciones menores que pueda influir sobre la clasificación de peligro.

4.3.2.3 Enzimas

En general, las enzimas se obtienen a partir de fermentaciones por microorganismos, pero en ocasiones también se extraen de plantas o animales. El concentrado líquido de enzimas que resulta de la fermentación o extracción, y las posteriores etapas de purificación, contienen, además de agua y la proteína enzimática activa, otros constituyentes que comprenden los residuos de la fermentación, es decir, proteínas, péptidos, aminoácidos, hidratos de carbono, lípidos y sales inorgánicas.

La proteína enzimática, junto con los otros constituyentes, se originan en procesos de fermentación o extracción pero, excluyendo el agua, que puede separarse sin afectar a la estabilidad de la proteína enzimática o cambiar su composición, deben considerarse como la sustancia, a efectos de identificación.

La sustancia enzimática contiene típicamente de un 10 a un 80 % de proteína enzimática. El resto de los constituyentes varía en cuanto a porcentaje y depende del organismo utilizado para su producción, el medio de fermentación y los parámetros operacionales del proceso de fermentación, así como las etapas de purificación intermedias utilizadas, pero la composición estará normalmente entre los intervalos indicados en el cuadro siguiente.

Proteína enzimática activa	10–80 %
Otras proteínas + péptidos y aminoácidos	5–55 %
Hidratos de carbono	3–40 %
Lípidos	0–5 %
Sales inorgánicas	1–45 %
Total	100 %

La sustancia enzimática debe contemplarse como una «sustancia UVCB» debido a su variabilidad y composición parcialmente desconocida. La proteína enzimática debe contemplarse como un constituyente de la sustancia UVCB. Las enzimas altamente purificadas pueden identificarse como sustancias de composición bien definida (monoconstituyente o multiconstituyente) y deben identificarse en consecuencia.

En el EINECS, el identificador principal para las enzimas es la actividad catalítica. Las enzimas están incluidas como entradas genéricas, sin más especificaciones, o con entradas específicas que indican los organismos fuente o el sustrato.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre EINECS**	**Número CAS**
278-547-1	Proteinasa, Bacillus, neutro	76774-43-1
278-588-5	Proteinasa, Aspergillus, neutro	77000-13-6
254-453-6	Elastasa (páncreas de cerdo)	39445-21-1
262-402-4	Mannanasa	60748-69-8

En un estudio sobre las enzimas encargado por la Comisión Europea se propone identificarlas mediante el sistema internacional de nomenclatura enzimática de la IUBMB (Unión Internacional de Bioquímica y Biología Molecular)[23]. Este enfoque es el que se ha adoptado en este documento de orientación, y permitirá una identificación de las enzimas más sistemática, detallada y completa, comparado con el EINECS.

1. *Convenio de nomenclatura*

Las enzimas se denominan según el convenio de nomenclatura IUBMB.

El sistema de clasificación IUBMB consiste en un código único de cuatro cifras para cada tipo de enzima y función catalítica (p. ej., 3.2.1.1 para la α-amilasa)[24]. Cada número puede comprender enzimas con un origen y una secuencia de aminoácidos variables, pero la función de dichas enzimas será idéntica. Para la identificación de sustancias debe utilizarse el nombre y el número de la nomenclatura IUBMB, la cual clasifica a las enzimas en seis grupos principales:

- 1. Oxidoreductasas
- 2. Transferasas
- 3. Hidrolasas
- 4. Liasas
- 5. Isomerasas
- 6. Ligasas

[23] UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Collection of Information on Enzymes. Final report. Co-operation between Federal Environment Agency Austria and Inter-University Research Center for Technology, Work and Culture (IFF/IFZ). Contract No B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

[24] Los términos «número EC» (≡ número de la Comisión de Enzimas) y «número IUBMB» a menudo se usan como sinónimos. Para evitar malentendidos, se recomienda usar el término «número IUBMB» para el código de cuatro números del IUBMB.

El ejemplo siguiente ilustra una entrada de acuerdo con la nomenclatura IUBMB:

EC 3.4.22.33

Nombre aceptado: bromelaína de fruta

Reacción: Hidrólisis de proteínas con amplia especificidad para enlaces peptídicos. Bz-Phe-Val-Arg┼NHMec es un buen sustrato sintético, pero no hay actividad para Z-Arg-Arg-NHMec (c.f. tallo de bromelia)

Otros nombres: bromelaína de jugo; ananasa; bromelasa; bromelina; extranasa; bromelaína de jugo; piñasa; enzima de piña; traumanasa; bromelaína de fruta FA2

Comentarios: Procedente de la planta de la piña, *Ananas comosus*. Apenas inhibida por la cistatina del pollo. Otra cisteína endopeptidasa, con acción similar sobre pequeñas moléculas de sustrato, la pinguinaína (antes EC 3.4.99.18), se obtiene de una planta relacionada, Bromelia pinguin, pero la pinguinaína difiere de la bromelaína de fruta en que es inhibida por la cistatina del pollo [4][25]. En familia de la peptidasa C1[26] (familia de la papaína). Antes EC 3.4.22.5 e incluida en EC 3.4.22.4, nº de registro CAS: 9001-00-7

Referencia a otras bases de datos:

BRENDA (http://www.brenda-enzymes.org/)

EXPASY (http://enzyme.expasy.org/EC/3.4.22.33)

MEROPS (http://merops.sanger.ac.uk/index.shtml)

Referencias generales:

Sasaki, M., Kato, T. and Iida, S. Antigenic determinant common to four kinds of thiol proteases of plant origin. *J. Biochem. (Tokyo)* 74 (1973) 635-637. [PMID: 4127920]

Yamada, F., Takahashi, N. and Murachi, T. Purification and characterization of a proteinase from pineapple fruit, fruit bromelain FA2. J. Biochem. (Tokyo) 79 (1976) 1223-1234. [PMID: 956152]

Ota, S., Muta, E., Katanita, Y. and Okamoto, Y. Reinvestigation of fractionation and some properties of the proteolytically active components of stem and fruit bromelains. *J. Biochem. (Tokio)* 98 (1985) 219-228. [PMID: 4044551]

Ejemplos de clasificación de enzimas conforme al sistema IUBMB (http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html)	
Las proteasas se numeran según los criterios siguientes:	
3.	**Hidrolasas**
3.4	**Actúan en los enlaces peptídicos (peptidasas); subclases:**

[25] Rowan, A.D., Buttle, D.J. and Barrett, A.J. The cysteine proteinases of the pineapple plant. Biochem. J. 266 (1990) 869-875. [Medline UI: 90226288]

[26] http://merops.sanger.ac.uk/cgi-bin/merops.cgi?id=c1.

3.4.1	α-aminoacil-péptido hidrolasas (ahora en CE 3.4.11)
3.4.2	Peptidil-aminoácido hidrolasas (ahora en CE 3.4.17)
3.4.3	Dipéptido hidrolasas (ahora en CE 3.4.13)
3.4.4	Peptidil péptido hidrolasas (ahora reclasificadas en CE 3.4)
3.4.11	Aminopeptidasas
3.4.12	Peptidilaminoácido hidrolasas o acilaminoácido hidrolasas (ahora reclasificadas en CE 3.4)
3.4.13	Dipeptidasas
3.4.14	Dipeptidil-peptidasas y tripeptidil-peptidasas
3.4.15	Peptidil-dipeptidasas
3.4.16	Carboxipeptidasas tipo serina
3.4.17	Metalocarboxipeptidasas
3.4.18	Carboxipeptidasas tipo cisteína
3.4.19	Omega peptidasas
3.4.21	Serina endopeptidasas
	Además se identifican enzimas específicas:
3.4.21.1	Quimotripsina
3.4.21.2	Quimotripsina C
3.4.21.3	Metridina
3.4.21.4	Tripsina
3.4.21.5	Trombina
3.4.21.6	Factor de coagulación Xa
3.4.21.7	Plasmina
3.4.21.8	Ahora englobadas en CE 3.4.21.34 y CE 3.4.21.35
3.4.21.9	Enteropeptidasa
3.4.21.10	Acrosina
3.4.21.11	Ahora englobadas en CE 3.4.21.36 y CE 3.4.21.37

3.4.21.12	Alfa-lítico endopeptidasa
…	
3.4.21.105	
3.4.99	Endopeptidasas de mecanismo catalítico desconocido

Ejemplos del EINECS con números IUBMB añadidos

Número CE	Nombre EINECS	Número CAS	Número IUBMB
278-547-1	Proteinasa, Bacillus, neutro	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisina	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Celulasa	9012-54-8	3.2.1.4

2. *Identificadores*

Las sustancias enzimáticas se identifican por el contenido de proteína enzimática (nomenclatura IUBMB) y los demás constituyentes procedentes de la fermentación. Los constituyentes específicos que acompañan a la proteína enzimática no suele estar presente en concentraciones superiores al 1 %. Si no se conocen las identidades de estos constituyentes específicos, pueden indicarse los grupos (es decir, proteínas, péptidos, aminoácidos, hidratos de carbono, lípidos y sales inorgánicas. Sin embargo, deben señalarse los constituyentes individuales en caso de que se conozcan sus identidades o si su concentración es igual o superior al 10 % o si son relevantes para la clasificación y el etiquetado o la valoración PBT[27].

Proteínas enzimáticas

Las proteínas ezimáticas del concentrado deben identificarse mediante:

- Número IUBMB
- Nombre asignado por IUBMB (nombre sistémico, nombres de la enzima, sinónimos)
- Comentarios asignados por IUBMB
- Reacción y tipo de reacción
- Número y nombre EC, si procede
- Número y nombre CAS, si procede

Debe especificarse la reacción inducida por la enzima. Esta reacción se define mediante IUBMB.

[27] Encontrará más información sobre la evaluación PBT y los criterios pertinentes en el Documento de orientación sobre requisitos de información y evaluación de la seguridad química, capítulo R11: evaluación PBT.

Ejemplo
alfa-amilasa: Polisacárido formado por unidades de glucosa con uniones alfa-(1-4) + H2O = maltooligosacáridos; endohidrólisis de las uniones 1,4-alfa-d-glucosídicas en polisacáridos que contengan tres o más unidades de d-glucosa con uniones 1,4-alfa.

Según la clase de enzima, debe asignarse un tipo de reacción. Esta puede ser de oxidación, reducción, eliminación, adicción, o un nombre de reacción.

Ejemplo
alfa-amilasa: hidrólisis de los enlaces O-glucosil (endohidrólisis)

Constituyentes distintos de la proteína enzimática

Deben identificarse todos los constituyentes en cantidades ≥ 10 % (p/p) o que sean relevantes para la clasificación y el etiquetado y/o la valoración PBT[28]. La identidad de los constituyentes en cantidades menores del 10 % pueden indicarse como un grupo químico, y deben facilitarse las concentraciones típicas o los intervalos de concentración; a saber:

- (Gluco)proteínas
- Péptidos y aminoácidos
- Hidratos de carbono
- Lípidos
- Materia inorgánica (p. ej., cloruro sódico u otras sales inorgánicas)

Si no es factible identificar de forma suficiente otros constituyentes en un concentrado de enzimas, debe indicarse el nombre del organismo productor (género y cepa o tipo genético, si resulta pertinente), al igual que para otras sustancias UVCB de origen biológico.

Si se dispone de ella, debe aportarse otra información; p. ej., parámetros funcionales (es decir, pH o temperatura óptima e intervalos), parámetros cinéticos (es decir, actividad específica o número de recambio), ligandos, sustratos y productos y cofactores.

[28] Encontrará más información sobre la evaluación PBT y los límites de concentración pertinentes en la sección sobre evaluación de la seguridad química RIP 3.2 TGD sobre la evaluación PBT.

5. Criterios para comprobar si las sustancias son iguales

Al comprobar si las sustancias de fabricantes/importadores pueden o no considerarse la misma, es preciso respetar ciertas normas: Estas normas, que se aplicaron para constituir el EINECS, deben entenderse como una base común para la identificación y denominación de una sustancia, y localizar así posibles solicitantes de registro conjunto de esta sustancia en particular[5, 6,, 16, 29, 30]. Las sustancias no consideradas como una misma sustancia pueden, no obstante, considerarse relacionadas estructuralmente, una vez aplicado un criterio especializado. Cabría sin embargo la posibilidad de una puesta en común de datos para estas sustancias si ello estuviera científicamente justificado. No obstante, no es ése el objeto del presente documento y se aborda más bien en el *Documento de orientación sobre la puesta en común de datos*.

- Debe aplicarse la regla «≥ 80 %» para las sustancias monoconstituyentes, así como la definición de las sustancias multiconstituyentes.

No se establecen diferencias entre los grados técnico, puro o analítico de las sustancias. Esto significa que la «misma» sustancia puede presentar distintos perfiles de pureza/impureza, en función de su grado. No obstante, las sustancias bien definidas deben contener los mismos constituyente principales, y la únicas impurezas toleradas son las que derivan del proceso de producción (para más detalles, véase el capítulo 4.2) y los aditivos necesarios para estabilizar la sustancia.

- Las formas hidratadas y anhidras de los compuestos se entenderán como la misma sustancia a efectos de registro.

Ejemplos

Nombre y fórmula	Número CAS	Número CE	Regla
Sulfato de cobre (CuH_2O_4S)	7758-98-7	231-847-6	
Sal de cobre (2+) del ácido sulfúrico (1:1), pentahidrato ($Cu.H_2O_4\ S\ \ 5\ H_2O$)	7758-99-8		Está sustancia está registrada en su forma anhidra (número CE: 231-847-6)

Las formas hidratadas y anhidras tienen distintos nombres químicos y distintos números CAS.

- Los ácidos o bases y sus sales deben considerarse sustancias distintas.

[29] Vollmer et al. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, p. 113-122.
[30] Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, sitio web de ECB; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
201-186-8	Ácido peracético $C_2H_4O_3$	Esta sustancia no debe considerarse la misma que, por ejemplo, su sal sódica (EINECS 220-624-9)
220-624-9	Glicolato sódico $C_2H_4O_3$. Na	Esta sustancia no debe considerarse la misma que su correspondiente ácido (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-Cloroanilina C_6H_6ClN	Esta sustancia no debe considerarse la misma que, por ejemplo, el bromhidrato de 2-cloroanilina (1:1) (C_6H_6ClN . HBr)

- Las sales individuales (p. ej., de sodio o potasio) deben considerarse sustancias distintas.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
208-534-8	Benzoato sódico $C_7H_5O_2$. Na	Esta sustancia no debe considerarse la misma que, por ejemplo, su sal potásica (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Benzoato potásico $C_7H_5O_2$. K	Esta sustancia no debe considerarse la misma que, por ejemplo, su sal sódica (EINECS 208-534-8)

- Las cadenas alquílicas lineales o ramificadas deben considerarse sustancias distintas.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
295-083-5	Ácido fosfórico, dipentil éster, ramificado y lineal	Esta sustancia no de considerarse la misma que las sustancias individuales ácido fosfórico, dipentil éster, ramificado o ácido fosfórico, dipentil éster, lineal

- Los grupos ramificados deben mencionarse como tal en el nombre. Las sustancias que contienen grupos alquílicos, sin más información, se refieren únicamente a las cadenas lineales no ramificadas, a menos que se especifique lo contrario.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
306-791-1	Ácidos grasos, C12-16	Solo las sustancias con grupos alquílicos lineares y no ramificados se consideran la misma sustancia
279-420-3	Alcoholes, C12-14;	
288-454-8	Aminas, C12-18-alquilmetil	

- Las sustancias con grupos alquílicos que utilizan términos adicionales como «iso», «neo», «ramificado», etc., no deben considerarse las mismas que las sustancias que no llevan dicha especificación.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
266-944-2	Glicéridos, C_{12-18} Esta sustancia se identifica por el nombre de sustancia SDA: C12-C18 trialquil glicérido, y el número de referencia SDA: 16-001-00	Esta sustancia no debe considerarse la misma que $C_{12-18-iso}$ Sustancia con cadenas alquílicas saturadas que se ramifica en cualquier posición

- Sin especificación explícita, las cadenas alquílicas en ácidos, alcoholes, etc. deben considerarse exclusivamente representativas de las cadenas saturadas. Las cadenas insaturadas deben especificarse como tales y se consideran sustancias diferentes.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
200-313-4	Ácido esteárico, puro C18H36O2	Esta sustancia no debe considerarse la misma que el ácido oleico, puro, C18H34O2 (EINECS 204-007-1)

- Sustancias con centros quirales

Una sustancia con un estereocentro puede existir en dos formas especulares (enantiómeros). En ausencia de cualquier indicación en sentido contrario, se considera que la sustancia es una mezcla equimolecular (racémica) de ambas formas.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
201-154-3	2-cloropropan-1-ol	Los enantiómeros individuales (R)-2-cloropropan-1-ol y (S)-2-cloropropan-1-ol no se consideran iguales en esa entrada

Los racematos se consideran sustancias multiconstituyentes. Cuando una sustancia se ha enriquecido con un una única forma enantiomérica, se aplican las normas correspondientes a las sustancias monoconstituyentes o multiconstituyentes, es decir, la sustancia será monoconstituyente o multiconstituyente en función de los rangos de concentración de los isómeros.

Las sustancias con múltiples estereocentros pueden existir en 2^n formas (siendo n el número de estereocentros). Estas distintas formas pueden presentar diferentes propiedades fisicoquímicas, toxicológicas y/o ecotoxicológicas entre sí. Deben considerarse sustancias distintas.

- Catalizadores inorgánicos

Los catalizadores inorgánicos se consideran mezclas. Con fines de identificación, los metales componentes o los compuestos metálicos deben considerarse sustancias individuales (sin especificar su uso).

Ejemplos		
	Nombre	**Regla**
	Catalizador óxido de cobalto-óxido de aluminio	Deben identificarse por separado como: - Óxido de cobalto II - Óxido de cobalto III - Óxido de aluminio - Óxido de aluminio cobalto

- Los concentrados de enzimas con el mismo número IUBMB pueden considerarse la misma sustancia, a pesar de utilizar distintos organismos para su producción, siempre que las propiedades peligrosas no difieran de manera significativa y garanticen la misma clasificación.

Sustancias multiconstituyentes

La Directiva 67/548/CEE regulaba la comercialización de las sustancias. La manera en que se producía la sustancia no era relevante. Por lo tanto, una sustancia multiconstituyente comercializada estaba incluida en el EINECS si *todos* todos los constituyentes individuales estaban enumerados en EINECS; p. ej., la mezcla isomérica de difluorobencenos estaba registrada en las entradas del EINECS 1,2-difluorobenceno (206-680-7), 1,3-difluorobenceno

(206-746-5) y 1,4-difluorobenceno (208-742-9) aunque la mezcla de isómeros propiamente dicha no estuviera recogida en el EINECS.

Por el contrario, REACH exige que se registre la sustancia fabricada. La decisión de establecer en qué medida se cubren en la definición de «fabricación» las distintas etapas de la producción de una sustancia deberá tomarse caso por caso (p. ej., las diferentes etapas de purificación o destilación). Si se fabrica una sustancia multiconstituyente, esta debe registrarse (salvo que esté amparada por el registro de los constituyentes individuales; véase el capítulo 4.2.2.4); p. ej., se fabrica la mezcla isomérica de difluorobenceno, luego debe registrarse «difluorobenceno» como mezcla isomérica. No obstante, para las sustancias multiconstituyentes, no es necesario probar la sustancia como tal, si el perfil de peligro de la misma puede describirse suficientemente mediante la información de los constituyentes individuales. Si se producen, y a continuación se mezclan, los isómeros individuales 1,2-difluorobenceno, 1,3-difluorobenceno y 1,4-difluorobenceno, deben registrarse dichos isómeros y se considerará como mezcla la mezcla isomérica.

Una sustancia multiconstituyente de los constituyentes principales A, B y C no debe considerarse la misma que una sustancia multiconstituyente de los constituyentes principales A y B, o como la masa de reacción de A, B, C y D.

- Una sustancia multiconstituyente no se considera igual que una sustancia con un solo subconjunto de los constituyentes individuales.

Ejemplos

Número CE	Nombre	Regla
207-205-6	2,5-difluorotolueno	Estas dos sustancias no se consideran la misma que la mezcla isomérica de difluorotoluenos, porque estas dos sustancias solo constituyen un subconjunto de todos los isómeros posibles.
207-211-9	2,4-difluorotolueno	

- El registro de una sustancia multiconstituyente no cubre los constituyentes individuales.

Ejemplos

Número CE	Nombre	Regla
208-747-6	1,2-dibromoetileno	Esta sustancia describe una mezcla de los isómeros cis y trans. Las sustancias individuales (1Z)-1,2-dibromoeteno y (1E)-1,2-dibromoeteno no están cubiertas por el registro de la mezcla isomérica.

Sustancias UVCB

- Una sustancia UVCB con una distribución limitada de constituyentes no se considera igual a una sustancia UVCB con una composición más amplia y viceversa.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
288-450-6	Aminas, C12-18-alquil, acetatos	Las sustancias «Aminas, C12-14-alquil, acetatos» o «Aminas, C12-20-alquil, acetatos» o «Aminas, dodecil C12-alquil, acetatos» o las sustancias constituidas únicamente por cadenas alquílicas de números pares de carbonos no se consideran iguales a esta sustancia.

- Una sustancia caracterizada por una especie/un género no se considera la misma que una sustancia aislada de otra especie/otro género.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
296-286-1	Glicéridos, aceite de girasol di-	Esta sustancia no se considera la misma que glicéridos, soja di- (EINECS: 271-386-8), ni la misma que glicéridos, sebo di- (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Aceite de linaza, epoxidado	Esta sustancia no se considera la misma que aceite de linaza, oxidado (EINECS: 272-038-8), ni la misma que aceite de linaza, maleatado (EINECS: 268-897-3), ni la misma que aceite de ricino, epoxidado (no recogido en el EINECS)

- Un extracto purificado o un concentrado se consideran sustancias de un extracto.

Ejemplos		
Número CE	**Nombre**	**Regla**
232-299-0	Aceite de colza Extractos y sus derivados modificados físicamente. Está formado principalmente por glicéridos de los ácidos grasos erúcico, linoleico y oleico. (Brassica napus,	La sustancia «ácido (Z)-docos-13-enoico (ácido eurícico)» es un constituyente de la sustancia «aceite de colza». El ácido eurícico no se considera la misma sustancia que el aceite de colza, ya que se aísla de este como una sustancia pura; el ácido eurícico tiene

	Cruciferae)	su propia entrada en el EINECS (204-011-3). Una mezcla aislada de ácidos palmítico, oleico, linoleico, linolénico, eurícico y eicosenoico no se considera lo mismo que el aceite de colza, ya que estos constituyentes no representan el aceite completo.

6. Identidad de la sustancia en una consulta

El capítulo 4 de este documento de orientación incluye directrices relativas al método que debe emplearse para identificar y denominar sustancias. Deberán seguirse estas directrices con el fin de determinar si las sustancias pueden considerarse la misma a efectos de REACH y CLP. A continuación, se desarrolla este concepto en profundidad en relación con las consultas de sustancias.

Según el artículo 4, todo fabricante o importador, a la vez que conserva plena responsabilidad en lo que respecta al cumplimiento de sus obligaciones con arreglo al Reglamento REACH, podrá nombrar a un representante para todos los procedimientos incluidos en el título III y que se refieran a debates mantenidos con otros fabricantes o importadores.

El posible solicitante de registro de cualquier sustancia tiene la obligación de consultar previamente a la Agencia si se ha presentado ya un registro para la misma sustancia (artículo 26 de REACH). Esta consulta debe contener:

- la identidad del posible solicitante de registro, tal como se especifica en la sección 1 del anexo VI del Reglamento REACH, con excepción de los emplazamientos de uso;
- la identidad de la sustancia, como se especifica en la sección 2 del anexo VI del Reglamento REACH;
- los requisitos de información que obligarían al posible solicitante de registro a efectuar nuevos estudios con vertebrados;
- los requisitos de información que obligarían al posible solicitante de registro a efectuar nuevos estudios.

El posible solicitante de registro deberá aportar la identidad y el nombre de la sustancia, de acuerdo con las reglas establecidas en el capítulo 4 del presente documento de orientación.

La Agencia determinará si se ha registrado anteriormente la misma sustancia. Esto también se llevará a cabo aplicando las reglas establecidas en el capítulo 4 del presente documento de orientación. El resultado será comunicado a los posibles solicitantes de registro y se trasladará información a cualquier otro solicitante de registro previo o potencial.

Encontrará más información sobre el proceso de consulta en el *Documento de orientación sobre la puesta en común de datos* y en la página web específica de la ECHA:

https://www.echa.europa.eu/web/guest/regulations/reach/registration/data-sharing/inquiry.

7. Ejemplos

Los ejemplos recogidos en las siguientes páginas tienen una función exclusiva: mostrarle al usuario cómo trabajar con las directrices contenidas en el presente documento de orientación. No presentan ningún precedente en relación con las obligaciones que emanan de REACH.

Se incluyen los siguientes ejemplos:

- El «dietil peroxidicarbonato» es un ejemplo de sustancia monoconstituyente que contiene un disolvente que también actúa como agente estabilizante (véase el capítulo 7.1);
- La «zolimidina» es un ejemplo de sustancia que podría identificarse como monoconstituyente o multiconstituyente (véase el capítulo 7.2);
- Una «mezcla de isómeros» formada durante la reacción de fabricación se incluye como ejemplo de sustancia monoconstituyente (véase el capítulo 7.3). Esta sustancia estaba anteriormente cubierta en el EINECS mediante las entradas de los isómeros individuales;
- La «fragancia AH» es un ejemplo de sustancia producida en distintas calidades, que puede describirse como la masa de reacción de cinco constituyentes con límites de concentración (capítulo 7.4). Este es también un ejemplo de alternativa justificada a los umbrales del 80 % y el 10 %;
- Los «minerales» no metálicos, incluyendo la montmorillonita como ejemplo de sustancia bien definida, que requiere caracterización física adicional, se incluyen en el capítulo 7.5;
- El «aceite esencial de lavanda» es un ejemplo de sustancia UVCB obtenida de plantas (capítulo 7.6);
- El «aceite esencial de crisantemo y los isómeros aislados asociados» es un ejemplo de sustancia UVCB de origen biológico procesado posteriormente (capítulo 7.7);
- El «fenol, isopropilado, fosfato» es un ejemplo de sustancia UVCB variable, que no puede ser completamente definida (capítulo 7.8);
- Los «compuestos de amonio cuaternario» son ejemplos de sustancias con variaciones en la longitud de la cadena carbonada (capítulo 7.9);
- En el capítulo 7.10 se incluyen dos ejemplos de «derivados del petróleo», una mezcla de gasolina y gasóleos;
- En el capítulo 7.11, por último, se exponen dos ejemplos de cómo identificar enzimas: lacasa y amilasa.

7.1. Dietil peroxidicarbonato

La sustancia «dietil peroxidicarbonato» (CE 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) se produce como una solución al 18 % en isododecano (CE 250-816-8, CAS 31807-55-3). El isododecano también actúa como agente estabilizante contra las propiedades explosivas. La concentración más alta posible que garantiza un manejo seguro de la sustancia es una solución al 27 %.

¿Cómo debe identificarse y nombrarse a fines de registro la sustancia descrita anteriormente?

De acuerdo con la definición de sustancia en REACH, deben excluirse los disolventes que pueden separarse sin afectar a la estabilidad de la sustancia o modificar su composición. Dado que, en el caso que nos ocupa, el isododecano actúa también como agente estabilizante y no puede separarse totalmente debido a las propiedades explosivas de la sustancia, deberá considerarse como aditivo y no exclusivamente como disolvente. Ahora bien, se deberá seguir considerando la sustancia como multiconstituyente; en consecuencia, deberá registrarse como la solución con la menor concentración de isododecano que garantice un manejo seguro:

Dietil peroxidicarbonato (límite de concentración superior: 27 %). El isododecano deberá

notificarse bajo «aditivos» y deberá especificarse la función estabilizante.

7.2. ZOLIMIDINA

La solución metanólica fabricada contiene «zolimidina» (CE 214-947-4; CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) e «imidazol» (CE 206-019-2; CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Tras eliminar el disolvente «metanol» y optimizar el proceso de fabricación, la sustancia presenta un rango de pureza del 74-86 % de zolimidina y el 4-12 % de imidazol.

¿Cómo debe identificarse y nombrarse a fines de registro la sustancia descrita anteriormente?

De acuerdo con la definición de sustancia en REACH, deben excluirse los disolventes que pueden separarse sin afectar a la estabilidad de la sustancia o modificar su composición. Dado que, en el caso que nos ocupa, el metanol puede separarse sin dificultad alguna, debe registrarse la sustancia libre de disolventes.

En general, una sustancia se considera monoconstituyente si uno de los constituyentes principales está presente en una cantidad ≥ 80 %. Una sustancia se considerará multiconstituyente si un constituyente principal está presente en una cantidad de ≥ 10 % y < 80 %. Este ejemplo es un caso límite, ya que se han traspasado los valores umbral. Por tanto, la sustancia podría considerarse bien como la sustancia monoconstituyente «zolimidina», o bien como una sustancia multiconstituyente, la masa de reacción de «zolimidina» e «imidazol».

En un caso límite como éste, puede utilizarse la concentración típica de los constituyentes principales de la sustancia para determinar el modo idóneo de describir la sustancia, del siguiente modo:

(1) (1) si la concentración típica de zolimidina es del 77 % y la de imidazol del 11 %, se recomienda considerar la sustancia una masa de reacción de zolimidina e imidazol;

(2) (2) si la concentración típica de zolimidina es del 85 % y la de imidazol del 5 %, se recomienda considerarla como sustancia monoconstituyente «zolimidina».

7.3. Mezcla de isómeros

La sustancia en cuestión es una mezcla (masa de reacción) de dos isómeros formados durante la reacción de fabricación. Los isómeros individuales se notificaron a EINECS. La Directiva 67/548/CEE regulaba la comercialización de las sustancias. Como el modo de producción de la sustancia no era significativo, la mezcla estaba cubierta mediante los registros en EINECS de los dos isómeros individuales. REACH obliga a registrar la sustancia fabricada. La decisión de establecer en qué medida las distintas etapas de la producción de una sustancia están contempladas en la definición de «fabricación» deberá ser tomada caso por caso. Si la mezcla de isómeros está registrada como una sustancia multiconstituyente (conforme a las directrices del capítulo 4.2.2), no será necesario probar la sustancia como tal, si su perfil de peligro puede ser suficientemente descrito mediante la información de los constituyentes individuales.

1. *Nombre y otros identificadores*

Ejemplos	
Nombre IUPAC u otro nombre químico internacional (de la sustancia)	Masa de reacción de 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol y 2,2'-[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol
Otros nombres (de la sustancia)	2,2'-[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol Masa de reacción de etanol, 2,2'-[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- y agua Compuesto isomérico de 2,2'-[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- (9CI)
Número CE (de la sustancia) **Nombre CE** **Descripción CE**	No existe ningún número CE para la sustancia, ya que no se ha declarado la mezcla de isómeros en el EINECS. No obstante, la sustancia estaba cubierta mediante las entradas en el EINECS de los constituyentes (279-502-9, 279-501-3).
Número CAS (de la sustancia) **Nombre CAS**	no disponible no disponible
número CE (constituyente A) **Nombre CE** **Descripción CE**	279-502-9 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol /
número CE (constituyente B) **Nombre CE** **Descripción CE**	279-501-3 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol /
Número CAS (constituyente A) **Nombre CAS**	80584-89-0 Etanol, 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-
Número CAS (constituyente B) **Nombre CAS**	80584-88-9 Etanol, 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-
Otro código de identificación **Referencia**	Número ENCS 5-5917

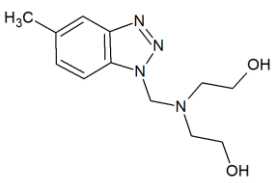
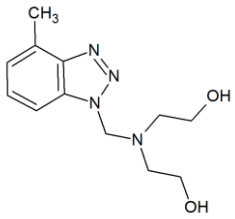
2. *Información sobre la composición - constituyentes principales*

Constituyentes principales						
	Nombre IUPAC	**Número CAS**	**Número CE**	**Fórmula mol. método Hill**	**Conc. típica (% p/p)**	**Rango de conc. (% p/p)**
A	Etanol, 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
B	Etanol, 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

Constituyentes principales		
	Otros nombres	
A	2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol	
B	2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol	

Constituyentes principales		
	Nombre CE	**Descripción CE**
A	2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol	/
B	2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol	/

Constituyentes principales		
	Nombre CAS	**Número CAS**
A	Etanol, 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0
B	Etanol, 2,2'-[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9

	Constituyentes principales Fórmula molecular Método CAS	Fórmula estructural	Código SMILES
A	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12
B	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12

Constituyentes principales	Peso molecular [g·mol-1]	Intervalo de peso molecular
A	250	/
B	250	/

7.4. Fragancia AH

La fragancia AH consiste en gamma (iso-alfa) metil ionona y sus isómeros. Se produce en tres calidades diferentes (A, B y C), que difieren en la proporción de isómeros.

El siguiente cuadro presenta una síntesis general de la composición de las diferentes calidades.

Composición de las distintas calidades de la fragancia AH

Intervalo de concentración [%]	Calidad A	Calidad B	Calidad C	Intervalos generales
gamma (iso-alfa) metil ionona	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (iso-beta) metil ionona	6 - 10	3 - 7	3 – 7	3 - 10
alfa n-metil ionona	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma n-metil ionona	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0,5-4
beta n-metil ionona	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15	0,5-15
pseudo metil iononas	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3	0,5-3

Existen varias opciones para la identificación de la sustancia:

- La calidad A contiene al menos el 80 % del isómero gamma (iso-alfa) metil ionona y, por tanto, puede considerarse una sustancia monoconstituyente basada en el isómero gamma (iso-alfa) metil ionona con los otros isómeros como impurezas.
- Las calidades B y C contienen menos del 80 % del isómero gamma (iso-alfa) metil ionona y ≥ 10 % de otros isómeros. Por tanto, deben considerarse sustancias multiconstituyentes:
  - Calidad B: como una masa de reacción de gamma (iso-alfa) metil ionona (65–75 %) y alfa-n metil ionona (10-20 %), y los otros isómeros como impurezas.
  - Calidad C: como la masa de reacción de gamma (iso-alfa) metil ionona (50-60 %) y alfa-n metil ionona (20-30 %), y los otros isómeros como impurezas.

La composición es variable y, a veces, un isómero se presenta en cantidades ≥ 10 % (en ese momento se denomina por lo general constituyente principal) y a veces < 10 % (en ese momento se denomina por lo general impureza).

Sería posible registrar las distintas calidades por separado. Esto implicaría tres registros. Sin embargo, podría estar justificada la extrapolación de los datos.

Por otra parte, se puede considerar:

- Un registro como sustancia monoconstituyente con dos subcalidades. En este caso, las subcalidades se apartan de la regla del 80 % (véase el capítulo 4.2.1);
- Un registro como masa de reacción definida de 5 isómeros (sustancia multiconstituyente). En este caso, algunos isómeros (constituyentes principales) se apartan del umbral del 10 % que distingue los constituyentes principales de las impurezas (véase el capítulo 4.2.2).

- Un registro como masa de reacción definida en la que la variabilidad de la composición está cubierta por el rango completo para cada isómero.

Puede ser importante considerar que:

- Las tres calidades presentan propiedades fisicoquímicas similares o muy similares.
- Las tres calidades presentan un uso y unos escenarios de exposición similares.
- Todas las calidades tienen la misma clasificación de peligro, y el etiquetado y el contenido de las fichas de datos de seguridad y los informes de seguridad son idénticos.
- Los datos de ensayos disponibles (y ensayos futuros) cubren la variabilidad de las tres calidades.

En este ejemplo se describe la identificación de la sustancia como masa de reacción definida de 5 isómeros (sustancia multiconstituyente). Es necesario justificar las causas de la desviación respecto a la regla del 80 % (véase el capítulo 4.2.1) y el umbral del 10 % (definición de sustancia multiconstituyente, véase el capítulo 4.2.2). Como cada calidad se produce como tal, debe especificarse la composición de cada una de las tres calidades en el expediente de registro. Sin embargo, en condiciones formales, podrían ser necesarios al menos dos registros: (1) Gamma (iso-alfa) metil ionona y (2) Masa de reacción de gamma (iso-alfa) metil ionona y alfa-n-metil ionona.

Identificación de sustancias

La fragancia AH se produce en tres calidades distintas (A, B y C) con idéntica composición cualitativa pero diferente composición cuantitativa. Las tres calidades se describen en un expediente de registro para una sustancia multiconstituyente. Aunque esto implica que la definición no se aplica estrictamente, el registro como sustancia multiconstituyente viene justificado, ya que (1) los datos de las pruebas disponibles cubren la variabilidad de las tres calidades; (2) las tres calidades presentan propiedades fisicoquímicas similares; (3) todas la calidades tienen la misma clasificación de peligro y el mismo etiquetado (por tanto, las fichas de datos de seguridad son idénticas), y (4) las tres calidades presentan un uso y unos escenarios de exposición similares (y, en consecuencia, informes sobre la seguridad química similares).

1. *Nombre y otros identificadores*

Nombre IUPAC u otro nombre químico internacional	Masa de reacción de 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)but-3-en-2-ona; 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)but-3-en-2-ona; [R-(E)-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona; 1-(6,6-metil-2-metilenciclohex-1-il)pent-1-en-3-ona; 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-1-ten-3-ona;
Otros nombres	Metil ionona gamma calidad A Metil ionona gamma calidad B Metil ionona gamma calidad C
Número CE	no disponible

Nombre CE Descripción CE	/ /
Número CAS Nombre CAS	no disponible /

2. Información sobre la composición - constituyentes principales

En teoría, son posibles enantiómeros adicionales. Sin embargo, se analizaron los siguientes isómeros:

Constituyentes principales						
	Nombre IUPAC	**Número CAS**	**Número CE**	**Fórmula mol. método Hill**	**Conc. mín. (% p/p)**	**Conc. máx. (% p/p)**
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)but-3-en-2-ona	127-51-5	204-846-3	C14H22O	50	85
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)but-3-en-2-ona	79-89-0	201-231-1	C14H22O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
D	1-(6,6-metil-2-metilenciclohex-1-il)pent-1-en-3-ona	no disponible	no disponible	C14H22O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

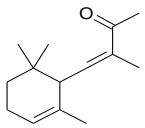
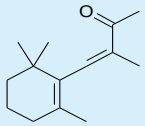
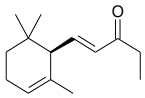
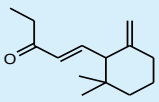
Constituyentes principales
Otros nombres

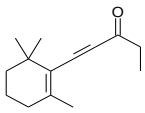
A	alfa-iso-metil ionona; gamma metil ionona
B	beta-iso-metil ionona; delta metil ionona
C	alfa-n-metil ionona
D	gamma-n-metil ionona
E	beta-n-metil ionona

Constituyentes principales		
	Nombre CE	**Descripción CE**
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona	/
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona	/
C	*[R-(E)*]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona	/
D	1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona	/
E	1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona	/

Constituyentes principales		
	Nombre CAS	**Número CAS**
A	3-buten-2-ona, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-	127-51-5
B	3-buten-2-ona, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-	79-89-0
C	1-penten-3-ona, 1-[(1R)-2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)]-, (1E)-	127-42-4
D	no disponible	no disponible
E	1-penten-3-ona, 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-	127-43-5

Constituyentes principales		
	Otro código de identificación	**Referencia**
A	2714 07.036	FEMA Registro de sustancias aromatizantes de la UE
B	07.041	Registro de sustancias aromatizantes de la UE
C	2711 07.009	FEMA Registro de sustancias aromatizantes de la UE
D	no disponible	no disponible
E	2712 07.010	FEMA Registro de sustancias aromatizantes de la UE

Constituyentes principales			
	Fórmula molecular **Método CAS**	**Fórmula estructural**	**Código SMILES**
A	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C
B	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C
C	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC
D	$C_{14}H_{22}O$		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC

E	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

Constituyentes principales		
	Peso molecular ($g \cdot mol^{-1}$)	**Intervalo de peso molecular**
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. *3 Información sobre la composición - impurezas y aditivos*

Impurezas						
	Nombre IUPAC	**Número CAS**	**Número CE**	**Fórmula mol.**	**Conc. típica (% p/p)**	**Rango de conc. (% p/p)**
F						
número de impurezas no especificadas: concentración total de impurezas no especificadas:				11 (pseudo metil iononas) 0,5–3 % p/p		

Aditivos						
	Nombre IUPAC	**Número CAS**	**Número CE**	**Fórmula mol.**	**Conc. típica (% p/p)**	**Rango de conc. (% p/p)**
G	Hidroxitolueno butilado (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0,1	0,05–0,15

4. *Información sobre las distintas calidades*

A continuación se indican los cinco constituyentes principales en tres calidades distintas:

Intervalo de concentración [%]	Calidad A	Calidad B	Calidad C
gamma (iso-alfa) metil ionona	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (iso-beta) metil ionona	6 - 10	3 - 7	3 – 7
alfa n-metil ionona	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-metil ionona	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4
beta n-metil ionona	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo metil iononas	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Minerales

Un mineral se define como una combinación de constituyentes inorgánicos tal como se encuentran en la corteza terrestre, con un conjunto de características relativas a composición química, formas cristalinas (desde altamente cristalinas hasta amorfas) y propiedades fisicoquímicas.

Los minerales están exentos de registro, si se ajustan a la definición de sustancia presente en la naturaleza (*artículo 3, apartado 39,* de REACH) y no han sido modificados químicamente (*artículo 3, apartado 40,* de REACH). Esta definición se aplica a los minerales cuya estructura química se mantiene inalterada, incluso si ha sido objeto de un proceso o tratamiento químico, o una transformación mineralógica física, como por ejemplo, para eliminar impurezas.

Mientras que ciertos minerales pueden describirse únicamente por su composición química (véanse los capítulos 4.2.1 y 4.2.2 para las sustancias monoconstituyentes y multiconstituyentes), para otros la composición no basta para identificar inequívocamente estas sustancias (véase el capítulo 4.2.3).

Contrariamente a otras sustancias monoconstituyentes y multiconstituyentes, la identificación de muchos minerales debe basarse en la composición química *y* la estructura interna (p. e., mediante la difracción de rayos X), porque juntas representan la esencia del mineral y determinan sus propiedades fisicoquímicas.

Como para otras sustancias multiconstituyentes, para los minerales debe utilizarse el número CAS como parte de la identificación (es decir, la combinación de constituyentes inorgánicos). Los números CAS de los constituyentes inorgánicos (según los define la mineralogía sistemática) se utilizan para describir los distintos constituyentes. Si se produjese un constituyente inorgánico individual (una sustancia monoconstituyente) deberá usarse el número CAS de esa sustancia para su identificación. Por ejemplo:

- El mineral caolín (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) se compone básicamente de caolinitas principales y secundarias (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7) que es una arcilla de silicato de aluminio hidratado.

Si se aplicase un proceso de refinado al caolín para producir un solo constituyente; p. ej., caolinitas, entonces los números CAS/EINECS serían, EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- El mineral bentonita (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) que se describe en el EINECS como «Una arcilla coloidal. Consiste principalmente de montmorillonita» contiene una elevada proporción del constituyente inorgánico montmorillonita (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) pero no es el único.

En el caso de que se hubiera fabricado montmorillonita pura (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), el número CAS que ha de utilizarse para identificar la sustancia es el de la montmorillonita.

Debe subrayarse que la bentonita (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) y la montmorillonita (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) no se consideran la misma sustancia.

En definitiva, un mineral se nombra por lo general de acuerdo con sus constituyentes inorgánicos combinados. Estos pueden considerarse sustancias monoconstituyentes o multiconstituyentes (directrices generales en el capítulo 4.2.1 y 4.2.2). Ciertos minerales no pueden describirse únicamente por su composición química, sino que requieren una caracterización física adicional o los parámetros del proceso para identificarlos suficientemente (véase el capítulo 4.2.3). En el cuadro siguiente se exponen algunos ejemplos.

Ejemplos de minerales

Nombre	CAS	EINECS	Descripción complementaria
Cristobalita	14464-46-1	238-455-4	O_2Si (sistema cristalino: cúbico/tetragonal)
Cuarzo	14808-60-7	238-878-4	O_2Si (sistema cristalino: trigonal/hexagonal)
Diatomitas	61790-53-2	-	También conocido como tierra de infusorios, tierra de diatomeas Descripción: Sólido silíceo, blando, compuesto por caparazones fosilizados de algas microscópicas. Contiene principalmente sílice.
Dolomita	16389-88-1	240-440-2	$CH_2O_3.1/2Ca.1/2Mg$
Minerales del grupo de los feldespatos	68476-25-5	270-666-7	Sustancia inorgánica que es el producto de reacción de la calcinación a altas temperaturas, en la que el óxido de aluminio, óxido de bario, óxido de calcio, óxido de magnesio, óxido de silicio y óxido de estroncio en cantidades variables se interdifunden de manera homogénea para formar una matriz cristalina.
Talco	14807-96-6	238-877-9	$Mg_3H_2(SiO_3)_4$
Vermiculita	1318-00-9	-	$(Mg_{0,33}[Mg_{2-3}(Al_{0-1}Fe_{0-1})_{0-1}](Si_{2,33-3,33}\ Al_{0,67-1,67})(OH)_2O_{10}.4H_2O)$

Información analítica requerida para los minerales

Composición elemental	La composición química proporciona una visión general de la composición del mineral independientemente del número de constituyentes y de sus proporciones en el mineral. Por convenio, la composición química se expresa como óxidos.
Datos espectrales (DRX o equivalente)	La DRX u otras técnicas permiten identificar minerales basándose en su estructura cristalográfica. La DRX característica u otros datos adecuados que identifiquen el mineral deben facilitarse junto con una breve descripción del método analítico o la referencia bibliográfica.
Propiedades fisicoquímicas típicas	Los minerales presentan propiedades fisicoquímicas características que permiten completar su identificación; p. ej.: - - Dureza muy baja - - Capacidad de hinchamiento - - Formas de las diatomitas (microscopio óptico) - - Densidad muy alta - - Área superficial (adsorción de nitrógeno)

7.6. Aceite esencial de lavanda grosso

Los aceites esenciales son sustancias que se obtienen de las plantas. Por este motivo, pueden caracterizarse también como sustancias de origen botánico.

En general, las sustancias de origen botánico son completamente naturales, obtenidas mediante el procesado de la planta o alguna de sus partes, aplicando tratamientos como la extracción, destilación, prensado, fraccionamiento, purificación, concentración o fermentación. La composición de estas sustancias varía en función del género, la especie, las condiciones de crecimiento y el período de recolección, así como de las técnicas de proceso aplicadas.

Los aceites esenciales podrían definirse por sus constituyentes principales, como es práctica en el caso de las sustancias multiconstituyentes. Sin embargo, los aceites esenciales pueden consistir en cientos de constituyentes, que pueden variar considerablemente dependiendo de múltiples factores (p. ej., el género, la especie, las condiciones de crecimiento, el período de recolección, los procesos utilizados). Por ello, la descripción de los constituyentes principales con frecuencia no basta para describir estas sustancias UVCB. Los aceites esenciales deberán describirse a partir de la planta de origen y el proceso de tratamiento, como se indica en el capítulo 4.3.1 (para las sustancias UVCB del subtipo 3).

En muchos casos, se dispone de normas industriales para los aceites esenciales (para muchos de ellos incluso de normas ISO). La información relativa a las normas también puede facilitarse. No obstante, la identificación de la sustancia deberá basarse en la sustancia tal como se fabrica.

El ejemplo siguiente describe el «aceite esencial de lavanda en bruto», para el que se dispone de una norma ISO (ISO 8902-1999).

1. *Nombre y otros identificadores*

Fuente

Especie	*Lavandula hybrida grosso* (Lamiaceae)

Proceso

Descripción de los procesos de reacciones (bio)químicas utilizados para fabricar la sustancia:
Destilación mediante vapor de agua de las puntas floreadas de *Lavandula hybrida grosso* (Lamiaceae) y posterior separación del agua del aceite esencial; La separación posterior es un proceso espontáneo, físico, que normalmente se produce en un decantador (también llamado «vaso florentino») que permite aislar fácilmente el aceite extraído. La temperatura en esta etapa del proceso de destilación es de unos 40 ºC.

Nombre

Nombre IUPAC u otro nombre químico internacional	Aceite esencial de Lavandula hybrida grosso (Lamiaceae)
Número CE Nombre CE Descripción CE	297-385-2 Lavanda, Lavandula hybrida grosso, ext. Extractos y sus derivados físicamente modificados, como tinturas, concretos, absolutos, aceites esenciales, oleorresinas, terpenos, fracciones libres de terpenos, destilados, residuos, etc., obtenidos de Lavandula hybrida grosso, Labiatae31.
Número CAS Nombre CAS	93455-97-1 Lavanda, Lavandula hybrida grosso, ext.

[31] «Labiatae» y «Lamiaceae» son sinónimos.

2. *Información sobre la composición - constituyentes conocidos*

Constituyentes conocidos					
	Nombre de la sustancia química **CE** **CAS** **IUPAC** **Otros**	**Número** **CE** **CAS**	**Fórmula mol. método Hill**	**Conc. típica (% p/p)**	**Rango de conc. (% p/p)**
A	**CE** linalil acetato **CAS** 1,6-octadien-3-ol, 3,7-dimetil-, acetato **IUPAC** 3,7-dimetil octa-1,6-dien-3-il acetato	**CE** 204-116-4 **CAS** 115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	33	28 – 38
B	**CE** linalol **CAS** 1,6-octadien-3-ol, 3,7-dimetil- **IUPAC** 3,7-Dimetil octa-1,6-dien-3-ol	**CE** 201-134-4 **CAS** 78-70-6	$C_{10}H_{18}O$	29,5	24 – 35
C	**CE** bornan-2-ona **CAS** biciclo[2.2.1] heptan-2-ona, 1,7,7-trimetil- **IUPAC** 1,7,7-trimetilbiciclo[2.2.1]-2-heptanona **Otros** alcanfor	**CE** 200-945-0 **CAS** 76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	7	6 – 8
D	**CE** cineol **CAS** 2-oxabiciclo [2.2.2]octano, 1,3,3-trimetil **IUPAC** 1,3,3-trimethyl-2-oxabiciclo[2.2.2]octano **Otros** 1,8-cineol	**CE** 207-431-5 **CAS** 470-82-6	$C_{10}H_{18}O$	5,5	4 – 7

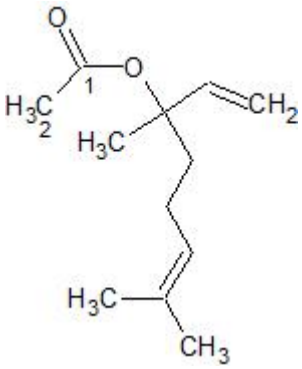
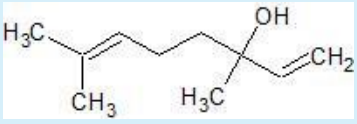
E	**CE** p-ment-1-en-4-ol **CAS** 3-ciclohexen-1-ol, 4-metil-1-(1-metiletil)- **IUPAC** 1-(1-metiletil)-4-metil-3-ciclohexen-1-ol **Otros** terpinen-4-ol	**CE** 209-235-5 **CAS** 562-74-3	$C_{10}H_{18}O$	3,25	1,5–5
F	**CE** 2-isopropenil-5-metilhex-4-enil acetato **CAS**4-hexen-1-ol, 5-metil-2-(1-metiletenil)-, acetato **IUPAC** 2-(1- metiletenil)-5-metilhex-4-en-1-ol **Otros** (±)-lavandulol acetato	**CE** 247-327-7 **CAS** 25905-14-0	$C_{12}H_{20}O_2$	2,25	1,5–3
G	**CE** DL-borneol **CAS** biciclo[2.2.1] heptan-2-ona, 1,7,7-trimetil-, (1R,2S,4R)-rel- **IUPAC** (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetil biciclo[2.2.1]heptan-2-ol **Otros** borneol	**CE** 208-080-0 **CAS** 507-70-0	$C_{10}H_{18}O$	2,25	1,5–3
H	**CE** cariofileno **CAS** biciclo[7.2.0] undec-4-eno, 4,11,11-trimetil-8-metileno, (1R,4E,9S)- **IUPAC**(1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metileno biciclo[7.2.0]undec-4-eno **Otros** trans-beta-cariofileno	**CE** 201-746-1 **CAS** 87-44-5	$C_{15}H_{24}$	1,75	1–2,5
I	**CE** (E)-7,11-dimetil-3-metilendodeca-1,6,10-trieno **CAS** 1,6,10-dodecatrieno, 7,11-dimetil-3-metilen-, (6E)- **IUPAC** (E)-7,11-dimetil-3-metilen-1,6,10-dodecatrieno **Otros** trans-beta-farneseno	**CE** 242-582-0 **CAS** 18794-84-8	$C_{15}H_{24}$	1,1	0,2–2

J	**CE** (R)-p-menta-1,8-dieneo **CAS** ciclohexeno, 1-metil-4-(1-metiletenil)-, (4R)- **IUPAC** (4R)-1-metil-4-(1-metiletenil) ciclohexeno **Otros** limoneno	**CE** 227-813-5 **CAS** 5989-27-5	$C_{10}H_{16}$	1	0,5–1,5
K	**EC** 3,7-dimetilocta-1,3,6-trieno **CAS** 1,3,6-octatrieno, 3,7-dimetil- **IUPAC** 3,7- dimetilocta -1,3,6-trieno **Otros** cis-beta-ocimeno	**CE** 237-641-2 **CAS** 13877-91-3	$C_{10}H_{16}$	1	0,5–1,5

Constituyentes conocidos ≥ 10 %

Constituyentes conocidos		
	Nombre CE	**Descripción CE**
A	linalil acetato $C_{12}H_{20}O_2$	
B	linalol $C_{10}H_{18}O$	

Constituyentes conocidos		
	Nombre CAS	**Números CAS relacionados**
A	linalil acetato $C_{12}H_{20}O_2$	115-95-7
B	linalol $C_{10}H_{18}O$	78-70-6

Constituyentes conocidos			
	Fórmula molecular Método CAS	**Fórmula estructural**	**Código SMILES**
A	$C_{12}H_{20}O_2$		
B	$C_{10}H_{18}O$		

Constituyentes conocidos		
	Peso molecular	**Intervalo de peso molecular**
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Aceite de crisantemo e isómeros aislados asociados

Una empresa produce aceite de crisantemo, que se extrae tras triturar las flores y hojas de *Chrysanthemum cinerariafolim*, Compositae, con un disolvente que contiene una mezcla de agua y etanol (1:10). Tras la extracción, se retira el disolvente, y el extracto «puro» se refina en varias etapas posteriores cuyo resultado final es el aceite de crisantemo.

Además, del extracto se han aislado dos isómeros como masa de reacción de:

Jasmolina I

(Ácido ciclopropanocarboxílico, 2,2-dimetil-3-(2-metil-1-propenil)-, (1S)-2-metil-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciclopenten-1-il éster, (1R,3R)-; número CAS 4466-14-2), y

Jasmolina II

(Ácido ciclopropanocarboxílico, 3-[(1E)-3-metoxi-2-metil-3-oxo-1-propenil]-2,2-dimetil-, (1S)-2-metil-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciclopenten-1-il éster, (1R,3R)-; número CAS 1172-63-0

Además, la empresa decidió sintetizar también la masa de reacción isomérica de jasmolina I y II.

La empresa consulta lo siguiente:

1. ¿Cómo identificar el aceite de crisantemo a fines de registro?
2. ¿Está la masa de reacción de los isómeros aislados jasmolina I y II cubierta mediante el registro del aceite?
3. ¿Puede la mezcla sintetizada de dos isómeros considerarse lo mismo que la mezcla de los isómeros aislados del aceite de crisantemo?

1. ¿Cómo identificar el aceite de crisantemo a fines de registro?

El aceite de crisantemo se considera como una sustancia UVCB que no puede identificarse suficientemente por su composición química (para obtener orientaciones detalladas, véase el capítulo 4.3). Resultan esenciales otros parámetros de identificación, como la fuente y el proceso. El aceite de crisantemo es de naturaleza biológica y debe identificarse mediante la especie y la parte del organismo a partir de la cual se obtiene, y el proceso de refinado (extracción mediante disolvente). Sin embargo, sigue siendo obligatorio indicar la composición química y la identidad de los constituyentes en la medida que se conozcan.

Se considerará necesaria la información siguiente para identificar suficientemente la sustancia:

Nombre de la sustancia	***Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae; aceite obtenido a partir de flores y hojas trituradas, mediante extracción con agua:etanol (1:10)**
Fuente	
Género, especie, subespecie	Chrysanthemum, cinerariafolium, Compositae
Partes de la planta utilizadas para el aceite	Flores y hojas

Proceso	
Método de fabricación	Trituración seguida de extracción
Disolvente utilizado para la extracción	Agua:etanol (1:10)

Información sobre la composición - constituyentes conocidos en % (p/p)

Nombre del constituyente	N.º CE	N.º CAS	Mín. %	Máx. %
Piretrina I: 2-metil-4-oxo-3-(penta-2,4-dienil) ciclopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-crisantemato	204-455-8	121-21-1	30	38
Piretrina II: 2-metil-4-oxo-3-(penta-2,4-dienil) ciclopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)-2,2-dimetilciclopropanocarboxilato	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerina I: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oxociclopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerina II: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oxociclopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolina I: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil) ciclopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato	ninguno	4466-14-2	4	10

Jasmolina II: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil) ciclopent-2-en-1-il [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato	ninguno	1172-63-0	4	10
Además, la sustancia contiene hasta 40 constituyentes por debajo del 1 %.				

Puede considerarse también la identificación de la sustancia como una sustancia multiconstituyente bien definida, con seis constituyentes principales (masa de reacción de piretrina I, piretrina II, cinerina I, cinerina II, jasmolina I y jasmolina II).

La sustancia podría considerarse como una «sustancia presente en la naturaleza» si el proceso de fabricación fuese solo de «triturado» y estaría exenta de la obligación de registro, a menos que cumpliese los criterios para clasificarla como peligrosa conforme a la Directiva 67/548/CEE.

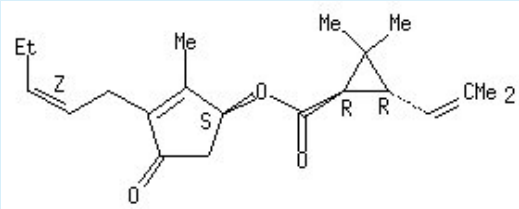
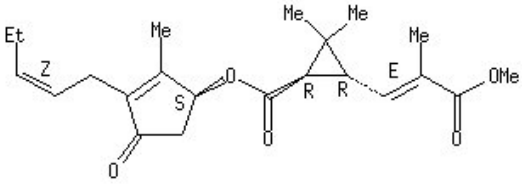
2. ¿Está la masa de reacción de los isómeros aislados jasmolina I y II cubierta mediante el registro del aceite?

La masa de reacción de los isómeros aislados jasmolina I y II no está cubierta por el registro de «Aceite de *Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae», ya que la sustancia UVCB completa no cubre los constituyentes individuales, y viceversa. La masa de reacción de jasmolina I y II se considera una sustancia diferente.

La masa de reacción de jasmolina I y II puede considerarse una sustancia multiconstituyente (véase la orientación detallada en el capítulo 4.2.3) con dos constituyentes principales.

Se considerará necesaria la información siguiente para identificar suficientemente la sustancia:

Nombre IUPAC de la sustancia	Masa de reacción de 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil) ciclopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato y (2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil) ciclopent-2-en-1-il [1R-[1α[S*(Z)],3β E]]-2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato)			
Otros nombres	Masa de reacción de jasmolina I y jasmolina II			
Pureza de la sustancia	95-98 % (p/p)			
Información sobre la composición - constituyentes principales en % (p/p)				
Nombre del constituyente	**N.º CE**	**N.º CAS**	**Mín. %**	**Máx. %**

Jasmolina I: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil) ciclopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato	ninguno	4466-14-2	40	60
Fórmula molecular Fórmula estructural Peso molecular		 $C_{22}H_{30}O_5$ M = 374 g/mol		
Jasmolina II: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil) ciclopent-2-en-1-il [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato Fórmula molecular Fórmula estructural Peso molecular	ninguno	1172-63-0  C21H30O3 M = 330 g/mol	35	65

3. ¿Puede la mezcla sintetizada (masa de reacción) de dos isómeros considerarse similar a la mezcla de los isómeros aislados del aceite de crisantemo?

Para sustancias químicamente bien definidas, que queden suficientemente descritas por sus constituyentes, no es relevante si la sustancia se ha aislado de un extracto o se ha sintetizado mediante un proceso químico. Por tanto, la masa de reacción de jasmolina I y jasmolina II sintetizada puede considerarse similar a la mezcla de isómeros aislada del crisantemo, incuso si proceden de distintos procesos de fabricación, siempre que la pureza de la mezcla y el rango de concentración de los constituyentes principales sean idénticos.

4. Conclusión

Se han identificado dos sustancias:

1. *Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae; aceite obtenido a partir de flores y hojas trituradas, mediante extracción con agua:etanol (1:10)
2. Masa de reacción de los isómeros jasmolina I y jasmolina II, independiente del proceso de fabricación de la sustancia.

Si las sustancias anteriores se utilizaran *solo* en productos fitosanitarios y biocidas, se considerarían registradas a efectos de REACH (artículo 15).

7.8. Fenol, isopropilado, fosfato

La sustancia fenol, isopropilado, fosfato (3:1) es una UVCB en la que no es posible definir perfectamente la variabilidad de la entidad isopropilada.

1. *Nombre y otros identificadores*

Nombre IUPAC u otro nombre químico internacional	Fenol, isopropilado, fosfato (3:1)
Otros nombres	Fenol, isopropilado, fosfato Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) (basado en una proporción molar de 1:1 entre propileno y fenol)
Número CE **Nombre CE** **Descripción CE**	273-066-3 Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) /
Número CAS **Nombre CAS**	68937-41-7 Fenol, isopropilado, fosfato (3:1)

2. *Información sobre la composición - constituyentes principales*

Constituyentes principales					
Nombre IUPAC	**Número CAS**	**Número CE**	**Fórmula mol. método Hill**	**Conc. típica (% p/p)**	**Rango de conc. (% p/p)**
Fenol, isopropilado, fosfato (3:1)	68937-41-7	273-066-3	No especificada		

Constituyentes principales	
Nombre CE	**Descripción CE**
Fenol, isopropilado, fosfato (3:1)	/
Nombre CAS	**Número CAS**
Fenol, isopropilado, fosfato (3:1)	68937-41-7

7.9. Compuestos de amonio cuaternario

Una empresa sintetiza las siguientes sustancias:

Sustancia A:

Compuestos de amonio cuaternario, di-C_{10-18}-alquildimetil, cloruros

Número CE 294-392-2

Número CAS 91721-91-4

Distribución de longitudes de las cadenas carbonadas:

- C_{10} 10 %
- C_{11} 5,5 %
- C_{12} 12 %
- C_{13} 7,5 %
- C_{14} 18 %
- C_{15} 8 %
- C_{16} 24 %
- C_{17} 7 %
- C_{18} 8 %

Sustancia B

Compuestos de amonio cuaternario, dicoco alquildimetil, cloruros

Número CE 263-087-6

Número CAS 61789-77-3

La empresa no conoce la composición exacta de esta sustancia.

Sustancia C

Bromuro de didodecildimetilamonio

Sustancia D

Cloruro de didodecildimetilamonio

Sustancia E

La sustancia E se fabrica como una masa de reacción de bromuro de didodecildimetilamonio y cloruro de didodecildimetilamonio (masa de reacción de las sustancias C y D)

Sustancia F

Compuestos de amonio cuaternario, di-C_{14-18}-alquildimetilamonio, cloruros

Número CE 268-072-8

Número CAS 68002-59-5

Distribución de longitudes de las cadenas carbonadas:

C_{14}	20 %
C_{15}	10 %
C_{16}	40 %
C_{17}	10 %
C_{18}	20 %

Sustancia G

Compuestos de amonio cuaternario, di-C_{4-22}-alquildimetil, cloruros

Distribución de longitudes de las cadenas carbonadas (una marca sencilla indica un doble enlace; una marca doble indica un triple enlace):

C4	0,5 %
C6	3,0 %
C8	6,0 %
C10	10,0 %
C12	12,0 %
C14	24,0 %
C16	20,0 %
C18	16,0 %
C18’	2,0 %
C18’’	0,5 %
C20	4,0 %
C22	2,0 %

Hasta el momento, la empresa utiliza solo la sustancia B (compuestos de amonio cuaternario, dicoco alquildimetil, cloruros, número CE 263-087-6, número CAS 61789-77-3) como denominación, porque se ajusta mejor a todas las sustancias (de la A a la G). La empresa desearía saber si es posible englobar todas las sustancias (de la A a la G) en el registro único de la sustancia B.

1. Observaciones generales

Los hidrocarburos (parafinas, olefinas) derivados de grasas y aceites o sustituidos de forma sintética se identifican por la distribución de sus cadenas carbonadas o por su origen (descriptor alquílico); por un grupo funcional (descriptor de funcionalidad), p. ej., amonio, y por el anión/catión (descriptor de la sal), p. ej., cloruro. La distribución de las longitudes de las cadenas, p. ej., en $C_{8\text{-}18}$, se refiere a:

saturada

linear (no ramificada)

todos los números de carbonos incluidos (C_8, C_9, C_{10}, C_{11},…., C_{18}) teniendo en cuenta que una distribución limitada no cubre otra más amplia, y viceversa

En caso contrario, deberá indicarse de la siguiente forma:

insaturada ($C_{16\ \text{insaturada}}$)

ramificada ($C_{10\ \text{ramificada}}$)

números pares ($C_{12\text{-}18\ \text{números pares}}$)

Las cadenas carbonadas descritas por la fuente deben incluir la distribución que se produce en la fuente; p. ej., aminas alquílicas de sebo:

Las aminas alquílicas de sebo son en un 99 % aminas alquílicas de cadena linear, con la siguiente distribución de longitudes de las cadenas carbonadas (Ullmann, 1985) (una marca sencilla indica un doble enlace; una marca doble indica un triple enlace):

C12	1 %
C14	3 %
C14’	1 %
C15	0,5 %
C16	29 %
C16’	3 %
C17	1 %
C18	23 %
C18’	37 %
C18’’	1,5 %

2. ¿Cómo identificar las sustancias con fines de registro?

Cada sustancia se compara con la sustancia B (que ha sido la utilizada hasta el momento para nombrarla, a fin de decidir si las dos sustancias pueden considerarse la misma.

Comparación de las sustancias A y B

Puede encontrarse la siguiente distribución de longitudes de las cadenas carbonadas para «coco» de la sustancia B (Ullmann, 1985) (una marca sencilla indica un doble enlace; una marca doble indica un triple enlace):

C6	0,5 %
C8	8 %
C10	7 %
C12	50 %
C14	18 %
C16	8 %
C18	1,5 %
C18’	6 %
C18’’	1 %

Por tanto, la distribución de longitudes de las cadenas carbonadas de la sustancia A se aparta de la distribución de longitudes de las cadenas carbonadas para «coco» de la sustancia B. Como la composición cualitativa y cuantitativa de ambas sustancias difiere significativamente, no pueden considerarse la misma.

Comparación de las sustancias B y C

La sustancia B, «compuestos de amonio cuaternario, dicoco alquildimetil, cloruros» es una mezcla de constituyentes con distintas longitudes de las cadenas carbonadas (C_6 a C_{18} números pares, lineal, saturada e insaturada), mientras que la sustancia C consiste en un solo constituyente que tiene una cadena carbonada saturada y de longitud de la definida (C_{12}) con un anión distinto (bromuro). Por tato, la sustancia C no puede considerarse la misma que la sustancia B.

Comparación de las sustancias B y D

La sustancia B, «compuestos de amonio cuaternario, dicoco alquildimetil, cloruros» es una mezcla de constituyentes con distintas longitudes de las cadenas carbonadas (C_6 a C_{18} números pares, lineal, saturada e insaturada), mientras que la sustancia D consiste en un solo constituyente que tiene una cadena carbonada saturada y de longitud de la definida (C_{12}) con el mismo anión (cloruro). Las sustancia B y D tienen nombres distintos y no pueden considerarse la misma, ya que un constituyente único no queda cubierto por una mezcla que contiene cierto número de constituyentes, y viceversa.

Comparación de las sustancias B y E

La sustancia E es una mezcla de las sustancias C y D. Ambas tiene una cadena carbona saturada y de la misma longitud (C_{12}) pero distintos aniones (bromuro y cloruro). La sustancia B, «compuestos de amonio cuaternario, dicoco alquildimetil, cloruros» es una mezcla de constituyentes con distintas longitudes de las cadenas carbonadas (C_6 a C_{18} números pares, lineal, saturada e insaturada) y el anión cloruro. Sin embargo, la sustancia E tiene una longitud de la cadena carbona C_{12}, con el anión bromuro adicional. Por tanto, las sustancias B y E no pueden considerarse la misma, y la sustancia E debe registrarse por separado

Comparación de las sustancias B y F

La sustancia F, «compuestos de amonio cuaternario, di-C_{14-18}-alquildimetilamonio, cloruros» es una mezcla de constituyentes con distintas longitudes de las cadenas carbonadas (C_{14} a C_{18} números pares e impares, lineal y saturada). La sustancia F difiere de la sustancia B en el rango de distribución de sus cadenas carbonadas. La sustancia F tiene una distribución de longitudes de las cadenas carbonadas limitada, además de las cadenas de carbonos C_{15} y C_{17}. Por tanto, las sustancias B y F no pueden considerarse la misma.

Comparación de las sustancias B y G

Las sustancias B y G parecen muy similares, ya que la distribución de sus cadenas carbonadas presenta prácticamente el mismo rango. Sin embargo, la sustancia G incluye además las longitudes de las cadenas de carbonos C_4, C_{20} y C_{22}. La distribución de longitudes de las cadenas carbonadas de la sustancia G abarca un rango más amplio que la de la sustancia B. Por tanto, las sustancias B y G no pueden considerarse la misma.

3. Conclusión

Los hidrocarburos (parafinas, olefinas) solo podrán considerarse la misma sustancia cuando los tres descriptores (alquílico, de funcionalidad y de la sal) sean el mismo.

En el ejemplo que nos ocupa, los descriptores difieren siempre uno de otro. Por lo tanto, las sustancias no quedan cubiertas por el registro exclusivo de la sustancia B.

7.10. Derivados del petróleo

En las orientaciones sobre sustancias UVCB específicas del capítulo 4.3.2, se incluyen dos ejemplos.

7.10.1. Corriente de mezcla de gasolina (C_4-C_{12})

1. *Nombre y otros identificadores*

Nombre

Nombre IUPAC u otro nombre químico internacional	Nafta (petróleo), reformada catalíticamente

Fuente

Identificación o descripción de la fuente de corriente	Petróleo crudo

Proceso

Descripción del proceso de refinería	**Proceso de reformado catalítico**

Intervalo del número de carbonos	C4-C12
Intervalo del punto de ebullición o umbral	30 °C a 220 °C
Otras propiedades físico-químicas; p. ej., viscosidad	Inferior a 7 mm^2/s a 40 °C (viscosidad)
Número CE **Número CAS** **Nombre CE/nombre CAS** **Descripción CE/descripción CAS**	273-271-8 68955-35-1 Nafta (petróleo), reformada catalíticamente Combinación compleja de hidrocarburos producida por la destilación de productos a partir de un proceso de reformado catalítico. Se compone de hidrocarburos con un número de carbonos predominantemente en el rango de C4 a C12 y un punto de ebullición entre 30 °C y 220 °C. Contiene una proporción relativamente grande de hidrocarburos de cadena ramificada y aromáticos. La corriente puede contener un 10 % en volumen o más de benceno.

2. *Información sobre la composición*

Constituyentes conocidos			
Nombre IUPAC	**Número CAS**	**Número CE**	**Rango de conc. (% p/p)**
Benceno	71-43-2	200-753-7	1-10
Tolueno	108-88-3	203-625-9	20-25
Xileno	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Gasóleos (petróleo)

1. *Nombre y otros identificadores*

Nombre IUPAC u otro nombre químico internacional	Gasóleos (petróleo), fracción pesada atmosférica

Fuente

Identificación o descripción de la fuente de corriente	Petróleo crudo

Proceso

Descripción del proceso de refinería	**Destilación atmosférica**
Intervalo del número de carbonos	C7-C35
Intervalo del punto de ebullición o umbral	121 °C a 510 °C
Otras propiedades físico-químicas; p. ej., viscosidad	20 mm^2/s a 40 °C (viscosidad)
Número CE **Número CAS** **Nombre CE/nombre CAS** **Descripción CE/descripción CAS**	272-184-2 68783-08-4 Gasóleos (petróleo), fracción pesada atmosférica Combinación compleja de hidrocarburos obtenida por la destilación de petróleo crudo. Se compone de hidrocarburos con un número de carbonos mayoritariamente en el rango de C7 a C35 y un punto de ebullición entre 121 °C y 510 °C.

2. *Composición química*

No se dispone de datos.

7.11. Enzimas

En las orientaciones sobre sustancias UVCB específicas del capítulo 4.3.2.3, se incluyen dos ejemplos de concentrados de enzimas: subtilisina (identificada mediante la nomenclatura IUBMB + otros constituyentes) y α-amilasa (identificada mediante la nomenclatura IUBMB nomenclatura + los organismos productores)

7.11.1. Subtilisina

Proteína enzimática	Subtilisina
Número IUBMB	3.4.21.62
Nombres asignados por IUBMB (nombre sistemático, nombre de la enzima, sinónimos)	Subtilisina; alcalasa; alcalasa 0.6L; alcalasa 2.5L; ALKenzima; bacillopeptidasa A; bacillopeptidasa B; proteasa alcalina de Bacillus subtilis bioprasa; bioprase AL 15; bioprase APL 30; colistinasa; (ver también los comentarios); subtilisina J; subtilisina S41; subtilisina Sendai; subtilisina GX; subtilisina E; etc.
Comentarios asignados por IUBMB	La subtilisina es una serina endopeptidas, ejemplo tipo de la familia de la peptidasa S8. No contiene residuos de cisteína (aunque estos se encuentran en enzimas homólogos). Las variantes de especie incluyen subtilisina BPN' (también subtilisina B, subtilopeptidasa B, subtilopeptidasa C, Nagarsa, Nagarsa proteasa, subtilisina Novo, proteasa bacteriana Novo) y subtilisina Carlsberg (subtilisina A, subtilopeptidasa A, alcalasa Novo). Antes EC 3.4.4.16 e incluida en EC 3.4.21.14. Enzimas similares las producen diversas cepas de *Bacillus subtilis* y otras especies de *Bacillus* [1,3]
Reacción	Hidrólisis de proteínas con amplia especificidad para los enlaces peptídicos, y una preferencia por un residuo grande no cargado en P1. Hidroliza amidas peptídicas
Tipo de reacción	Hidrolasas; Actúan en los enlaces peptídicos (peptidasas); Serina endopeptidasas.
Número CE	232-752-2
Nombre CE	Subtilisina
Número CAS	9014-01-1

Nombre CAS	Subtilisina
Concentración de la proteína enzimática	26 %
Otros constituyentes	
Otras proteínas, péptidos y aminoácidos	39 %
Hidratos de carbono	11 %
Lípidos	1 %
Sales inorgánicas	23 %
Sustratos y productos	
Parámetros adicionales	Proteínas u oligopéptidos, agua péptidos

7.11.2. α-amilasa

Proteína enzimática	**α-amilasa**
Número IUBMB	3.2.1.1
Nombres asignados por IUBMB (nombre sistemático, nombre de la enzima, sinónimos)	1,4-α-D-glucano glucanohidrolasa; glucogenasa; α -amilasa; alfa-amilasa; endoamilasa; taka-amilasa A
Comentarios asignados por IUBMB	Actúa, de forma aleatoria, sobre el almidón, el glucógeno y los polisacáridos y oligosacáridos relacionados; se liberan grupos reductores en configuración α. El término «α» se refiere a la configuración inicial anomérica del grupo azúcar libre liberado, y no a la configuración del enlace hidrolizado.

Reacción	Endohidrólisis de enlaces 1,4- α-D-glucosídicos en polisacáridos que contienen tres o más unidades de glucosa con uniones 1,4- α.
Tipo de reacción	hidrolasas; glucosidasas; glucosidasas, es decir, enzimas que hidrolizan compuestos O-glucosil y S-glucosil.
Número CE	232-565-6
Nombre CE	Amilasa, α–
Número CAS	9000-90-2
Números CAS relacionados	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (todos eliminados)
Nombre CAS	Amilasa, α–
Concentración de la proteína enzimática	37 %
Otros constituyentes	
Otras proteínas, péptidos y aminoácidos Hidratos de carbono Sales inorgánicas	30 % 19 % 14 %
Sustratos y productos	
Parámetros adicionales	Almidón; glucógeno; agua; polisacáridos; oligosacáridos

Apéndice I - Materiales de apoyo

En este apéndice se incluye una lista de sitios web, bases de datos y manuales que pueden ser útiles para encontrar los nombres IUPAC, CAS y CE, los números CAS y CE, las fórmulas molecular y estructural, incluyendo la notación SMILES, y otros parámetros requeridos para la identificación de la sustancia. No se incluyen instrumentos de orientación u bases de datos comerciales.

General		
Parámetro de identidad de la sustancia	**Fuente**	**Descripción de la fuente**
U.S. Department of Health and Human Services	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Un conjunto de bases de datos y herramientas para ayudar a los usuarios a buscar información química
Perkin Elmer Informatics	https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	Una base de datos gratuita que contiene estructuras químicas, propiedades físicas e hiperenlaces a información relevante
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Software químico; Accord Alphabetical Product Listing

Nombre y otros identificadores		
Parámetro de identidad de la sustancia	**Fuente**	**Descripción de la fuente**
Nombre IUPAC	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	Sitio web oficial de la IUPAC
	https://iupac.qmul.ac.uk/	Nomenclatura química IUPAC y recomendaciones (bajo la autoridad de la IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Importante publicación sobre la nomenclatura IUPAC; actualización esperada en 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Importante publicación sobre la nomenclatura IUPAC; actualización esperada en 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Importante publicación sobre la nomenclatura IUPAC; actualización esperada en julio de 2005.

Nombre IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Importante publicación sobre la nomenclatura IUPAC
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Volumen introductorio a todos los tipos de compuestos
Nombre IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Programa de denominación computerizada comercial que puede resultar muy útil para nombrar estructuras se complejidad moderada. También se distribuye de forma gratuita para moléculas pequeñas (recomendado por IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Nomenclatura IUPAC de química orgánica (recomendado por IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Lista completa de raíces de nombres comunes y semisistemáticos aprobados para compuestos orgánicos

	http://www.chemexper.com/	El objetivo del ChemExper Chemical Directory es crear una base de datos común y de libre acceso sobre productos químicos en Internet. Contiene productos químicos con sus características físicas. Todo el mundo puede enviar información química y recuperar información mediante un navegador.
Nomencla-ture IUBMB	https://iubmb.qmul.ac.uk/	Base de datos de nomenclatura bioquímica IUBMB (bajo la autoridad de la IUBMB)
Otros nombres	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Colour Index Generic Names, Colour Index International, Cuarta edición en línea
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients), sitio web oficial del Personal Care Products Council

	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	Catálogo de sustancias que contienen variaciones en la cadena carbonada (rangos alquílicos utilizando la notación CX-Y) de la EPA estadounidense
Otros identificadores	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	Normas CEN, sitio oficial del CEN
Número CE	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	Catálogo CE: buscador para EINECS, ELINCS, NLP y anexo I de 67/548/EEE
Número CAS	http://www.cas.org	Sitio web oficial de servicio de registro CAS
	http://www.chemistry.org	Sitio web oficial de la American Chemical Society

Fórmula molecular y estructural		
Parámetro de identidad de la sustancia	**Fuente**	**Descripción de la fuente**
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator___checker/index.html	Generador gratuito de representaciones SMILES
Peso molecular y SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, distribución gratuita (también disponible comercialmente)

Algunas propiedades fisicoquímicas	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ es una aplicación para Windows® sobre propiedades físicas/químicas y modelos de estimación de impacto ambiental, desarrollada conjuntamente por la Office of Pollution Prevention Toxics de la EPA y Syracuse Research Corporation (SRC).
Asistencia adicional sobre sustancias específicas	Preguntas y respuestas - ECHA Asistencia sectorial para la identificación de sustancias - ECHA	En el sitio web de la ECHA y en la sección de preguntas y respuestas encontrará asistencia sobre los planteamientos en materia de denominación y caracterización.

Apéndice II - Guía técnica para los parámetros de identificación de sustancias

La información de este apéndice ha sido concebida como un documento destinado a orientar a los usuarios no familiarizados con las reglas técnicas de la nomenclatura sobre el uso de una variedad de números de registro, reglas de notación para la información molecular y estructural, los datos espectrales, etc.

Ofrece una introducción general en la que se resumen los principios más importantes, y guía al usuario a las fuentes originales para completar la información.

Este resumen es una versión simplificada, por lo que no es completa ni exhaustiva, ni es lo suficientemente detallada como para el uso profesional. No debe considerarse en ningún caso equivalente a la fuente oficial.

1. Nombres IUPAC u otros nombres internacionales

Con fines de registro de la sustancia, se debe aportar el nombre IUPAC en inglés, u otro nombre bien definido y aceptado internacionalmente.

El nombre IUPAC se basa en la nomenclatura química estándar internacional establecida por la IUPAC, la Unión internacional de Química Pura y Aplicada (para referencias al respecto, véase el apéndice I). La nomenclatura IUPAC es una forma sistemática de nombrar las sustancias, tanto orgánicas como inorgánicas. En ella se utilizan prefijos, sufijos e infijos para describir el tipo y posición de los grupos funcionales en la sustancia.

penta-1,3-dien-1-ol, en este ejemplo:

el prefijo es ***penta-1,3-***

el infijo es ***-di*** y

el sufijo es ***-ol***

en- es la base del nombre, su raíz.

El conjunto de reglas se desarrolló a lo largo de varios años, y continúa cambiando para abarcar los nuevos compuestos de diversidad molecular y solucionar los posibles conflictos o confusiones que se hayan identificado. Las reglas establecidas por la IUPAC deben utilizarse solo para sustancias bien definidas.

Más adelante se ofrecen algunas directrices generales sobre la estructura de un nombre IUPAC. Pueden encontrarse más detalles en las orientaciones que se incluyen en el capítulo 4 del documento de orientación.

1.1 Sustancias orgánicas

Paso 1 Identificar el número de átomos de carbono en la cadena carbonada continua más larga. Este número será el que determine el prefijo, la raíz del nombre.

Número de átomos de carbono	Raíz
1	met-

2	et-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	oct-
N	….

Paso 2 Determinar la saturación de la cadena, la cual determina el sufijo, la segunda parte de la raíz del nombre.

Saturación	Enlaces	Sufijo
Insaturado	Doble Triple	-eno -ino
Saturado	-	-ano

En caso de que haya varios dobles o triples enlaces, el número de ellos se indicará con los añadidos «mono», «di», «tri», etc., antes del sufijo:

penteno con 2 dobles enlaces: pentadieno

Paso 3 Combinar el prefijo, el sufijo y los añadidos a la raíz del nombre

Nota: Para la raíz del nombre, pueden utilizarse ciertos nombres comunes y semisistemáticos aprobados por la IUPAC, como:

benceno, tolueno, etc.

Paso 4 Utilizar la tabla siguiente:

- Identificar sustituyentes y/o grupos funcionales: grupos con o sin carbonos, unidos a la cadena de átomos de carbono identificada en el paso 1;
- Determinar el orden de procedencia de los sustituyentes y/o grupos funcionales;
- Añadir el sufijo al primer sustituyente/grupo funcional, y cada uno de los siguientes en orden de precedencia;
- Añadir el prefijo para los otros sustituyentes y grupos funcionales en orden alfabético.

Procedencia	Grupo	Fórmula	Sufijo	Prefijo
1	Ácido carboxílico	R-COOH	Ácido -oico	Carboxi
2	Éster	R-CO-O-R	-oato	-
3	Amida	R-$CONH_2$	-amida	Carbamoil
4	Cianuro	R-CN	-nitrilo	Ciano
5	Aldehído	R-CHO	-al	Oxo
6	Cetona	R-CO-R	-ona	Oxo
7	Alcohol	R-OH	-ol	Hidroxil
8	Tiol	R-SH	-tiol	Sulfanil
9	Amina	R-NH_2	-amina	Amino

1.2 Sustancias inorgánicas

1.2.1 Denominación de sustancias inorgánicas simples

El nombre de las sustancias inorgánicas se basa en una serie de reglas (libro rojo IUPAC; véase la referencia en 7.1), las más básicas de las cuales se exponen a continuación:

1 Los aniones con un solo átomo, se denominan con el sufijo -uro

O^{2-} es óxido

2 Los compuestos iónicos simples se nombran a partir del catión seguido del anión. Para los cationes con cargas > 1, dichas cargas se escriben con números romanos entre paréntesis inmediatamente después del nombre del elemento:

Cu^{2+} es cobre(II)

3 Los hidratos se nombran mediante el componente iónico seguido de un prefijo numérico y el sufijo –hidrato. Los prefijos numéricos son mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, deca-:

$CuSO_4 \cdot 5H_2O$ es sulfato de cobre(II) pentahidrato

Nota: con fines de registro de los hidratos y, si procede, la forma anhidra de la sal de un metal particular se considera «la misma sustancia».

4 Los compuestos moleculares inorgánicos se nombran con un prefijo (véase los hidratos) antes de cada elemento. Los elementos más electronegativos se escriben los últimos, con el sufijo –uro:

CO2 es dióxido de carbono, y CCl4 es tetracloruro de carbono.

5 Los ácidos se nombran después del anión que se forma al disolver el ácido en agua. Existen varias posibilidades:

a Si, al disolverlo en agua, el ácido se disocia en un anión con el nombre «x»-uro, el nombre será ácido hidro-«x»-ico:

el ácido hidroclórico forma el anión cloruro.

b Si, al disolverlo en agua, el ácido se disocia en un anión con el nombre «x»-ato, el nombre será ácido «x»-ico:

el ácido clórico se disocia en aniones clorato en agua.

c Si, al disolverlo en agua, el ácido se disocia en un anión con el nombre «x»-ito, el nombre será ácido «x»-oso:

el ácido cloroso se disocia en aniones clorito.

1.2.2 Denominación de las fases mineralógicas

Las fases mineralógicas complejas contienen, por lo general, tres o más elementos combinados. La mayoría de los elementos presentes están combinados con oxígeno y, con el fin de simplificar la identificación, los mineralogistas consideran que los compuestos complejos están, normalmente, formados por óxidos, algunos de los cuales tienen características básicas y otros ácidas. Por ejemplo, en el caso de los silicatos, se ha establecido el convenio de representarlos como la suma de un cierto número de óxidos o como sales del ácido silícico, o como ácidos aluminosilícicos. En consecuencia, el ortosilicato de calcio puede representarse como $2CaO.SiO_2$, una combinación de óxidos distintos o como Ca_2SiO_4, la sal cálcica del ácido ortosilícico H_4SiO_4. Lo mismo se aplica a otros óxidos minerales complejos: se nombran con un prefijo antes de cada óxido (p. ej., Ca_3SiO_5 = silicato tricálcico = $3CaO.SiO_2$). En algunos sectores de la industria, se han introducido aún más simplificaciones con el fin de abreviar la fórmula compuesta. Por ejemplo, en el caso del cemento clínker Portland, $2CaO.SiO_2$ (ortosilicato de calcio o silicato dicálcico) se acorta a C_2S, siendo C = CaO y S = SiO_2. Se aconseja consultar los textos industriales o mineralógicos cuando deban nombrarse o identificarse fases mineralógicas complejas.

1.3 Productos naturales y compuestos relacionados

Para los productos naturales, la IUPAC ha creado varias reglas para su nomenclatura sistemática. En pocas palabras, esto significa que, para las sustancias extraídas de una fuente natural, el nombre se basará, siempre que sea posible, en los nombres de la familia, el género o la especie de los organismos a partir de los cuales se han extraído las sustancias:

Para una hipotética proteína, *Hypothecalia Examplare* los nombres se basan en hypothecalia y/o examplare; por ejemplo, examplare de caballo

Si es posible, el nombre deberá reflejar el conocimiento o la probable distribución del producto natural. Si resulta apropiado, la clase y el orden podrían usarse también, cuando se trata del nombre de una sustancia producida por un cierto número de familias relacionadas. El nombre de los productos naturales de estructura desconocida no debe contener ninguno de los prefijos, sufijos o infijos utilizados en la nomenclatura orgánica:

Producto de condensación de examplare de caballo; valarine añadido al N terminal

Muchas sustancias presentes de manera natural pertenecen a clases estructurales bien definidas, cada una de las cuales puede caracterizarse por un conjunto de supraestructuras estrechamente relacionadas, es decir, cada una puede derivarse de una estructura fundamental. El nombre sistemático para estas sustancias presentes de manera natural y sus derivados puede basarse en el nombre de un grupo estructurar fundamental

adecuado:

Grupos estructurales bien conocidos son los alcaloides, los esteroides, los terpenoides y las vitaminas

Un grupo estructurar fundamental debe reflejar el esqueleto básico común a la mayoría de las sustancias de esa clase. Las sustancias presentes de manera natural o sus derivados se nombran después del nombre de grupo estructural, añadiendo prefijos, sufijos o infijos que denoten:

- modificaciones en la estructura del esqueleto
- sustitución de átomos del esqueleto
- cambios en el estado de hidrogenación implícito en el nombre del grupo estructural
- átomos o grupos que sustituyan átomos de hidrógeno del grupo estructural
- configuraciones aún no implícitas en el nombre del grupo estructural, o que han cambiado desde que lo fueron

El cloruro de tiamina se conoce también como vitamina B_1

Para una información más detallada sobre la denominación sistemática de los productos naturales y las sustancias relacionadas, debe consultarse a la IUPAC (véase el apéndice 1).

1.4 No es posible identificar el nombre IUPAC

Si no es posible identificar un nombre IUPAC para ciertas sustancias, puede utilizarse otra nomenclatura reconocida internacionalmente, como:

- Minerales y menas; nombres mineralógicos
- Derivados del petróleo
- Colour Index Generic Names[3];
- Aditivos para aceites;
- INCI (Nomenclatura Internacional de Ingredientes Cosméticos)[4];
- Nombres de tensioactivos de la SDA (Soap and Detergent Association)[5];
- Etc.

2 Otros nombres

Es útil incluir todos los nombres relevantes y/o identificadores públicos en todos los idiomas de los países de la UE en los que se comercializa o comercializará la sustancia (p. ej., nombres comerciales) con fines de registro en el marco de REACH. Esto incluye, nombres comerciales, sinónimos, abreviaturas, etc.

- http://www.colour-index.com, Colour Index International, cuarta edición en línea
- http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp, INCI, sitio web oficial del Personal Care Products Council
- http://www.cleaninginstitute.org/, sitio web oficial del American Cleaning Institute (ACI).

3 Número CE del EINECS, la ELINCS o la lista de NLP (catálogo CE)

El número CE, es decir, el número EINECS, ELINCS o NLP es el número oficial de la sustancia dentro de la Unión europea. El número CE puede obtenerse de las publicaciones oficiales del EINECS, la ELINCS la lista de NLP.

El número CE consta de 7 dígitos, del tipo $x_1x_2x_3$-$x_4x_5x_6$-x_7. El primer dígito se define por

la lista a la cual pertenece la sustancia.

Lista	Primer dígito del número CE
EINECS	2 o 3
ELINCS	4
NLP	5

4 Nombre CAS y número CAS

El Servicio de resúmenes químicos (CAS), una división de la American Chemical Society (ACS), asigna un nombre y un número CAS a todas las sustancias químicas que entran en la base de datos del registro CAS. Los nombres y números se asignan en orden secuencial a las sustancias exclusivas identificadas por los científicos del CAS. Cada sustancia registrada en el Servicio de resúmenes químicos tiene un nombre acorde con la nomenclatura CAS, que la ACS adoptó después de escuchar las recomendaciones de su comité del nomenclatura (véanse las referencias en apéndice 1).

4.1 Nombre CAS

El nombre CAS es nombre asignado por el Servicio de resúmenes químicos, y es distinto del nombre IUPAC. La nomenclatura CAS se basa en un conjunto limitado de criterios, que no siempre resulta suficiente para definir el nombre de una sustancia. Por ello, en general, se recomienda ponerse en contacto con el Servicio de resúmenes químicos para obtener el número CAS correcto.

En pocas palabras, las reglas de nomenclatura básicas son:

- Se selecciona una parte «principal» de la sustancia que actúa como encabezado.
- Los sustituyentes se nombran después del encabezado, lo cual significa un orden invertido.
- Si existen más sustituyentes, se listan en orden alfabético (incluyendo los prefijos):

o-xileno-3-ol es benceno, 1,2-dimetil, 3-hidroxi,

4.2 Número CAS

Los números CAS pueden obtenerse en el Servicio de resúmenes químicos.

Dichos números consisten en un mínimo de 5 dígitos, divididos en tres partes, separadas por guiones. La segunda parte tiene siempre 2 dígitos, la tercera parte, 1 dígito.

$$\mathbf{N_i \ldots\ldots N_4\ N_3 - N_2\ N_1 - R}$$

Para comprobar el número CAS puede utilizarse una ecuación:

$$\frac{iN_i + \ldots\ldots 4N_4 + 3N_3 + 2N_2 + 1N_1}{10} = \frac{\sum iN_i}{10} = Q + \frac{R}{10}$$

El número puede corregirse de acuerdo con ella.

5 Otros códigos de identificación

Además, pueden aportarse otros códigos reconocidos internacionalmente, como:

- Número de aduana
- Número ONU;
- Índice colorimétrico;
- Número de colorante.

6 Fórmula molecular, fórmula estructural y SMILES

6.1 Fórmula molecular

Una fórmula molecular identifica cada tipo de elemento por su símbolo químico, así como el número de átomos de cada uno de los elementos que se encuentran en una molécula aislada de la sustancia

La fórmula molecular debe facilitarse de acuerdo con el sistema Hill (tradicional) y también de acuerdo con el sistema CAS, ya que ambas fórmulas difieren.

Para aplicar el método Hill deben seguirse estos pasos:

1. Identificar los elementos y escribir sus símbolos químicos;

2. Colocar los elementos en el orden correcto:

   a. Sustancias que contienen carbono:

   Cada elemento se menciona por sus símbolo químico, en la secuencia siguiente:

   (1) carbono

   (2) hidrógeno

   (3) otros símbolos de elementos en orden alfabético:

   pentano: C5H12

   penteno: C5H10

   pentanol: C5H12O

   b. Sustancias que no contienen carbono:

   Cada elemento se cita en orden alfabético:

ácido hidroclórico: ClH

3. Para cada elemento, cuando el número de átomos es >1, indicar el número de átomos como un subíndice del símbolo químico;

4. Añadir información no relacionada con la estructura principal al final de la fórmula molecular, separada por un punto o una coma:

benzoato sódico es C7H6O2, sal sódica

sulfato de cobre dihidrato es CuO4S.2H2O

En caso de que el método Hill no pueda aplicarse para una sustancia específica, la fórmula molecular deberá escribirse de otra manera; por ejemplo, como una fórmula empírica, una simple descripción de los átomos y las relación entre ellos, o bien la fórmula facilitada por el Servicio de resúmenes químicos (véase el capítulo 4 del documento de orientación).

6.2 Fórmula estructural y descripción de la estructura cristalina

La formula estructural es necesaria para visualizar la disposición de las moléculas dentro de la sustancia y las relaciones de unas con otras. En ella se indica la posición de los átomos, iones o grupos, así como la naturaleza de los enlaces que se establecen entre ellos. Esto incluye la isomería, es decir, cis/trans, quiralidad, enantiómeros, etc.

La fórmula estructural puede darse en distintos formatos: como fórmula molecular y/o en forma de un diagrama estructural.

- *Fórmula estructural en forma molecular*

1. Escriba todos los grupos de elementos pertinentes y en orden de aparición:

n-pentano: CH3CH2CH2CH2CH3

2. Cada sustituyente se escribe entre paréntesis, directamente después del átomo al cual va unido:

2-metilbutano: CH3CH(CH2)CH2CH3

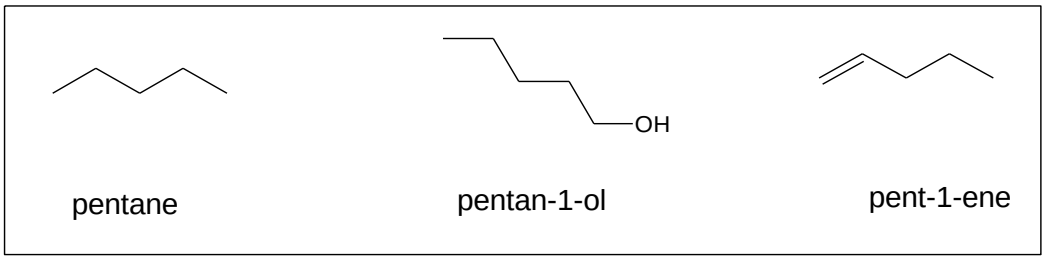
3. En caso de dobles o triples enlaces, deben señalarse entre los grupos de elementos afectados:

pent-1-eno: CH2=CHCH2CH2CH3

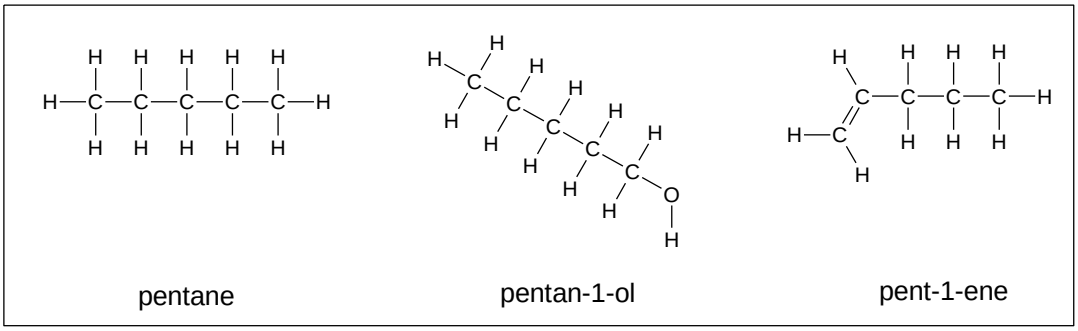
- *Fórmula estructural en forma de diagrama*

En un diagrama estructural, los elementos y los enlaces entre ellos se visualizan en una imagen bidimensional o tridimensional. Existen diversos métodos:

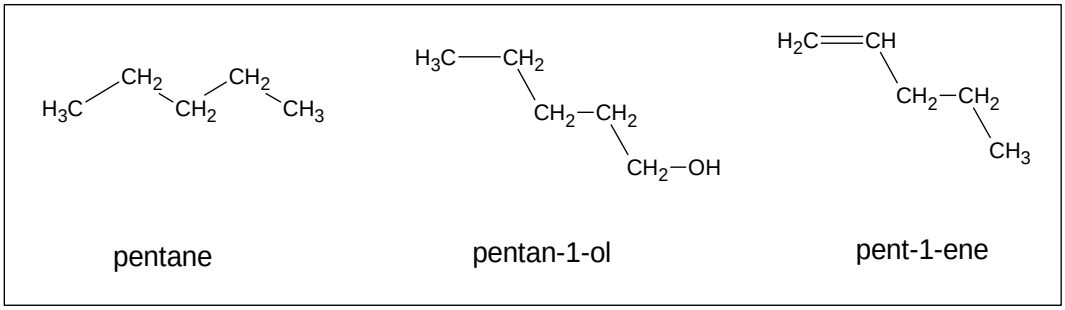
1. Mostrar todos los elementos que no sean carbono y el hidrógeno unido a los elementos distintos del carbono.



2. Mostrar todos los elementos con su símbolo



3. Mostrar los carbonos e hidrógenos como grupos (p. ej., CH3), todos los elementos que no sean carbono y todos los hidrógenos no unidos a carbonos.

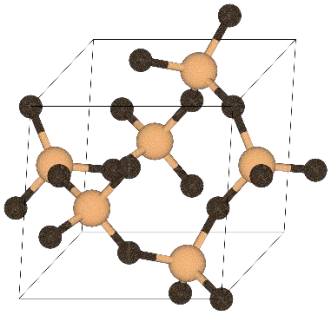


- - *Fórmula estructural en forma molecular*

1. *Indicar la fórmula molecular:*

SiO_2

2. *Indicar la estructura cristalina de la sustancia*



3. *Indicar el nombre mineralógico o cristalográfico basado en el sistema cristalino*[32] *y la clase de cristal:*

*cuarzo α [cuarzo β] / **sistema cristalino**: trigonal - hexagonal, **clase de cristal**: trigonal-trapezoedro 3 2*

6.3 Notación SMILES

SMILES es el acrónimo del Sistema Simplificado de Registro de Líneas Moleculares[33]. Es un sistema de notación química utilizado para representar una estructura molecular mediante una cadena linear de símbolos. Mediante la norma SMILES, el nombre de una molécula es sinónimo de su estructura: muestra indirectamente una imagen en dos dimensiones de la estructura molecular. Como una estructura química bidimensional puede escribirse de varias formas, existen diversas notaciones SMILES correctas para una sola molécula. La base de la notación SMILES es la representación del modelo de valencia de una molécula; por ello, no es adecuado para describir moléculas que no pueden representarse mediante dicho modelo.

---

[32] cúbico/tetragonal/ortorrómbico/romboédrico (o trigonal)/hexagonal/monoclínico/triclínico

[33] Weininger (1988) SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules; J. Chem. Inf. Comput. Sci.; 1988; 28(1); pp. 31-36.

La notación SMILES está formada por átomos, diseñada mediante símbolos elementales, enlaces, paréntesis (para mostrar ramificaciones) y números (para las estructuras cíclicas). La notación SMILES describe la estructura molecular como un gráfico con indicaciones quirales opcionales. Cuando la notación describe la estructura solo en términos de enlaces y átomos, se llama SMILES genérica; si se escriben las especificaciones isotópicas y quirales, se conoce como SMILES isomérica.

En resumen, la notación SMILES sigue varias reglas básicas:

1. Los átomos se representan mediante sus símbolos.
2. Cada átomo, excepto el hidrógeno, se especifica de forma independiente:
   a. Los elementos de la «parte orgánica» B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br y I se escriben sin paréntesis y sin los H unidos, en la medida en que el número de H conforme la menor valencia normal coherente con los enlaces explícitos:

Elemento de la «parte orgánica»	«Menor valencia normal»
B	3
C	4
N	3 y 5
O	2
P	3 y 5
S	2, 4 y 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

   b. Los elementos de la «parte orgánica» se escriben entre paréntesis cuando el número de H no conforme la menor valencia normal:

El catión amonio es NH4+

   c. Los elementos distintos de la «parte orgánica» se escriben entre paréntesis mostrando todos los hidrógenos unidos.
3. Los átomos alifáticos se escriben en mayúsculas; los aromáticos, en minúsculas:

benceno es c1ccccc1; ciclohexano es C1CCCCC1

4. Los átomos de hidrógeno solo se incluye en las siguientes situaciones:
   a. Cuando están cargados, es decir, se trata de protones, [H+];

b. Cuando están unidos a otros átomos de hidrógeno, es decir, se trata de hidrógeno molecular, [H][H];
c. Cuando están unidos de forma que no sea a otros átomos, p. ej., puentes de hidrógeno;
d. Cuando se trata de especificar isótopos del hidrógeno; p. ej., deuterio ([2H]);
e. Cuando están unidos a átomos quirales.

5. Los cuatro enlaces básicos se muestran a continuación:

Tipo de enlace	Notación SMILES
Simple	- (no es necesario mostrarlo)
Doble	=
Triple	#
Aromático	Letras mayúsculas

6. Los sustituyentes se muestran entre paréntesis e inmediatamente después de los átomos a los que están unidos:

2-metilbutano es CC(C)CC

a. Los sustituyentes se muestran siempre directamente después de los átomos principales; no pueden ir seguidos del símbolo de doble o triple enlace:

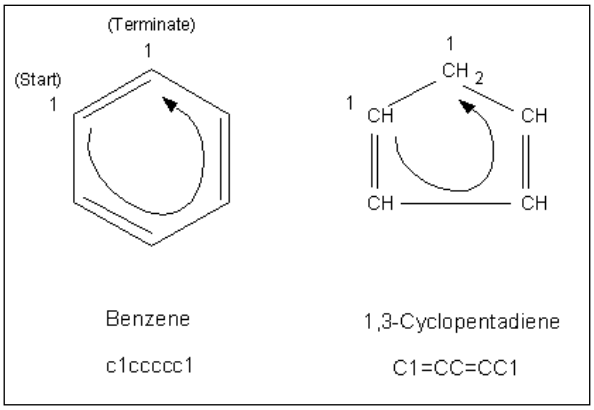
ácido pentanoico es CCCCC(=O)O

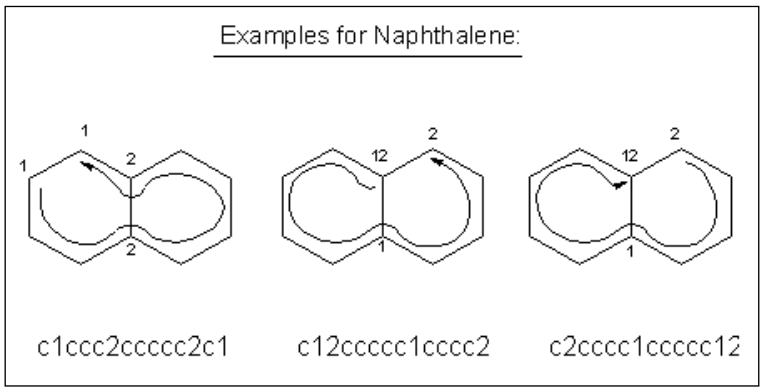
b. Se admiten sustituyentes dentro de los sustituyentes:

2-(1-metiletil)butano es CC(C(C)C)CC

7. Para las estructuras cíclicas, se utilizan los números del 1 al 9 para indicar el inicio y el final del anillo:

a. Se usa el mismo número para indicar el átomo en que comienza y finaliza cada anillo. Este átomo debe estar unido a otro.
b. Los números se indican inmediatamente después de los átomos utilizados para indicar las posiciones inicial y final.
c. Un átomo de inicio o finalización del anillo puede asociarse a dos números consecutivos.





8. Los compuestos no enlazados se designan como estructuras individuales o iones separados por un punto («.»). Los átomos adyacentes separados por un punto («.») no están directamente unidos uno al otro; p. ej., en las uniones de Van der Waals:

aminopropeno hidrocloruro es C=CC(N).HCl

9. Las configuraciones isoméricas se especifican mediante barras inclinadas («\» y «/»). Estos símbolos indican la dirección relativa entre dos enlaces isoméricos. (cis = «/ \», trans = «/ /»). El sistema SMILES utiliza la quiralidad local, lo cual significa que esta debe especificarse por completo:

cis-1,2-dibromoeteno es Br/C=C\Br

trans-1,2-dibromoeteno es Br/C=C/Br

10. Los enantiómeros o la quiralidad se especifican mediante el símbolo «@». Dicho símbolo indica que los átomos vecinos del átomo quiral se numeran en sentido antihorario. Si se utiliza el símbolo «@@», los átomos se numeran en sentido horario. El átomo quiral y el símbolo «@» se muestran entre corchetes:

ácido 2-cloro-2-hidroxipropanoico, con

quiralidad especificada, es C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)

11. Las especificaciones isotópicas se indican anteponiendo a los símbolos atómicos un número igual a la masa atómica integral relevante. La masa atómica solo puede especificarse entre corchetes:

carbono-13 es [13C] y oxígeno-18 es [18O]

Para determinar la notación SMILES existen varias herramientas (generadores SMILES) disponibles (véase el apéndice 1).

7 Información sobre la actividad óptica

La actividad óptica es la capacidad de las sustancias asimétricas para girar el plano de la luz polarizada. Tales sustancias, y sus imágenes especulares, se conocen como enantiómeros y poseen uno o más centros quirales. Aunque difieren en su disposición geométrica, los enantiómeros tienen propiedades físicas y químicas idénticas. Puesto que cada tipo de enantiómero afecta a la luz polarizada de forma distinta, la actividad óptica puede utilizarse para identificar el enantiómero presente en una muestra y, por tanto, también la pureza de la sustancia. El ángulo de rotación es una propiedad intrínseca de la molécula.

Los enantiómeros siempre tienen ángulos de rotación opuestos: giran la luz polarizada los mismos grados, pero en direcciones opuestas. La actividad óptica de una mezcla de enantiómeros es, por ello, una indicación de la relación entre ambos. En una mezcla a partes iguales, la actividad óptica es 0.

La rotación observada depende de la concentración, la longitud del tubo de muestra, la temperatura y la longitud de onda de la fuente de luz.

La actividad óptica, por tanto, es el parámetro por definición para identificar una sustancia asimétrica; y es el único que permite distinguir una sustancia de su imagen especular. En consecuencia, cuando proceda, debe indicarse la actividad óptica de la sustancia.

La norma para la actividad óptica se conoce como rotación específica. La rotación específica se define como la rotación observada de la luz a 5896 angstroms, con una longitud del tubo de 1 dm y a una concentración de la muestra de 1 g/ml. La rotación específica es la rotación observada dividida por la longitud del tubo (dm) multiplicada por la concentración (g/ml).

La actividad óptica puede medirse por varios métodos. Los más comunes son:

- La rotación óptica, en la cual se mide la rotación del plano de polarización de un haz de luz que atraviesa la muestra.
- Dicroísmo circular, en la cual se mide la absorción por una muestra de las componentes derecha e izquierda de la luz polarizada.

Si la sustancia hace rotar la luz a la derecha (en sentido horario) de llama dextrógira y se indica con el signo (+). Si la hace rotar a la derecha (en sentido antihorario) se llama levógira y se indica con el signo (-).

8 Peso molecular o rango de pesos moleculares

El peso molecular es el peso de una molécula de la sustancia expresado en unidades de masa atómica (uma) o como la masa molar (g/mol). Puede calcularse a partir de la fórmula molecular de la sustancia: es la suma de los pesos atómicos de los átomos que la conforman. Existen sustancias, como ciertas proteínas o mezclas de reacción indefinidas, para las cuales no puede determinarse un peso molecular concreto, por lo que debe indicarse el rango de pesos moleculares.

Pueden utilizarse diversos métodos para determinar el peso molecular de las sustancias:

- En el caso de las sustancias gaseosas, puede utilizarse la ley de Avogadro, la cual establece que, a determinadas condiciones de presión y temperatura, un volumen dado de cualquier gas contiene un número específico de moléculas.

$PV = nRT = NkT$

n = número de moles

R = constante universal de los gases = 8,3145 J/mol K

N = número de moléculas

k = constante de Boltzmann = $1{,}38066 \times 10^{-23}$ J/K = $8{,}617385 \times 10^{-5}$ eV/K

k = R/NA

NA = número de Avogadro = $6{,}0221 \times 10^{23}$/mol

- Para las sustancias sólidas o líquidas, el peso molecular puede determinarse midiendo cómo afecta al punto de fusión, el punto de ebullición, la presión de vapor o la presión osmótica de un disolvente.
- La espectrometría de masas es un método de medición de alta precisión.
- En el caso de moléculas de sustancias complejas con pesos moleculares muy altos, como proteínas o virus, dichos pesos moleculares pueden determinarse midiendo, por ejemplo, la tasa de sedimentación en una ultracentrífuga o mediante fotometría de dispersión de la luz.
- Existen diversas herramientas para calcular el peso molecular basándose en un diagrama estructural de la fórmula molecular de la sustancia (véase el apéndice 1).

9 Composición de la sustancia

La composición de cada sustancia, como una combinación de los constituyentes principales, los aditivos y las impurezas, debe notificarse de acuerdo con las reglas y criterios descritos en el capítulo 4 del documento de orientación.

Cada constituyente, aditivo o impureza debe identificarse adecuadamente mediante:

- nombre (IUPAC o bien, cuando no esté disponible, otro nombre internacionalmente aceptado);
- número CAS (si está disponible);
- número CE (si está disponible);
- todos los demás identificadores disponibles.

Cuando sea posible, deberá facilitarse la concentración típica de cada constituyente, grupo de constituyentes, aditivo o impureza en porcentaje de los lotes comerciales (preferentemente en peso o volumen). La suma de los valores debe ser el 100 %. Deberán facilitarse siempre los límites de concentración superior e inferior, como rango en la sustancia comercial.

10 Datos espectroscópicos

Los datos espectroscópicos son necesarios para confirmar la estructura de una sustancia monoconstituyente, o para verificar que una mezcla de reacción no sea un preparado. Para generar los espectros se utilizan distintos métodos (ultravioleta, infrarrojo, resonancia magnética nuclear o espectro de masa). No todos los métodos son aplicables a todas las sustancias. Siempre que sea posible, el documento de orientación ofrecerá

directrices sobre los espectros más adecuados que deben incluirse para las distintas sustancias (ECB, 2004; ECB, 2005).

Para algunos de los métodos bien conocidos, deberá indicarse la siguiente información en el propio espectro o en sus anexos:

Espectroscopia de absorción ultravioleta-visible (UV-VIS)

- La identidad de la sustancia.
- La concentración del disolvente.
- El rango.
- La posición (y valores épsilon) de los picos principales.
- El efecto de los ácidos.
- El efecto de los álcalis.

Espectroscopia infrarroja (IR)

- La identidad de la sustancia.
- El medio.
- El rango.
- Los resultados (indicando los principales picos relevantes para la identificación; p. ej., la interpretación del área de la huella).

Espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN)

- La identidad de la sustancia.
- El núcleo y la frecuencia.
- El disolvente.
- Si procede, la referencia interna y externa.
- Los resultados (indicando las señales que resultan importantes para la identificación de la sustancia y las que corresponden al disolvente y a las impurezas).
- Para los espectros de RMN-1H, debe facilitarse la curva de integración.
- La intensidad de los picos débiles en la RMN debe aumentarse en vertical, y los patrones complejos expandirse.

Espectroscopia de masas (EM)

- La identidad de la sustancia.
- El voltaje de aceleración.
- El método de carga (inserción directa, mediante CG, etc.).
- El modo de ionización (impacto de electrones, ionización química, desorción de campo, etc.
- El ión molecular (M).
- Los fragmentos significativos para identificar la sustancia.
- Los valores M/z o asignaciones de los picos importantes para la identificación de la estructura.
- Los patrones complejos deberán expandirse.

Espectroscopia de masas, difracción de rayos X (DRX)

- La identidad de la sustancia.
- La tensión.
- La intensidad.
- La fuente de rayos X y cualquier referencia bibliográfica que permita la identificación

de la fase o fases cristalinas presentes en la sustancia.

Deben cumplirse al menos los siguientes requisitos en el caso de que se utilice el método DRX para la identificación y cuantificación de las fases cristalinas o amorfas presentes en la sustancia:

- La descripción de los métodos de refino y normas internas que se utilicen.
- La cifra de mérito que refleje el ajuste entre el patrón de difracción modelizado/de referencia.
- El patrón medido, así como la escala del valor figura de mérito (por ejemplo, 0-1 o 0-100).

Pueden utilizarse también otros métodos científicamente reconocidos , si los datos espectroscópicos confirman la identificación de la sustancia, como la estructura interna.

Son necesarios los siguientes requisitos generales para una clara comprensión e interpretación de los espectros:

- Describir la preparación de la muestra.
- Registrar las longitudes de onda significativas y otros datos apropiados.
- Facilitar información complementaria; p. ej., el espectro de los materiales de partida.
- Precisar los disolventes utilizados y/o otros detalles esenciales, como se ha indicado más arriba para algunos métodos.
- Entregar copias claras (en lugar de los originales) con las escalas convenientemente marcadas.
- Proporcionar información sobre las concentraciones de la sustancia utilizadas.
- Asegurarse de que los picos más intensos relacionados con la sustancia se aproximen al tamaño natural.

11 Cromatografía líquida de alta resolución, cromatografía de gases

Si resulta conveniente para el tipo de sustancia, debe facilitarse un cromatograma para confirmar su composición. Por ejemplo, un cromatograma podría confirmar la existencia de impurezas y aditivos, así como los constituyentes de una mezcla de reacción. Los dos métodos más conocidos de separación e identificación de mezclas son la cromatografía de gases (CG) y la cromatografía líquida de alta resolución (HPLC). Los dos métodos se basan en la interacción entre una fase móvil y una fase estacionaria, que lleva a la separación de los constituyentes de una mezcla.

Para la CG/HPLC, deberá indicarse la siguiente información en el propio cromatograma o en sus anexos (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC.

- La identidad de la sustancia.
- Las propiedades de la columna, como el diámetro, la longitud y el empaquetamiento.
- La temperatura, y también el rango, si se utiliza.
- La composición de la fase móvil, y también el rango, si se utiliza.
- Rango de concentración de la sustancia.
- El método de visualización (p. ej., UV-VIS)
- Los resultados (indicar los principales picos relevantes para la identificación de la sustancia).

CG

- La identidad de la sustancia.
- Las propiedades de la columna, como el diámetro, la longitud y el empaquetamiento.
- La temperatura, y también el rango, si se utiliza.

- La temperatura de inyección.
- El gas transportador y la presión del gas transportador.
- El rango de concentración de la sustancia.
- El método de visualización (p. ej., EM)
- La identificación de los picos.
- Los resultados (indicar los principales picos relevantes para la identificación de la sustancia).

12 Descripción de los métodos analíticos

En el *anexo VI* de REACH se especifica que los solicitantes de registro deben describir los métodos analíticos y/o facilitar las referencias bibliográficas de los métodos utilizados para la identificación de la sustancia y, en su caso, para la identificación de impurezas y aditivos. Esta información deberá ser suficiente para permitir que se reproduzcan los métodos.

Apéndice III - Identificación de sustancias y presentación conjunta de datos

La parte básica de este documento de orientación describe los principios generales que los posibles solicitantes de registro deben seguir al identificar las sustancias específicas de su entidad jurídica que desean registrar. Este apéndice ofrece a los posibles solicitantes de registro orientación práctica sobre el modo de aplicar los principios para la identificación de sustancias al definir colectivamente la identidad y el ámbito de la identidad de la sustancia para el registro conjunto siguiendo el principio «una sustancia, un registro» (OSOR, por sus siglas en inglés) del Reglamento REACH. En el Documento de orientación sobre la puesta en común de datos disponible en http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach se ofrece información sobre las obligaciones de presentación conjunta y el proceso de puesta en común de datos en general.
Queda implícito que los principios para la identificación de sustancias recogidos en la parte básica de este documento de orientación son aplicables, en función del tipo de sustancia, a la identidad de la sustancia para el registro conjunto.

De hecho, las primeras partes del artículo 11, apartado 1, y el artículo 19, apartado 1, de REACH imponen un requisito de «presentación conjunta de datos por varios solicitantes de registro». Más concretamente, exigen que «cuando uno o más fabricantes quieran fabricar una sustancia en la Comunidad y/o uno o más importadores quieran importarla» la información relacionada con las propiedades de la sustancia y su clasificación «serán presentadas en primer lugar por el solicitante de registro que actúe con el consentimiento de los demás solicitantes de registro que así lo hayan convenido (en lo sucesivo, "el solicitante de registro principal")».

El Reglamento de Ejecución (UE) 2016/9 de la Comisión relativo a la presentación conjunta y la puesta en común de datos ratifica y consolida la obligación de los varios solicitantes de registro de la misma sustancia identificada de presentar conjuntamente determinada información. En la práctica, la presentación conjunta de información exige a las partes interesadas consensuar los límites y el ámbito de la identidad de la sustancia. Esto es lo que se denomina perfil de identidad de la sustancia o PIS. El PIS debe especificar los límites de la sustancia que los solicitantes de registro han acordado abarcar con los datos presentados conjuntamente. También afecta a los solicitantes de registro que hayan optado por no participar en determinada información presentada conjuntamente.

Por tanto, el acuerdo sobre el ámbito de la identidad de la sustancia abarcada en el registro es un requisito previo para la presentación conjunta. La transparencia en el ámbito de la identidad de esta sustancia y en los datos a los que hace referencia es esencial para la aplicación. En consecuencia, el perfil de identidad de la sustancia o PIS debe notificarse con claridad en el expediente del solicitante de registro principal en nombre del resto de los solicitantes de registro, mientras que todos los solicitantes de registro deben notificar su información sobre la composición de manera individual.

En la

Figura 2 se ofrece un sencillo e ilustrativo ejemplo de la forma de establecer el perfil de identidad de la sustancia en relación con las sustancias químicas fabricadas o importadas en la UE por solicitantes de registro individuales. Ilustra la identificación de la sustancia que se desea registrar, añadiendo las distintas composiciones, generando los datos y, en última instancia, enviándolos en formato IUCLID en un expediente de registro. El ejemplo se corresponde con una sustancia monoconstituyente simple bien definida. Para sustancias más complejas, el proceso de definición del PIS puede requerir iteraciones entre los pasos 3 y 5 de la figura.

Durante las conversaciones entre los posibles solicitantes de registro, la documentación

del PIS puede adoptar el formato de un documento de Word o una hoja de cálculo de Excel en los que se consigne la información y se distribuya entre todos los miembros y posibles miembros. Algunas asociaciones de la industria han creado plantillas para documentar el PIS y muchos solicitantes de registro las utilizan (p. ej. plantilla del Cefic[34]). Otras sencillamente documentan la información pertinente en un documento de Word o en la página web de un consorcio creado para trabajar en el registro de la sustancia de que se trate.

2. Definición de la identidad y el ámbito de una sustancia correspondiente a los datos presentados para registro

En la

Figura 2 (pasos 1 a 4) se ilustran esquemáticamente los pasos que varios posibles solicitantes de registro pueden dar para definir la identidad de la sustancia correspondiente a los datos que presentan conjuntamente en caso de sustancias simples bien definidas.

Cada posible solicitante de registro individual determina sus obligaciones con respecto a las sustancias que fabrica o importa con arreglo a la definición de sustancia del artículo 3, apartado 1, y aplicando los principios de identificación de sustancias recogidos en la parte básica de este documento de orientación (pasos 1 y 2 de la

Figura 2).

Seguidamente, cada posible solicitante de registro puede comprobar si otros posibles solicitantes de registro han alcanzado el mismo «nombre y otros identificadores» (paso 3). A partir de este punto, los posibles solicitantes de registro pueden aplicar conjuntamente los principios de la parte básica de este documento de orientación para definir los límites de la identidad de la sustancia correspondiente a los datos que han presentado conjuntamente; es decir, el perfil de identidad de la sustancia (paso 4).

Este PIS describe de forma genérica el ámbito de la sustancia en términos de la información sobre su composición (incluidos otros parámetros relevantes, como la morfología, p. ej. forma física o figura), su nombre y otros identificadores para los que serán importantes los datos sobre clasificación y peligros presentados conjuntamente. La definición del PIS no debe adoptar un enfoque excesivamente conservador para evitar excluir a los competidores de la presentación conjunta.

Este PIS establece el vínculo inherente entre la identidad de la sustancia y los datos sobre peligros que deben presentarse conjuntamente. Si se establece con suficiente presteza, puede facilitar la fase de generación o recogida de información durante el proceso de cumplimiento de las obligaciones de registro (descritas en el Documento de orientación sobre los requisitos de información y la valoración de la seguridad química; paso 5 de la

Figura 2) al objeto de garantizar que los datos generados o recogidos abarquen toda la amplitud de la identidad de la sustancia.

Tal y como se indica en las secciones 4.2.3 y 4.3 de la parte básica de este documento de orientación, en el caso de sustancias más complejas, los posibles solicitantes de registro utilizan parámetros y/o descriptores adicionales para la información sobre composición en

[34] El PIS fue descrito originalmente en el «Documento de orientación para solicitantes de registro principales» de Cefic, disponible en http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/. En el sitio web REACH centrum http://www.reachcentrum.eu/consortium.html se ofrecen ejemplos de PIS desarrollados por solicitantes de registro utilizando esta plantilla.

los pasos 1-3 y aquellos que se consensúen pueden incluirse en el PIS (paso 4). En algunos casos, el vínculo entre el límite de la identidad de la sustancia y los datos sobre peligros presentados conjuntamente solo se percibe con total claridad una vez recogidos la totalidad o partes de los datos disponibles sobre peligros. Pueden producirse iteraciones entre los pasos 3-5 según sea necesario, en función de la complejidad de la identidad de la sustancia y los datos recogidos en el paso 5, p. ej. cuando determinadas composiciones incluyen constituyentes que requieren clasificación y etiquetado o valoración PBT. El PIS puede incluir más de un perfil de composición para describir adecuadamente los límites de la identidad de la sustancia.

El PIS debe proporcionar información genérica que permita la determinación de los límites de la identidad de la sustancia correspondiente a los datos presentados conjuntamente:

- nombre de la sustancia
- otros identificadores (p. ej. CAS, CE, información molecular y estructural, descripción según proceda) usados por los distintos solicitantes de registro de la identidad de la sustancia de que se trate
- información sobre la composición:
    - identidades de los constituyentes relevantes para la identificación de sustancias y los rangos de concentración respectivos,
    - lista genérica de las identidades de los estabilizantes relevantes para la identificación de sustancias (y los rangos de concentración respectivos, si procede),
    - lista genérica de los parámetros adicionales relevantes para el tipo de sustancia (p. ej. descriptores de fuente y proceso para algunas sustancias UVCB)

Es importante que los parámetros que definen los límites de la identidad de la sustancia recogidos en la presentación conjunta sean consensuados por todos los solicitantes de registro conjunto y queden claramente documentados en el PIS. Para ello, cabe la posibilidad de que haya que modificar o ampliar el PIS a petición de un posible solicitante de registro nuevo, si se acuerda que la totalidad o parte de los datos presentados conjuntamente también son relevantes para la sustancia fabricada o importada por ese solicitante de registro.

El PIS no debe dar lugar a la puesta en común de información comercial confidencial entre los solicitantes de registro ni a la divulgación de dicha información a terceros a partir de la presentación conjunta. Cuando los solicitantes de registro tengan que compartir información comercial confidencial para definir claramente el PIS, pueden considerar la posibilidad de usar un fideicomisario, tal y como se recoge en el Documento de orientación sobre la puesta en común de datos

3. **Orientación práctica sobre la documentación del perfil de identidad de la sustancia**

Los principios generales de la identificación de sustancias en el caso de sustancias bien definidas y sustancias UVCB se describen en la parte básica de este documento de orientación. A continuación se ofrecen algunas orientaciones prácticas sobre el modo de aplicar estos principios de manera colectiva. La parte básica de este documento de orientación prevé la posibilidad de excepciones a los principios generales. Dichas excepciones requieren que los solicitantes de registro demuestren el vínculo inherente entre la identidad de la sustancia y los datos sobre peligros presentados conjuntamente

3.1 Sustancias bien definidas

Al definir los constituyentes principales y sus rangos de concentración e impurezas en relación con una sustancia bien definida, debe seguirse el principio >=80 % (p/p) para la identificación de sustancias monoconstituyentes y el principio < 80 %, >=10 % para la identificación de sustancias multiconstituyentes. Esta condición se aplica a cada uno de los solicitantes de registro individuales y a todos los solicitantes de registro colectivamente en el momento de determinar el PIS. En concreto, deben notificarse los perfiles de impurezas convenidos en el PIS. Si el PIS incluye impurezas específicas que pudieran afectar a la clasificación y el etiquetado o a la valoración PBT, los solicitantes de registro afectados por estas impurezas tendrían que considerarlas en la fase de recogida de datos (paso 5). Estos solicitantes pueden presentar la información relevante del anexo VII-XI de forma conjunta o por separado, con arreglo al artículo 11, apartado 3, del Reglamento REACH (las denominadas opciones de exclusión voluntaria). Los valores de concentración que deben notificarse han de tener en cuenta el rango de concentración en la presentación conjunta.

Para sustancias que requieran parámetros adicionales para consignar la identificación de la sustancia de forma inequívoca, cada solicitante de registro tendría que seguir los principios descritos en el capítulo 4.2.3 de la parte básica de este documento de orientación. Debe considerarse si la variabilidad en estos parámetros requeriría una adaptación de la clasificación o de los datos sobre peligros presentados conjuntamente. A efectos de determinar el PIS en relación con la presentación conjunta, pueden aplicarse consideraciones similares. Por ejemplo, podría ser necesario incluir en el perfil de identidad de la sustancia aquellos parámetros (como forma física y/o parámetros morfológicos como la porosidad, el tamaño de las partículas o la forma de las partículas) que pudieran afectar a propiedades relevantes para la determinación del perfil de riesgo (como la solubilidad, la reactividad, la toxicidad por inhalación, etc.). Si esto sucediera, sería necesario indicar claramente los rangos genéricos de estos parámetros recogidos en el PIS (p. ej. rangos de tamaños de partículas aplicables a todos los solicitantes de registro, lista de sus formas y lista de sustancias químicas de superficie). De este modo se garantiza la integridad de los datos sobre peligros presentados conjuntamente en relación con el PIS.

Asimismo, las diferencias en la fase cristalina de las sustancias químicas inorgánicas pueden dar lugar a consideraciones de perfil de riesgo diferentes específicas de dichas fases (p. ej. cuarzo, cristobalita, sílice amorfo). Dada la posible diferencia en las propiedades de las distintas fases, los posibles solicitantes de registro de estas sustancias deben considerar si presentar un registro conjunto que abarque todas las fases, incluidos los datos sobre peligros específicos de las distintas fases, o presentar registros conjuntos distintos para las distintas fases (es decir, distintas identidades de sustancias). En cualquier caso, sería obligatorio indicar en el PIS las fases incluidas y los datos relevantes del anexo VII-XI deberían cubrir todas las fases recogidas en el registro, garantizando así que los datos abarcan el PIS en toda su extensión.

Cabe destacar que las composiciones pueden tener perfiles de riesgo o impurezas distintos y que estas diferencias no implican necesariamente que no se puedan registrar en el mismo registro.

3.2 Sustancias UVCB

En el caso de las sustancias UVCB, la identificación puede resultar más complicada, y por este motivo es muy útil que la documentación sea transparente al consensuar la identidad de la sustancia para el registro conjunto. Cada posible solicitante de registro tendría que considerar individualmente la recomendación de la parte básica de este documento de orientación y aplicar los mismos principios de forma colectiva. Téngase en cuenta que la adición de los rangos de concentración al PIS podría dar lugar a un perfil con rangos de

concentración muy amplios, posiblemente hasta un punto en que dejaría de considerarse una única sustancia.

Como se indica en la parte básica de este documento de orientación, las bases de la identificación de algunas sustancias UVCB son la fuente y el proceso utilizado en su fabricación, más que las identidades y los rangos de concentración de sus constituyentes. En estos casos, otros descriptores sirven como variables de sustitución para las identidades de los constituyentes y sus rangos de concentración respectivos. Los posibles solicitantes de registro pueden describir el proceso de fabricación en términos de fuente y proceso en la medida necesaria para identificar la sustancia. La descripción podría incluir cualquiera de los parámetros o caracterizadores adicionales que los solicitantes consideren relevantes para la identidad de su sustancia (véase, por ejemplo, el Cuadro 5 de la parte básica de este documento de orientación). A efectos del registro conjunto, los descriptores solo se comparten según sea necesario para acordar el ámbito de la identidad de la sustancia UVCB para su registro. Los posibles solicitantes de registro pueden seguir los principios descritos en la parte básica de este documento de orientación, tanto de forma individual como colectiva. De esta forma, el PIS da lugar a la notificación genérica de los parámetros de fuente y proceso, de manera que abarca toda la extensión de las composiciones de los solicitantes de registro individuales. Esto se ilustra esquemáticamente en la Figura 3.

En el caso de las sustancias identificadas atendiendo a la fuente y el proceso, según se indica en la parte básica de este documento de orientación, cualquier cambio significativo en la fuente o el proceso generará probablemente una sustancia distinta que será preciso registrar de nuevo. Para que sea admisible una excepción de este principio, los solicitantes de registro tendrían que demostrar que cada combinación de proceso y fuente origina composiciones que se pueden abordar en el mismo registro conjunto. En el PIS se pueden tener en cuenta pequeñas variaciones en los materiales fuente y en el proceso o las condiciones del proceso. Los solicitantes de registro deben convenir que cada combinación de proceso y fuente origina composiciones similares hasta el punto que tiene sentido consignarlas como identidad de una única sustancia y asegurarse de que los datos sobre peligros son adecuados para toda el área de variación del PIS. Más concretamente, los solicitantes de registro deben justificar que el conjunto de datos sobre peligros presentado conjuntamente es relevante para todas estas composiciones o está adaptado, si procede, con la información presentada por separado para composiciones específicas en virtud del artículo 11, apartado 3, del Reglamento REACH (exclusión voluntaria).

A fin de demostrar la relevancia del conjunto de datos para cada combinación de proceso y fuente, estas combinaciones deben documentarse claramente en el PIS al objeto de reflejar los criterios de inclusión o exclusión aplicados para los solicitantes de registro actuales y futuros.

Para otros tipos de sustancias UVCB (véase el capítulo 4.3.2 de la parte básica de este documento de orientación), los posibles solicitantes de registro pueden usar una combinación de descriptores de composición y descriptores adicionales, según proceda. Por ejemplo, en algunas sustancias oleoquímicas, la composición es variable debido a la variabilidad de las distribuciones de longitudes de la cadena alquílica de los constituyentes y la distribución de longitudes de la cadena alquílica puede ser un descriptor adicional utilizado en la identificación. Sería obligatorio documentar claramente en el PIS el método adoptado por el FIIS.

3.3 Perfil de identidad de la sustancia

Es responsabilidad de todos los solicitantes de registro que presentan información conjunta consensuar los parámetros necesarios para la identificación de su sustancia y

documentarlos claramente en el PIS correspondiente. Las desviaciones o excepciones de los principios de identidad de la sustancia normales adoptadas colectivamente deben documentarse con total claridad. Puesto que el PIS documenta los criterios de inclusión o exclusión, el FIIS debe garantizar la transparencia de los criterios aplicados y que los datos relevantes del anexo VII-IX recogidos o generados abarcan de hecho todos los perfiles de composición acordados.

Si los posibles solicitantes de registro incluyen de manera individual en su perfil de identidad aditivos estabilizantes en el sentido del artículo 3, apartado 1, es necesario consensuar sus identidades y rangos de concentración y notificarlos claramente en el PIS.

En la fase de recogida de datos, debe considerarse la importancia de los materiales de prueba utilizados para generar o recoger datos con el fin de cumplir los requisitos de información del anexo VII-IX. Es necesario documentar e incluir en el expediente técnico la justificación de las conclusiones sobre su representatividad para las composiciones recogidas en el PIS. Esto sería especialmente relevante en el caso de identidades de sustancias complejas que abarquen perfiles de composición amplios.

Durante la fase de recogida de datos, los posibles solicitantes de registro pueden determinar que su PIS es excesivamente amplio y que no responde al propósito de presentación conjunta de la información sobre peligros que es representativa de la identidad de la sustancia de que se trate. En tal caso, los posibles solicitantes de registro pueden decidir dividir el FIIS para abordar dos o más sustancias por separado[35]. De esta forma, cada sustancia tendría su propio PIS y su propia presentación conjunta de la información sobre peligros que debe ser específicamente representativa de la identidad de dicha sustancia. Las razones por las que cierta información sobre peligros no era representativa de determinados parámetros de identidad de la sustancia han de exponerse claramente en el PIS para cada registro separado. Los posibles solicitantes de registro respectivos también pueden determinar en esta fase que los perfiles de composición deben refinarse más atendiendo a los constituyentes o las impurezas, dando lugar a clasificación y etiquetado, valoración PBT, etc.

En el caso de los posibles solicitantes de registro que pretendan unirse a otros posibles solicitantes de registro que ya hubieran consensuado un PIS pero aún no hubieran presentado el registro, tendrían que considerar si la información sobre la identidad de su sustancia se sitúa dentro de los límites del PIS. Si la respuesta es no, deberían consultar y acordar con los posibles solicitantes de registro si es necesario ampliar el ámbito del perfil para incluir al nuevo miembro o si la sustancia no se encuentra dentro del ámbito.

Si la sustancia que va a registrar el posible solicitante de registro tiene parámetros de identidad específicos que pudieran alterar la representatividad de la información sobre peligros presentada conjuntamente, sería necesario adaptar el PIS y habría que incluir una justificación específica (p. ej. una impureza específica, una relación de composición diferente, una fase distinta, un tamaño de partículas distinto, etc.) En aras de la transparencia, este parámetro se especificará en el PIS.

En casos individuales, los solicitantes de registro posibles y existentes pueden acordar que los datos sobre peligros presentados conjuntamente no son fundamentalmente representativos de la sustancia del posible solicitante de registro debido a desviaciones de

[35] Las consideraciones sobre el papel del EINECS en el establecimiento de la identidad de la sustancia en virtud del Reglamento REACH se encuentran en el documento de CARACAL consensuado en la 4.ª reunión de las autoridades competentes de los Reglamentos REACH y CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 «Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)».

los parámetros de la identidad de la sustancia que se encuentran fuera de los límites del PIS acordados. En tal caso, el posible solicitante de registro presentará un registro separado, bien junto con el resto de los solicitantes de registro con una identidad de la sustancia que comprenda este parámetro, o bien individualmente, si no hubiera otros solicitantes de registro para la misma identidad de la sustancia.

4. Notificación del perfil de identidad de la sustancia en el expediente de registro

Una vez que los posibles solicitantes de registro han recogido o generado todos los datos exigidos en el anexo VII-XI en relación con su sustancia (es decir, paso 5 de la

Figura 2), el paquete de datos está listo para su notificación en formato IUCLID en expedientes para presentar a la Agencia (es decir, paso 6 de la

Figura 2). Para notificar el PIS en formato IUCLID, el nombre y otros identificadores, la información sobre la composición y otros parámetros relevantes se notifican en las secciones 1.1 y 1.2 de IUCLID.

Perfil de identidad de la sustancia	Notificado en IUCLID
Nombre y otros identificadores	Sección 1.1 de todos los expedientes
información sobre la composición y otros parámetros relevantes	Sección 1.2 del expediente del solicitante de registro principal

El nombre del PIS y otros identificadores se indican en la sección 1.1 de todos los expedientes. El solicitante de registro principal notifica la información sobre la composición y otros parámetros del PIS relevantes en la sección 1.2 de su expediente en forma de «composición límite de la sustancia»[36]. El solicitante de registro principal también debe presentar todos los datos relevantes del anexo VII-XI en las secciones 4-14 (en ausencia de exclusiones voluntarias justificadas en relación con uno o más requisitos de información) en nombre de todos los solicitantes de registro.

Cada solicitante de registro (incluido el solicitante de registro principal) consigna en la sección 1.2 de su propio expediente la información sobre la composición de la sustancia que su entidad jurídica fabrica o importa. Esto significa que el solicitante de registro principal notifica tanto la información sobre la composición del PIS como la información sobre la composición de su propia entidad jurídica en la sección 1.2 de su expediente, mientras que el resto de los solicitantes de registro notifican su propia información sobre la composición específica. Cada registro normalizado también debe incluir la información analítica relevante en la sección 1.4 de IUCLID.

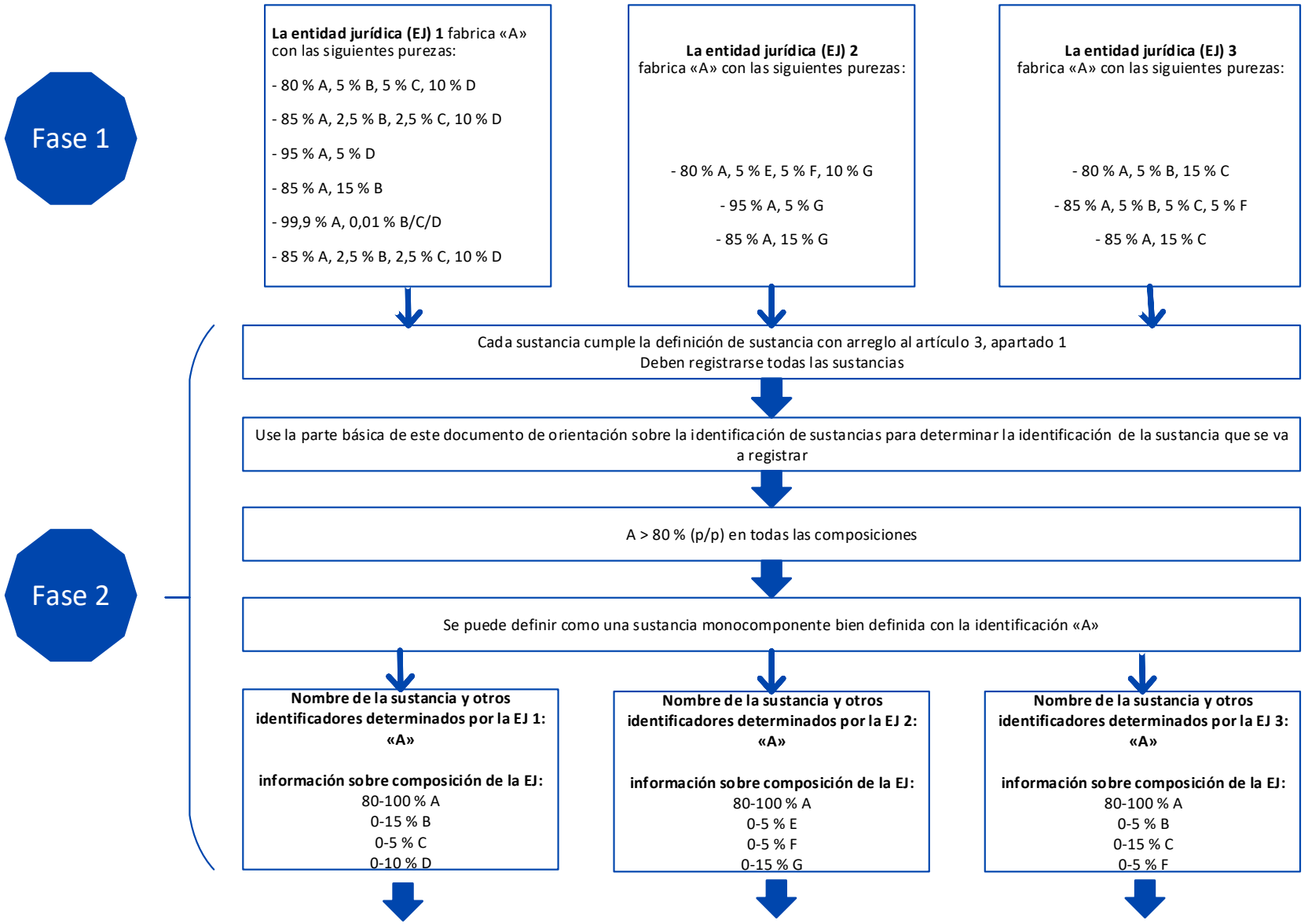
Cada solicitante de registro debe demostrar que la información sobre la composición de las sustancias que fabrica o importa específicamente está recogida en el PIS tal y como se indica en la «composición límite» y que esta, a su vez, está recogida en los datos del anexo VII-XI presentados en el expediente del solicitante de registro principal (en ausencia de exclusiones voluntarias justificadas).

Las instrucciones técnicas sobre cómo notificar información sobre la composición en

[36] Las instrucciones para introducir la «composición límite de la sustancia» se encuentran en el manual «How to prepare registration and PPORD dossiers" [Cómo preparar el registro y los expedientes de IDOPP], disponible en http://echa.europa.eu/manuals..

formato IUCLID están disponibles en los manuales de IUCLID (http://echa.europa.eu/manuals).

Figura 2 (página siguiente): Esquema de los pasos dados por los posibles solicitantes de registro desde la determinación de sus obligaciones de registro (1) hasta la definición del PIS para la identidad de la sustancia (4) y, en última instancia, la presentación de sus registros para el cumplimiento formal de las obligaciones de registrar sus sustancias (8).



Nota para la figura: La identificación de la sustancia es un monocomponente simple, para simplificar la visualización. En el caso de sustancias más complejas, los pasos son los mismos, pero para definir la identificación de la sustancia se pueden usar elementos o variables de sustitución adicionales para la información sobre la composición. El proceso de definición del SIP también puede implicar interacciones entre los pasos 3 y 5.

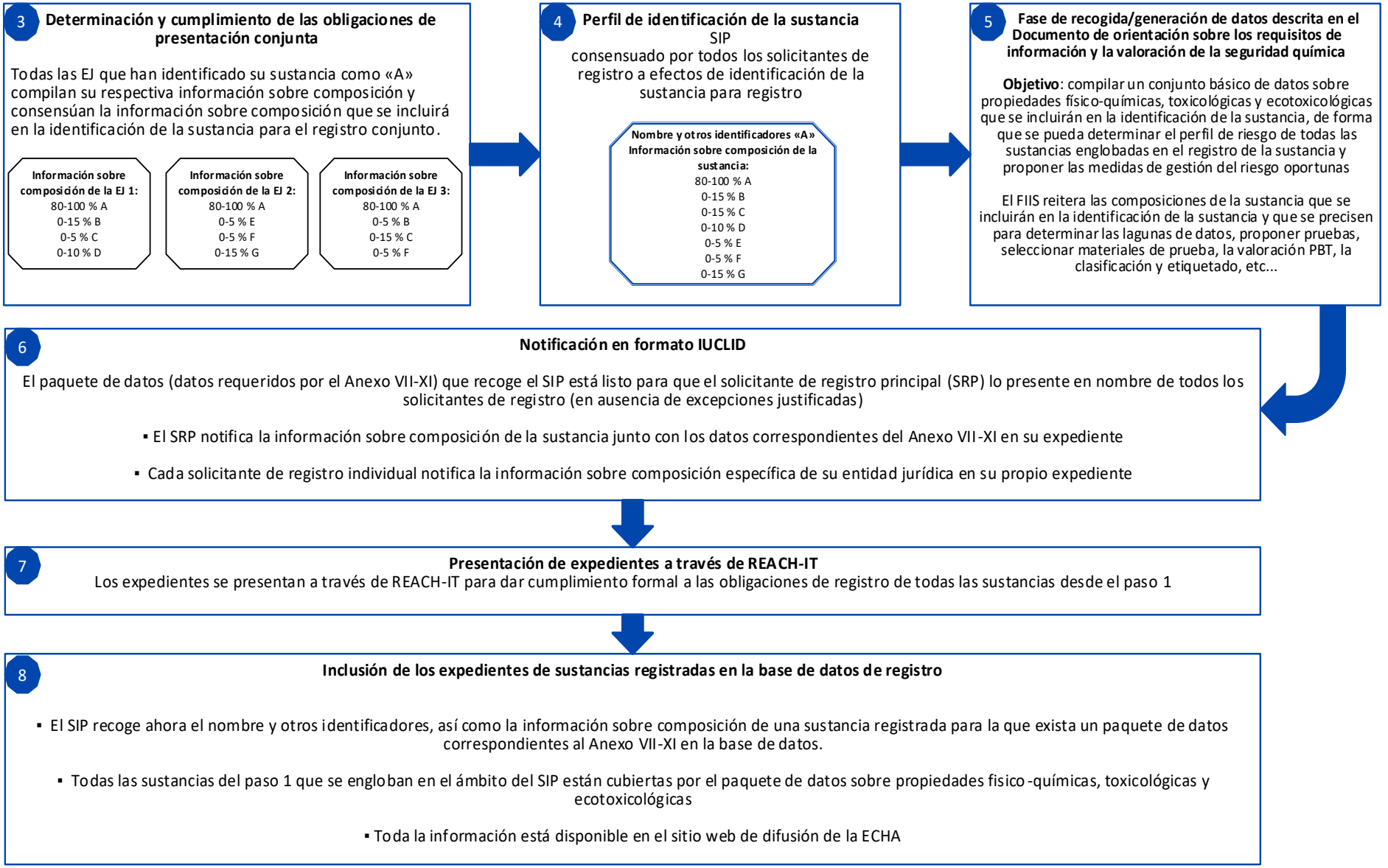
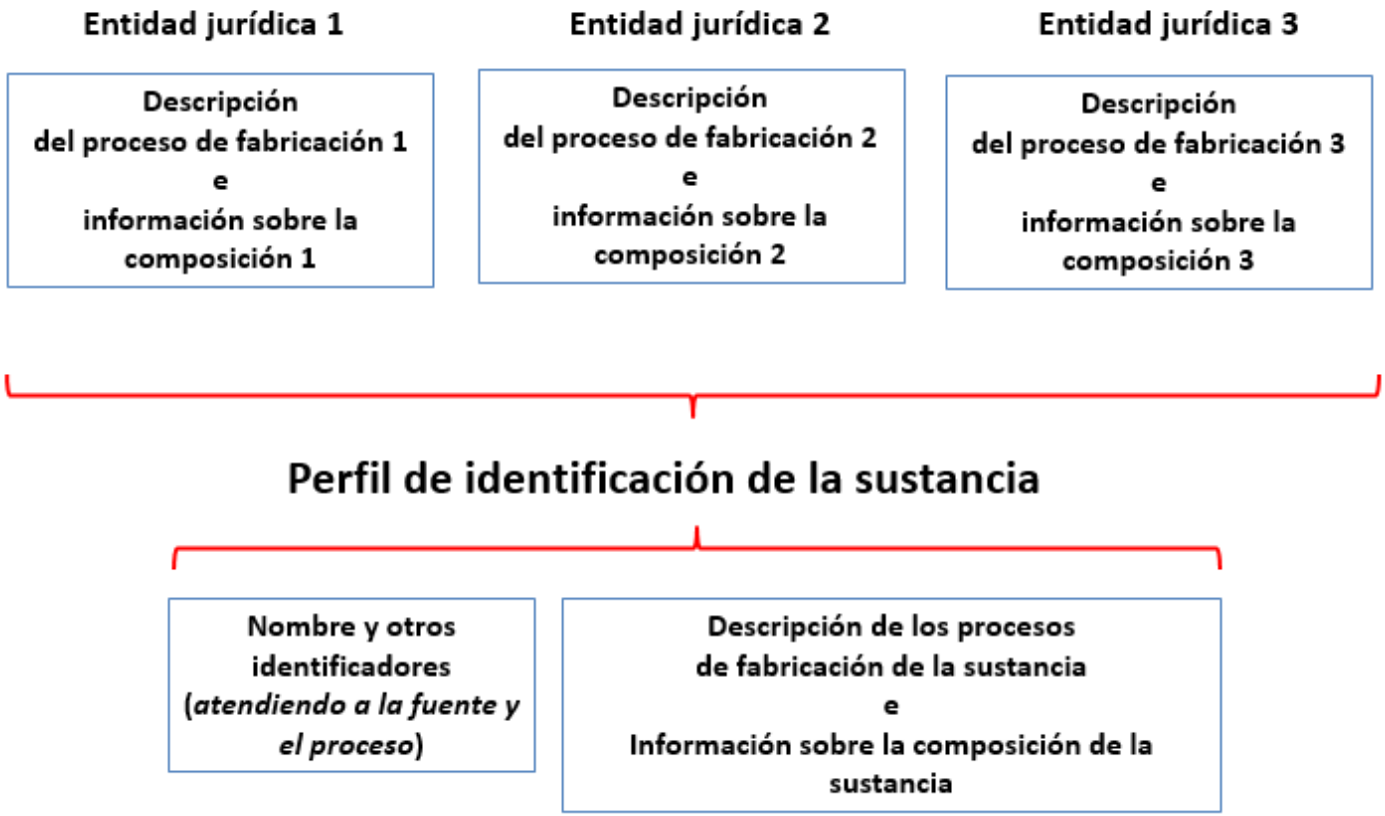

3
Determinación y cumplimiento de las obligaciones de presentación conjunta
Todas las EJ que han identificado su sustancia como «A» compilan su respectiva información sobre composición y consensúan la información sobre composición que se incluirá en la identificación de la sustancia para el registro conjunto.
Información sobre composición de la EJ 1:
80-100 % A
0-15 % B
0-5 % C
0-10 % D
Información sobre composición de la EJ 2:
80-100 % A
0-5 % E
0-5 % F
0-15 % G
Información sobre composición de la EJ 3:
80-100 % A
0-5 % B
0-15 % C
0-5 % F
4
Perfil de identificación de la sustancia
SIP
consensuado por todos los solicitantes de registro a efectos de identificación de la sustancia para registro
Nombre y otros identificadores «A»
Información sobre composición de la sustancia:
80-100 % A
0-15 % B
0-15 % C
0-10 % D
0-5 % E
0-5 % F
0-15 % G
5
Fase de recogida/generación de datos descrita en el Documento de orientación sobre los requisitos de información y la valoración de la seguridad química
Objetivo: compilar un conjunto básico de datos sobre propiedades físico-químicas, toxicológicas y ecotoxicológicas que se incluirán en la identificación de la sustancia, de forma que se pueda determinar el perfil de riesgo de todas las sustancias englobadas en el registro de la sustancia y proponer las medidas de gestión del riesgo oportunas
El FIIS reitera las composiciones de la sustancia que se incluirán en la identificación de la sustancia y que se precisen para determinar las lagunas de datos, proponer pruebas, seleccionar materiales de prueba, la valoración PBT, la clasificación y etiquetado, etc...
6
Notificación en formato IUCLID
El paquete de datos (datos requeridos por el Anexo VII-XI) que recoge el SIP está listo para que el solicitante de registro principal (SRP) lo presente en nombre de todos los solicitantes de registro (en ausencia de excepciones justificadas)
▪ El SRP notifica la información sobre composición de la sustancia junto con los datos correspondientes del Anexo VII-XI en su expediente
▪ Cada solicitante de registro individual notifica la información sobre composición específica de su entidad jurídica en su propio expediente
7
Presentación de expedientes a través de REACH-IT
Los expedientes se presentan a través de REACH-IT para dar cumplimiento formal a las obligaciones de registro de todas las sustancias desde el paso 1
8
Inclusión de los expedientes de sustancias registradas en la base de datos de registro
▪ El SIP recoge ahora el nombre y otros identificadores, así como la información sobre composición de una sustancia registrada para la que exista un paquete de datos correspondientes al Anexo VII-XI en la base de datos.
▪ Todas las sustancias del paso 1 que se engloban en el ámbito del SIP están cubiertas por el paquete de datos sobre propiedades fisico-químicas, toxicológicas y ecotoxicológicas
▪ Toda la información está disponible en el sitio web de difusión de la ECHA

Figura 3: Esquema ilustrativo de la definición de un PIS (paso 4 de la Figura 2) para una sustancia de tipo UVCB identificada atendiendo a descriptores de fuente y proceso procedentes de las descripciones de fuente y proceso de la entidad jurídica individual.



AGENCIA EUROPEA DE SUSTANCIAS Y MEZCLAS QUÍMICAS
P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI
HTTP://ECHA.EUROPA.EU