

Guia de orientação para a identificação e designação de substâncias no âmbito dos regulamentos REACH e CRE

Dezembro de 2023
Versão 3.0



ADVERTÊNCIA JURÍDICA

O presente guia destina-se a ajudar os utilizadores no cumprimento das suas obrigações ao abrigo dos regulamentos REACH e CRE. Todavia, recorda-se aos utilizadores que os textos dos regulamentos REACH e CRE são a única referência jurídica autêntica e que as informações constantes do presente documento não constituem aconselhamento jurídico. A utilização das informações permanece da responsabilidade exclusiva do utilizador. A Agência Europeia dos Produtos Químicos não assume qualquer responsabilidade pelo uso que possa ser feito das informações contidas no presente documento.

Guia de orientação para a identificação e designação de substâncias no âmbito dos regulamentos REACH e CRE

Referência: ECHA-23-H-07-EN
Número Número ED-09-23-444-EN-N
ISBN: 978-92-9468-310-6
DOI: 10.2823/87416
Data de publicação: Dezembro de 2023
Língua: PT

© Agência Europeia dos Produtos Químicos, 2023
Página de rosto © Agência Europeia dos Produtos Químicos

Todas as perguntas ou observações relacionadas com o presente documento devem ser enviadas (indicando a referência e a data de publicação) através do formulário de pedido de informações. O formulário de pedido de informações pode ser acedido através da página Contactos da ECHA, em:

<https://echa.europa.eu/contact>

Agência Europeia dos Produtos Químicos

Endereço postal: P.O. Box 400, FI-00121 Helsínquia, Finlândia
Morada: Telakkakatu 6, 00150, Helsínquia, Finlândia

PREFÁCIO

O presente guia descreve a forma de identificar e designar uma substância no âmbito dos regulamentos REACH e CRE. Faz parte de uma série de documentos de orientação que têm por objetivo apoiar todas as partes interessadas na preparação para o cumprimento das obrigações decorrentes dos regulamentos REACH e CRE. Estes guias fornecem orientações pormenorizadas sobre um conjunto de processos essenciais no âmbito dos regulamentos REACH e CRE, bem como sobre métodos técnicos e/ou científicos específicos que devem ser utilizados pela indústria ou pelas autoridades, no quadro dos mesmos regulamentos.

Os guias de orientação foram elaborados e debatidos no âmbito dos projetos de implementação do REACH (PIR), geridos pelos serviços da Comissão Europeia, com a participação de todas as partes interessadas: Estados-Membros, indústria e organizações não-governamentais. Estes guias de orientação podem ser obtidos através do sítio Web da Agência Europeia dos Produtos Químicos (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Assim que forem finalizados ou atualizados, serão publicados neste sítio Web outros guias de orientação.

HISTÓRICO DO DOCUMENTO

| Versão | Observação | Data |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|
| Versão 1 | Primeira edição | Junho de 2007 |
| Versão 1.1 | <p>Retificação:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aditamento de uma referência ao Regulamento CRE (Regulamento (CE) n.º 1272/2008, de 16 de dezembro de 2008) no título e nos títulos dos capítulos. - Aditamento de texto adicional para clarificar o âmbito do guia de orientação. Eliminação de texto redundante em todo o documento. - Inclusão de referências ao Regulamento CRE no texto, consoante adequado. - Alteração do termo «TGD» (documento técnico de orientação) para «guia de orientação» em todo o documento. - Alteração do termo «preparação» para «mistura» em todo o documento. - Alteração do termo «ponto» para «secção» em todo o documento. - Alteração do termo «pré-registo» para «pré-registo (tardio)» em todo o documento. - Inserção das abreviaturas EAA e CRE e eliminação de RIP e TGD. - Alteração das descrições de Liga, Inventário CE e IUCLID. Introdução das definições de Número CE, Número de Lista, Mistura e Substância Notificada. Eliminação da definição de «preparação». - Revisão da secção 3.2 para clarificar o conteúdo. - Revisão da secção 3.3 para clarificar o conteúdo no que respeita às obrigações no âmbito do Regulamento CRE. - Alteração na secção 4.2.2.1 da forma de apresentar os constituintes, substituindo a percentagem de concentração pela ordem alfabética, de modo a que a composição relativa não possa ser deduzida a partir da ordem da lista. - Alteração na secção 4.2.3.1 do termo «rede cristalina» para «cristal». | Novembro de 2011 (apenas em inglês) |

| | | |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| | <ul style="list-style-type: none"> - Revisão da secção 4.3.1.2.3 para clarificar o conteúdo. - Inclusão na secção 5 de uma referência ao Manual de Apresentação de Dados, Parte 18, <i>Como comunicar a identidade da substância na IUCLID 5 para registo nos termos do REACH</i>. - Revisão da secção 5 para clarificar o conteúdo. - Alteração na secção 6 da descrição de «pré-registo» para «pré-registo (tardio)» - Atualização das hiperligações quebradas no Apêndice 1. - Eliminação da secção 4.3 do Apêndice 2, uma vez que é possível encontrar o seu conteúdo no sítio Web pertinente. | |
| Versão 1.2 | <p>Retificação</p> <p>A definição de «substância de integração progressiva» foi alinhada pelo Regulamento (CE) n.º 1907/2006 com a redação que lhe foi dada pelo Regulamento (CE) n.º 1354/2007 e pela retificação publicada no JO L 36 de 05.2.2009, p. 84 (Retificação ao Regulamento (CE) n.º 1907/2006).</p> <p>De referir que as alterações das versões 1.1 e 1.2 estão consolidadas numa única versão 1.2 para as línguas que não o inglês.</p> | Março de 2012 |
| Versão 1.3 | <p>Retificação</p> <p>Introdução de duas fórmulas estruturais em falta no capítulo 7.6.</p> | Fevereiro de 2014 |
| Versão 1.4 | <p>Retificação:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Reformulação do documento de acordo com a atual identidade institucional. - Eliminação do capítulo 8, que fornece instruções técnicas com base numa versão desatualizada da IUCLID. - Correção na secção 7.5 da descrição da cristobalite e do quartzo e eliminação da referência à Diretiva 2000/30/CE. - Eliminação das referências ao capítulo 8 e aos Manuais de Apresentação de Dados desatualizados e aditamento de referências aos novos manuais da ECHA. - Eliminação do Apêndice III e inclusão da informação no quadro do histórico do documento. - Correção de hiperligações quebradas e de erros editoriais. | Junho de 2016 |

| | | |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| Versão 2.0 | Atualização parcial limitada a: <ul style="list-style-type: none">- Aditamento de um novo apêndice III com descrição do conceito de perfil da identidade da substância.- Aditamento de um novo texto no capítulo 1 para introduzir o novo apêndice III.- Correção de erros tipográficos e editoriais. | Dezembro de 2016 |
| Versão 2.1 | Retificação para corrigir os erros tipográficos no texto e os erros nas informações sobre a composição nos exemplos apresentados na figura 2 do apêndice III. | Maio de 2017 |
| Versão 3.0 | Atualização: <ul style="list-style-type: none">- Alinhar com as alterações introduzidas pelo Regulamento (UE) 2022/477 da Comissão, de 24 de março de 2022.- Eliminar as referências ao pré-registo (tardio)- Corrigir erros tipográficos e editoriais- Adicionar ligações às páginas de apoio e de perguntas e respostas da ECHA- Suprimir o apêndice III, n.º 5, relativo à transição da IUCLID 5 para a IUCLID 6 | Dezembro de 2023 |

Índice

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1. GENERALIDADES | 9 |
| 1.1. Objetivos | 9 |
| 1.2. Âmbito de aplicação | 10 |
| 1.3. Estrutura do guia de orientação | 11 |
| 2. DEFINIÇÕES E ABREVIATURAS | 12 |
| 2.1. Abreviaturas | 12 |
| 2.2. Definições | 14 |
| 3. QUADRO PARA A IDENTIFICAÇÃO DA SUBSTÂNCIA NO ÂMBITO DO REACH E DO CRE | 18 |
| 3.1. DEFINIÇÃO DE SUBSTÂNCIA | 18 |
| 3.2. Identificadores numéricos | 18 |
| 3.2.1. Inventário CE | 18 |
| 3.2.2. Números de lista | 20 |
| 3.3. Requisitos para a identificação de substâncias no âmbito do REACH e do CRE | 21 |
| 4. GUIA DE ORIENTAÇÃO PARA A IDENTIFICAÇÃO E DESIGNAÇÃO DE SUBSTÂNCIAS NO ÂMBITO DOS REGULAMENTOS REACH E CRE | 24 |
| 4.1. Introdução | 24 |
| 4.2. Substâncias de composição bem definida | 30 |
| 4.2.1. Substâncias monoconstituíntes | 31 |
| 4.2.2. Substâncias multiconstituíntes | 34 |
| 4.2.3. Substâncias de composição química definida e outros identificadores principais | 37 |
| 4.3. Substâncias UVCB | 39 |
| 4.3.1. Orientações gerais sobre substâncias UVCB | 39 |
| 4.3.2. Tipos específicos de substâncias UVCB | 49 |
| 5. CRITÉRIOS PARA VERIFICAR SE DETERMINADAS SUBSTÂNCIAS SÃO IDÊNTICAS | 58 |
| 6. IDENTIDADE DA SUBSTÂNCIA NO ÂMBITO DO PEDIDO DE INFORMAÇÃO | 65 |
| 7. EXEMPLOS | 66 |
| 7.1. Peroxidicarbonato de dietilo | 66 |
| 7.2. Zolimidina | 67 |
| 7.3. Mistura de isômeros | 67 |
| 7.4. Fragrância AH | 71 |
| 7.5. Minerais | 78 |
| 7.6. Óleo essencial de lavandin grosso | 81 |
| 7.7. Óleo de crisântemo e respetivos isômeros isolados | 87 |

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 7.8. Fenol, isopropilado, fosfato | 91 |
| 7.9. Compostos de amónio quaternário | 92 |
| 7.10. Substâncias petrolíferas;..... | 96 |
| 7.10.1. Fração de mistura de gasolina (C4-C12)..... | 96 |
| 7.10.2. Gasóleos (petróleo) | 98 |
| 7.11. Enzimas | 99 |
| 7.11.1. Subtilisina | 99 |
| 7.11.2. α -Amilase..... | 100 |
| APÊNDICE I - MATERIAIS DE APOIO | 103 |
| APÊNDICE II – ORIENTAÇÕES TÉCNICAS POR PARÂMETRO DE IDENTIFICAÇÃO DA SUBSTÂNCIA..... | 107 |
| APÊNDICE III - IDENTIFICAÇÃO DA SUBSTÂNCIA E APRESENTAÇÃO CONJUNTA DE DADOS..... | 124 |

Índice de quadros

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Quadro 1: Abreviaturas | 12 |
| Quadro 2: Definições | 14 |
| Quadro 3: Parâmetros de identificação da substância no anexo VI, ponto 2, do REACH .. | 22 |
| Quadro 4.: Agrupamento dos principais identificadores para exemplos que representam vários tipos de substâncias bem definidas similares | 25 |
| Quadro 5: Agrupamento dos principais identificadores para exemplos que representam vários tipos de substâncias UVCB | 26 |

Índice de figuras

| | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 1: Esquema relativo aos capítulos e apêndices do presente guia para uma orientação adequada no que respeita à identificação dos vários tipos de substâncias..... | 29 |
| Figura 2 (página seguinte): Uma visão geral esquemática das etapas que os potenciais registantes percorrem desde a determinação das suas obrigações de registo (1) até à definição do seu SIP (4) e, por fim, à apresentação dos seus registos em cumprimento formal das obrigações de registo das suas substâncias (8)..... | 131 |
| Figura 3: Esquema ilustrativo da definição de um SIP (etapa 4 da figura 2) para uma substância do tipo UVCB identificada com base em descritores de origem e de processo da entidade jurídica individual e em descrições de processo. | 134 |

1. Generalidades

O Regulamento REACH (Regulamento (CE) n.º 1907/2006) estabelece um sistema de registo, avaliação, autorização e restrição dos produtos químicos e cria a Agência Europeia dos Produtos Químicos (ECHA) para executar o regulamento.¹

O Regulamento CRE (Regulamento (CE) n.º 1272/2008) é o novo regulamento europeu relativo à classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas químicas.² A legislação introduz, na UE, um novo sistema de classificação e rotulagem de produtos químicos, com base no Sistema Mundial Harmonizado (GHS) das Nações Unidas.

O Regulamento REACH diz respeito exclusivamente às substâncias. A identificação clara e inequívoca das substâncias é essencial para assegurar o bom funcionamento dos processos previstos no Regulamento REACH. O presente guia de orientação para a identificação e designação de substâncias destina-se a ajudar a indústria, os Estados-Membros e a Agência Europeia dos Produtos Químicos.

O presente guia de orientação baseia-se na experiência adquirida com a identificação de substâncias nos termos da anterior legislação em matéria de produtos químicos (Diretiva 67/548/CEE e Diretiva 98/8/CEE). No entanto, as práticas atuais de identificação de substâncias no quadro do Regulamento REACH e do Regulamento relativo à classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas (CRE) constituem a base para o aperfeiçoamento das presentes orientações. Além disso, e sempre que apropriado, foram tidas igualmente em consideração abordagens em matéria de produtos químicos de sistemas exteriores à União Europeia.

Foram incluídas orientações específicas para diferentes tipos de substâncias.

O presente guia de orientação deve ser utilizado para identificar e designar substâncias que são regulamentadas nos termos dos regulamentos REACH e CRE.

1.1. Objetivos

O presente guia de orientação tem por objetivo fornecer orientações a fabricantes e importadores sobre o registo e a comunicação da identidade de uma substância no âmbito dos regulamentos REACH e CRE. O guia de orientação é um elemento essencial para a identificação de substâncias e fornece ainda orientações sobre a forma de as designar. Também fornece orientações sobre se as substâncias podem ser consideradas iguais no contexto do REACH e do CRE e como o princípio «uma substância, um registo» (OSOR) pode ser implementado através da definição do perfil de identidade da substância (SIP). A identificação de substâncias idênticas que podem ser cobertas pelo mesmo SIP é importante para pedidos de informação, partilha de dados, apresentação conjunta de dados, notificação ao inventário de classificação e rotulagem e harmonização de classificação e rotulagem.

A identificação de substâncias deve ser realizada, de preferência, por peritos do setor

¹ Regulamento (CE) n.º 1907/2006 do Parlamento Europeu e do Conselho, de 18 de dezembro de 2006, relativo ao registo, avaliação, autorização e restrição dos produtos químicos (REACH), que cria a Agência Europeia dos Produtos Químicos, que altera a Diretiva 1999/45/CE e revoga o Regulamento (CEE) n.º 793/93 do Conselho e o Regulamento (CE) n.º 1488/94 da Comissão, bem como a Diretiva 76/769/CEE do Conselho e as Diretivas 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE e 2000/21/CE da Comissão («REACH»).

² Regulamento (CE) n.º 1272/2008 do Parlamento Europeu e do Conselho, de 16 de dezembro de 2008, relativo à classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas, que altera e revoga as Diretivas 67/548/CEE e 1999/45/CE, e altera o Regulamento (CE) n.º 1907/2006 (Texto relevante para efeitos do EEE) («CRE»).

industrial. Para os interessados do setor industrial com pouca experiência na identificação de substâncias, são incluídas orientações suplementares sobre parâmetros de identificação num apêndice ao presente guia de orientação.

Além disso, o guia indica algumas hiperligações para ferramentas de apoio à caracterização e verificação da identidade química de uma substância.

Os manuais da ECHA fornecem instruções mais pormenorizadas sobre como preencher as informações relativas à identidade da substância na IUCLID, no contexto dos diferentes processos no âmbito do REACH e CRE, e estão disponíveis em <http://echa.europa.eu/manuals..>

1.2. Âmbito de aplicação

O Regulamento REACH, nos termos do seu artigo 1.º, diz respeito ao fabrico, importação, colocação no mercado e utilização de substâncias estremes ou contidas em misturas ou em artigos. As misturas e os artigos, enquanto tal, não são abrangidos pelo regulamento.

Em conformidade com o artigo 10.º do REACH, o registo exige que a identidade da substância seja registada de acordo com os parâmetros especificados no anexo VI, ponto 2, do referido regulamento (ver Quadro 3). São obrigatórios parâmetros idênticos (especificados no anexo VI, pontos 2.1 a 2.3.4, do REACH) para registar a identidade da substância para efeitos de notificação, de acordo com o artigo 40.º, n.º 1, do Regulamento CRE. O presente guia de orientação centra-se na identificação correta de substâncias abrangidas pela definição jurídica de substância constante do REACH e do CRE e fornece orientações sobre os parâmetros de identificação da substância enumerados no anexo VI, ponto 2, do REACH. As informações fornecidas sobre a identidade da substância devem ser suficientes para identificar cada substância. Um ou vários dos parâmetros de identificação da substância podem ser omitidos se não for tecnicamente possível ou se não se afigurar necessário, do ponto de vista científico, fornecer as informações solicitadas. Os motivos para essas omissões devem ser devidamente fundamentados com base numa justificação científica.

A abordagem para a identificação de uma substância depende do tipo de substância em causa. Por conseguinte, o utilizador do presente guia de orientação será orientado para capítulos específicos consoante os diferentes tipos de substâncias.

Os inventários CE utilizados no âmbito da Diretiva 67/548/CEE (EINECS, ELINCS e lista NLP [lista de «ex-polímeros»]) constituem ferramentas importantes para a identificação de substâncias. No capítulo 3.2 são fornecidas orientações sobre o papel destes inventários no âmbito do REACH.

As substâncias abrangidas pelo âmbito de aplicação do REACH e do CRE (e, conseqüentemente, do presente guia de orientação) são, em geral, o resultado de reações químicas decorrentes do fabrico da substância e podem conter vários constituintes distintos. As substâncias, conforme definidas no REACH e no CRE, incluem também substâncias quimicamente derivadas ou isoladas a partir de materiais que ocorrem na natureza, os quais podem incluir um único elemento ou molécula (por exemplo, metais puros ou determinados minerais) ou vários constituintes (por exemplo, óleos essenciais, mates de metal que se formam quando se procede à fusão dos minérios do sulfureto de metal). No entanto, as substâncias que são regulamentadas por outra legislação da UE estão, em vários casos, isentas de registo ao abrigo do REACH (ver artigo 2.º do REACH). Também as substâncias enumeradas no anexo IV do REACH e as substâncias que cumprem os critérios especificados no anexo V do REACH estão isentas de registo. Importa salientar que, embora uma substância possa estar isenta de registo, tal não significa necessariamente que a substância esteja isenta dos requisitos estipulados noutros títulos do REACH ou dos requisitos do CRE.

O REACH exige que os registantes da mesma substância cheguem a acordo sobre a apresentação conjunta de determinadas informações sobre a substância (princípio OSOR)³. A aplicação desse princípio necessita de clareza sobre a forma como o registante definiu o âmbito do seu perfil de identidade da substância.

1.3. Estrutura do guia de orientação

As informações gerais, como os objetivos e o âmbito de aplicação do presente guia de orientação, são apresentadas no capítulo 1, e as abreviaturas e definições utilizadas encontram-se no capítulo 2. As informações relevantes sobre o quadro para a identificação de substâncias no REACH, por exemplo, a definição de substância e os requisitos de informação no texto jurídico, são apresentadas no capítulo 3.

No capítulo 4, são fornecidas orientações para a identificação e designação ou denominação das substâncias.

- O capítulo 4.1 descreve a diferença entre substâncias «bem definidas» e «não bem definidas»; estes dois grupos principais podem ainda ser subdivididos em tipos diferentes de substâncias, com as suas próprias orientações específicas para a identificação da substância. É ainda apresentado um esquema que orientará o utilizador para o capítulo que lhe interessa, no qual poderá consultar as orientações sobre a identificação do tipo de substância pertinente.
- Nos capítulos subsequentes, são fornecidas orientações específicas para cada tipo de substância, sob a forma de um conjunto de regras com explicações e exemplos.

O capítulo 5 fornece orientações sobre a forma de verificar se as substâncias podem ou não ser consideradas idênticas. As orientações sobre a identidade da substância no âmbito do pedido de informações são fornecidas no capítulo 6.

Além disso, no capítulo 7, são preparados alguns exemplos pormenorizados com recurso às orientações práticas do capítulo 4.

O apêndice I contém algumas hiperligações para ferramentas pertinentes de apoio à caracterização e verificação da identidade química de uma substância.

O apêndice II fornece mais informações gerais sobre os parâmetros de identificação de substâncias individuais utilizados no processo de identificação de substâncias, tais como as regras de nomenclatura, os números CE e os números CAS, as notações de fórmula molecular e fórmula estrutural e os métodos analíticos.

O Apêndice III fornece informações sobre o conceito de SIP, a sua relevância para as obrigações de apresentação conjunta e a forma como deve ser definido e comunicado.

³ As orientações sobre partilha de dados sobre a mesma substância contêm informações pormenorizadas sobre a apresentação conjunta de *dados sobre a mesma substância*.

2. Definições e abreviaturas

2.1. Abreviaturas

As principais abreviaturas utilizadas no presente guia de orientação são enumeradas e explicadas no Quadro 1.

Quadro 1: Abreviaturas

| Abreviatura | Significado |
|-------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| AISE | Associação Internacional de Sabões, Detergentes e Produtos de Manutenção |
| CAS | Serviço de Resumos de Química (<i>Chemical Abstracts Service</i>) |
| CE | Comissão Europeia |
| CG | Cromatografia gasosa |
| CRE | Regulamento (CE) n.º 1272/2008 relativo à classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas |
| EAA | Espetroscopia de Absorção Atômica |
| EINECS | Inventário Europeu das Substâncias Químicas Existentes no Mercado |
| ELINCS | Lista Europeia das Substâncias Químicas Notificadas |
| ENCS | Substâncias Químicas Novas e Existentes (Japão) |
| ESIS | Sistema Europeu de Informação sobre Produtos Químicos |
| FIIS | Fórum de Intercâmbio de Informações sobre uma Substância |
| GHS | Sistema Mundial Harmonizado |
| HPLC | Cromatografia líquida de elevado rendimento (<i>High performance liquid chromatography</i>) |
| InChI | Identificador Químico Internacional IUPAC |
| INCI | Nomenclatura Internacional dos Ingredientes Cosméticos |
| ISO | Organização Internacional de Normalização |
| IUBMB | União Internacional de Bioquímica e Biologia Molecular |
| IUCLID | Base de dados Internacional de Informações Químicas Uniformes. |
| IUPAC | União Internacional de Química Pura e Aplicada |
| m/m | Massa por massa |
| MS | Espetroscopia de massa |
| NLP | Ex-polímero |
| PIS | Perfil da identidade da substância |

| | |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ppm | Partes por milhão |
| REACH | Registo, Avaliação, Autorização e Restrição dos Produtos Químicos |
| RI | Infravermelho |
| RMN | Ressonância Magnética Nuclear |
| SMILES | Especificação de entrada de linha de dados moleculares simplificada |
| TSCA | Lei sobre o controlo das substâncias tóxicas (EUA) |
| UE | União Europeia |
| UV/VIS | Ultravioleta/visível |
| UVCB | substâncias de composição desconhecida ou variável, produtos de reação complexos ou materiais biológicos. |
| XRD | Difração de raios X |
| XRF | Fluorescência de raios X |

2.2. Definições

As principais definições utilizadas no presente guia de orientação são enumeradas e descritas no Quadro 2.

Estas definições têm em conta as definições utilizadas no Regulamento REACH e no Regulamento CRE. Por este motivo, as definições de alguns termos são diferentes das utilizadas na Diretiva 67/548/CEE.

Quadro 2: Definições

| Definição | Descrição |
|----------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Aditivo | uma substância adicionada intencionalmente para estabilizar a substância ⁴ . |
| Artigo* | Um objeto ao qual, durante a produção, é dada uma forma, superfície ou desenho específico que é mais determinante para a sua utilização final do que a sua composição química. |
| Componente | Substância adicionada intencionalmente para formar uma mistura. |
| Constituinte | Qualquer espécie química única presente numa substância que pode ser caracterizada pela sua identidade química única. |
| Constituinte principal | Um constituinte que, não sendo um aditivo ou uma impureza, constitui uma parte significativa de uma substância, sendo, por isso, utilizado na denominação de substâncias e na identificação pormenorizada das mesmas. |
| Fabrico* | A produção e extração de substâncias no estado natural. |
| Impressão digital cromatográfica | Representação da composição de uma substância a partir da distribuição característica dos constituintes num cromatograma analítico. |
| Impureza | Um constituinte não intencionalmente presente numa substância após o seu fabrico, podendo ter origem nos materiais de base ou ser o resultado de reações secundárias ou incompletas durante o processo de fabrico. Apesar de estar presente na substância final, não foi adicionado intencionalmente. |

⁴ Noutros domínios, um aditivo pode igualmente ter outras funções, por exemplo, regulador de pH ou corante. No entanto, no Regulamento REACH e no presente guia de orientação técnica, trata-se de um estabilizador.

| | |
|-----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Inventário CE | Embora não esteja juridicamente definido no Regulamento REACH, o Inventário CE é composto por três listas europeias de substâncias combinadas, independentes e legalmente aprovadas, dos quadros regulamentares anteriores em matéria de produtos químicos: o EINECS, a ELINCS e a lista NLP (ex-polímeros). As entradas no Inventário CE são constituídas por um nome químico e por um número (nome CE e número CE), um número CAS, a fórmula molecular (caso exista) e uma descrição (para determinados tipos de substâncias). |
| IUCLID | Base de dados Internacional de Informações Químicas Uniformes. A IUCLID é uma base de dados e um sistema de gestão de informações sobre substâncias químicas. |
| Liga* | Um material metálico, homogêneo à escala macroscópica, constituído por dois ou mais elementos combinados de modo que não possam ser facilmente separados por meios mecânicos. As ligas são consideradas misturas especiais. |
| Mistura * | Uma mistura ou solução composta por duas ou mais substâncias. |
| Monómero* | Uma substância capaz de formar ligações covalentes com uma sequência de moléculas adicionais, semelhantes ou não, nas condições da reação relevante de polimerização usada no processo em questão. |
| Número CE | O Número CE é o identificador numérico das substâncias no Inventário CE. |
| Número de Lista | Número atribuído pela Agência. Número atribuído automaticamente pelo REACH-IT. Aplica-se a todas as apresentações válidas recebidas (por exemplo, PPORD, pedidos de informação, registos, notificações de classificação e rotulagem). |
| Polímero* | Uma substância composta por moléculas caracterizadas por sequências de um ou mais tipos de unidades monoméricas. As referidas moléculas devem distribuir-se por uma gama de massas moleculares em que as diferenças decorram sobretudo das diferenças no número de unidades monoméricas que as constituem. Um polímero contém: (a) uma maioria ponderal simples de moléculas com, pelo menos, três unidades monoméricas unidas por ligação covalente a, pelo menos, outra unidade monomérica ou outro reagente; (b) menos que a maioria ponderal simples de moléculas com a mesma massa molecular. No contexto desta definição, uma «unidade monomérica» significa a forma reativa do monómero de partida dentro de um polímero. |

| | |
|-----------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Substância intermédia* | <p>Uma substância que é fabricada e consumida ou utilizada para processamento químico, tendo em vista a sua transformação noutra substância (a seguir designada <i>síntese</i>):</p> <p>(a) <u>substância intermédia não isolada</u> é uma substância intermédia que, durante a síntese, não é intencionalmente retirada (exceto para amostragem) do equipamento em que a síntese se realiza. Esse equipamento inclui o reator, o seu equipamento auxiliar e qualquer equipamento através do qual a ou as substâncias passem durante um processo de fluxo contínuo ou descontínuo, assim como as tubagens para transferência entre recipientes para realizar a fase seguinte da reação, mas exclui os tanques ou outros recipientes em que a ou as substâncias são armazenadas após o fabrico;</p> <p>(b) <u>substância intermédia isolada nas instalações</u> é uma substância intermédia que não satisfaz os critérios de substância intermédia não isolada, quando o fabrico da substância intermédia e a síntese de outra ou outras substâncias a partir desse produto se realize nas mesmas instalações, administradas por uma ou mais entidades jurídicas;</p> <p>(c) <u>substância intermédia transportada isolada</u> é uma substância que não satisfaz os critérios de substância intermédia não isolada, e que é transportada entre instalações ou fornecida a outras instalações.</p> |
| Substância monoconstituente | Uma substância definida pela sua composição em que, regra geral, um constituinte principal tem uma presença de, pelo menos 80 % (m/m). |
| Substância multiconstituente | Uma substância definida pela sua composição em que, regra geral, mais do que um constituinte principal está presente numa concentração 10 % (m/m) e < 80 % (m/m). |
| Substância não quimicamente modificada* | Uma substância cuja estrutura química permanece inalterada, mesmo que tenha sido submetida a um processo ou tratamento químico, ou a uma transformação física mineralógica, por exemplo, destinado à remoção de impurezas. |
| Substância notificada | Uma substância em relação à qual foi apresentada uma notificação e que pode ser colocada no mercado de acordo com a Diretiva 67/548/CEE. |
| Substância que ocorre na natureza* | Uma substância estreme natural, não transformada ou transformada apenas por meios manuais, mecânicos ou gravitacionais; por dissolução na água, por flotação, por extração com água, por destilação a vapor ou por aquecimento exclusivamente para fins de remoção da água, ou extraída da atmosfera por qualquer meio. |

| | |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Substância* | Um elemento químico e seus compostos, no estado natural ou obtidos por qualquer processo de fabrico, incluindo qualquer aditivo necessário para preservar a sua estabilidade e qualquer impureza que derive do processo utilizado, mas excluindo qualquer solvente que possa ser separado sem afetar a estabilidade da substância nem modificar a sua composição. |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

* Definições nos termos do artigo 3.º do REACH.

3. Quadro para a identificação da substância no âmbito do REACH e do CRE

O REACH e o CRE incluem uma definição de substância e o REACH enumera os parâmetros de identificação da substância (anexo VI, ponto 2) que devem ser tidos em conta para identificar a substância para efeitos de registo.

O presente capítulo descreve a definição de substância no REACH e CRE (capítulo 3.1), fornece orientações genéricas sobre a forma de utilizar o Inventário CE a partir do quadro regulamentar anterior em matéria de produtos químicos (capítulo 3.2) e fornece ainda informações gerais sobre os requisitos de identificação de substâncias que são especificados no REACH (capítulo 3.3).

3.1. DEFINIÇÃO DE SUBSTÂNCIA

De acordo com o REACH (artigo 3.º, n.º 1) e o CRE (artigo 2.º, n.º 7), a definição de substância é a seguinte:

Substância: um elemento químico e seus compostos, no estado natural ou obtidos por qualquer processo de fabrico, incluindo qualquer aditivo necessário para preservar a sua estabilidade e qualquer impureza que derive do processo utilizado, mas excluindo qualquer solvente que possa ser separado sem afetar a estabilidade da substância nem modificar a sua composição.

A definição de substância no REACH e no CRE é idêntica à definição de substância que foi utilizada na sétima alteração da Diretiva Substâncias Perigosas (Diretiva 92/32/CEE que altera a Diretiva 67/548/CEE). Em ambos os casos, a definição não se limita a um composto químico puro definido por uma única estrutura molecular. A definição de substância inclui constituintes diferentes, tais como impurezas.

3.2. Identificadores numéricos

3.2.1. Inventário CE

Existem três inventários distintos criados pelo quadro regulamentar anterior em matéria de produtos químicos: o Inventário Europeu das Substâncias Químicas Existentes no Mercado (EINECS), a Lista Europeia das Substâncias Químicas Notificadas (ELINCS) e a Lista de Ex-Polímeros (NLP).

As substâncias colocadas no mercado europeu entre 1 de janeiro de 1971 e 18 de setembro de 1981 estão enumeradas no Inventário Europeu das Substâncias Químicas Existentes no

Mercado (EINECS)^{5, 6, 7}.

O inventário inclui cerca de 100 000 substâncias identificadas por uma denominação química (e uma descrição para determinados tipos de substâncias), um número CAS e um número de sete dígitos designado número EINECS. O número EINECS começa sempre pelos algarismos 2 ou 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). As substâncias comunicadas ao EINECS foram objeto de um processo de verificação que justifica a sua introdução no inventário.

As substâncias notificadas e colocadas no mercado após 18 de setembro de 1981 são enumeradas na Lista Europeia de Novas Substâncias Químicas (ELINCS)⁶. Este inventário (lista) inclui todas as substâncias notificadas até 31 de maio de 2008 em conformidade com a Diretiva 67/548/CEE e respetivas alterações. Estas substâncias são designadas «novas substâncias», uma vez que não foram colocadas no mercado europeu até 18 de setembro de 1981. Os números ELINCS foram atribuídos às substâncias pela Comissão Europeia após análise por parte das autoridades competentes dos Estados-Membros (ACEM). Contrariamente ao inventário EINECS, o inventário ELINCS não inclui um número CAS nas suas entradas mas sim o número de notificação atribuído pelas autoridades competentes dos Estados-Membros, o nome comercial (se disponível), a classificação e o nome IUPAC para substâncias classificadas. Os números ELINCS também são números de sete dígitos que começam sempre pelo algarismo 4 (4xx-xxx-x).

Os polímeros foram excluídos da notificação ao inventário EINECS e foram sujeitos a regras especiais no âmbito da Diretiva 67/548/CEE.⁸⁹ O termo «polímero» foi ainda definido na sétima retificação da Diretiva 67/548/CEE (Diretiva 92/32/CEE). Em consequência da implementação desta definição, algumas substâncias consideradas polímeros ao abrigo das regras de notificação para o inventário EINECS *deixaram de ser* consideradas polímeros ao abrigo da sétima alteração. Dado que todas as substâncias que não constam do EINECS eram de notificação obrigatória, todos os «*ex-polímeros*» (NLP) deverão, teoricamente, ter sido notificados. No entanto, o Conselho de Ministros esclareceu que estes *ex-polímeros* não deveriam ser sujeitos retroativamente a notificação. Foi solicitada à Comissão a elaboração de uma lista de *ex-polímeros* (lista NLP). As substâncias a incluir nesta lista eram as substâncias que existiam no mercado da UE entre 18 de setembro de 1981 (a data de entrada em vigor da Diretiva 79/831/CEE, a sexta alteração da Diretiva 67/548/CEE) e 31 de outubro

⁵ O EINECS é baseado no **European COre INventory** (ECOIN), o inventário europeu de base que permitia que a indústria introduzisse informações complementares sobre substâncias (de acordo com os critérios para notificação de substâncias ao inventário EINECS). O ECOIN foi criado a partir da combinação de várias listas de produtos químicos presumivelmente colocados no mercado europeu (por exemplo, TSCA). O EINECS foi publicado em 15 de junho de 1990 e inclui mais de 100 000 substâncias. Durante a utilização do inventário, foram identificados vários erros (erros de impressão, por exemplo, denominações químicas, fórmulas ou números CAS incorretos). Por conseguinte, foi publicada uma retificação em 1 de março de 2002.

⁶ Gabinete Europeu de Produtos Químicos (2005) *Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/EEC* (Manual de decisões para aplicação das sexta e sétima alterações à Diretiva 67/548/CEE) (Diretivas 79/831/CEE e 92/32/CEE) - Versão não confidencial. EUR 20519 EN. Versão atualizada de junho de 2005.

⁷ Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) *The EINECS Inventory of existing chemical substances on the EC market* (Inventário Europeu das Substâncias Químicas Existentes no Mercado (EINECS)). Tox Env Chem Vol. 37, p. 21-33.

⁸ Gabinete Europeu de Produtos Químicos (2003) *Notification of new chemical substances in accordance with Directive 67/548/EEC on the classification, packaging and labelling of dangerous substances* (Notificação de novas substâncias químicas de acordo com a Diretiva 67/548/CEE relativa à classificação, embalagem e rotulagem das substâncias perigosas). Lista de *ex-polímeros*. EUR 20853 EN.

⁹ Rasmussen K, Christ G e Davis JB (1998) *Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC* (Registo de polímeros de acordo com a Diretiva 67/548/CEE). Tox Env Chem Vol. 67, pp. 251-261.

de 1993 (a data de entrada em vigor da Diretiva 92/32/CEE, a sétima alteração Diretiva 67/548/CEE) e que satisfaziam os requisitos para serem consideradas polímeros ao abrigo das regras de notificação para o inventário EINECS, mas que deixaram de ser consideradas polímeros ao abrigo da sétima alteração. A lista de ex-polímeros não é exaustiva. As substâncias que constam da lista de ex-polímeros são identificadas pela denominação química, pelo número CAS e por um número com sete dígitos designado número NLP. O número NLP começa sempre pelo algarismo 5 (5xx-xxx-x).

Estas três listas de substâncias, EINECS, ELINCS e lista de NLP, são designadas em conjunto por Inventário CE. Cada substância constante deste inventário tem um número CE atribuído pela Comissão Europeia (ver informações pormenorizadas sobre o número CE no apêndice II).

As informações sobre estas substâncias podem ser obtidas através do sítio Web da Agência Europeia dos Produtos Químicos (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), que também mantém e publica um inventário de substâncias registadas (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

O Inventário CE pode ser utilizado como uma ferramenta para os fabricantes e importadores encontrarem o número CE da sua substância.

3.2.2. Números de lista

Ao criar o sistema REACH-IT, a ECHA considerou que seria vantajoso atribuir automaticamente um número às substâncias incluídas em todas as apresentações recebidas e tecnicamente completas (pré-registos, PPORD, pedidos de informação, registos, notificações de classificação e rotulagem, etc.), para as quais não fosse especificado um número CE (ver adiante os critérios de atribuição dos números de lista). Esta atribuição facilitava tecnicamente a gestão, o processamento posterior e a identificação das substâncias constantes dessas apresentações. Estes designados «números de lista» têm o mesmo formato numérico dos números utilizados nos inventários EINECS e ELINCS e na lista de ex-polímeros (NLP), mas começam com algarismos diferentes.

Os números de lista têm o formato numérico em comum com as entradas EINECS, ELINCS e NLP. A grande maioria dos números de lista e a identificação das substâncias com eles relacionados nunca foram objeto de verificação quanto à exatidão e validade, nem foi verificado se as convenções descritas no presente guia de orientação foram mantidas.

Importa referir que é possível que sejam atribuídos números de lista diferentes à mesma substância quando são utilizados identificadores diferentes (por exemplo, denominação) para essa substância. Consequentemente, é também possível que seja atribuído um número de lista a uma substância inscrita no EINECS, ELINCS ou PNL. Tal pode ocorrer se, numa apresentação à ECHA através do REACH-IT, for utilizado um nome de substância diferente do que consta do inventário CE.

Os números de lista podem começar, por exemplo, pelos algarismos 6, 7, 8 ou 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

É importante notar que, em algumas entradas do inventário EINECS, a descrição de uma substância é relativamente abrangente e poderia ser eventualmente considerada como abrangendo mais do que uma identidade de substância, em conformidade com o artigo 3.º, n.º 1, do REACH. Nestes casos, o potencial registante é convidado a descrever mais pormenorizadamente a substância em questão (por exemplo, através de um nome IUPAC e de outros identificadores disponíveis). O registante deve, no entanto, indicar a entrada EINECS a que pertence a substância. Nestes casos, a Agência Europeia dos Produtos Químicos decidirá se é ou não apropriada a atribuição de um número de lista à substância em questão.

3.3. Requisitos para a identificação de substâncias no âmbito do REACH e do CRE

No caso de ser obrigatório um registo ao abrigo do Regulamento REACH, este deve incluir informações sobre a identificação da substância, tal como especificado no anexo VI, ponto 2. Estas informações devem ser adequadas e suficientes para permitir a identificação de cada substância. Se não for tecnicamente possível, ou se não se afigurar cientificamente necessário, fornecer informações sobre um ou mais parâmetros de identificação da substância, há que justificá-lo claramente, tal como indicado no anexo VI, nota 1.

De igual modo, no caso de ser obrigatória uma notificação ao abrigo do Regulamento CRE (artigo 40.º do CRE), esta deverá incluir informações sobre a identificação da substância, tal como especificado no anexo VI, pontos 2.1 a 2.3.4, do REACH. Estas informações devem permitir a identificação de cada substância. Se não for tecnicamente possível, ou se não se afigurar cientificamente necessário, fornecer informações sobre um ou mais parâmetros de identificação da substância, há que justificá-lo claramente, tal como indicado no anexo VI, nota 1.

É apresentada no Quadro 3 uma descrição geral dos parâmetros de identificação de substâncias no âmbito do anexo VI do REACH.

Quadro 3: Parâmetros de identificação da substância no anexo VI, ponto 2, do REACH

| Parâmetros de identificação da substância no anexo VI, ponto 2, do REACH | |
|---------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2. | <p>IDENTIFICAÇÃO DA SUBSTÂNCIA</p> <p><i>As informações apresentadas devem ser suficientes para permitir a identificação da substância em causa. Se não for tecnicamente possível, ou se não se afigurar cientificamente necessário fornecer informações sobre um ou mais dos elementos a seguir indicados, há que justificá-lo claramente.</i></p> |
| 2.1 | Denominação e qualquer outro identificador de cada substância» |
| 2.1.1 | <i>Denominação(ões) de acordo com a nomenclatura da IUPAC. Se não estiver disponível, outra(s) denominação(ões) química(s) internacional(ais)»</i> |
| 2.1.2 | <i>Outras denominações (nome vulgar, nome comercial, abreviatura)</i> |
| 2.1.3 | <i>Número CE — ou seja, número EINECS, ELINCS ou NLP — ou número atribuído pela Agência (se disponível e adequado)»</i> |
| 2.1.4 | <i>Número CAS e nome CAS (caso existam)</i> |
| 2.1.5 | <i>Outro código de identificação, como o número de identificação aduaneira (se disponível)»</i> |
| 2.2 | Informações relativas à fórmula molecular e estrutural ou à estrutura cristalina de cada substância» |
| 2.2.1 | <i>Fórmula molecular e fórmula estrutural (incluindo notação SMILES e outra representação, se disponível) e descrição da(s) estrutura(s) cristalina(s)»</i> |
| 2.2.2 | <i>Informação sobre a atividade ótica e rácio típico de (estéreo) isómeros (se aplicável e caso se justifique)</i> |
| 2.2.3 | <i>Massa molecular ou intervalo de massas moleculares</i> |
| 2.3. | Composição de cada substância |
| 2.3.1 | <i>Grau de pureza (%), se aplicável</i> |

| | |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2.3.2 | <p><i>Denominações dos componentes e das impurezas</i></p> <p><i>No caso de substâncias de composição desconhecida ou variável, produtos de reação complexos ou materiais biológicos (UVCB):</i></p> <ul style="list-style-type: none"><i>– denominações dos componentes presentes numa concentração $\geq 10\%$;</i><i>– denominações dos componentes conhecidos presentes numa concentração $< 10\%$;</i><i>– no caso dos componentes que não possam ser identificados individualmente, descrição dos grupos de componentes com base na natureza química;</i><i>– descrição da origem ou fonte e do processo de fabrico</i> |
| 2.3.3 | <p><i>Concentração típica e intervalo de concentração (em percentagem) dos componentes, dos grupos de componentes que não podem ser identificados individualmente e das impurezas especificadas no ponto 2.3.2</i></p> |
| 2.3.4 | <p><i>Denominações e concentração típica e intervalo de concentração (em percentagem) dos aditivos</i></p> |
| 2.3.5 | <p><i>Todos os dados analíticos qualitativos específicos necessários para a identificação da substância, como dados de espectroscopia de ultravioletas, infravermelhos ou ressonância magnética nuclear, de espectrometria de massa ou de difração</i></p> |
| 2.3.6 | <p><i>Todos os dados analíticos quantitativos específicos necessários para a identificação da substância, como dados cromatográficos, titrimétricos, de análises elementares ou de difração</i></p> |
| 2.3.7 | <p><i>Descrição dos métodos analíticos ou das referências bibliográficas adequadas necessárias para a identificação da substância (incluindo a identificação e quantificação dos seus componentes e, se for caso disso, das suas impurezas e aditivos). A descrição deve consistir nos protocolos experimentais seguidos e na interpretação pertinente dos resultados comunicados nos termos dos pontos 2.3.1 a 2.3.6. Estas informações devem ser suficientes para possibilitar a reprodução dos métodos.</i></p> |
| 2.5 | <p>Quaisquer outras informações pertinentes para a identificação da substância»</p> |

4. Guia de orientação para a identificação e designação de substâncias no âmbito dos regulamentos REACH e CRE

4.1. Introdução

As regras para a identificação e designação variam consoante os tipos de substâncias. Por motivos de ordem prática, o presente guia de orientação está estruturado de forma a que, para cada tipo de substância, o utilizador seja orientado diretamente para o capítulo onde são fornecidas as orientações pertinentes. Para este efeito, são fornecidas algumas explicações sobre os diferentes tipos de substâncias e, por último, é dada uma indicação para localizar o capítulo pertinente.

A identificação das substâncias deve basear-se, pelo menos, nos parâmetros de identificação de substâncias enumerados no anexo VI, ponto 2, do REACH (ver Quadro 3). Por conseguinte, todas as substâncias devem ser identificadas através de uma combinação dos parâmetros de identificação pertinentes:

- o nome e IUPAC e/ou outras denominações e outros identificadores, por exemplo, número CAS, número CE (anexo VI, ponto 2.1);
- a informação molecular e estrutural (anexo VI, ponto 2.2);
- a composição química (anexo VI, ponto 2.3).

Uma substância é identificada totalmente pela sua composição química, ou seja, a identidade química e o conteúdo de cada constituinte na substância. Embora esta identificação simples seja possível para a maior parte das substâncias, para algumas não é viável ou não é adequada no âmbito do REACH e do CRE. Nesses casos, são necessárias outras informações ou informações suplementares relativas à identificação da substância.

Assim, as substâncias podem ser divididas em dois grupos principais:

1. «Substâncias bem definidas»: substâncias com uma composição qualitativa e quantitativa definida que pode ser suficientemente identificada com base nos parâmetros de identificação do anexo VI, ponto 2, do REACH.
2. «Substâncias UVCB»: substâncias de composição desconhecida ou variável, produtos de reação complexos ou materiais biológicos. Estas substâncias não podem ser suficientemente identificadas pelos parâmetros supra.

A variabilidade da composição das substâncias bem definidas é especificada pelos limites superior e inferior do(s) intervalo(s) de concentração do(s) constituinte(s) principal(is). Para as substâncias UVCB, a variabilidade é relativamente ampla e/ou pouco previsível.

Reconhece-se que existirão casos-limite entre substâncias bem definidas (produtos de reação com vários constituintes, cada um dentro de um intervalo amplo) e substâncias UVCB (produtos de reação com composição variável e pouco previsível). Cabe ao registante a responsabilidade de identificar a substância da forma mais adequada.

As regras aplicáveis à identificação e designação das «substâncias bem definidas» com um constituinte principal diferem das regras aplicáveis às «substâncias bem definidas» com mais do que um constituinte principal. De igual modo, são descritas diferentes regras de identificação e designação para os diversos tipos de substâncias abrangidas pela definição de substância «UVCB».

Em

Quadro 4. e Quadro 5 são enumerados os principais identificadores para vários exemplos de diversos tipos de substâncias. Esses exemplos estão agrupados de forma a que as semelhanças e as diferenças para a identificação da substância sejam facilmente reconhecidas.

Quadro 4. e Quadro 5 não representam uma lista exaustiva de todos os tipos de substâncias possíveis. Este agrupamento de substâncias através de regras de identificação e designação não deve ser considerado um sistema de categorização oficial para as substâncias, mas antes uma ajuda prática para aplicar as regras específicas de forma adequada e para encontrar as orientações adequadas no presente documento de orientação.

Quadro 4.: Agrupamento dos principais identificadores para exemplos que representam vários tipos de substâncias bem definidas similares

| Características comuns | Exemplos ou substâncias representativas | Identificadores principais |
|----------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Substâncias bem definidas pela composição química [Capítulo 4.2.] | Substâncias monoconstituintes, por exemplo - benzeno (95 %) - níquel (99 %) [Capítulo 4.2.1] | Composição química: um constituinte principal $\geq 80\%$: - Identidade química do constituinte principal (denominação química, número CAS, número CE, etc.) - Concentração típica e limites superior e inferior |
| | Substâncias multiconstituintes, por exemplo produtos de reação definidos como Mistura reacional de 2-, 3-, e 4-clorotolueno (30 % cada) [Capítulo 4.2.2] | Composição química: uma mistura (mistura ou massa reacional) de constituintes principais, cada um entre 10 % e 80 %: - Identidade química de cada constituinte principal - Concentrações típicas e limites superior e inferior de cada constituinte, bem como da própria mistura reacional |
| | Substâncias definidas por mais do que a composição química, por exemplo, Grafite e diamante [Capítulo 4.2.3] | Composição química como substância mono ou multiconstituinte E Outros parâmetros físicos ou de caracterização: por exemplo, morfologia cristalina, composição mineral (geológica), etc. |

Quadro 5: Agrupamento dos principais identificadores para exemplos que representam vários tipos de substâncias UVCB

| Características comuns | | Exemplos ou substâncias representativas | Identificadores principais | | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | | | Fonte | Processo | Outros identificadores |
| Substâncias UVCB Substâncias de composição desconhecida ou variável, produtos de reação complexos ou materiais biológicos [Capítulo 4.3] | Materiais biológicos (B) | Extratos de materiais biológicos, p. ex. fragrâncias naturais, óleos naturais, corantes naturais e pigmentos | - Espécies de planta ou animal e família - Parte de planta/animal | - Extração - Fracionamento, concentração, isolamento, purificação, etc. - <u>Derivação*</u> | - Composição conhecida ou genérica - Impressões cromatográficas e outras - Referência a normas - Índice de cor |
| | | Macromoléculas biológicas complexas, p. ex. enzimas, proteínas, fragmentos de ADN ou ARN, hormonas, antibióticos | | | - Índice de enzimas-padrão - Código genético - Configuração estereo - Propriedades físicas - Função/atividade - Estrutura - Sequência de aminoácidos |
| | Produtos de fermentação antibióticos, biopolímeros, enzimas, vinassas (produtos de fermentação de açúcar), soforolípidos, etc. | - Meio de cultura - Microrganismo aplicado | - Fermentação - Isolamento de produtos - Fases de purificação | - Tipo de produtos: p. ex., antibióticos, biopolímeros, proteínas, etc. - Composição conhecida | |
| Substâncias químicas e minerais com composição pouco definida, complexa | Misturas reacionais de composição pouco previsível e/ou variável | | Materiais de base | <u>Tipo de reação química</u> , p. ex., esterificação, alquilação, hidrogenação | - Composição conhecida - Impressões cromatográficas e outras - Referência a normas |
| | | - Frações ou destilados, p. ex. substâncias petrolíferas - Argila, p. ex. bentonite - Alcatrões | - Petróleo bruto - Carvão/turfa - Gases minerais - Minerais | - Fracionamento, destilação - <u>Conversão de frações</u> - Processamento físico | - Gamas do valor limiar - Intervalo do comprimento de cadeia - Rácio aromático/alifático |

| | | | | | |
|--|-------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | ou variável (UVC) | Concentrados ou fusões, p. ex., minerais metálicos ou resíduos de vários processos de fusão ou metalúrgicos, p. ex., escórias | Minérios | <ul style="list-style-type: none"> - Resíduos - Fusão - Tratamento térmico - Vários processos metalúrgicos | <ul style="list-style-type: none"> - Composição conhecida Índice padrão - Composição conhecida ou genérica - Concentração de metais |
|--|-------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

* Os processos sublinhados indicam sínteses de novas moléculas

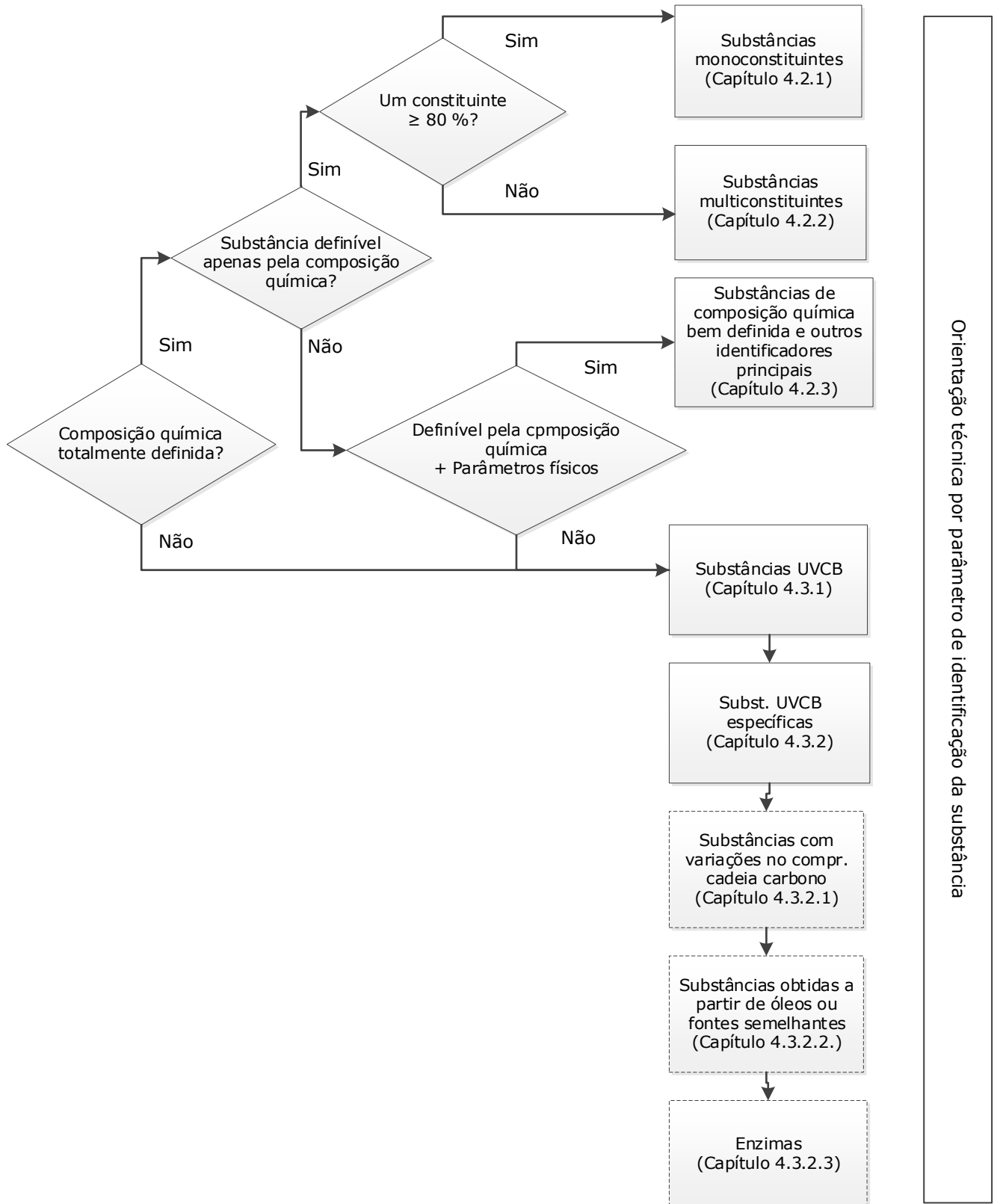
O presente capítulo está dividido em subcapítulos que contêm orientações específicas para a identificação de vários tipos de substâncias. A Figura 1 apresenta um esquema que remete para os capítulos pertinentes.

O esquema da Figura 1 é baseado em critérios que são «regras gerais». Cabe ao registante selecionar o capítulo mais adequado e registrar a identidade da substância em conformidade com as regras e os critérios aplicáveis a esse tipo de substância.

A regra básica determina que as substâncias são definidas, tanto quanto possível, pela composição química e pela identificação dos constituintes. Apenas devem ser utilizados outros identificadores caso esta regra não seja tecnicamente viável, conforme especificado para os diversos tipos de substâncias UVCB.

Se o registante não cumprir as regras e os critérios de identificação da substância constantes do presente guia de orientação, deve ser apresentada uma justificação. A identificação da substância deve ser transparente, responsável e assegurar a coerência.

Figura 1: Esquema relativo aos capítulos e apêndices do presente guia para uma orientação adequada no que respeita à identificação dos vários tipos de substâncias



Deve ser apresentada uma descrição dos métodos analíticos e/ou uma indicação das referências bibliográficas apropriadas para a identificação da substância e, eventualmente, das impurezas e aditivos (anexo VI, pontos 2.3.5, 2.3.6 e 2.3.7 do REACH). Estas informações devem ser suficientes para possibilitar a reprodução dos métodos. Devem igualmente ser fornecidos os resultados típicos obtidos ao aplicar as técnicas analíticas.

4.2. Substâncias de composição bem definida

As substâncias de composição química bem definida são denominadas de acordo com o ou os constituintes principais e Para alguns tipos de substâncias, a composição química por si só não é suficiente para a caracterização. Nesses casos, é necessário aditar à identificação da substância alguns parâmetros físicos suplementares relativos às estruturas químicas.

Regra geral, o objetivo consiste em abranger toda a composição, e cada constituinte exige uma especificação química completa, incluindo a informação estrutural. No que respeita às substâncias que são definidas pela sua composição química, é feita distinção entre:

- **Constituinte principal:** um constituinte de uma substância que, não sendo um aditivo ou uma impureza, constitui uma parte significativa dessa substância sendo, por isso, utilizado na denominação de substâncias e na identificação pormenorizada das mesmas.
- **Impureza:** um constituinte não intencionalmente presente numa substância após o seu fabrico. Pode ter origem nos materiais de base ou ser o resultado de reações secundárias ou incompletas durante o processo de produção. Apesar de estar presente na substância final, não foi adicionado intencionalmente.
- **Aditivo:** uma substância adicionada intencionalmente para estabilizar a substância.

Todos os constituintes (com exceção dos aditivos) que não são constituintes principais de uma substância mono-constituinte ou uma substância multiconstituinte são considerados impurezas. Embora em alguns setores seja prática corrente a utilização do termo «vestígios», no presente guia de orientação apenas é utilizado o termo «impurezas».

Os diferentes constituintes têm requisitos de identificação diferentes:

- os constituintes principais contribuem para a denominação da substância e cada constituinte principal deve ser exaustivamente identificado;
- As impurezas não contribuem para a denominação da substância, mas cada impureza deve ser exaustivamente identificada
- os aditivos contribuem para a composição da substância (mas não para a denominação) e devem ser sempre exaustivamente identificados.
- A identificação exaustiva dos principais constituintes, impurezas e aditivos deve consistir numa denominação IUPAC, numa denominação química, numa fórmula estrutural, num número CE e num número CAS, se disponível.

São utilizadas algumas convenções para estabelecer a distinção entre substâncias monoconstituíntes e multiconstituíntes:

- uma substância monoconstituinte é uma substância na qual um constituinte está presente numa concentração mínima de 80 % (m/m) e que contém até 20 % (m/m) de impurezas.

Uma substância monoconstituinte é designada de acordo com o constituinte principal:

- uma substância multiconstituinte é uma substância composta por vários constituintes principais presentes em concentrações normalmente $\geq 10\%$ e $< 80\%$ (m/m).

Uma substância multiconstituinte é designada como uma mistura reacional de dois ou vários constituintes principais.

As regras acima mencionadas destinam-se a fornecer orientações. São aceites desvios desde que seja apresentada uma justificação clara.

Normalmente, as impurezas presentes numa concentração $\geq 1\%$ devem ser especificadas. No entanto, as impurezas que são pertinentes para a classificação e/ou avaliação PBT¹⁰ devem sempre ser especificadas, independentemente da concentração. Como regra geral, a informação relativa à composição deve estar totalmente preenchida.

Os aditivos, na aceção do REACH, do CRE e do presente guia de orientação, são agentes necessários para preservar a estabilidade da substância. Assim, os aditivos são um constituinte essencial da substância e são tidos em conta ao efetuar o equilíbrio de massas. No entanto, fora do âmbito da definição do REACH e do presente guia de orientação, o termo «aditivo» também é utilizado para substâncias adicionadas intencionalmente com outras funções, por exemplo, reguladores de pH ou corantes. Estas substâncias adicionadas intencionalmente não fazem parte da substância estreme e, por conseguinte, não são tidas em conta ao efetuar o equilíbrio de massas.

As misturas, tal como definidas no REACH e no CRE, são misturas intencionais de substâncias e, conseqüentemente, não são consideradas substâncias multiconstituintes.

O capítulo 4.2.1 contém orientações específicas sobre substâncias monoconstituintes e o capítulo 4.2.2 sobre substâncias multiconstituintes. O capítulo 4.2.3 contém orientações sobre substâncias que necessitam de informações suplementares (por exemplo, determinados minerais).

4.2.1. Substâncias monoconstituintes

Uma substância monoconstituente é uma substância, definida pela sua composição quantitativa, em que um dos constituintes principais está presente numa concentração mínima de 80 % (m/m).

Convenção de denominação

As substâncias monoconstituintes são designadas de acordo com o constituinte principal. Em princípio, o nome deve ser indicado na língua inglesa, de acordo com as regras de nomenclatura IUPAC (ver apêndice I). A título de informação complementar, podem ser indicadas outras designações reconhecidas internacionalmente.

Identificadores

Uma substância monoconstituente é identificada pela denominação química e por todos os outros identificadores disponíveis (incluindo a fórmula molecular e estrutural ou a estrutura cristalina) do constituinte principal. Devem ser identificadas todas as impurezas e/ou aditivos da substância monoconstitutiva. Devem ser fornecidas as concentrações típicas e os intervalos de concentração do constituinte principal, impurezas e/ou aditivos. Todas estas informações devem ser fundamentadas por informações analíticas.

| Exemplo | | | | |
|------------------------|----------|---------------------|----------|--------------------------|
| Constituinte principal | Teor (%) | Impureza | Teor (%) | Identidade da Substância |
| m-xylene (m-xileno) | 91 | o-xylene (o-xileno) | 5 | m-xylene (m-xileno) |

¹⁰ Estão disponíveis mais informações sobre a avaliação PBT e sobre os critérios pertinentes no Guia de orientação sobre requisitos de informação e avaliação da segurança química, capítulo R11: avaliação PBT.

| | | | | |
|---------------------|----|---------------------|----|---------------------|
| o-xylene (o-xileno) | 87 | m-xylene (m-xileno) | 10 | o-xylene (o-xileno) |
|---------------------|----|---------------------|----|---------------------|

Normalmente, o constituinte principal está presente numa concentração > 80 % e deve ser completamente especificado por todos os parâmetros acima mencionados. A soma das concentrações típicas do constituinte principal e das impurezas deve ser de 100 %. As impurezas presentes numa concentração > 1 % devem ser especificadas por nome e identificadores. As impurezas que são relevantes para a classificação e/ou avaliação PBT¹¹ devem sempre ser especificadas pelos mesmos identificadores, independentemente da sua concentração.

Para a aplicação correta da regra dos 80 %, as substâncias adicionadas intencionalmente, como reguladores de pH ou corantes, não devem ser incluídas no equilíbrio de massas.

A «regra dos 80 %» tem sido aplicada na notificação de novas substâncias (Diretiva 67/548/CEE) e é aplicável no REACH. No entanto, os desvios a esta regra dos 80 % devem ser justificados. Exemplos possíveis de um desvio justificado:

- se o constituinte principal estiver presente numa concentração inferior a 80 %, mas for possível demonstrar que a substância tem propriedades físico-químicas idênticas e o mesmo perfil de perigo que outras substâncias monoconstituintes com a mesma identidade que cumprem a regra dos 80 %.
- o intervalo de concentrações para o constituinte principal e as impurezas respeita os critérios da regra dos 80 % e o constituinte principal apenas ocasionalmente é igual ou inferior a 80 %.

| Exemplos | | | | | | | | | |
|-----------------|--------------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|---------------------|-----------------|-----------------|-----------------|---------------------|
| Substância | Constituinte principal | Teor máximo (%) | Teor típico (%) | Teor mínimo (%) | Impureza | Teor máximo (%) | Teor típico (%) | Teor mínimo (%) | Identidade da subs. |
| 1 | o-xylene (o-xileno) | 90 | 85 | 65 | m-xylene (m-xileno) | 35 | 15 | 10 | o-xylene (o-xileno) |
| 2 | O-xylene (o-xileno) m-xylene (m-xileno) | 90 35 | 85 15 | 65 10 | p-xylene (p-xileno) | 5 | 4 | 1 | o-xylene (o-xileno) |

Devido aos intervalos de concentração do constituinte principal e da impureza, as substâncias 1 e 2 podem ser consideradas como multiconstituintes dos dois constituintes principais, o-xileno e m-xileno, ou como substâncias monoconstituintes. Neste caso, consideram-se ambas as substâncias como monoconstituintes, devido ao facto de o o-xileno estar tipicamente presente numa concentração superior a 80 %.

Informação analítica

Devem ser fornecidos dados qualitativos suficientes para confirmar a identidade dos constituintes e das impurezas de uma substância monoconstituente. Existem vários métodos espectroscópicos adequados para confirmar a identidade da substância, nomeadamente Espectroscopia de Absorção Ultravioleta/Visível (UV/Vis), Espectroscopia de Infravermelho (IR), Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e Espectroscopia de Massa (MS). Para substâncias inorgânicas ou substâncias orgânicas e/ou metal-orgânicas

¹¹ Estão disponíveis mais informações sobre a avaliação PBT e sobre os critérios pertinentes no Guia de orientação sobre requisitos de informação e avaliação da segurança química, capítulo R11: avaliação PBT.

detetáveis/mensuráveis por estrutura cristalina, é preferível, na maioria dos casos, a utilização de difração por raios X (XRD).

Devem ser fornecidos métodos quantitativos, tais como técnicas cromatográficas como a cromatografia gasosa (GC) ou a cromatografia líquida de alta resolução (HPLC), associados a uma técnica de detecção, para confirmar a composição da substância. No caso das substâncias inorgânicas, a difração de raios X (XRD), a fluorescência de raios X (XRF), a espectroscopia de absorção atômica (AAS), a espectroscopia de emissão ótica com plasma indutivamente acoplado (ICP-OES) ou a espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS) podem ser mais adequadas. Se necessário, também devem ser utilizadas outras técnicas de separação de constituintes válidas.

A descrição dos métodos analíticos deve incluir os protocolos experimentais seguidos e a interpretação dos resultados comunicados.

Os métodos analíticos estão sujeitos a avanços e aperfeiçoamentos contínuos. Por conseguinte, cabe ao registante apresentar dados analíticos adequados.

4.2.2. Substâncias multiconstituintes

Uma substância multiconstituinte é uma substância, definida pela sua composição quantitativa, em que mais de um constituinte principal está presente numa concentração igual ou superior a 10% (m/m) e inferior a 80% (m/m). Uma substância multiconstituinte é o resultado de um processo de fabrico¹².

O REACH exige que as substâncias sejam registadas tal como foram fabricadas. Se for fabricada uma substância multiconstituinte, a substância multiconstituinte tem de ser registada^{13 14}. Determinar em que medida as diferentes fases da produção da substância são abrangidas pela definição de «fabrico» deve ser decidido caso a caso. Se for possível descrever suficientemente o perfil de perigo da substância através da informação dos constituintes individuais, não será necessário realizar o ensaio da substância estreme.

Convenção de denominação

Uma substância multiconstituinte é designada como uma mistura reacional dos constituintes principais da substância estreme, ou seja, não os materiais de base necessários para produzir a substância. O formato genérico é: «Mistura reacional de [nomes dos principais constituintes]». Recomenda-se que os nomes dos constituintes sejam apresentados por ordem alfabética e separados pela conjunção «e». Apenas os constituintes principais com uma concentração típica igual ou superior a 10 % contribuem para a denominação. Em princípio, os nomes devem ser indicados na língua inglesa, de acordo com as regras de nomenclatura IUPAC. A título de informação complementar, podem ser indicadas outras designações reconhecidas internacionalmente.

Identificadores

Uma substância multiconstituinte é identificada pelo nome químico e por todos os outros identificadores disponíveis da substância como tal, e pela identidade química dos constituintes (incluindo a fórmula molecular e estrutural, ou a(s) estrutura(s) cristalina(s)). Deve ser identificada qualquer impureza e/ou aditivo da substância multiconstituinte. Devem ser fornecidas as concentrações) típicas e os intervalos de concentração dos constituintes, impurezas e/ou aditivos. Todas estas informações devem ser fundamentadas por informações analíticas.

| Exemplo | | | | |
|--------------------------------------------------|-----------------|------------------------|-----------------|------------------------------------------|
| Constituintes principais | Teor (%) | Impureza | Teor (%) | Identidade da substância |
| m-xylene (m-xileno) o-xylene (o-xileno) | 50 45 | p-xylene (p-xileno) | 5 | Mistura reacional de m-xileno e o-xileno |

No que respeita às substâncias multiconstituintes, a composição química é conhecida e vários constituintes principais são relevantes para a identificação da substância. Além disso, a composição química da substância é previsível, sob a forma de intervalos e valores típicos.

¹² A diferença entre uma mistura e uma substância multiconstituinte é que a mistura é obtida a partir da mistura de duas ou mais substâncias sem a ocorrência de uma reação química. Uma substância multiconstituinte é o resultado de uma reação química.

¹³ Várias substâncias estão isentas da obrigação de registo no âmbito do REACH (por exemplo, as substâncias enumeradas no anexo IV).

¹⁴ Esta abordagem não se aplica a várias substâncias específicas, como os minerais (ver o capítulo 7.5 para mais informações).

Os constituintes principais devem ser completamente especificados por todos os parâmetros relevantes. A soma das concentrações típicas dos constituintes principais ($\geq 10\%$) e das impurezas ($< 10\%$) deve totalizar 100% .

Para a identificação de substâncias multiconstituintes, as substâncias adicionadas intencionalmente, por exemplo reguladores de pH ou corantes, não devem ser incluídas no equilíbrio de massas.

As impurezas presentes numa concentração $\geq 1\%$ devem ser especificadas por nome e por todos os identificadores disponíveis. As impurezas que são relevantes para a classificação e/ou avaliação PBT devem sempre ser especificadas pelos mesmos identificadores, independentemente da sua concentração.

| Exemplo | | | | | | | | |
|-------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|---------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------------------------------|
| Constituinte principal | Teor máximo (%) | Teor típico (%) | Teor mínimo (%) | Impureza | Teor máximo (%) | Teor típico (%) | Teor mínimo (%) | Identidade da substância |
| aniline (anilina) | 90 | 75 | 65 | phenanthrene (fenantreno) | 5 | 4 | 1 | Mistura reacional de anilina e naftaleno |
| naphthalene (naftaleno) | 35 | 20 | 10 | | | | | |

De acordo com as regras do presente guia de orientação, esta substância é uma substância multiconstituinte. Embora o intervalo de um constituinte seja superior a 80% , tal acontece apenas ocasionalmente e a composição típica é inferior a 80% .

Sempre que um constituinte principal de uma substância multiconstituinte for $\geq 80\%$ ou $< 10\%$ (m/m), deve ser fornecida uma justificação para este desvio. Um possível exemplo de desvio justificado é:

- O constituinte só ocasionalmente é $\geq 80\%$ ou $< 10\%$.

Por exemplo, uma substância contém dois constituintes, um a 85% e outro a 10% , sendo a parte restante constituída por impurezas. Os dois constituintes contribuem e são essenciais para o efeito técnico pretendido da substância. Neste caso, apesar de um dos constituintes estar presente numa concentração superior a 80% , a substância pode ser descrita como uma substância de dois constituintes.

Informação analítica

Devem ser fornecidos dados qualitativos suficientes para confirmar a identidade dos constituintes e das impurezas de uma substância multiconstituinte. Existem vários métodos espectroscópicos adequados para confirmar a identidade da substância, nomeadamente Espectroscopia de Absorção Ultravioleta/Visível (UV/Vis), Espectroscopia de Infravermelho (IR), Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e Espectroscopia de Massa (MS). Para substâncias inorgânicas ou substâncias orgânicas e/ou metal-orgânicas detetáveis/mensuráveis por estrutura cristalina, é preferível, na maioria dos casos, a utilização de difração por raios X (XRD).

Devem ser fornecidos métodos quantitativos, tais como técnicas cromatográficas como a cromatografia gasosa (GC) ou a cromatografia líquida de alta resolução (HPLC), associados a uma técnica de deteção, para confirmar a composição da substância. No caso das substâncias inorgânicas, a difração de raios X (XRD), a fluorescência de raios X (XRF), a espectroscopia de absorção atômica (AAS), a espectroscopia de emissão ótica com plasma indutivamente acoplado (ICP-OES) ou a espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS) podem ser mais adequadas. Se necessário, também devem ser utilizadas outras técnicas

de separação de constituintes válidas.

A descrição dos métodos analíticos deve incluir os protocolos experimentais seguidos e a interpretação dos resultados comunicados.

Os métodos analíticos estão sujeitos a avanços e aperfeiçoamentos contínuos. Por conseguinte, cabe ao registante apresentar dados analíticos adequados.

Registo dos constituintes individuais de uma substância multiconstituinte

Em geral, o registo da identidade das substâncias para efeitos de registo deve adotar a abordagem utilizada para as substâncias multiconstituintes (ou seja, o registo da substância multiconstituinte). Os constituintes individuais poderão ser registados desde que exista uma justificação para tal desvio. Existe uma possibilidade de desvio do caso padrão para identificar (e potencialmente registar) substâncias através dos seus constituintes individuais, se

- não houver uma redução dos requisitos de informação;
- existirem dados suficientes que justifiquem o registo dos constituintes individuais, ou seja, a abordagem normalmente não deve promover a realização de ensaios suplementares (em animais vertebrados) relativamente à abordagem padrão;
- o registo dos constituintes individuais conduzir a uma situação mais eficiente (ou seja, evitar vários registos de substâncias compostas pelos mesmos constituintes);
- for indicada a informação sobre a composição das misturas de reação individuais.

A flexibilidade permitida não deve ser aproveitada para contornar os requisitos de informação. No caso de, por exemplo, 1200 toneladas por ano (tpa) de uma substância multiconstituinte «(C+D)», com uma composição de 50 % de C e 50 % de D, esta abordagem conduziria a dois registos com as informações seguintes:

Substância C

- 600 toneladas
- requisitos de informação a cumprir para quantidades superiores a 1000 toneladas (anexo X)

Substância D

- 600 toneladas
- requisitos de informação a cumprir para quantidades superiores a 1000 toneladas (anexo X)

Esta abordagem deve ser combinada com o requisito estabelecido no REACH de adicionar os volumes da mesma substância por entidade jurídica. O objetivo consiste em estabelecer os seguintes requisitos de informação:

- adicionar todos os volumes dos constituintes individuais (de acordo com as quantidades presentes na substância)
- remeter para o maior volume de uma substância que contém esse constituinte.

Os requisitos de informação devem ser estabelecidos com base no maior resultado. Para a comunicação das tonelagens, deve ser tido em conta o resultado do somatório da tonelagem de cada constituinte individual. São apresentados, a seguir, exemplos simplificados para ilustrar a execução prática desta abordagem:

Exemplo 1

A substância multiconstituinte «C+D+E» é o resultado de um processo numa entidade jurídica, do qual resultam substâncias diferentes:

- Substância 1: 50 % C e 25 % D e 25 % E, 1 100 tpa

- Substância 2: 50 % C e 50 % D 500 tpa

Neste caso, o produto da reação é também o ponto inicial: as duas substâncias devem ser registadas como substâncias multiconstituintes. Se for adotada a abordagem de registo dos constituintes individuais¹⁵, aplicar-se-á o seguinte:

A comunicação da substância D significaria, neste caso:

- Tonelagem: $(25\% * 1100) + (50\% * 500) = 525$ tpa

A determinação dos requisitos de informação é baseada no requisito mais rigoroso. Neste caso: > 1 000 tpa, uma vez que a tonelagem total da substância multiconstituinte «C+D+E» é superior a 1 000 tpa.

Nota: neste exemplo, as substâncias C e E devem ser registadas em conformidade.

Exemplo 2

A substância multiconstituinte «G+H+I» é o resultado de um processo numa entidade jurídica, do qual resultam substâncias diferentes:

- Substância 3: 65 % G e 15 % H e 20 % I, 90 tpa
- Substância 4: 60 % G e 40 % H, 90 tpa

Comunicação da substância G:

- Tonelagem: $(65\% * 90) + (60\% * 90) = 112.5$ tpa

A determinação dos requisitos de informação é baseada no requisito mais rigoroso. Neste caso: > 100 tpa, uma vez que a tonelagem total do constituinte G é superior a 100 tpa.

Nota: neste exemplo, as substâncias H e I devem ser registadas em conformidade.

Além da determinação dos requisitos de informação mencionados, deve ser tido igualmente em conta o número de novos estudos (em animais vertebrados) que devem ser realizados. Antes de optar por uma estratégia, os potenciais registantes devem ponderar se existem estudos suficientes (em animais vertebrados) e se a flexibilidade proposta conduzirá a mais ou menos novos ensaios (em animais vertebrados). Deve ser adotada a estratégia que evite novos ensaios (em animais vertebrados).

Em caso de dúvida, a opção comum para registar a identidade da substância para efeitos de registo deve sempre consistir na identificação da substância tal como fabricada.

4.2.3. Substâncias de composição química definida e outros identificadores principais

Algumas substâncias (por exemplo, minerais inorgânicos) que podem ser identificadas pela sua composição química devem ser objeto de maior especificação através de identificadores suplementares, com vista a obter a identificação das suas próprias substâncias. Essas substâncias podem ser substâncias monoconstituintes ou multiconstituintes, mas necessitam, além dos parâmetros de identificação descritos nos capítulos anteriores, de outros identificadores principais para que a identidade da substância possa ser registada de forma inequívoca.

¹⁵ O exemplo destina-se apenas a ilustrar a determinação dos requisitos de informação e da comunicação dos volumes. Não pretende determinar se a abordagem é justificável neste caso.

Exemplos

Alguns minerais não metálicos (de fonte natural ou de fabrico humano) com estruturas únicas necessitam igualmente da composição morfológica e mineral para identificar inequivocamente a substância. Um exemplo é o caulino (CAS 1332-58-7), composto por caulinite, silicato de alumínio e potássio, feldspato e quartzo.

As orientações sobre o cumprimento das obrigações específicas do REACH para as substâncias em «nanofomas» são fornecidas no *Apêndice para nanofomas aplicáveis ao Guia de Orientação sobre o Registo e Identificação de Substâncias*¹⁶. O aconselhamento prestado abrange questões nanoespecíficas relacionadas com a identificação e a caracterização de nanofomas.

Convenção de denominação

Em princípio, deve ser seguida a convenção de denominação adotada para as substâncias monoconstituíntes (ver capítulo 4.2.1) ou para as substâncias multiconstituíntes (ver capítulo 4.2.2).

No que diz respeito aos minerais inorgânicos, podem ser utilizados os nomes mineralógicos utilizados para os constituíntes. Por exemplo, a apatite é uma substância multiconstituente composta por um grupo de minerais de fosfato, normalmente designados como hidroxilapatite, fluorapatite e clorapatite, cujas denominações resultam de elevadas concentrações de iões OH-, F-, ou Cl, respetivamente, no cristal. A fórmula da mistura das três espécies mais comuns é $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$. Outro exemplo é a aragonite, uma das estruturas cristalinas de carbonato de cálcio especiais.

Identificadores

Estas substâncias são identificadas e designadas de acordo com as regras aplicáveis às substâncias monoconstituíntes (ver capítulo 4.2.1) ou às substâncias multiconstituíntes (ver capítulo 4.2.2). Os outros principais parâmetros de identificação específicos a adicionar dependem da substância. A composição elementar com dados espectrais, a estrutura cristalina tal como revelada por difração de raios X (XRD), os picos de absorção de infravermelho, o índice de tumefação, a capacidade de permuta catiónica ou outras propriedades físicas e químicas são exemplos de outros identificadores principais.

No que respeita aos minerais, é importante combinar os resultados da composição elementar com os dados espectrais para identificar a composição mineralógica e a estrutura cristalina. Esta identificação é posteriormente confirmada por propriedades físico-químicas características, como a estrutura cristalina (revelada por difração de raios X), a forma, a dureza, a capacidade de tumefação, a densidade e/ou a área da superfície.

Podem ser indicados exemplos de identificadores principais adicionais específicos para minerais específicos, uma vez que os minerais têm propriedades físico-químicas características que permitem concluir a sua identificação, por exemplo: dureza muito baixa do talco, capacidade de tumefação da bentonite, formas de diatomite, densidade muito elevada da barite e área da superfície (adsorção de azoto).

Informação analítica

O principal critério é que devem ser fornecidas todas as informações necessárias para

¹⁶ Apêndice relativo às nanofomas aplicável às Orientações sobre o registo e a identificação de substâncias, disponível em <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

confirmar a estrutura da substância. Deve ser fornecida a mesma informação analítica apresentada para as substâncias monoconstituintes (ver capítulo 4.2.1) ou para as substâncias multiconstituintes (ver capítulo 4.2.2).

4.3. Substâncias UVCB

As substâncias de composição desconhecida ou variável, produtos de reação complexos ou materiais biológicos^{17, 18, 19} também designadas como substâncias UVCB, não podem ser satisfatoriamente identificadas através da sua composição química, porque:

- O número de constituintes é relativamente grande e/ou
- a sua composição é, em grande medida, desconhecida e/ou
- a variabilidade da sua composição é relativamente grande ou pouco previsível.

Por conseguinte, as substâncias UVCB exigem outros tipos de informação para a sua identificação, além do que é conhecido quanto à sua composição química.

No Quadro 5 é possível observar que os identificadores principais dos diversos tipos de substâncias UVCB estão relacionados com a fonte da substância e o processo utilizado ou pertencem a um grupo de «outros identificadores principais» (por exemplo, «impressões digitais cromatográficas e outras»). O número e o tipo de identificadores indicados no Quadro 5 representam um exemplo da variabilidade dos tipos e não devem ser considerados numa perspetiva abrangente. Sempre que for conhecida a composição química de, por exemplo, um produto de reação complexo ou uma substância de fonte biológica, a substância deve ser identificada como substância monoconstituinte ou multiconstituinte, consoante o caso. A consequência da definição de uma substância como UVCB é que qualquer alteração significativa da fonte ou do processo conduzirá, provavelmente, a uma substância diferente que deverá ser registada novamente. Se uma mistura reacional for identificada como uma «substância multiconstituinte», a substância pode ser derivada a partir de uma fonte diferente e/ou de processos diferentes, desde que a composição da substância final se mantenha dentro do intervalo especificado. Assim, não será necessário um novo registo.

O capítulo 4.3.1 contém orientações genéricas sobre substâncias UVCB e o capítulo 4.3.2 sobre substâncias com variação nos comprimentos da cadeia de carbono, substâncias obtidas a partir de hidrocarbonetos ou fontes semelhantes a hidrocarbonetos e enzimas, tais como tipos de substâncias UCVB específicos.

4.3.1. Orientações gerais sobre substâncias UVCB

Este capítulo do guia de orientação fornece orientações genéricas sobre a utilização de determinados identificadores principais, além dos parâmetros de identificação da substância enumerados no anexo VI (ponto 2) do REACH, para identificação de substâncias UVCB.

¹⁷ Rasmussen K, Pettau D, Vollmer G et al. (1999) *Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances* (Compilação do inventário EINECS: descrições e definições utilizadas para substâncias UVCB). *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 (Registo do inventário da lei sobre o controlo das substâncias tóxicas para combinações de duas ou várias substâncias: produtos de reação complexos).

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 (Registo do inventário da lei sobre o controlo das substâncias tóxicas para substâncias químicas de composição variável, produtos de reação complexos e materiais biológicos: substâncias UVCB).

Informações sobre a composição química

As substâncias UVCB ou não podem ser especificadas exclusivamente com o nome IUPAC dos constituintes, uma vez que nem todos os constituintes podem ser identificados, ou podem ser especificadas genericamente, mas sem especificidade devido à variabilidade da composição exata. Devido à falta de diferenciação entre constituintes e impurezas, os termos «constituintes principais» e «impurezas» não devem ser entendidos como pertinentes para as substâncias UVCB.

No entanto, a composição química e a identidade dos constituintes devem ser indicadas, se forem conhecidas. A descrição da composição química pode frequentemente ser indicada de uma forma mais genérica, por exemplo, «ácidos gordos de cadeia linear C8-C16» ou «etoxilatos de álcool com álcoois C10-C14 e unidades etoxiladas 4-10». A título de informação complementar, podem ser fornecidas informações sobre a composição química com base em padrões ou amostras de referência bem conhecidos e, em muitos casos, podem também ser utilizados índices e códigos existentes. Outras informações genéricas sobre a composição podem incluir as designadas «impressões digitais», ou seja, por exemplo, imagens cromatográficas ou espectrais que mostram um padrão característico de distribuição de picos.

Para uma substância UVCB, todos os constituintes presentes em concentrações $\geq 10\%$ e todos os outros constituintes conhecidos presentes em concentrações $< 10\%$ devem ser especificados por um nome IUPAC em inglês, concentrações típicas e gamas de concentração.

Além disso, se disponível, deve indicar, para cada constituinte, um identificador numérico (número CAS e/ou número CE ou número de lista).

Os componentes que não possam ser identificados individualmente serão descritos em grupos com base na natureza química. Neste caso, deve especificar, para cada grupo, pelo menos um nome químico, a concentração típica e o intervalo de concentração. Além disso, se disponível, deve fornecer informações moleculares e estruturais.

Os constituintes que são relevantes para a classificação e/ou avaliação PBT²⁰ da substância devem sempre ser identificados pelos mesmos identificadores, independentemente da sua concentração.

Os constituintes desconhecidos que não contribuem para a classificação devem ser identificados, tanto quanto possível, por uma descrição genérica da sua natureza química. Os aditivos devem ser completamente especificados de uma forma semelhante à descrita para as substâncias bem definidas.

Principais parâmetros de identificação – denominação, fonte e processo

Uma vez que a composição química, por si só, não é suficiente para a identificação da substância, esta deve, em geral, ser identificada pela sua denominação, origem ou fonte e por uma descrição do processo de fabrico. Outras propriedades da substância podem também ser identificadores importantes, quer como identificadores genéricos pertinentes (por exemplo, ponto de fusão), quer como identificadores cruciais para grupos de substâncias específicos (por exemplo, atividade catalítica para as enzimas).

1. Convenção de denominação

Em geral, a denominação de uma substância UVCB é uma combinação de fonte e processo com o formato seguinte: primeiro a fonte e depois o(s) processo(s).

²⁰ Estão disponíveis mais informações sobre a avaliação PBT e sobre os critérios pertinentes no Guia de orientação sobre requisitos de informação e avaliação da segurança química, capítulo R11: avaliação PBT.

- Uma substância derivada de fontes biológicas é identificada pelo nome da espécie.
- Uma substância derivada de fontes não biológicas é identificada pelos materiais de base.
- Os processos são identificados pelo tipo de reação química, se estiver envolvida a síntese de novas moléculas, ou como um tipo de fase de transformação, por exemplo, extração, fracionamento, concentração ou como resíduo.

| Exemplos | |
|-----------|-----------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Nome CE |
| 296-358-2 | Extrato de alfazema, Lavandula hybrida, acetilado |
| 307-507-9 | Extrato de alfazema, Lavandula latifolia, sulfurizado, sal de paládio |

No caso de produtos de reação, foram utilizados formatos diferentes no Inventário CE, por exemplo,

- EINECS Material de base principal, produto(s) de reação de outro(s) material(is) de base
- ELINCS Produto(s) de reação do(s) material(is) de base

| Exemplos | |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Nome CE |
| 232-341-8 | Ácido nitroso, produtos de reação com hidrocloreto de 4-metil-1,3-benzenodiamina |
| 263-151-3 | Ácidos gordos, coco, produtos de reação com dietilenotriamina |
| 400-160-5 | Produtos de reação de ácidos gordos de tall-oil, dietanolamina e ácido bórico |
| 428-190-4 | Produto de reação de: 2,4-diamino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-il)etil]-1,3,5-triazina e ácido cianúrico |

No presente guia de orientação, o formato genérico da denominação dos produtos de reação é «Produtos de reação de [nomes dos materiais de base]». Em princípio, os nomes devem ser indicados na língua inglesa, de acordo com as regras de nomenclatura IUPAC. A título de informação complementar, podem ser indicadas outras designações reconhecidas internacionalmente. Recomenda-se que o termo «reação» na denominação seja substituído pelo tipo de reação específico descrito de uma forma genérica, por exemplo, esterificação ou formação de sal, etc. (ver orientações adiante nas quatro subclasses UVCB específicas).

2. Fonte

A fonte pode ser dividida em dois grupos:

2.1. Fontes de origem biológica

As substâncias de fonte biológica devem ser definidas pelo género, espécie e família, por

exemplo, *Pinus cembra*, sendo que *Pinaceae* significa *Pinus* (género), *cembra* (espécie), *Pinaceae* (família), e a estirpe ou tipo genético, se pertinente. Se for adequado, também podem ser indicados o tecido ou a parte do organismo utilizada para a extração da substância, por exemplo, medula óssea, pâncreas, ou caule, sementes ou raízes.

| Exemplos | |
|------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Nome CE |
| 283-294-5 | Extrato de <i>saccharomyces cerevisiae</i> Descrição CE Produtos de extração e seus derivados modificados fisicamente, tais como tinturas, concretos, absolutos, óleos essenciais, oleorresinas, terpenos, frações não-terpénicas, destilados, resíduos, etc., obtidos de <i>Saccharomyces cerevisiae</i> , <i>Saccharomycelaceae</i> . |
| 296-350-9 | Extrato de <i>Arnica mexicana</i> . Descrição CE Produtos de extração e seus derivados modificados fisicamente, tais como tinturas, concretos, absolutos, óleos essenciais, oleorresinas, terpenos, frações não-terpénicas, destilados, resíduos, etc., obtidos de <i>Arnica mexicana</i> , <i>Compositae</i> . |

2.2. Fontes químicas ou minerais

No caso de produtos de reação de reações químicas, os materiais de base devem ser descritos com o respetivo nome IUPAC na língua inglesa. As fontes minerais devem ser descritas em termos genéricos, por exemplo, minérios de fosfato, bauxite, caulino, gás mineral, carvão, turfa.

3. Processo

Os processos são identificados pelo tipo de reação química, se estiver envolvida a síntese de novas moléculas, ou como um tipo de fase de transformação, por exemplo, extração, fracionamento, concentração ou ainda como resíduo de refinação.

Para algumas substâncias, por exemplo, derivados químicos, o processo deve ser descrito como uma combinação de transformação e síntese.

3.1 Síntese

Ocorre uma determinada reação química ou bioquímica entre os materiais de base que dá origem à substância. Exemplos: reação de Grignard, sulfonação, separação enzimática por protease ou lipase, etc. Muitas reações de derivação pertencem também a este tipo.

No que respeita a substâncias sintetizadas recentemente, cuja composição química não pode ser fornecida, os materiais de base constituem o principal identificador, juntamente com uma especificação da reação, ou seja, o tipo de reação química. O tipo de reação química é um indicador do tipo de moléculas esperadas na substância. Existem vários tipos de reação química final: hidrólise, esterificação, alquilação, cloração, etc. Uma vez que esse indicador apenas fornece informações genéricas sobre as possíveis substâncias produzidas, será

também necessária, em muitos casos, uma impressão digital cromatográfica para obter a caracterização e identificação total da substância.

| Exemplos | |
|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Nome CE |
| 294-801-4 | Óleo de linhaça epoxidado, produtos de reação com tetraetilenopentamina |
| 401-530-9 | Produto de reação de (2-hidroxi-4-(3-propenoxi)benzofenona e trietoxisilano) com (produtos de hidrólise de sílica e metiltrimetoxisilano) |

3.2 Transformação

A transformação pode ser aplicada de diversas formas às substâncias de origem natural ou mineral, em que a identidade química dos constituintes não é alterada, mas é alterada a sua concentração, por exemplo, transformação a frio de tecido vegetal seguida de extração com um álcool.

A transformação pode ser mais definida em processos como a extração. A identificação da substância depende do tipo de processo:

- Para as substâncias derivadas por métodos físicos, por exemplo, transformação ou fracionamento, devem ser indicados os valores-limite do intervalo e do parâmetro da fração (por exemplo: tamanho molecular, comprimento da cadeia, ponto de ebulição, intervalo de volatilidade, etc.).
- Para as substâncias derivadas por concentração, por exemplo, produtos de processos metalúrgicos, precipitados isolados por centrifugação, resíduos de filtros, etc., a fase de concentração deve ser especificada juntamente com a composição genérica da substância resultante em comparação com o material de base.

| Exemplos | |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Nome CE |
| 408-250-6 | Composto de organotungstênio concentrado (produtos de reação de hexacloreto de tungstênio com 2-metilpropan-2-ol, nonilfenol e pentano-2,4-diona) |

- Para os resíduos de uma reação específica, por exemplo, escórias, alcatrões e frações pesadas (*heavy ends*), o processo deve ser descrito juntamente com a composição genérica da substância resultante.

| Exemplos | |
|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Nome CE |
| 283-659-9 | Resíduos de estanho fundidos Descrição CE Substância resultante do uso e produção de estanho e respetivas ligas primárias obtidas a partir de fontes primárias e secundárias e incluindo substâncias intermédias de materiais reciclados. Composto essencialmente por compostos de estanho, podendo conter outros metais |

| | |
|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | não ferrosos residuais e seus compostos. |
| 293-693-6 | <p>Farinha de soja extraída com proteínas. Resíduos</p> <p>Descrição CE</p> <p>Subproduto, contendo essencialmente hidratos de carbono, produzido através de extração etanólica de soja desengordurada.</p> |

- Para os extratos, devem ser indicados o método de extração, o solvente utilizado para a extração e outras condições pertinentes (por exemplo, temperatura/intervalo de temperaturas).
- Para processos combinados, deve ser especificada (de uma forma genérica) cada uma das fases dos processos em complemento da informação da fonte. Esta transformação combinada é particularmente importante no caso de derivações químicas.

Exemplos:

- Uma planta é inicialmente extraída, o extrato é destilado e a fração destilada do extrato vegetal é utilizada para derivação química. A substância resultante pode ser ainda purificada. O produto purificado pode ser bem definido pela sua composição química e não é necessário identificar a substância como UVCB. Caso o produto ainda deva ser considerado UVCB, a transformação combinada pode ser descrita como um derivado químico purificado de uma fração destilada de um extrato vegetal.
- Se a transformação posterior de um extrato incluir apenas derivação física, a composição será alterada, mas sem síntese prevista de novas moléculas. No entanto, a alteração da composição resulta numa substância diferente, por exemplo, um destilado ou precipitado de um extrato vegetal.
- A derivação química e o fracionamento são utilizados frequentemente em combinação para a produção de produtos petrolíferos. Por exemplo, a destilação de óleo seguida de *cracking* origina uma fração do material de base e também novas moléculas. Assim, nesse caso, os dois tipos de processos devem ser identificados ou o destilado deve ser especificado como material de base do processo de *cracking*. Esta regra aplica-se, em especial, aos derivados de petróleo que resultam frequentemente de uma combinação de processos. No entanto, pode ser utilizado um sistema de separação específico para a identificação de substâncias petrolíferas (ver capítulo 4.3.2.2).

Uma vez que um derivado químico de um extrato não conterá os mesmos constituintes que o extrato que lhe deu origem, este deve ser considerado uma substância diferente. Esta regra pode implicar que a identificação através da denominação e da descrição apresente um desvio em relação à denominação e descrição anteriores constantes do inventário EINECS. À data da criação do inventário EINECS, os extratos resultantes de processos diferentes e solventes diferentes, e mesmo os derivados físicos ou químicos, eram frequentemente abrangidos por uma única entrada. Contudo, no âmbito do REACH, essas substâncias devem ser objeto de registos separados.

4. Outros parâmetros de identificação da substância

Além da denominação química, da fonte e da especificação do processo, as substâncias UVCB devem incluir outras informações pertinentes, tal como estabelecido no anexo VI, ponto 2, do REACH.

No que respeita a tipos específicos de substâncias UVCB, podem ser pertinentes outros parâmetros de identificação. Exemplos de outros identificadores suplementares:

- descrição genérica da composição química;
- impressão digital cromatográfica ou outros tipos de impressão digital;
- material de referência (por exemplo, ISO);
- parâmetros físico-químicos (por exemplo, ponto de ebulição);
- número do índice de cor;
- número AISE.

São apresentadas adiante, para diversos tipos de fontes e processos, orientações específicas sobre as regras e os critérios e como utilizar a denominação, a fonte e a informação do processo para a identificação de substâncias UVCB. Nos parágrafos seguintes, são descritos quatro subtipos de substâncias UVCB como uma combinação de fontes e processos (síntese ou transformação) biológicos ou químicos/minerais.

Subtipo 1 de UVCB, em que a origem é biológica e o processo consiste numa síntese

As substâncias de natureza biológica podem ser modificadas por transformação (bio)química para produzir constituintes que não estavam presentes no material de base, por exemplo, produtos químicos de extratos vegetais ou produtos resultantes do tratamento enzimático dos extratos. Por exemplo, as proteínas podem ser hidrolisadas por protease para gerar oligopeptídeos ou a celulose da madeira pode ser carboxilada para produzir carboximetilcelulose (CMC).

Os produtos de fermentação também podem pertencer a este subtipo de substâncias UVCB. Por exemplo, a vinassa é um produto de fermentação de açúcar que, comparado com o açúcar, contém muitos constituintes diferentes. Quando os produtos de fermentação são mais purificados, as substâncias podem tornar-se totalmente identificáveis pela sua composição química e deixam de ser identificadas como substâncias UVCB.

As enzimas são um grupo de substâncias específico que podem ser derivadas por extração e posterior transformação a partir de uma fonte de origem biológica. Embora a fonte e o processo possam ser especificados pormenorizadamente, não é gerada informação específica sobre a enzima. Para essas substâncias, deve ser utilizado um sistema específico de classificação, denominação e identificação (ver capítulo 4.3.2.3).

Para a identificação da substância, deve ser indicada a fase final do processo e/ou qualquer outra fase do processo que seja relevante para essa identificação.

A descrição do processo químico deve ser uma descrição genérica do tipo de processo (esterificação, hidrólise alcalina, alquilação, cloração, substituição, etc.), juntamente com as circunstâncias pertinentes do processo.

A descrição do processo bioquímico pode ser uma descrição genérica da reação catalisada, juntamente com o nome da enzima que catalisa a reação.

Para substâncias produzidas por fermentação ou culturas (tecido) de espécies, devem ser indicadas as espécies da fermentação, o tipo e as condições gerais da fermentação (por lote ou contínua, aeróbia, anaeróbia, anóxica, temperatura, pH, etc.), juntamente com eventuais outras fases suplementares do processo aplicadas para isolar os produtos da fermentação, por exemplo, centrifugação, precipitação, extração, etc. Se estas substâncias forem posteriormente transformadas, este processo pode dar origem a uma fração, a um concentrado ou a um resíduo. Essas substâncias tratadas posteriormente são identificadas com especificações suplementares das fases adicionais do processo.

Subtipo 2 de UVCB, em que a fonte é química ou mineral e o processo consiste numa síntese

As substâncias UVCB obtidas a partir de fontes minerais ou químicas, derivadas através de

um processo no qual são sintetizadas novas moléculas, são «produtos de reação». Os produtos de esterificação, alquilação ou cloração são exemplos de produtos de reação química. As reações bioquímicas por aplicação de enzimas isoladas são tipos especiais de reações químicas. No entanto, se for aplicado um processo bioquímico de síntese complexo utilizando microrganismos completos, é preferível considerar a substância resultante como um produto de fermentação e identificá-la pelo processo de fermentação e pelas espécies da fermentação do que pelos materiais de base (ver subtipo 4 de UVCB).

Nem todos os produtos de reação devem ser automaticamente especificados como UVCB. Se um produto de reação puder ser suficientemente definido pela composição química (incluindo alguma variabilidade), é preferível identificá-lo como uma substância multiconstituinte (ver capítulo 4.2.2). A substância apenas deve ser identificada como substância UVCB («produto de reação») quando a composição do produto de reação é insuficientemente conhecida ou pouco previsível. A identificação de um produto de reação é baseada nos materiais de base da reação e no processo de reação (bio)química no qual a substância é gerada.

| Exemplos | | |
|-----------|-----------------------------------------------------------------------|------------|
| Número CE | Nome EINECS | Número CAS |
| 294-006-2 | Ácido nonanodióico, produtos de reação com 2-amino-2-metil-1-propanol | 91672-02-5 |
| 294-148-5 | Formaldeído, produtos de reação com dietilenoglicol e fenol | 91673-32-4 |

Um dos principais identificadores dos produtos de reação é a descrição do processo de fabrico. Para a identificação da substância, deve ser indicada a fase final do processo ou a fase mais relevante. A descrição do processo químico deve ser uma descrição genérica do tipo de processo (por exemplo, esterificação, hidrólise alcalina, alquilação, cloração, substituição, etc.), juntamente com circunstâncias pertinentes do processo. Os processos bioquímicos devem ser descritos pelo tipo de reação, juntamente com o nome da enzima que catalisa a reação.

Subtipo 3 de UVCB, em que a origem é biológica e o processo consiste numa transformação

As substâncias UVCB de origem biológica, resultantes de um processo de transformação no qual não são geradas intencionalmente novas moléculas, podem ser, por exemplo, extratos, frações de um extrato, concentrados de um extrato ou resíduos de processos ou extratos purificados de substâncias de origem biológica.

Logo que um extrato é objeto de tratamento posterior, a substância deixa de ser idêntica ao extrato, sendo agora uma substância que pertence a outro tipo de UVCB, por exemplo, uma fração ou um resíduo de um extrato. Estas substâncias devem ser especificadas com parâmetros de tratamento (posterior) suplementares. Se o extrato for modificado em reações químicas ou bioquímicas que produzem novas moléculas (derivados), a identificação da substância é abrangida de acordo com as orientações relativas ao subtipo 2 de UVCB ou o capítulo 4.2 para uma substância bem definida.

Esta diferenciação de extratos tratados posteriormente pode ter como consequência que o novo nome e descrição sejam diferentes dos constantes no inventário EINECS. À data da criação do inventário, essa diferenciação não existia e todos os tipos de extratos com solventes diferentes e fases de processo posteriores podiam estar abrangidos por uma única entrada.

O primeiro identificador principal para este subtipo de substância UVCB é a família, o género e a espécie do organismo que deu origem à substância. Se necessário, também podem ser indicados o tecido ou a parte do organismo utilizados para a extração da substância, por exemplo, medula óssea, pâncreas, ou caule, sementes ou raízes. Para substâncias de origem microbiológica, devem ser definidos a estirpe e o tipo genético da espécie.

Se a substância UVCB for derivada de uma espécie diferente, será considerada uma substância diferente, mesmo que a composição química seja idêntica.

| Exemplos | |
|------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Nome EINECS |
| 290-977-1 | Extrato de pau-campeche oxidado (Haematoxylon campechianum) Descrição CE Esta substância é identificada no <i>Colour Index</i> (Índice de cor) pelo <i>Colour Index Constitution Number</i> (Número de Constituição do Índice de Cor), C.I.75290. |
| 282-014-9 | Extratos pancreáticos desproteínados |

O segundo identificador principal é o tratamento da substância, por exemplo, o processo de extração, o processo de fracionamento, purificação ou concentração ou o processo que influencia a composição do resíduo. Assim, as transformações de extratos efetuadas através de processos diferentes, por exemplo, utilizando solventes diferentes ou fases de purificação diferentes, resultarão em substâncias diferentes.

Quanto maior for o número de fases aplicado na transformação, mais viável será a definição da substância através da sua composição química. Nesse caso, espécies de fontes diferentes ou modificações por processos diferentes não originam automaticamente substâncias diferentes.

Um dos principais parâmetros de identificação para as substâncias de origem biológica é a descrição dos processos pertinentes. No caso dos extratos, o processo de extração deve ser descrito com o grau de pormenor pertinente para a identidade da substância. No mínimo, deve ser especificado o solvente utilizado.

Quando são utilizadas fases de tratamento suplementares para o fabrico da substância, como fracionamento ou concentração, deve ser descrita a combinação das fases de tratamento pertinentes, por exemplo, a combinação de extração e fracionamento, incluindo os intervalos-limite.

Subtipo 4 de UVCB, em que a origem é química ou mineral e o processo consiste numa transformação

As substâncias de origem não biológica, ou seja, que são ou têm origem em minerais, minérios, carvão, gás natural e petróleo bruto, ou outras matérias-primas para a indústria química, e resultam de tratamento sem reações químicas intencionais, podem ser frações, concentrados ou resíduos (purificados) desses processos.

O carvão e o petróleo bruto são utilizados em processos de destilação ou gaseificação para produzir uma ampla variedade de substâncias, por exemplo, substâncias petrolíferas, gases combustíveis, etc., e ainda resíduos como alcatrões e escórias. Com frequência, um produto destilado ou fracionado de modo diferente é sujeito de imediato a nova transformação,

incluindo reações químicas. Nesses casos, a identificação da substância deve seguir as orientações fornecidas para o subtipo 2 de substâncias UVCB, uma vez que o processo é mais pertinente do que a fonte.

Para as substâncias petrolíferas, é utilizado um sistema de identificação especial (ver capítulo 4.3.2.2). As substâncias abrangidas por esse sistema incluem frações e produtos de reação química.

Outros exemplos de substâncias UVCB do subtipo 4 são os minérios, os concentrados de minérios e as escórias que contêm várias quantidades de metais que podem ser extraídos por meio de transformação metalúrgica.

Minerais como a bentonite ou o carbonato de cálcio podem ser transformados, por exemplo, por dissolução em ácido e/ou precipitação química ou em colunas de permuta de íons. Quando a composição química está totalmente definida, os minerais devem ser identificados de acordo com as orientações da parte pertinente do capítulo 4.2. Se os minerais forem transformados apenas através de métodos mecânicos, por exemplo, trituração, crivagem, centrifugação, flotação, etc., ainda são considerados idênticos aos minerais tal como foram extraídos. Os minerais que são produzidos através de um processo de fabrico podem – para efeitos de identificação²¹ – ser considerados idênticos aos minerais equivalentes que ocorrem na natureza desde que a composição e o perfil de toxicidade sejam idênticos.

Um dos principais parâmetros de identificação para substâncias de origem não biológica é a descrição da(s) fase(s) do processo relevante(s).

Para as frações, o processo de fracionamento deve ser descrito com os parâmetros e o intervalo-limite para a fração isolada, juntamente com uma descrição das fases de transformação anteriores, quando relevante.

Para a fase de concentração, devem ser indicados o tipo de processo, ou seja, evaporação, precipitação, etc., e a relação entre a concentração inicial e a concentração final dos principais constituintes, bem como informações sobre a(s) fase(s) de transformação anterior(es).

Um dos principais parâmetros de identificação para os resíduos de origem não biológica é a descrição do processo do qual resultou o resíduo. O processo pode ser qualquer reação física que produza resíduos, por exemplo, purificação, fracionamento, concentração, etc.

Informação analítica

As substâncias UVCB incluem tipos muito diversos de substâncias, diferentes em parâmetros como a fonte e o processo de fabrico. Por conseguinte, devem ser apresentados métodos analíticos adequados para o fornecimento de informações sobre a composição da substância UVCB, os quais dependem do caso. Além disso, os conhecimentos sobre a forma de utilizar esses métodos estão sujeitos a desenvolvimentos e melhorias contínuos. Por conseguinte, é da responsabilidade do registante apresentar dados analíticos adequados, a fim de fornecer as melhores informações possíveis para permitir a identificação da substância.

Podem ser utilizados vários métodos qualitativos para caracterizar as substâncias UVCB; exemplos incluem UV/Vis, infravermelhos e espectrometria de massa, ressonância magnética nuclear, difração de raios X.

Devem ser fornecidos dados quantitativos, tais como cromatogramas ou dados de difração, que possam ser utilizados como impressões digitais para caracterizar a composição da substância.

A descrição dos métodos analíticos deve incluir os protocolos experimentais seguidos e a

²¹ A mesma abordagem para a identificação de minerais que ocorrem na natureza e minerais produzidos quimicamente não significa necessariamente que os requisitos legais (por exemplo, isenções de registo) sejam os mesmos.

interpretação dos resultados comunicados.

4.3.2. Tipos específicos de substâncias UVCB

A presente secção fornece orientações sobre grupos específicos de substâncias UVCB: substâncias com variação no comprimento da cadeia de carbono (4.3.2.1), substâncias obtidas a partir de hidrocarbonetos ou fontes semelhantes a hidrocarbonetos (4.3.2.2) e enzimas (4.3.2.3).

4.3.2.1 Substâncias com variação nos comprimentos da cadeia de carbono

Este grupo de substâncias UVCB abrange as substâncias alquílicas com cadeias longas e com variação no comprimento da cadeia de carbono, por exemplo, parafinas e olefinas. Estas substâncias ou são derivadas de óleos ou gorduras naturais ou são produzidas sinteticamente. As gorduras naturais têm origem vegetal ou animal. As substâncias com cadeias de carbono longas derivadas de plantas têm normalmente apenas comprimentos da cadeia pares, enquanto as substâncias com cadeias de carbono longas obtidas a partir de fontes animais contêm também (alguns) comprimentos de cadeia ímpares. As substâncias com cadeias de carbono longas produzidas sinteticamente podem incluir toda a gama de cadeias de carbono, pares e ímpares.

Identificadores e convenção de denominação

O grupo compreende as substâncias cujos constituintes individuais têm uma característica estrutural comum: um ou vários grupos alquílicos com cadeia longa frequentemente com um grupo funcional acoplado. Os constituintes diferem entre si no que respeita a uma ou várias das seguintes características do grupo de cadeia alquílica:

- Comprimento da cadeia de carbono (número de carbonos)
- Saturação
- Estrutura (linear ou ramificada)
- Posição do grupo funcional

A identidade química dos constituintes pode ser suficientemente descrita e denominada de forma sistemática através da utilização dos três descritores seguintes:

- O **descritor de alquilo**, que descreve o número de átomos de carbono existente no(s) comprimento(s) da cadeia de carbono do(s) grupo(s) alquílico(s).
- O **descritor de funcionalidade**, que identifica o grupo funcional da substância, por exemplo, amina, amónio, ácido carboxílico.
- O **descritor de sal**, o catião/anião de qualquer sal, por exemplo, sódio (Na⁺), carbonato (CO₃²⁻), cloreto (Cl⁻).

Descritor de alquilo

- Em geral, o descritor de alquilo C_{x-y} refere-se a cadeias alquílicas lineares saturadas que compreendem todos os comprimentos de cadeia entre x e y, p. ex., C₈₋₁₂ corresponde a C₈, C₉, C₁₀, C₁₁ e C₁₂.
- Tem de ser indicado, mesmo que o descritor de alquilo se refira apenas a cadeias alquílicas pares ou ímpares, p. ex., C_{8-12 (par)}.
- Tem de ser indicado se o descritor de alquilo se referir (também) a cadeias alquílicas ramificadas, p. ex., C_{8-12 (ramificada)} ou C_{8-12 (linear e ramificada)}.
- Tem de ser indicado se o descritor de alquilo se referir (também) a cadeias

- alquílicas insaturadas, p. ex., C₁₂₋₂₂ (C₁₈ insaturada).
- Uma distribuição estreita de comprimentos de cadeias alquílicas não abrange uma mais ampla e vice-versa, p. ex., C₁₀₋₁₄ não corresponde a C₈₋₁₈.
- O descritor de alquilo também pode referir-se à fonte das cadeias alquílicas, por exemplo, coco ou sebo. No entanto, a distribuição do comprimento da cadeia de carbono tem de coincidir com a da fonte.

O sistema descrito supra deve ser utilizado para descrever substâncias com variação nos comprimentos da cadeia de carbono. Não é adequado para substâncias bem definidas, que podem ser identificadas através de uma estrutura química precisa.

As informações sobre o descritor de alquilo, o descritor de funcionalidade e o descritor de sal são a base para a denominação deste tipo de substâncias UVCB. Além disso, as informações sobre a fonte e o processo podem ser úteis para identificar a substância de forma mais precisa.

| Exemplos | | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| Descritores | Denominação | |
| Descritor de alquilo Descritor de funcionalidade Descritor de sal | comprimentos da cadeia de alquilo C ₁₀₋₁₈ ácidos gordos (ácido carboxílico) sais de cádmio | ácidos gordos (C ₁₀₋₁₈) sais de cádmio |
| Descritor de alquilo Descritor de funcionalidade Descritor de sal | di-C ₁₀₋₁₈ -alquilo-dimetilamónio cloreto | cloreto de di-C ₁₀₋₁₈ -alquilo-dimetilamónio |
| Descritor de alquilo Descritor de funcionalidade Descritor de sal | trimetil-alquilo de sebo amónio cloreto | cloreto de trimetil-alquilo de sebo-amónio |

4.3.2.2 Substâncias obtidas a partir de hidrocarbonetos ou fontes semelhantes a hidrocarbonetos

As substâncias obtidas a partir de hidrocarbonetos (substâncias petrolíferas) ou de fontes semelhantes a hidrocarbonetos (por exemplo, carvão) são substâncias de composição muito complexa e variável ou parcialmente indefinida. No presente capítulo, são utilizadas substâncias petrolíferas para demonstrar como identificar este tipo específico de substâncias UVCB. No entanto, pode aplicar-se a mesma abordagem a outras substâncias obtidas a partir de fontes semelhantes a hidrocarbonetos, como o carvão.

Os materiais de base utilizados na indústria de transformação do petróleo podem ser petróleo bruto ou qualquer fração específica de transformação obtida através de um ou vários processos. A composição dos produtos finais depende do petróleo bruto utilizado no fabrico (uma vez que a composição do petróleo bruto varia em função do local de origem) e dos subsequentes processos de transformação. Por conseguinte, existe uma variação natural e independente dos processos na composição das substâncias petrolíferas¹⁷.

1. Convenção de denominação

Para a identificação de substâncias petrolíferas, recomenda-se que a denominação seja efetuada em conformidade com um sistema de nomenclatura estabelecido²². Esta denominação é constituída normalmente pelo processo de transformação, pela origem da fração e pela composição ou características gerais. Se a substância contiver mais de 5 % em peso de hidrocarbonetos aromáticos polinucleares com 4 a 6 membros, esta informação deve ser incluída na descrição. Para as substâncias petrolíferas com um número EINECS, deve ser utilizada a denominação indicada no Inventário CE.

2. Identificadores

Os termos e as definições para a identificação de substâncias petrolíferas incluem normalmente a fonte da fração, o processo de transformação, a composição geral, o número de átomos de carbono, o intervalo de ebulição ou outras características físicas adequadas e o tipo de hidrocarboneto predominante²².

Devem ser indicados os parâmetros de identificação enumerados no anexo VI, ponto 2, do REACH. É sabido que as substâncias petrolíferas são fabricadas de acordo com especificações de desempenho em vez de especificações sobre a composição. Por conseguinte, características como a denominação, o intervalo de comprimento das cadeias de carbono, ponto de ebulição, viscosidade, valores-limite e outras propriedades físicas são normalmente mais úteis do que a informação sobre a composição, para identificar a substância petrolífera o mais claramente possível.

Embora a composição química não seja o principal identificador para as substâncias UVCB, todos os constituintes a uma concentração $\geq 10\%$ e os constituintes conhecidos a uma concentração $< 10\%$ devem ser indicados e a composição deve ser descrita em termos genéricos, por exemplo, intervalo de massas moleculares, alifática ou aromática, grau de hidrogenação e outras informações essenciais. Os grupos de constituintes que não podem ser identificados individualmente devem também ser descritos pelos mesmos parâmetros. Devem ainda ser identificados através da denominação e da concentração típica todos os outros constituintes presentes numa concentração inferior que tenham impacto na classificação de perigo.

4.3.2.3 Enzimas

As enzimas são normalmente produzidas por fermentação de microrganismos, mas ocasionalmente têm origem vegetal ou animal. O concentrado líquido de enzimas resultante das fases de fermentação ou extração e subsequente purificação contém, além de água, a proteína enzimática ativa e outros constituintes que contêm resíduos da fermentação, ou seja, proteínas, peptídeos, aminoácidos, hidratos de carbono, lípidos e sais inorgânicos.

A proteína enzimática, juntamente com os outros constituintes derivados do processo de fermentação ou extração, mas excluindo a água, que possam ser separados sem afetar a estabilidade da proteína enzimática ou alterar a sua composição, deve ser considerada a substância para efeitos de identificação.

A substância enzimática contém normalmente 10-80 % (m/m) da proteína enzimática. Os restantes constituintes variam em percentagem e dependem do organismo de produção utilizado, do meio de fermentação e dos parâmetros operacionais do processo de

²² US EPA (1978) TSCA PL 94-469 *Candidate list of chemicals substances Addendum I. Generic terms covering petroleum refinery process streams* (Lista de substâncias químicas candidatas – Adenda I. Termos genéricos sobre frações do processo de transformação de produtos petrolíferos). US EPA, Office of Toxic Substances, Washington DC 20460.

fermentação, bem como da purificação posterior aplicada, mas a concentração encontrar-se-á normalmente dentro dos intervalos indicados no quadro seguinte.

| | |
|--------------------------------------------|---------|
| Proteína enzimática ativa | 10–80 % |
| Outras proteínas + peptídeos e aminoácidos | 5–55 % |
| Hidratos de carbono | 3–40 % |
| Lípidos | 0–5 % |
| Sais inorgânicos | 1–45 % |
| Total | 100 % |

A substância enzimática deve ser considerada uma «substância UVCB» devido à sua variabilidade e composição parcialmente desconhecida. A proteína enzimática deve ser considerada um constituinte da substância UVCB. As enzimas com um grau de pureza elevado podem ser identificadas como substâncias de composição bem definida (monoconstituintes ou multiconstituintes) e devem ser identificadas em conformidade.

No sistema EINECS, o principal identificador das enzimas é a atividade catalítica. As enzimas são enumeradas como entradas genéricas sem outras especificações ou com entradas específicas que indicam o organismo de origem ou o substrato.

| Exemplos | | |
|------------------|----------------------------------|-------------------|
| Número CE | Nome EINECS | Número CAS |
| 278-547-1 | Proteínase, neutra em bacilos | 76774-43-1 |
| 278-588-5 | Proteínase, neutra em aspergilos | 77000-13-6 |
| 254-453-6 | Elastase (pâncreas de porco) | 39445-21-1 |
| 262-402-4 | Mananase | 60748-69-8 |

Um estudo sobre enzimas encomendado pela Comissão Europeia sugere que as enzimas devem ser identificadas de acordo com o sistema internacional para a nomenclatura das enzimas, IUBMB (União Internacional de Bioquímica e Biologia Molecular).²³ Esta abordagem é adotada no presente guia de orientação e permitirá uma identificação mais sistemática, pormenorizada e abrangente das enzimas, em comparação com o sistema EINECS.

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* (Recolha de Informações sobre Enzimas. Relatório final. Cooperação entre a Agência Federal do Ambiente austríaca e o Centro de Investigação Interuniversitário para Tecnologia, Trabalho e Cultura (IFF/IFZ) Contrato N.º BB4-3040/2000/278245/MAR/E2).

1. Convenção de denominação

As enzimas são denominadas de acordo com as convenções de nomenclatura da IUBMB.

O sistema de classificação da IUBMB atribui um número único de quatro dígitos a cada tipo de enzima e função catalítica (p. ex., 3.2.1.1 para a α -amilase)²⁴. Cada número pode englobar enzimas de origem e sequência de aminoácidos variável, mas a funcionalidade da enzima é idêntica. A denominação e o número da nomenclatura IUBMB devem ser utilizados para a identificação da substância. A nomenclatura IUBMB classifica as enzimas em seis grupos principais:

- 1. Oxidoredutases
- 2. Transferases
- 3. Hidrolases
- 4. Liasas
- 5. Isomerases
- 6. Ligases

O exemplo apresentado a seguir ilustra uma entrada em conformidade com a nomenclatura IUBMB:

CE 3.4.22.33

Denominação aceite: bromelaína de fruta

Reação: hidrólise de proteínas com ampla especificidade para ligações peptídicas. O Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec é um bom substrato sintético, mas não existe qualquer ação sobre o Z-Arg-Arg-NHMec (cf. caule de bromelaína)

Outras denominações: sumo de bromelaína; ananase; bromelase; bromelina; extranase; sumo de bromelaína; pinase; enzima do ananás; traumanase; sumo de bromelaína FA2

Observações: Provém do ananás, *Ananas comosus*. Muito pouco inibida por cistatina de carne de galinha. Outra endopeptidase cisteína, com ação idêntica sobre substratos de pequenas moléculas, a pinguinaína (anteriormente CE 3.4.99.18), é obtida a partir da planta relacionada, *Bromelia pinguin*, mas a pinguinaína difere do fruto de bromelaína ao ser inibida pela cistatina de carne de galinha [4].²⁵ Em família de peptidases C1²⁶ (família da papaína). Anteriormente CE 3.4.22.5 e incluída no número CE 3.4.22.4, número de registo CAS: 9001-00-7

Ligações para outras bases de dados:

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

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

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

²⁴ As expressões «número CE» (\equiv número da Comissão de Enzimas) e «número IUBMB» são frequentemente utilizadas como sinónimos. A fim de evitar interpretações incorretas, recomenda-se a utilização da expressão «número IUBMB» para o código de quatro dígitos da IUBMB.

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

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

Referências gerais:

Sasaki, M., Kato, T. e 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. (Tokyo)* 98 (1985) 219-228. [PMID: 4044551]

Exemplos para classificação enzimática nos termos do sistema IUBMB

(<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>)

As proteases são numeradas de acordo com os seguintes critérios:

| | |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 3. | Hidrolases |
| 3.4 | Atuando em ligações peptídicas (peptidases), com subclasses: |
| 3.4.1 | Hidrolases α -Amino-Acil-Peptidicas (agora no número CE 3.4.11) |
| 3.4.2 | Hidrolases Peptidil-Amino-Ácidas (agora no número CE 3.4.17) |
| 3.4.3 | Hidrolases Dipeptídicas (agora no número CE 3.4.13) |
| 3.4.4 | Hidrolases Peptidil Peptídicas (agora reclassificadas no número CE 3.4) |
| 3.4.11 | Aminopeptidases |
| 3.4.12 | Hidrolases Peptidilamino-Ácidas ou Hidrolases Acilamino-Ácidas (agora reclassificadas no número 3.4) |
| 3.4.13 | Dipeptidases |
| 3.4.14 | Dipeptidil-peptidases e tripeptidil-peptidases |
| 3.4.15 | Peptidil-dipeptidases |
| 3.4.16 | Carboxipeptidases do tipo da serina |
| 3.4.17 | Metalocarboxipeptidases |
| 3.4.18 | Carboxipeptidases do tipo da cisteína |
| 3.4.19 | peptidases ómega |
| 3.4.21 | Endopeptidases serina |
| | São ainda identificadas 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 | fator de coagulação Xa |
| 3.4.21.7 | plasmina |
| 3.4.21.8 | agora abrangida pelos números CE 3.4.21.34 e CE 3.4.21.35 |
| 3.4.21.9 | enteropeptídase |
| 3.4.21.10 | acrosina |
| 3.4.21.11 | agora abrangida pelos números CE 3.4.21.36 e CE 3.4.21.37 |
| 3.4.21.12 | Endopeptídase 12 a-Lítica |
| ... | |
| 3.4.21.105 | |
| 3.4.99 | Endopeptidases de mecanismo catalítico desconhecido |

Exemplos de EINECS com número IUBMB adicionado

| Número CE | Nome EINECS | Número CAS | Número IUBMB |
|------------------|-------------------------------|-------------------|---------------------|
| 278-547-1 | Proteínase, neutra em bacilos | 76774-43-1 | 3.4.24.28 |
| 232-752-2 | Subtilisina | 9014-01-1 | 3.4.21.62 |
| 232-734-4 | Celulase | 9012-54-8 | 3.2.1.4 |

2. Identificadores

As substâncias enzimáticas são identificadas pela proteína enzimática que contêm (nomenclatura IUBMB) e pelos outros constituintes provenientes da fermentação. Além da proteína enzimática, os constituintes específicos não estão normalmente presentes em concentrações superiores a 1 %. Se as identidades destes constituintes específicos não forem conhecidas, estes podem ser classificados por agrupamento (ou seja, proteínas, peptídeos, aminoácidos, hidratos de carbono, lípidos e sais inorgânicos). No entanto, os constituintes individuais têm de ser indicados se as suas identidades forem conhecidas ou se a sua concentração for igual ou superior a 10 % ou se forem relevantes para a classificação e

rotulagem e/ou a avaliação PBT²⁷.

Proteínas enzimáticas

As proteínas enzimáticas presentes nos concentrados devem ser identificadas através de:

- Número IUBMB
- Nomes atribuídos pela IUBMB (nome sistémico, nomes das enzimas, sinónimos)
- Comentários da IUBMB
- Reação e tipo de reação
- Número CE e nome CE, se adequado
- Número CAS e nome CAS (caso existam)

A reação induzida pela enzima deve ser especificada. Esta reação é definida pela IUBMB.

Exemplo

.alfa.-amilase: Polissacarídeo contendo unidades de glucose .alfa.-(1-4)-ligadas + H₂O = malto-oligossacarídeos; endo-hidrólise de ligações de 1,4-alfa.-d-glucosídicas em polissacarídeos contendo três ou mais unidades de d-glucose 1,4-.alpha.-ligadas.

Deve ser atribuído um tipo de reação em função da classe da enzima. Pode ser um nome de oxidação, redução, eliminação, adição ou reação.

Exemplo

.alfa.-amilase: Hidrólise da ligação o-glicosil (endo-hidrólise).

Constituintes que não são proteínas enzimáticas

Todos os constituintes presentes numa concentração igual ou superior a 10 % (m/m) ou relevantes para a classificação e rotulagem e/ou a avaliação PBT²⁸ devem ser identificados. A identidade dos constituintes presentes numa concentração inferior a 10 % pode ser indicada sob a forma de um grupo químico. Os respetivos intervalos de concentração ou as concentrações típicas têm de ser indicados, ou seja:

- (Glico)Proteínas
- Peptídeos e aminoácidos
- Hidratos de carbono
- Lípidos
- Material inorgânico (por exemplo, cloreto de sódio ou outros sais inorgânicos)

Caso a identificação suficiente dos restantes constituintes de um concentrado enzimático não seja viável, deve ser indicado o nome do organismo de produção (género e estirpe ou tipo genético, se for relevante), tal como para as outras substâncias UVCB de origem biológica.

²⁷ Estão disponíveis mais informações sobre a avaliação PBT e sobre os critérios pertinentes no *Guia de orientação sobre requisitos de informação e avaliação da segurança química, capítulo R11: avaliação PBT*.

²⁸ Estão disponíveis mais informações sobre avaliação PBT e sobre os limites de concentração relevantes no RIP 3.2 (Projetos de implementação do REACH), documento de orientação técnica sobre avaliação da segurança química, secção relativa à avaliação PBT

Se existirem, podem ser fornecidos parâmetros suplementares, por exemplo, parâmetros funcionais (ou seja, pH ou temperatura ideal e intervalos), parâmetros cinéticos (ou seja, atividade específica ou número de moléculas convertidas por centro ativo [*turnover number*]), ligandos, substratos e produtos e cofatores.

5. Critérios para verificar se determinadas substâncias são idênticas

Ao verificar se as substâncias de diferentes fabricantes/importadores podem ou não ser consideradas idênticas, devem ser observadas algumas regras. As regras que foram aplicadas para a criação do inventário EINECS devem ser consideradas como uma base comum para identificar e denominar uma substância e, desse modo, encontrar um potencial correlistante dessa substância específica^{5, 6, 16, 29, 30}. As substâncias que não são consideradas idênticas podem, no entanto, ser consideradas estruturalmente relacionadas, com base num julgamento de peritos. A partilha de dados pode, contudo, ser possível para essa substância se for justificada do ponto de vista científico. Contudo, este aspeto não é um tema do presente guia de orientação e é tratado nas *Orientações sobre partilha de dados*.

- Deve ser aplicada a regra «≥ 80 %» às substâncias monoconstituintes, bem como a definição de substâncias multiconstituintes.

Não é estabelecida qualquer diferenciação entre os graus técnico, puro ou analítico das substâncias. Tal significa que a «mesma» substância pode ter um perfil pureza/impureza diferente, dependendo do grau que apresente. No entanto, as substâncias bem definidas devem conter o mesmo ou os mesmos constituintes principais e as únicas impurezas permitidas são as que são derivadas do processo de produção (para mais informações, ver o capítulo 4.2) e os aditivos que são necessários para estabilizar a substância.

- As formas hidratadas e anidras dos compostos devem ser consideradas a mesma substância para efeitos de registo.

| Exemplos | | | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| Denominação e fórmula | Número CAS | Número CE | Regra |
| Sulfato de cobre (Cu · H ₂ O ₄ S) | 7758-98-7 | 231-847-6 | |
| Sal (1:1) de cobre(2+) pentahidratado de ácido sulfúrico (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O) | 7758-99-8 | | Esta substância está abrangida por um registo da sua forma anidrosa (número CE: 231-847-6) |

As formas hidratadas e anidras têm denominações químicas e números CAS diferentes.

- Os ácidos ou bases e os respetivos sais devem ser considerados substâncias diferentes.

²⁹ Vollmer et al. (1999) *Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures* (Compilação do EINECS: descrições e definições utilizadas para substâncias, impurezas e misturas). *Tox Env Chem Vol.* 65, p. 113-122.

³⁰ *Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS* (Manual de decisões, critérios para comunicação de substâncias ao EINECS), sítio Web do Gabinete Europeu de Produtos Químicos; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999.

| Exemplos | | |
|-----------|-----------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 201-186-8 | Ácido peracético $C_2H_4O_3$ | Esta substância não deve ser considerada idêntica, por exemplo, ao seu sal de sódio (EINECS 220-624-9) |
| 220-624-9 | Glicolato de sódio $C_2H_4O_3 \cdot Na$ | Esta substância não deve ser considerada idêntica ao seu ácido correspondente (EINECS 201-186-8) |
| 202-426-4 | 2-Cloroanilina C_6H_6ClN | Esta substância não deve ser considerada idêntica, por exemplo, ao hidrobrometo de 2-cloroanilina (1:1) ($C_6H_6ClN \cdot HBr$) |

- Os sais únicos (por exemplo, sódio ou potássio) devem ser considerados substâncias diferentes.

| Exemplos | | |
|-----------|------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 208-534-8 | Benzoato de sódio $C_7H_5O_2 \cdot Na$ | Esta substância não deve ser considerada idêntica, por exemplo, ao sal de potássio (EINECS 209-481-3) |
| 209-481-3 | Benzoato de potássio $C_7H_5O_2 \cdot K$ | Esta substância não deve ser considerada idêntica, por exemplo, ao sal de sódio (EINECS 208-534-8) |

- As cadeias alquílicas ramificadas ou lineares devem ser consideradas substâncias diferentes.

| Exemplos | | |
|-----------|-----------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 295-083-5 | Éster dipentílico de ácido fosfórico, ramificado e linear | Esta substância não deve ser considerada idêntica às substâncias individuais ácido fosfórico, éster dipentílico, ramificado ou ácido fosfórico, éster dipentílico, linear |

- Os grupos ramificados devem ser mencionados dessa forma na denominação. As substâncias que contêm grupos alquílicos sem quaisquer informações complementares abrangem apenas as cadeias lineares não ramificadas, salvo especificação em contrário.

| Exemplos | | |
|------------------|-----------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 306-791-1 | Ácidos gordos, C12-16 | Apenas as substâncias com grupos alquílicos lineares e não ramificados são consideradas idênticas |
| 279-420-3 | Álcoois, C12-14 | |
| 288-454-8 | Aminas, C12-18-alquilometil | |

- As substâncias com grupos alquílicos que utilizam termos adicionais como iso, neo, ramificado, etc., não devem ser consideradas idênticas às substâncias que não têm essa especificação.

| Exemplos | | |
|------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 266-944-2 | Glicerídeos, C ₁₂₋₁₈ Esta substância é identificada pela denominação SDA: C12-C18 <i>trialkyl glyceride</i> e pelo número SDA: 16-001-00 | Esta substância não deve ser considerada idêntica à substância C ₁₂₋₁₈ -iso com cadeias alquílicas saturadas que está ramificada em qualquer posição |

- Sem especificação explícita, as cadeias alquílicas em ácidos, álcoois, etc., devem ser consideradas como representando apenas as cadeias saturadas. As cadeias não saturadas devem ser especificadas estremes e são consideradas substâncias diferentes.

| Exemplos | | |
|------------------|----------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 200-313-4 | Ácido esteárico puro C18H36O2 | Esta substância não deve ser considerada idêntica ao ácido oleico puro, C18H34O2 (EINECS 204-007-1) |

- Substâncias com centros quirais

As substâncias com um estereocentro podem existir em formas para a esquerda e para a direita (enantiômeros). Na ausência de qualquer indicação em contrário, pressupõe-se que a substância é uma mistura igual (racêmica) das duas formas.

| Exemplos | | |
|-----------|---------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 201-154-3 | 2-cloropropan-1-ol; | Os enantiómeros individuais (R)-2-cloropropan-1-ol e (S)-2-cloropropan-1-ol não são considerados iguais a esta entrada |

As substâncias racêmicas são consideradas substâncias multiconstituintes. Se uma substância tiver sido enriquecida com uma única forma enantiomérica, aplicam-se as regras para substâncias mono ou multiconstituintes, ou seja, dependendo das gamas de concentração dos isómeros, a substância é uma substância mono ou multiconstituinte.

As substâncias com vários estereocentros podem existir em formas 2^n (em que n é o número de estereocentros). Estas diferentes formas podem ter diferentes propriedades físico-químicas, toxicológicas e/ou ecotoxicológicas entre si. Devem ser consideradas substâncias diferentes.

- Catalisadores inorgânicos

Os catalisadores inorgânicos são considerados misturas. Para efeitos de identificação, os componentes metálicos ou compostos metálicos devem ser considerados substâncias individuais (sem especificação de utilização).

| Exemplos | | |
|----------|-----------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | Denominação | Regra |
| | Catalisador de óxido de cobalto e óxido de alumínio | Deve ser identificado separadamente como: - Óxido de cobalto II - Óxido de cobalto III - Óxido de alumínio - Óxido de alumínio e cobalto |

- Os concentrados enzimáticos com o mesmo número IUBMB podem ser considerados substâncias idênticas, apesar de utilizarem diferentes organismos de produção, desde que as propriedades de perigo não difiram significativamente e assegurem a mesma classificação.

Substâncias multiconstituintes

A Diretiva 67/548/CEE regulou a colocação das substâncias no mercado. O processo de produção da substância não era relevante. Por conseguinte, uma substância multiconstituinte comercializada era abrangida pelo EINECS desde que *todos* os constituintes individuais constassem do EINECS; por exemplo, a mistura isomérica difluorobenzenos era abrangida pelas entradas EINECS 1,2-Difluorobenzeno (206-680-7), 1,3-Difluorobenzeno (206-746-5) e 1,4-Difluorobenzeno (208-742-9), embora a própria mistura isomérica não constasse do

EINECS.

Pelo contrário, o REACH exige o registo da substância fabricada. Determinar em que medida as diferentes fases da produção da substância são abrangidas pela definição de «fabrico» (por exemplo, diferentes fases de purificação ou destilação) deve ser alvo de uma tomada de decisão caso a caso. Uma substância multiconstituinte produzida tem de ser registada (a menos que esteja abrangida pelo registo dos constituintes individuais, ver capítulo 4.2.2.4); por exemplo, a mistura isomérica difluorobenzeno é produzida, portanto o «difluorobenzeno», enquanto mistura isomérica, tem de ser registado. No entanto, no caso das substâncias multiconstituintes, não é necessário realizar o ensaio da substância estreme se for possível descrever o perfil de perigo da substância de forma suficiente através da informação dos constituintes individuais. Se os isómeros individuais 1,2-Difluorobenzeno, 1,3-Difluorobenzeno e 1,4-Difluorobenzeno forem produzidos e misturados posteriormente, os isómeros individuais devem ser registados e a mistura isomérica será considerada uma mistura.

Uma substância multiconstituinte com os constituintes principais A, B e C não deve ser considerada idêntica a uma substância multiconstituinte com os constituintes principais A e B ou como uma mistura reacional de A, B, C e D.

- Uma substância multiconstituinte não é considerada idêntica a uma substância com apenas um subconjunto dos constituintes individuais.

| Exemplos | | |
|------------------|---------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 207-205-6 | 2,5-Difluorotolueno | Estas duas substâncias não são consideradas idênticas à mistura isomérica dos difluorotoluenos porque estas duas substâncias são apenas um subconjunto de todos os isómeros possíveis. |
| 207-211-9 | 2,4-Difluorotolueno | |

- O registo de uma substância multiconstituinte não abrange os constituintes individuais.

| Exemplos | | |
|------------------|--------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 208-747-6 | 1,2-Dibromoetileno | Esta substância descreve uma mistura de cis- e trans-isómeros. As substâncias individuais (1Z)-1,2-Dibromoeteno e (1E)-1,2-Dibromoeteno não são abrangidas pelo registo da mistura isomérica. |

Substâncias UVCB

- Uma substância UVCB com uma distribuição reduzida de constituintes não é considerada idêntica a uma substância UVCB com uma composição alargada e vice-versa.

| Exemplos | | |
|-----------|----------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 288-450-6 | Aminas, C12-18-alquilo, acetatos | As substâncias «aminas, C12-14-alquilo, acetatos», «aminas, C12-20-alquilo, acetatos» ou «aminas, dodecil (C12-alquilo), acetatos» ou substâncias apenas com cadeias alquílicas em número par não são consideradas idênticas a esta substância |

- Uma substância caracterizada por uma espécie/género não é considerada idêntica a uma substância isolada de outra espécie/género.

| Exemplos | | |
|-----------|-----------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 296-286-1 | Diglicerídeos de óleo de girassol | Esta substância não é considerada idêntica a Diglicerídeos de soja (EINECS: 271-386-8), nem idêntica a Diglicerídeos de sebo (EINECS: 271-388-9) |
| 232-401-3 | Óleo de linhaça epoxidado | Esta substância não é considerada idêntica ao óleo de linhaça oxidado (EINECS: 272-038-8), nem idêntica ao óleo de linhaça maleico (EINECS: 268-897-3), nem idêntica ao óleo de rícino epoxidado (não existente no EINECS). |

- Um extrato purificado ou um concentrado são considerados substâncias diferentes do extrato.

| Exemplos | | |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número CE | Denominação | Regra |
| 232-299-0 | Óleo de colza Extratos e seus derivados modificados fisicamente. Essencialmente constituído por acilgliceróis dos ácidos gordos erúcido, linoleico e | A substância «ácido (Z)-Docos-13-enóico (ácido erúcido)» é um constituinte da substância «óleo de colza». O ácido erúcido não é considerado idêntico ao óleo de colza, uma vez que é isolado como substância |

| | | |
|--|--------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | oleico. (Brassica napus, Cruciferae) | pura a partir do óleo de colza; o ácido erúcico tem a sua própria entrada EINECS (204-011-3). Uma mistura isolada de ácido palmítico, ácido oleico, ácido linoleico, ácido linolénico, ácido erúcico e ácido eicosanóico não é considerada idêntica ao óleo de colza, uma vez que estes constituintes não representam a totalidade do óleo. |
|--|--------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

6. Identidade da substância no âmbito do pedido de informação

O capítulo 4 do presente guia de orientação contém orientações sobre a identificação e designação de substâncias. Estas orientações devem ser observadas com vista a determinar se determinadas substâncias podem ser consideradas idênticas para efeitos do REACH e do CRE. Este aspeto é explicado de forma mais pormenorizada abaixo no que se refere ao pedido de informação sobre substâncias.

De acordo com o artigo 4.º do REACH, o fabricante ou o importador podem, mantendo a plena responsabilidade de cumprir as suas obrigações nos termos do REACH, designar um terceiro como representante para todos os procedimentos previstos no título III que impliquem discussões com outros fabricantes ou importadores.

Para todas as substâncias, o potencial registante deve consultar a Agência antes do registo para saber se já foi apresentado algum registo para a mesma substância (artigo 26.º do REACH). Esse pedido de informação deve conter:

- a identidade do potencial registante, conforme especificado no anexo VI, ponto 1, do REACH, com exceção das instalações de utilização;
- a identidade da substância, conforme especificado no anexo VI, ponto 2, do REACH;
- os requisitos de informação para os quais o potencial registante teria de realizar novos estudos envolvendo animais vertebrados;
- os requisitos de informação para os quais o potencial registante teria de realizar novos estudos de outro tipo.

O potencial registante deve indicar a identidade e a denominação da substância em conformidade com as regras estabelecidas no capítulo 4 do presente guia de orientação.

A Agência deve determinar se a mesma substância foi registada anteriormente. Este procedimento deve igualmente ser realizado aplicando as regras estabelecidas no capítulo 4 do presente guia de orientação. O resultado deve ser comunicado ao potencial registante e os registantes anteriores ou outros registantes potenciais devem ser informados.

Estão disponíveis mais informações sobre o processo de pedido de informação no *Guia de orientação sobre partilha de dados* e no sítio Web dedicado da ECHA

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

7. Exemplos

Os exemplos apresentados nas páginas seguintes destinam-se apenas a ilustrar a forma como devem ser utilizadas as orientações do presente guia de orientação. Não constituem qualquer precedente no que respeita às obrigações no âmbito do REACH.

São apresentados os seguintes exemplos:

- o «peroxidicarbonato de dietilo» é um exemplo de uma substância monoconstituente que contém um solvente e atua igualmente como agente estabilizador (ver capítulo 7.1);
- a «zolimidina» é um exemplo de uma substância que poderia ser identificada como substância monoconstituente ou multiconstituente (ver capítulo 7.2);
- é apresentada uma «mistura de isómeros» formada durante a reação no processo de fabrico como exemplo de uma substância multiconstituente (ver capítulo 7.3). Esta substância estava anteriormente abrangida pelas entradas dos isómeros individuais do inventário EINECS;
- a «fragrância AH» é um exemplo de uma substância produzida em qualidades diferentes, que pode ser descrita como uma mistura reacional de cinco constituintes com intervalos de concentração (capítulo 7.4). Constitui igualmente um exemplo de um desvio justificado dos limites dos 80 % e dos 10 %;
- Os «minerais» não metálicos, incluindo a montmorilonite como exemplo de uma substância bem definida que necessita de caracterização física adicional, estão incluídos no capítulo 7.5;
- um «óleo essencial de lavandula» é um exemplo de uma substância UVCB obtida a partir de plantas (capítulo 7.6);
- o «óleo de crisântemo e os seus isómeros isolados» é um exemplo de uma substância UVCB de fonte biológica que é processada posteriormente (capítulo 7.7);
- «fenol, fosfato isopropilado» é um exemplo de uma substância UVCB variável que pode ser totalmente definida (capítulo 7.8);
- os «compostos de amónio quaternário» são exemplos de substâncias com variação no comprimento da cadeia de carbono (capítulo 7.9);
- o capítulo 7.10 contém dois exemplos de «substâncias petrolíferas», uma fração de mistura de gasolina e gasóleos;
- o capítulo 7.11 contém dois exemplos de identificação de enzimas, lacase e amilase.

7.1. Peroxidicarbonato de dietilo

A substância «peroxidicarbonato de dietilo» (CE 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) é produzida como uma solução de isododecano a 18 % (CE 250-816-8, CAS 31807-55-3). O isododecano atua igualmente como estabilizador contra propriedades explosivas. A maior concentração possível que assegura o manuseamento seguro da substância é uma solução a 27 %.

Como deve ser identificada e denominada a substância acima descrita para efeitos de registo?

Nos termos da definição de substância do REACH, devem ser excluídos os solventes que possam ser separados sem afetar a estabilidade da substância ou alterar a sua composição. Uma vez que, no caso acima, o isododecano atua igualmente como estabilizador e não pode ser totalmente separado devido às propriedades explosivas da substância, o isododecano deve ser considerado um aditivo e não apenas um solvente. No entanto, a substância ainda deve ser considerada uma substância monoconstituente. Por conseguinte, deve ser registada como a solução com a menor concentração de isododecano que assegura um manuseamento seguro:

peroxidicarbonato de dietilo (limite de concentração superior: 27 %). O isododecano deve ser comunicado em «Aditivos» e a função estabilizadora deve ser especificada.

7.2. Zolimidina

A solução metanólica fabricada contém «zolimidina» (CE 214-947-4; CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) e «imidazola» (CE 206-019-2; CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Após a remoção do solvente «metanol» e a otimização do processo de fabrico, a substância tem um grau de pureza de 74 – -86% de zolimidina e 4-12 % de imidazole.

Como deve ser identificada e denominada a substância acima descrita para efeitos de registo?

Nos termos da definição de substância do REACH, devem ser excluídos os solventes que possam ser separados sem afetar a estabilidade da substância ou alterar a sua composição. Tal como no caso acima, o metanol pode ser separado sem qualquer dificuldade; a substância livre de solvente tem de ser registada.

Em geral, uma substância é considerada uma substância monoconstituente desde que um constituinte principal esteja presente numa concentração igual ou superior a 80 %. Uma substância é considerada uma substância multiconstituente se mais do que um constituinte principal estiver numa concentração igual ou superior a 10 % e inferior a 80 %. O exemplo acima é um caso-limite, uma vez que os valores dos limiares se cruzam. Por conseguinte, a substância pode ser considerada uma substância monoconstituente «zolimidina», uma substância multiconstituente ou uma mistura reacional de «zolimidina» e «imidazole».

Nestes casos-limite, a concentração típica dos principais constituintes da substância pode ser utilizada para decidir a melhor forma de descrever esta substância, ou seja:

- (1) Se a concentração típica da zolimidina for 77 % e da imidazole for 11 %, recomenda-se que a substância seja considerada uma mistura reacional de zolimidina e imidazole;
- (2) Se a concentração típica da zolimidina for 85 % e da imidazole for 5 %, recomenda-se que a substância seja considerada substância monoconstituente «zolimidina».

7.3. Mistura de isómeros

A substância em questão é uma mistura (mistura reacional) de dois isómeros formados durante a reação do processo de fabrico. Os isómeros individuais foram comunicados para inclusão no inventário EINECS. A Diretiva 67/548/CEE regulou a colocação das substâncias no mercado. Uma vez que o processo de produção não era relevante, a mistura foi abrangida pelas entradas EINECS dos dois isómeros individuais. O REACH obriga ao registo de substâncias fabricadas. Determinar em que medida as diferentes fases da produção da substância são abrangidas pela definição de «fabrico» deve ser alvo de uma tomada de decisão caso a caso. Se a mistura isomérica for registada como uma substância multiconstituente (de acordo com as orientações do capítulo 4.2.2), não será necessário realizar o ensaio da substância estreme se for possível descrever o perfil de perigo da substância de forma suficiente através da informação dos constituintes individuais.

1. Denominação e outros identificadores

| Exemplos | |
|------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Nome IUPAC ou outra denominação química internacional (da substância) | Mistura reacional de <i>2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol</i> <i>2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol</i> e <i>2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol</i> <i>2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol</i> |
| Outras denominações (da substância) | <i>2,2' [[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol</i> Mistura reacional de Etanol, <i>2,2' [[(metil 1H benzotriazol 1 il)metil]imino]bis-</i> e água Composto isomérico de etanol, <i>2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-</i> (9CI) |
| Número CE (da substância) Nome CE Descrição CE | Não existe nenhum número CE para a substância, uma vez que a mistura de isômeros não foi notificada para o EINECS. No entanto, a substância era abrangida pelas entradas EINECS para os constituintes (279-502-9, 279-501-3). |
| Número CAS (da substância) Nome CAS | não disponível não disponível |
| Número CE (constituente A) Nome CE Descrição CE | 279-502-9 <i>2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol</i> / |
| Número CE (constituente B) Nome CE Descrição CE | 279-501-3 <i>2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol</i> / |
| Número CAS (constituente A) Nome CAS | 80584-89-0 Etanol, <i>2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-</i> |
| Número CAS (constituente B) Nome CAS | 80584-88-9 Etanol, <i>2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-</i> |
| Outro código de identidade Referência | Número ENCS 5-5917 |

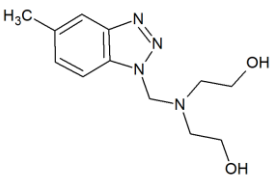
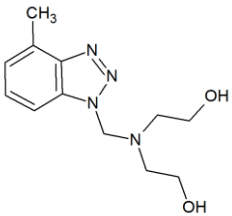
2. Informação sobre a composição – constituintes principais

| Constituintes principais | | | | | | |
|---------------------------------|---------------------------------------------------------------|-------------------|------------------|---------------------------------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|
| | Nome IUPAC | Número CAS | Número CE | Fórmula molecular método de Hill | Concentração típica (% m/m) | Intervalo concentração (% m/m) |
| A | Etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- | 80584-89-0 | 279-502-9 | C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂ | 60 | 50-70 |
| B | Etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- | 80584-88-9 | 279-501-3 | C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂ | 40 | 30-50 |

| Constituintes principais | |
|---------------------------------|------------------------------------------------------------|
| Outras denominações | |
| A | 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol |
| B | 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol |

| Constituintes principais | | |
|---------------------------------|------------------------------------------------------------|---------------------|
| | Nome CE | Descrição 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 | / |

| Constituintes principais | | |
|---------------------------------|---------------------------------------------------------------|-------------------|
| | Nome 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 |

| Constituintes principais | | | |
|--------------------------|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|
| | Fórmula molecular Método CAS | Fórmula estrutural | Código SMILES |
| A | / |  | OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12 |
| B | / |  | OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12 |

| Constituintes principais | | |
|--------------------------|----------------------------------------|---------------------------------|
| | Massa molecular [g mol ⁻¹] | Intervalo de massas moleculares |
| A | 250 | / |
| B | 250 | / |

7.4. Fragrância AH

A fragrância AH é constituída por gama (iso-alfa) metilionona e pelos respetivos isómeros. É produzida em três qualidades diferentes (qualidade A, B e C) que diferem no rácio dos isómeros.

O quadro seguinte apresenta uma descrição geral da composição das diferentes qualidades.

| Composição das diferentes qualidades da Fragrância AH | | | | |
|-------------------------------------------------------|-------------|-------------|-------------|--------------------|
| Intervalo de concentração [%] | Qualidade A | Qualidade B | Qualidade C | Intervalos globais |
| gama (iso alfa) metilionona | 80 - 85 | 65 - 75 | 50 - 60 | 50 - 85 |
| delta (iso beta) metilionona | 6 - 10 | 3 - 7 | 3 - 7 | 3 - 10 |
| alfa n-metilionona | 3 - 11 | 10 - 20 | 20 - 30 | 3 - 30 |
| gama n-metilionona | 0,5 - 1,5 | 2 - 4 | 2 - 4 | 0,5 - 4 |
| beta n-metilionona | 0,5 - 1,5 | 4 - 6 | 5 - 15 | 0,5 - 15 |
| pseudo metiliononas | 0,5 - 1,5 | 1 - 3 | 1 - 3 | 0,5 - 3 |

Existem várias opções para a identificação da substância:

- A qualidade A contém, pelo menos, 80 % do isómero gama (iso-alfa) de metilionona e, por conseguinte, pode ser considerada uma substância monoconstituente com base no isómero gama (iso-alfa) de metilionona, considerando-se os restantes isómeros como impurezas.
- As qualidades B e C contêm menos de 80 % do isómero gama (iso-alfa) de metilionona e ≥ 10 % dos restantes isómeros. Por conseguinte, podem ser consideradas substâncias multiconstituintes:
 - Qualidade B: uma mistura reacional de gama (iso-alfa) metilionona (65 a 75 %) e alfa-n metilionona (10 a 20 %), considerando-se os restantes isómeros como impurezas.
 - Qualidade C: uma mistura reacional de gama (iso-alfa) metilionona (50 a 60 %) e alfa-n metilionona (20 a 30 %), considerando-se os restantes isómeros como impurezas.

A composição é variável e, por vezes, um isómero está presente numa concentração ≥ 10 % (por isso normalmente denominado constituinte principal) e, outras vezes, < 10 % (por isso normalmente denominado impureza).

Seria possível registar as diferentes qualidades separadamente, o que implicaria três registos. No entanto, a comparação por interpolação dos dados pode ser justificada.

Em alternativa, é possível considerar:

- Um registo como substância monoconstituente com duas subqualidades. Neste caso, as subqualidades apresentam um desvio em relação à regra dos 80 % (ver capítulo 4.2.1).
- Um registo como mistura reacional de 5 isómeros (substância multiconstituente). Neste caso, alguns isómeros (constituintes principais) apresentam um desvio em relação ao

limite dos 10 % que estabelece a distinção entre constituintes principais e impurezas (ver capítulo 4.2.2).

- Um registo como mistura reacional definida, em que a variabilidade da composição é abrangida pelo intervalo total para cada isómero.

Pode ser importante ter em conta que:

- As três qualidades apresentam propriedades físico-químicas iguais ou muito semelhantes.
- As três qualidades têm utilização e cenários de exposição idênticos.
- Todas as qualidades possuem a mesma classificação de perigo e a mesma rotulagem e os conteúdos das fichas de dados de segurança e dos relatórios de segurança são idênticos.
- Os dados de ensaio disponíveis (e de futuros ensaios) abrangem a variabilidade das três qualidades.

Neste exemplo, é descrita a identificação da substância como mistura reacional definida de 5 isómeros (substância multiconstituinte). É necessária uma justificação devido ao desvio em relação à regra dos 80 % (ver capítulo 4.2.1) e ao limite dos 10 % (definição de substância multiconstituinte, ver capítulo 4.2.2). Uma vez que cada qualidade é fabricada estreme, a composição de cada uma das três qualidades deve ser especificada no dossiê de registo. No entanto, em condições formais, poderiam ser necessários, pelo menos, dois registos: 1) Gama (iso-alfa) metilionona e 2) Mistura reacional de gama (iso-alfa) metilionona e alfa-n-metilionona.

Identificação da substância

A fragrância AH é produzida em três qualidades diferentes (A, B e C) com a mesma composição qualitativa mas com composição quantitativa diferente. As três qualidades são descritas num dossiê de registo para uma substância multiconstituinte. Embora tal implique que a definição não seja aplicada com rigor, justifica-se a realização do registo como uma substância multiconstituinte, uma vez que 1) os dados de ensaio disponíveis abrangem a variabilidade das três qualidades, 2) as três qualidades apresentam propriedades físico-químicas muito semelhantes, 3) todas as qualidades possuem a mesma classificação de perigo e a mesma rotulagem (logo, as fichas de dados de segurança são idênticas) e 4) as três qualidades têm utilização e cenários de exposição idênticos (logo, os relatórios de segurança química são idênticos).

1. Denominação e outros identificadores

| | |
|-------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Nome IUPAC ou outra denominação química internacional | Mistura reacional de 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)but-3-an-2-ona 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)but-3-an-2-ona [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona; |
|-------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

| | |
|---------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | 1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one 1-(6,6-metil-2-metilenociclohex-1-il)pent-1-an-3-ona; 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona |
| Outras denominações | Gama-metilionona Qualidade A Gama-metilionona Qualidade B Gama-metilionona Qualidade C |
| Número CE | não disponível |
| Nome CE | / |
| Descrição CE | / |
| Número CAS | não disponível |
| Nome CAS | / |

2. Informação sobre a composição – constituintes principais

Em teoria, são possíveis enantiómeros adicionais. No entanto, foram analisados os isômeros seguintes:

| Constituintes principais | | | | | | |
|--------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|-----------|-----------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| | Nome IUPAC | Número CAS | Número CE | Fórmula molecular método de Hill | Concentração mínima (% m/m) | Concentração máxima (% m/m) |
| A | <i>3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one</i> 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)but-3-an-2-ona | 127-51-5 | 204-846-3 | C ₁₄ H ₂₂ O | 50 | 85 |
| B | <i>3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one</i> 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)but-3-an-2-ona | 79-89-0 | 201-231-1 | C ₁₄ H ₂₂ O | 3 | 10 |

| | | | | | | |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|----------------|---------|-----|----|
| C | <i>[R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one</i> <i>[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona</i> | 127-42-4 | 204-842-1 | C14H22O | 3 | 30 |
| D | <i>1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one</i> <i>1-(6,6-metil-2-metilenociclohex-1-il)pent-1-an-3-ona</i> | não disponível | não disponível | C14H22O | 0,5 | 4 |
| E | <i>1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one</i> <i>1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona</i> | 127-43-5 | 204-843-7 | C14H22O | 0,5 | 15 |

Constituintes principais

Outras denominações

| | |
|----------|-----------------------------------------|
| A | alfa-iso-metilionona; gama-metilionona |
| B | beta-iso-metilionona; delta-metilionona |
| C | alfa-n-metilionona |
| D | gama-n-metilionona |
| E | beta-n-metilionona |

Constituintes principais

| | Nome CE | Descrição CE |
|----------|------------------------------------------------------------|--------------|
| A | 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona | / |

| | | |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|
| B | 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)-3-butan-2-ona | / |
| C | [<i>R-(E)</i>]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona | / |
| D | 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona | / |
| E | 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)pent-1-an-3-ona | / |

Constituintes principais

| | Nome CAS | Número CAS |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------|
| A | 3-Butan-2-ona, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il)- | 127-51-5 |
| B | 3-Butan-2-ona, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)- | 79-89-0 |
| C | 1-Pentan-3-ona, 1-[(1 <i>R</i>)-2,6,6-trimetil-2-ciclohexan-1-il]-, (1 <i>E</i>)- | 127-42-4 |
| D | não disponível | não disponível |
| E | 1-Pentan-3-ona, 1-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexan-1-il)- | 127-43-5 |

Constituintes principais

| | Outro código de identidade | Referência |
|----------|----------------------------|-------------------------------------------------------|
| A | 2714 07.036 | FEMA EU Flavour Register (Registo de Odores da UE) |
| B | 07.041 | EU Flavour Register (Registo de Odores da UE) |
| C | 2711 07.009 | FEMA EU Flavour Register (Registo de Odores da UE) |
| D | não disponível | não disponível |

| | | |
|----------|----------------|----------------------------------------------------------|
| E | 2712 07.010 | FEMA EU Flavour Register (Registo de Odores da UE) |
|----------|----------------|----------------------------------------------------------|

Constituintes principais

| | Fórmula molecular Método CAS | Fórmula estrutural | Código SMILES |
|----------|-----------------------------------|--------------------|---------------------------------------------|
| A | C ₁₄ H ₂₂ O | | <chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem> |
| B | C ₁₄ H ₂₂ O | | <chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem> |
| C | C ₁₄ H ₂₂ O | | <chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem> |
| D | C ₁₄ H ₂₂ O | | <chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem> |
| E | C ₁₄ H ₂₂ O | | <chem>O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC</chem> |

Constituintes principais

| | Massa molecular / g·mol ⁻¹ | Intervalo de massas moleculares |
|----------|---------------------------------------|---------------------------------|
| A | 206,33 | / |
| B | 206,33 | / |
| C | 206,33 | / |

| | | |
|----------|--------|---|
| D | 206,33 | / |
| E | 206,33 | / |

3. Informação sobre a composição – impurezas e aditivos

| Impurezas | | | | | | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|-------------------|------------------|-------------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|
| | Nome IUPAC | Número CAS | Número CE | Fórmula molecular | Concentração típica (% m/m) | Intervalo concentração (% m/m) |
| F | | | | | | |
| número de impurezas não especificadas: concentração total de impurezas não especificadas: | | | | 11 (pseudo metiliononas) 0,5 – 3 % m/m | | |
| «Additives» [Aditivos] | | | | | | |
| | Nome IUPAC | Número CAS | Número CE | Fórmula molecular | Concentração típica (% m/m) | Intervalo concentração (% m/m) |
| G | <i>Butylated Hydroxytoluene (BHT)</i> Butil-hidroxitolueno (BHT) | 128-37-0 | 204-881-4 | C ₁₅ H ₂₄ O | 0,1 | 0,05 – 0,15 |

4. Informação relativa às diferentes qualidades

O quadro seguinte apresenta os intervalos dos cinco principais constituintes nas três qualidades:

| Intervalo de concentração [%] | Qualidade A | Qualidade B | Qualidade C |
|--------------------------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| gama (iso alfa) metilionona | 80 - 85 | 65 - 75 | 50 - 60 |
| delta (iso beta) metilionona | 6 - 10 | 3 - 7 | 3 - 7 |

| | | | |
|---------------------|-----------|---------|---------|
| alfa n-metilionona | 3 - 11 | 10 - 20 | 20 - 30 |
| gama n-metilionona | 0,5 - 1,5 | 2 - 4 | 2 - 4 |
| beta n-metilionona | 0,5 - 1,5 | 4 - 6 | 5 - 15 |
| pseudo metiliononas | 0,5 - 1,5 | 1 - 3 | 1 - 3 |

7.5. Minerais

Um mineral é definido como uma combinação de constituintes inorgânicos tal como se encontram na crosta terrestre, com um conjunto característico de composições químicas, formas cristalinas (desde muito cristalinas a amorfas) e propriedades físico-químicas.

Os minerais estão isentos de registo se cumprirem a definição de uma substância que ocorre na natureza (*artigo 3.º, n.º 39, do REACH*) e não forem quimicamente modificados (*artigo 3.º, n.º 40, do REACH*). Esta disposição aplica-se aos minerais cuja estrutura química permanece inalterada, mesmo que tenha sido submetida a um processo ou tratamento químico, ou a uma transformação física mineralógica, por exemplo, destinado à remoção de impurezas.

Embora alguns minerais possam ser descritos exclusivamente através da sua composição química (ver capítulos 4.2.1 e 4.2.2, relativos às substâncias monoconstituintes e multiconstituintes), para outros a composição química não é suficiente para identificar exclusivamente essas substâncias (ver capítulo 4.2.3).

Ao contrário de outras substâncias monoconstituintes ou multiconstituintes, a identificação de muitos minerais deve basear-se na composição química e na estrutura interna (por exemplo, revelada por difração de raios X), as quais, juntas, representam a essência do mineral e determinam as suas propriedades físico-químicas.

No que respeita a outras substâncias multiconstituintes, deve utilizar-se o número CAS do mineral como parte da identificação (ou seja, a combinação de constituintes inorgânicos). Os números CAS dos constituintes inorgânicos (tal como definidos pela sistemática mineralógica) são utilizados para descrever os diferentes constituintes. Em caso de produção de um constituinte inorgânico individual (uma substância monoconstituinte), o número CAS desta substância deve ser utilizado na identificação da substância. Por exemplo:

- O mineral Caulino (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) é composto basicamente por caulinite primária e secundária (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7) que é uma argila constituída por aluminossilicato hidratado.

Caso seja aplicado um processo de transformação ao Caulino para produzir um constituinte individual de Caulino, por exemplo, caulinites os números CAS e EINECS da substância seriam EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- O mineral Bentonite (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), descrito no inventário EINECS como «Uma argila coloidal. É constituída principalmente por montmorilonite», contém uma proporção elevada do constituinte inorgânico Montmorilonite (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) mas não só.

Caso seja produzida Montmorilonite pura (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), o número CAS a utilizar para identificar a substância é o da Montmorilonite.

Deve salientar-se que a Bentonite (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) e a Montmorilonite (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) não são consideradas substâncias idênticas.

Em conclusão, os minerais são geralmente denominados de acordo com os seus constituintes inorgânicos em combinação. Podem ser considerados substâncias monoconstituintes ou multiconstituintes (ver orientações gerais nos capítulos 4.2.1 e 4.2.2). Alguns minerais não podem ser descritos exclusivamente pela sua composição química e necessitam de características físicas ou parâmetros de transformação adicionais para os identificar suficientemente (ver capítulo 4.2.3). São apresentados alguns exemplos no quadro seguinte.

Exemplos de minerais

| Denominação | CAS | EINECS | Descrição adicional |
|----------------------------------|------------|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Cristobalite | 14464-46-1 | 238-455-4 | O ₂ Si (estrutura cristalina: cúbica/tetragonal) |
| Quartzo | 14808-60-7 | 238-878-4 | O ₂ Si (estrutura cristalina: trigonal/hexagonal) |
| Kieselguhr | 61790-53-2 | - | Também conhecido como Diatomite, Kieselgur e Celite Descrição: um sólido silicioso composto por esqueletos de pequenas plantas aquáticas pré-históricas. Contém sílica primária. |
| Dolomite | 16389-88-1 | 240-440-2 | CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg |
| Minerais do grupo dos feldspatos | 68476-25-5 | 270-666-7 | Uma substância inorgânica que é o produto de reação da calcinação a alta temperatura na qual quantidades diferentes de óxido de alumínio, óxido de bário, óxido de cálcio, óxido de magnésio, óxido de silício e óxido de estrôncio se distribuem homogênea e ionicamente para formar uma matriz cristalina. |
| Talco | 14807-96-6 | 238-877-9 | Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄ |
| Vermiculite | 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) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O) |

Informação analítica necessária para os minerais

| | |
|-----------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Composição elementar | A composição química apresenta uma perspectiva geral da composição do mineral, independentemente do número de constituintes e da sua proporção no mineral. Por convenção, a composição química é expressa para os óxidos. |
| Dados espectrais (XRD ou equivalentes) | As técnicas XRD, ou outras, podem identificar os minerais com base na sua estrutura cristalográfica. Devem ser indicados o XRD característico ou dados alternativos adequados juntamente com uma síntese do método analítico ou referência bibliográfica. |
| Propriedades físico-químicas típicas | Os minerais têm propriedades físico-químicas características que permitem efetuar a sua identificação, por exemplo: <ul style="list-style-type: none">- Dureza muito baixa- Capacidade de tumefação- Formas de diatomite (microscópio ótico)- Densidade muito elevada- Área da superfície (adsorção de azoto) |

7.6. Óleo essencial de lavandin grosso

Os óleos essenciais são substâncias que são obtidas a partir de plantas. Por conseguinte, podem ser caracterizados como substâncias derivadas de fonte botânica.

Em geral, as substâncias derivadas de fonte botânica são substâncias naturais complexas obtidas por transformação de parte ou da totalidade de uma planta através de um tratamento como extração, destilação, compressão, fracionamento, purificação, concentração ou fermentação. A composição destas substâncias varia em função do género, espécie, condições de crescimento e período de colheita das fontes, bem como das técnicas de transformação aplicadas.

Os óleos essenciais podem ser definidos através dos seus constituintes principais, uma vez que se trata da prática aplicada às substâncias multiconstituintes. No entanto, os óleos essenciais podem ser formados por várias centenas de constituintes, os quais podem variar consideravelmente em função de muitos fatores (por exemplo, género, espécie, condições de crescimento, período de colheita, processos utilizados). Por conseguinte, a descrição dos principais constituintes não é muitas vezes suficiente para descrever estas substâncias UVCB. Os óleos essenciais devem ser descritos através da planta de origem e do processo de tratamento, tal como descrito no capítulo 4.3.1 (utilizando UVCB do subtipo 3).

Em muitos casos, estão disponíveis normas industriais para óleos essenciais (para muitos óleos essenciais, também estão disponíveis Normas ISO-). As informações sobre as normas podem ser fornecidas adicionalmente. No entanto, a identificação da substância deve basear-se na substância tal como fabricada.

O exemplo seguinte descreve o «óleo essencial de Lavandin grosso», para o qual está disponível uma norma ISO (ISO 8902-1999).

1. Denominações e outros identificadores

Fonte

| | |
|---------|---------------------------------------------|
| Espécie | <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) |
|---------|---------------------------------------------|

Processo

Descrição dos processos de reação (bio)química utilizados para o fabrico da substância:

Destilação por vapor de água das extremidades floridas de *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) e separação subsequente da água do óleo essencial;
A separação subsequente é um processo físico espontâneo, que ocorre normalmente num separador (denominado «vaso florentino») que permite o fácil isolamento do óleo separado. Nesta fase do processo de destilação, a temperatura é de cerca de 40 °C.


Denominação

| | |
|-------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Nome IUPAC ou outra denominação química internacional | Óleo essencial de <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) |
| Número CE Nome CE Descrição CE | 297-385-2 Extrato de Lavanda, <i>Lavandula hybrida grosso</i> . Produtos de extração e seus derivados modificados fisicamente, tais como tinturas, concretos, absolutos, óleos essenciais, oleorresinas, terpenos, frações não-terpénicas, destilados, resíduos, etc., obtidos de <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³¹ . |
| Número CAS Nome CAS | 93455-97-1 Extrato de Lavanda, <i>Lavandula hybrida grosso</i> . |

³¹ «Labiatae» e «Lamiaceae» são sinónimos.

2. Informação sobre a composição – constituintes conhecidos

| Constituintes conhecidos | | | | | |
|--------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|------------------------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------------|
| | Denominação química CE CAS IUPAC outra | Número CE CAS | Fórmula molecular Método de Hill | Concentração típica % (m/m) | Intervalo concentração % (m/m) |
| A | CE Acetato de linalilo CAS Acetato de 3,7-dimetil-1,6-octadien-3-ol IUPAC <i>3,7-Dimethyl octa-1,6-dien-3-yl acetate</i> Acetato de 3,7-dimetil octa-1,6-dien-3-ilo | CE 204-116-4 CAS 115-95-7 | C ₁₂ H ₂₀ O ₂ | 33 | 28 – 38 |
| B | CE linalol CAS 3,7-dimetil de 1,6-octadien-3-ol IUPAC <i>3,7-Dimethyl octa-1,6-diene-3-ol</i> 3,7-dimetil de 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 <i>1,7,7-Trimethylbicyclo[2.2.1]-2-heptanone</i> 1,7,7-trimetilbiciclo[2.2.1]-2-heptanona Outra ^{SEP} cânfora | CE 200-945-0 CAS 76-22-2 | C ₁₀ H ₁₆ O | 7 | 6 – 8 |
| D | CE Cineole CAS 2-oxabicyclo [2.2.2]octano, 1,3,3-trimetil- IUPAC <i>1,3,3-Trimethyl-2-oxabicyclo[2.2.2]octane</i> 1,3,3-trimetil-2-oxabicyclo[2.2.2]octano Outra ^{SEP} 1,8-cineole | CE 207-431-5 CAS 470-82-6 | C ₁₀ H ₁₈ O | 5,5 | 4 – 7 |

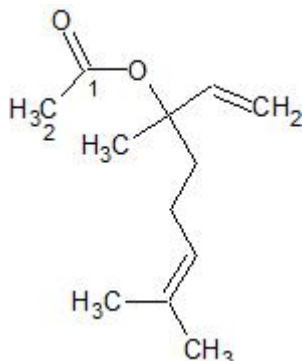
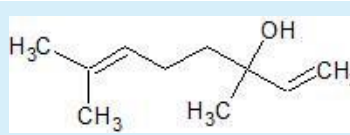
| | | | | | |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|------|---------|
| E | <p>CE p-ment-1-an-4-ol</p> <p>CAS 3-ciclohexen-1-ol, 4-metil-1-(1-metiletil)</p> <p>IUPAC 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol/1-(1-metiletil)-4-metil-3-ciclohexen-1-ol</p> <p>Outras terpinen-4-ol</p> | <p>CE 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p> | C ₁₀ H ₁₈ O | 3,25 | 1,5 – 5 |
| F | <p>CE Acetato de 2-isopropenil-5-metilhex-4-enilo</p> <p>CAS Acetato de 4-hexen-1-ol, 5-metil-2-(1-metiletenil)-</p> <p>IUPAC 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol 2-(1-metiletenil)-5-metilhex-4-en-1-ol</p> <p>Outra (±)-Acetato de lavandulol</p> | <p>CE 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p> | C ₁₂ H ₂₀ O ₂ | 2,25 | 1,5 – 3 |
| G | <p>CE DL-borneol</p> <p>CAS biciclo[2.2.1] heptan-2-ol, 1,7,7-trimetil-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetil bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol</p> <p>Outra  borneol</p> | <p>CE 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p> | C ₁₀ H ₁₈ O | 2,25 | 1,5 – 3 |
| H | <p>CE Cariofileno</p> <p>CAS biciclo[7.2.0]undec-4-eno, 4,11,11-trimetil-8-metilen-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC 1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylene bicyclo[7.2.0]undec-4-ene/1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metilen bicyclo[7.2.0]undec-4-eno</p> <p>Outra trans-beta-cariofileno</p> | <p>CE 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p> | C ₁₅ H ₂₄ | 1,75 | 1 – 2,5 |

| | | | | | |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|---------------------------------|-----|-----------|
| I | <p>CE (E)-7,11-dimetil-3-metilenedodeca-1,6,10-trieno CAS 1,6,10-dodecatrieno, 7,11-dimetil-3-metileno-, (6E)- IUPAC (E)-7,11-Dimethyl-3-methylene-1,6,10-dodecatriene (E)-7,11-dimetil-3-metileno-1,6,10-dodecatrieno Outra trans-beta-farneseno</p> | <p>CE 242-582-0 CAS 18794-84-8</p> | C ₁₅ H ₂₄ | 1,1 | 0,2 – 2 |
| J | <p>CE (R)-p-menta-1,8-dieno CAS ciclohexeno, 1-metil-4-(1-metiletenil)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexene (4R)-1-metil-4-(1-metiletenil)ciclohexeno Outra limoneno</p> | <p>CE 227-813-5 CAS 5989-27-5</p> | C ₁₀ H ₁₆ | 1 | 0,5 – 1,5 |
| K | <p>CE 3,7-dimetilocta-1,3,6-trieno CAS 1,3,6-octatrieno, 3,7-dimetil IUPAC 3,7-Dimethylocta-1,3,6-triene 3,7-dimetilocta-1,3,6-trieno Outra cis-beta-ocimeno</p> | <p>CE 237-641-2 CAS 13877-91-3</p> | C ₁₀ H ₁₆ | 1 | 0,5 – 1,5 |

Constituintes conhecidos ≥ 10%

| Constituintes conhecidos | | |
|--------------------------|--------------------------------------------------------------------|--------------|
| | Nome CE | Descrição CE |
| A | acetato de linalilo C ₁₂ H ₂₀ O ₂ | |
| B | linalol C ₁₀ H ₁₈ O | |

| Constituintes conhecidos | | |
|--------------------------|--------------------------------------------------------------------|------------------------|
| | Nome CAS | Números CAS associados |
| A | acetato de linalilo C ₁₂ H ₂₀ O ₂ | 115-95-7 |
| B | linalol C ₁₀ H ₁₈ O | 78-70-6 |

| Constituintes conhecidos | | | |
|--------------------------|------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| | Fórmula molecular Método CAS | Fórmula estrutural | Código SMILES |
| A | C ₁₂ H ₂₀ O ₂ |  | |
| B | C ₁₀ H ₁₈ O |  | |

| Constituintes conhecidos | | |
|--------------------------|-----------------|---------------------------------|
| | Massa molecular | Intervalo de massas moleculares |
| A | 196,2888 | / |
| B | 154,2516 | / |

7.7. Óleo de crisântemo e respetivos isómeros isolados

Uma empresa está a produzir um óleo de crisântemo que é extraído após esmagamento de flores e folhas de *Chrysanthemum cinerariaefolium*, *Compositae* com um solvente contendo uma mistura de água/etanol (1:10). Após a extração, o solvente é removido e o extrato «puro» é transformado posteriormente, resultando no óleo de crisântemo final.

Além disso, são isolados dois isómeros do extrato como mistura reacional 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 ester, (1R,3R)-; número CAS 4466-14-2), e

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-ilester, (1R,3R)-; número CAS 1172-63-0

Além disso, a empresa decidiu sintetizar também a mistura reacional isomérica de Jasmolina I e II.

A empresa está a colocar as seguintes questões:

1. Como identificar o óleo de crisântemo para efeitos de registo?
2. A mistura reacional de isómeros isolados de Jasmolina I e II é abrangida pelo registo do óleo?
3. Pode a mistura sintetizada dos dois isómeros ser considerada idêntica à mistura dos isómeros isolados a partir do óleo de crisântemo?

1. Como identificar o óleo de crisântemo para efeitos de registo?

O óleo de crisântemo é considerado uma substância UVCB que não pode ser suficientemente identificada através da sua composição química (para mais informações, consultar o capítulo 4.3). Outros parâmetros de identificação, como a fonte e o processo, são essenciais. O óleo de crisântemo é de natureza biológica e deve ser identificado através da espécie e da parte do organismo a partir do qual é obtido e do processo de transformação (extração com solvente). No entanto, a composição química e a identidade dos constituintes devem ser indicadas, se forem conhecidas.

A informação seguinte é considerada necessária para identificar suficientemente a substância:

| Nome da substância | <i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , <i>Compositae</i> ; óleo obtido de flores e folhas esmagadas por extração com água:etanol (1:10) |
|---------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Fonte | |
| Género, espécie, subespécie | Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae |
| Parte da planta utilizada para o óleo | Flores e folhas |

| Processo | | | | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------|----------------|---------------|---------------|
| Método de fabrico | Esmagamento seguido de extração | | | |
| Solvente utilizado para a extração | Água:etanol (1:10) | | | |
| Informação sobre a composição – constituintes conhecidos em % (m/m) | | | | |
| Nome do constituinte | N.º CE | N.º CAS | % mín. | % máx. |
| Piretrina I: crisantemato de 2-metil-4-oxo-3-(penta-2,4-dienil) ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]] | 204-455-8 | 121-21-1 | 30 | 38 |
| Piretrina II: 2,2-dimetilciclopropanocarboxilato de 2-metil-4-oxo-3-(penta-2,4-dienil) ciclopent-2-enilo [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil) | 204-462-6 | 121-29-9 | 27 | 35 |
| Cinerina I: ciclopropanocarboxilato de 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oxociclopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil) | 246-948-0 | 25402-06-6 | 5 | 10 |
| Cinerina II: ciclopropanocarboxilato de 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oxociclopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil) | 204-454-2 | 121-20-0 | 8 | 15 |
| Jasmolina I: [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato de 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-enil | nenhum | 4466-14-2 | 4 | 10 |
| Jasmolina II: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-ciclopropanocarboxilato de 2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil) | nenhum | 1172-63-0 | 4 | 10 |

Além disso, a substância contém cerca de 40 constituintes abaixo de 1 %.

Também é possível considerar a identificação da substância como uma substância multiconstituinte bem definida com seis constituintes principais (mistura reacional de Piretrina I, Piretrina II, Cinerina I, Cinerina II, Jasmolina I e Jasmolina II).

A substância seria considerada uma «substância que ocorre na natureza» se o processo de fabrico consistisse apenas em «esmagamento» e estaria isenta da obrigação de registo, a menos que cumprisse os critérios de classificação como substância perigosa nos termos da Diretiva 67/548/CEE.

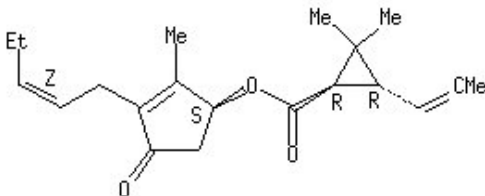
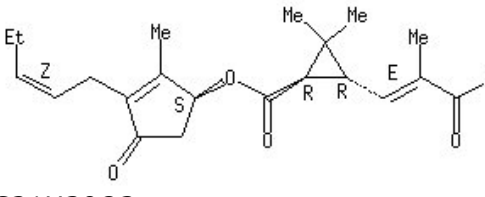
2. A mistura reacional de isómeros isolados de Jasmolina I e II é abrangida pelo registo do óleo?

A mistura reacional dos isómeros isolados de Jasmolina I e II não é abrangida pelo registo do «*Chrysanthemum cinerariaefolium, Compositae*», uma vez que os constituintes individuais não são abrangidos pela totalidade da substância UVCB e vice-versa. A mistura reacional de Jasmolina I e II é considerada uma substância diferente.

A mistura reacional de Jasmolina I e Jasmolina II pode ser considerada uma substância multiconstituinte (para mais informações, consulte o capítulo 4.2.3) com dois constituintes principais.

A informação seguinte é considerada necessária para identificar suficientemente a substância:

| | | | | |
|---------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|---------------|---------------|
| Nome IUPAC da substância | Mistura reacional de (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1a [S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato de (2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-enil) e (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1a [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato de (2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-en-1-il) | | | |
| Outra denominação | Mistura reacional de Jasmolina I e Jasmolina II | | | |
| Pureza da substância | 95 a 98 % (m/m) | | | |
| Informação sobre a composição – constituintes principais em % (m/m) | | | | |
| Nome do constituinte | N.º CE | N.º CAS | % mín. | % máx. |

| | | | | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------|----|
| Jasmolina I: [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropanocarboxilato de 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-enil | nenhum | 4466-14-2 | 40 | 60 |
| Fórmula molecular | |  | | |
| Fórmula estrutural Massa molecular | | | $C_{22}H_{30}O_5$ $M = 374 \text{ g/mol}$ | |
| Jasmolina II: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-en-1-il [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-ciclopropanocarboxilato de 2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil) | nenhum | 1172-63-0 | 35 | 65 |
| Fórmula molecular | |  | | |
| Fórmula estrutural Massa molecular | | | $C_{21}H_{30}O_3$ $M = 330 \text{ g/mol}$ | |

3. Pode a mistura sintetizada (mistura reacional) dos dois isômeros ser considerada idêntica à mistura dos isômeros isolados a partir do óleo de crisântemo?

Para as substâncias quimicamente bem definidas, as quais são descritas suficientemente pelos seus constituintes, não é relevante se a substância é isolada a partir de um extrato ou se é sintetizada através de um processo químico. Por conseguinte, a mistura reacional sintetizada de Jasmolina I e Jasmolina II pode ser considerada idêntica à mistura de isômeros isolada a partir do crisântemo, mesmo que derivada a partir de processos de fabrico diferentes, desde que a pureza da mistura e o intervalo de concentração dos constituintes principais sejam os mesmos.

4. Conclusões

São identificadas duas substâncias:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, *Compositae*; óleo obtido de flores e folhas esmagadas por extração com água:etanol (1:10)
2. Mistura reacional dos isômeros Jasmolina I e Jasmolina II, independentemente do

processo de fabrico da substância.

Se as substâncias acima referidas fossem utilizadas *apenas* em produtos fitofarmacêuticos e biocidas, seriam consideradas registadas ao abrigo do REACH (artigo 15.º).

7.8. Fenol, isopropilado, fosfato

Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) é uma substância UVCB em que a variabilidade da entidade isopropilada não pode ser totalmente definida.

1. Denominação e outros identificadores

| | |
|--------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Nome IUPAC ou outra denominação química internacional | Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) |
| Outras denominações | Fenol, isopropilado, fosfato Fenol, isopropilado, fosfato (3.1) (com base num rácio propileno/fenol de 1:1 mol) |
| Número CE Nome CE Descrição CE | 273-066-3 Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) / |
| Número CAS Nome CAS | 68937-41-7 Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) |

2. Informação sobre a composição – constituintes principais

| Constituintes principais | | | | | |
|------------------------------------|------------|-----------|----------------------------------|-----------------------------|--------------------------------|
| Nome IUPAC | Número CAS | Número CE | Fórmula molecular método de Hill | Concentração típica (% m/m) | Intervalo concentração (% m/m) |
| Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) | 68937-41-7 | 273-066-3 | Não especificada | | |

| Constituintes principais | |
|------------------------------------|---------------------|
| Nome CE | Descrição CE |
| Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) | / |
| Nome CAS | Número CAS |
| Fenol, isopropilado, fosfato (3:1) | 68937-41-7 |

7.9. Compostos de amónio quaternário

Uma empresa está a sintetizar as substâncias seguintes:

Substância A

Compostos de amónio quaternário, cloretos de di-C₁₀₋₁₈-alquilodimetil

Número CE 294-392-2

Número CAS 91721-91-4

Distribuição dos comprimentos das cadeias de carbono:

| | |
|-----------------|-------|
| 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 % |

Substância B

Compostos de amónio quaternário, cloretos de di(alquil de coco)dimetil

Número CE 263-087-6

Número CAS 61789-77-3

A empresa desconhece a composição exata desta substância.

Substância C

Brometo de didodecildimetilamónio

Substância D

Cloreto de didodecildimetilamónio

Substância E

A substância E é fabricada como uma mistura reacional de brometo de didodecildimetilamónio e cloreto de didodecildimetilamónio (mistura reacional das substâncias C e D)

Substância F

Compostos de amónio quaternário, cloretos de di-CC₁₄₋₁₈-alquilodimetilamónio

Número CE 268-072-8

Número CAS 68002-59-5

Distribuição dos comprimentos das cadeias de carbono:

| | |
|-----------------|------|
| C ₁₄ | 20 % |
| C ₁₅ | 10 % |
| C ₁₆ | 40 % |
| C ₁₇ | 10 % |
| C ₁₈ | 20 % |

Substância G

Compostos de amónio quaternário, cloretos de di-C₄₋₂₂-alquilodimetil

Distribuição dos comprimentos das cadeias de carbono (uma plica simples indica uma ligação dupla, uma plica dupla indica uma ligação tripla):

| | |
|-------------------|--------|
| C ₄ | 0,5 % |
| C ₆ | 3,0 % |
| C ₈ | 6,0 % |
| C ₁₀ | 10,0 % |
| C ₁₂ | 12,0 % |
| C ₁₄ | 24,0 % |
| C ₁₆ | 20,0 % |
| C ₁₈ | 16,0 % |
| C _{18'} | 2,0 % |
| C _{18''} | 0,5 % |
| C ₂₀ | 4,0 % |
| C ₂₂ | 2,0 % |

Até à data, a empresa utiliza apenas a substância B (compostos de amónio quaternário, cloretos de di(alquil de coco)dimetil, número CE 263-087-6 e número CAS 61789-77-3) para a denominação, uma vez que se adequa melhor a todas as substâncias (substâncias A a G). A empresa pretende saber se é possível abranger todas as substâncias (A a G) num

registo da substância B.

1. Observações gerais

Os hidrocarbonetos (parafinas, olefinas) derivados de gorduras e óleos ou de substitutos sintéticos são identificados pela sua distribuição da cadeia de carbono ou pela sua origem (descriptor de alquilo), por um grupo funcional (descriptor de funcionalidade), por exemplo, amónio, e pelo anião/catião (descriptor de sal), por exemplo, cloreto. A distribuição do comprimento da cadeia, por exemplo, C₈₋₁₈, indica

saturada

linear (não ramificada)

todos os números de carbono (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈), tendo em conta que uma distribuição reduzida não abrange uma distribuição mais ampla e vice-versa.

Em alternativa, deve ser indicada da seguinte forma:

insaturada (C₁₆_{insaturada})

ramificada (C₁₀_{ramificada})

número par (C₁₂₋₁₈_{número par})

As cadeias de carbono descritas através da fonte devem incluir a distribuição que ocorre na fonte, por exemplo, aminas de alquil de sebo.

As aminas de alquil de sebo são 99 % de aminas de alquil de cadeias lineares primárias com a seguinte distribuição do comprimento da cadeia de carbono (Ullmann, 1985) [uma plica simples indica uma ligação dupla, uma plica dupla indica uma ligação tripla]:

| | |
|-------|-------|
| C12 | 1 % |
| C14 | 3 % |
| C14' | 1 % |
| C15 | 0,5 % |
| C16 | 29 % |
| C16' | 3 % |
| C17 | 1 % |
| C18 | 23 % |
| C18' | 37 % |
| C18'' | 1,5 % |

2. Como identificar as substâncias para efeitos de registo?

Cada substância é comparada com a substância B (utilizada até agora para a denominação) a fim de decidir se as duas substâncias podem ser consideradas idênticas.

Comparação das substâncias A e B

A seguinte distribuição de comprimentos de cadeia corresponde ao constituinte «coco» da substância B (Ullmann, 1985) [uma plica simples indica uma ligação dupla, uma plica dupla indica uma ligação tripla]:

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

Assim, a distribuição dos comprimentos de cadeia da substância A difere da distribuição dos comprimentos da cadeia de carbono do constituinte «coco» da substância B. Uma vez que a composição qualitativa e quantitativa das duas substâncias difere significativamente, não podem ser consideradas idênticas.

Comparação das substâncias B e C

A denominação «Compostos de amónio quaternário, cloretos de di(alquil de coco)dimetil» da substância B descreve uma mistura de constituintes com comprimentos da cadeia de carbono diferentes (C₆ a C₁₈ com número par, lineares, saturadas e insaturadas), enquanto a substância C descreve apenas um constituinte com um comprimento de cadeia definida e saturada (C₁₂) com um anião diferente (brometo). Por conseguinte, a substância C não pode ser considerada idêntica à substância B.

Comparação das substâncias B e D

A denominação «Compostos de amónio quaternário, cloretos de di(alquil de coco)dimetil» da substância B descreve uma mistura de constituintes com comprimentos da cadeia de carbono diferentes (C₆ a C₁₈ com número par, lineares, saturadas e insaturadas), enquanto a substância D descreve um constituinte com um comprimento de cadeia definida e saturada (C₁₂) e o mesmo anião (cloreto). As substâncias B e D têm nomes diferentes e não podem ser consideradas idênticas, uma vez que um constituinte simples não é abrangido por uma mistura que contém um determinado constituinte e vice-versa.

Comparação das substâncias B e E

A substância E é uma mistura das substâncias C e D. Ambas têm um comprimento de cadeia saturada C₁₂ mas têm aniões diferentes (brometo e cloreto). A denominação «Compostos de amónio quaternário, cloretos de di(alquil de coco)dimetil» da substância B descreve uma mistura de constituintes com comprimentos da cadeia de carbono diferentes (C₆ a C₁₈ com número par, lineares, saturadas e insaturadas) e cloreto como anião. No entanto, a substância E é descrita apenas pelo comprimento da cadeia de carbono C₁₂ com brometo como anião adicional. Por conseguinte, as substâncias B e E não podem ser consideradas idênticas. Assim, é necessário um registo separado para a substância E.

Comparação das substâncias B e F

A denominação «Compostos de amónio quaternário, cloretos de di-C₁₄₋₁₈-alquilodimetilamónio» descreve uma mistura de constituintes com comprimentos da cadeia de carbono diferentes (C₁₄ a C₁₈ com números pares e ímpares, lineares e saturadas). A substância F difere da substância B na composição e no intervalo de distribuição da cadeia de carbono. A substância F tem uma distribuição reduzida do comprimento da cadeia de carbono e, adicionalmente, as cadeias de carbono ¹⁵⁻ e C₁₇₋. Por conseguinte, as substâncias B e F não podem ser consideradas idênticas.

Comparação das substâncias B e G

As substâncias B e G aparentam ser muito semelhantes, uma vez que a distribuição da cadeia de carbono se encontra praticamente no mesmo intervalo. No entanto, a substância G contém ainda os comprimentos da cadeia de carbono C₄, C₂₀ e C₂₂. A distribuição dos comprimentos da cadeia de carbono da substância G abrange um intervalo mais amplo do que a substância B. Por conseguinte, as substâncias B e G não podem ser consideradas idênticas.

3. Conclusões

Os hidrocarbonetos (parafinas, olefinas) apenas podem ser considerados substâncias idênticas quando os três descritores (alquilo, funcionalidade e sal) são os mesmos.

Nos exemplos indicados acima, os descritores são sempre diferentes entre si. Por conseguinte, as substâncias não podem ser abrangidas por um registo da substância B.

7.10. Substâncias petrolíferas;

São indicados dois exemplos, utilizando as orientações do capítulo 4.3.2 relativas a substâncias UVCB específicas.

7.10.1. Fração de mistura de gasolina (C4-C12)

1. Denominação e outros identificadores

Denominação

| | |
|--------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|
| Nome IUPAC ou outra denominação química internacional | Nafta (petróleo), do <i>reforming</i> catalítico |
|--------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|

Fonte

| | |
|------------------------------------------------------|----------------|
| Identificador ou descrição da fonte da fração | Petróleo bruto |
|------------------------------------------------------|----------------|

Processo

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Descrição do processo de transformação | Processo de <i>reforming</i> catalítico |
| Gama de carbono | C4-C12 |
| Intervalo ou valor limiar do ponto de ebulição | 30 °C a 220 °C |
| Outras propriedades físicas, por exemplo, viscosidade | inferior a 7 mm ² /s a 40 °C (viscosidade) |
| Número CE Número CAS Nome CE/Nome CAS Descrição CE/Descrição CAS | 273-271-8 68955-35-1 Nafta (petróleo), do <i>reforming</i> catalítico Uma combinação complexa de hidrocarbonetos obtida pela destilação de produtos a partir de um processo de <i>reforming</i> catalítico. É constituída por hidrocarbonetos com números de átomos de carbono predominantemente na gama de C4 a C12 e destila no intervalo de aproximadamente 30 °C a 220 °C (90 °F a 430 °F). Contém uma proporção relativamente elevada de hidrocarbonetos aromáticos e de cadeia ramificada. Esta fração pode conter 10 % em volume ou mais de benzeno. |

2. Informação sobre a composição

| Constituintes conhecidos | | | |
|---------------------------------|-------------------|------------------|---------------------------------------|
| Nome IUPAC | Número CAS | Número CE | Intervalo concentração (% m/m) |
| <i>Benzene</i> (Benzeno) | 71-43-2 | 200-753-7 | 1-10 |
| <i>Toluene</i> (Tolueno) | 108-88-3 | 203-625-9 | 20-25 |
| <i>Xylene</i> (Xileno) | 1330-20-7 | 215-535-7 | 15-20 |

7.10.2. Gasóleos (petróleo)

1. Denominação e outros identificadores

| | |
|--------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|
| Nome IUPAC ou outra denominação química internacional | Gasóleos (petróleo), atmosféricos pesados |
|--------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|

Fonte

| | |
|------------------------------------------------------|----------------|
| Identificador ou descrição da fonte da fração | Petróleo bruto |
|------------------------------------------------------|----------------|

Processo

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Descrição do processo de transformação | Destilação atmosférica |
| Gama de carbono | C7 - C35 |
| Intervalo ou valor limiar do ponto de ebulição | 121 °C a 510 °C |
| Outras propriedades físicas, por exemplo, viscosidade | 20 mm ² /s a 40 °C (viscosidade) |
| Número CE Número CAS Nome CE/Nome CAS Descrição CE/Descrição CAS | 272-184-2 68783-08-4 Gasóleos (petróleo), atmosféricos pesados Uma combinação complexa de hidrocarbonetos obtida pela destilação de petróleo bruto. É constituída por hidrocarbonetos com números de átomos de carbono predominantemente na gama de C7 a C35 e destila no intervalo de aproximadamente 121 °C a 510 °C (250 °F a 950 °F). |

2. Composição química

Nenhuma informação disponível.

7.11. Enzimas

São indicados dois exemplos de enzimas concentradas, utilizando as orientações do capítulo 4.3.2.3 relativas a substâncias UVCB específicas: subtilisina (identificada pela nomenclatura IUBMB + outros constituintes) e α -amilase (identificada pela nomenclatura IUBMB + organismo de produção).

7.11.1. Subtilisina

| Proteína enzimática | Subtilisina |
|------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Número IUBMB | 3.4.21.62 |
| Nomes atribuídos pela IUBMB (Nome sistémico, nome enzimático, sinónimos) | Subtilisina; alcalase; alcalase 0.6L; alcalase 2.5L; enzima ALK; bacilopeptidase A; bacilopeptidase B; proteinase alcalina de <i>Bacillus subtilis</i> biopraxe; biopraxe AL 15; biopraxe APL 30; colistinase; (ver também comentários); subtilisina J; subtilisina S41; subtilisina Sendai; subtilisina GX; subtilisina E; etc. |
| Comentários da IUBMB | A subtilisina é uma endopeptidase serina, exemplo-tipo da família de peptidases S8 . Não contém resíduos de cisteína (embora estes se encontrem em enzimas homólogas). As variantes da espécie incluem a subtilisina BPN ¹ (também subtilisina B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse, proteinase Nagarse, subtilisina Novo, proteinase bacteriana Novo) e subtilisina Carlsberg (subtilisina A, subtilopeptidase A, alcalase Novo). Número CE anterior 3.4.4.16 e incluída no número CE 3.4.21.14. São produzidas enzimas idênticas por várias estirpes de <i>Bacillus subtilis</i> e outras espécies de <i>Bacillus</i> [1,3] |
| Reação | Hidrólise de proteínas com maior especificidade para ligações peptídicas e uma preferência por um grande resíduo descarregado em P1. Hidrolisa amidos peptídicos |

| | |
|--------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| Tipo de reação | Hidrolases; Atuando sobre ligações peptídicas (peptidases); Endopeptidases serina |
| Número CE | 232-752-2 |
| Nome CE | Subtilisina |
| Número CAS | 9014-01-1 |
| Nome CAS | Subtilisina |
| Concentração de proteína enzimática | 26 % |
| Outros constituintes | |
| Outras proteínas, peptídeos e aminoácidos | 39 % |
| Hidratos de carbono | 11 % |
| Lípidos | 1 % |
| Sais inorgânicos | 23 % |
| Parâmetros adicionais | |
| Substratos e produtos | proteínas ou oligopeptídeos, peptídeos em solução aquosa |

7.11.2. α -Amilase

| Proteína enzimática | α-Amilase |
|----------------------------|------------------------------------|
| Número IUBMB | 3.2.1.1 |

| | |
|------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Nomes atribuídos pela IUBMB (Nome sistémico, nome enzimático, sinónimos) | 1,4- α -D-glucan glucanohidrolase; glicogenase; α -amilase; alfa-amilase; endoamilase; Taka-amilase A |
| Comentários da IUBMB | Atua sobre amido, glicogénio e polissacarídeos e oligossacarídeos associados de forma aleatória; os grupos redutores são libertados na configuração α . O termo « α » está relacionado com a configuração anomérica inicial do grupo de sacarose livre libertado e não com a configuração da ligação hidrolisada. |
| Reação | Endohidrólise de ligações 1,4- α -D-glucosídicas em polissacarídeos que contenham três ou mais 1,4- α -D-glucose ligadas |
| Tipo de reação | hidrolases; glicosidases; glicosidases, ou seja, enzimas que hidrolisam compostos de O-glicosil e S-glicosil |
| Número CE | 232-565-6 |
| Nome CE | Amilase, α - |
| Número CAS | 9000-90-2 |
| Números CAS associados | 9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (todos suprimidos) |
| Nome CAS | Amilase, α - |
| Concentração de proteína enzimática | 37 % |
| Outros constituintes | |

| | |
|-------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|
| Outras proteínas, peptídeos e aminoácidos | 30 % |
| Hidratos de carbono | 19 % |
| Sais inorgânicos | 14 % |
| Parâmetros adicionais | |
| Substratos e produtos | amido; glicogénio; água; ^[1] polissacarídeo; ^[5EP] oligossacarídeo; |

Apêndice I - Materiais de apoio

Este apêndice contém uma lista de sítios Web, bases de dados e manuais que podem ser úteis para localizar os nomes IUPAC, CAS e CE, os números CAS e CE, as fórmulas moleculares e as estruturas moleculares pertinentes, incluindo notação SMILES, bem como outros parâmetros necessários para a identificação da substância. Não foram incluídos instrumentos de orientação nem bases de dados comerciais.

| Generalidades | | |
|------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Parâmetro de identificação da substância | Fonte | Descrição da fonte |
| Departamento da Saúde e dos Serviços Sociais dos EUA | https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/ | Um conjunto de bases de dados e ferramentas para ajudar os utilizadores a pesquisar informações químicas |
| Perkin Elmer Informatics | https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice | Uma base de dados de acesso gratuito que disponibiliza estruturas químicas, propriedades físicas e hiperligações para informações relevantes |
| BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB) | https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/ | Software para química; Lista Alfabética de Produtos do estudo Accord |

| Denominação e outros identificadores | | |
|-------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Parâmetro de identificação da substância | Fonte | Descrição da fonte |
| Nome IUPAC | https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/ | Sítio Web oficial da IUPAC |
| | https://iupac.qmul.ac.uk/ | Nomenclatura química e recomendações da IUPAC (sob a autoridade da IUPAC) |
| | Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699] | Principais publicações de nomenclatura da IUPAC, atualização prevista em 2006. |
| | A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882] | Principais publicações de nomenclatura da IUPAC, atualização prevista em 2006. |
| | Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941] | Principais publicações de nomenclatura da IUPAC, atualização prevista em julho de 2005. |
| Nome IUPAC | Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4] | Principais publicações de nomenclatura da IUPAC |
| | Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856] | Volume introdutório que abrange todos os tipos de compostos |
| Nome IUPAC | http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/ | Programa informático comercial de denominação que pode ser muito útil para a denominação de estruturas de complexidade moderada. Também disponível como software gratuito para pequenas moléculas (recomendado pela IUPAC) |

| | | |
|------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature | Nomenclatura IUPAC de química orgânica (recomendado pela IUPAC) |
| | http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm | Lista completa de compostos orgânicos com denominações comuns e semissistemáticas aprovadas |
| | http://www.chemexper.com/ | O objetivo do <i>ChemExper Chemical Directory</i> consiste em criar uma base de dados comum e de acesso gratuito sobre produtos químicos na Internet. Esta base de dados contém produtos químicos com as respetivas características físicas. Qualquer pessoa pode apresentar informações químicas e obter informações com um motor de busca na Internet |
| Nomenclatura IUBMB | https://iubmb.qmul.ac.uk/ | Base de dados da nomenclatura bioquímica da IUBMB (sob a autoridade da IUBMB) |
| Outras denominações | http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name | <i>Colour Index Generic Names, Colour Index International</i> , Quarta Edição em linha |
| | https://incipedia.personalcarecouncil.org/ | INCI (<i>International Nomenclature Cosmetic Ingredients</i>), sítio Web oficial do <i>Personal Care Products Council</i> |
| | https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges | Agência EPA (EUA), substâncias que contêm comprimentos da cadeia de carbono variáveis (gamas de alquilo utilizando a notação CX-Y) |
| Outros identificadores | https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en | Normas CE, sítio oficial da CE |
| Número CE | https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory | Inventário CE: pesquisa sobre EINECS, ELINCS, NLP e <i>anexo I</i> da Diretiva 67/548/CEE |

| | | |
|------------|-----------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------|
| Número CAS | http://www.cas.org | Sítio Web oficial do serviço de registo CAS |
| | http://www.chemistry.org | Sítio Web oficial da <i>American Chemical Society</i> |

Fórmula molecular e estrutural

| Parâmetro de identificação da substância | Fonte | Descrição da fonte |
|----------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| SMILES | http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html | Gerador SMILES gratuito |
| Massa molecular e SMILES | http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html | ACDCChemsketch, software gratuito (também disponível no mercado) |
| Vários parâmetros físico-químicos | https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface | A EPI (<i>Estimation Programs Interface</i>) Suite™ é um conjunto de modelos de previsão de propriedades físicas/químicas e destino ambiental para ambientes Windows® desenvolvido pelo <i>Office of Pollution Prevention Toxics</i> (Escritório para a Prevenção da Poluição e Tóxicos) da EPA e pela <i>Syracuse Research Corporation</i> (SRC). |
| Apoio adicional para substâncias específicas | Perguntas e respostas - ECHA Apoio a setores específicos para a identificação de substâncias - ECHA | É prestado apoio às abordagens de designação e caracterização de substâncias específicas no sítio Web da ECHA e nas perguntas e respostas. |

Apêndice II – Orientações técnicas por parâmetro de identificação da substância

A informação apresentada neste apêndice destina-se aos utilizadores do guia de orientação que não estão familiarizados com as regras técnicas relativas à nomenclatura, com a utilização dos diversos números de registo e com as regras de notação para informações de natureza molecular e estrutural, dados espectrais, etc.

Fornece uma introdução geral com um resumo dos princípios fundamentais e indica ao utilizador como aceder às fontes originais para obter informações completas.

Esta descrição geral é uma versão simplificada, não completa ou exaustiva e não suficientemente pormenorizada para os utilizadores profissionais. Não deve, em caso algum, ser considerada equivalente à fonte oficial.

1 Nome(s) na nomenclatura IUPAC ou noutra nomenclatura internacional

Para efeitos de registo, deve ser indicado o nome IUPAC em inglês ou outra denominação da substância bem definida e internacionalmente aceite.

Os nomes IUPAC são baseados na nomenclatura química internacional normalizada definida pela organização internacional IUPAC, a União Internacional de Química Pura e Aplicada (para as referências pertinentes, consulte o apêndice 1). A nomenclatura IUPAC é uma forma sistemática de denominação das substâncias químicas orgânicas e inorgânicas. Na nomenclatura IUPAC são utilizados prefixos, sufixos e infixos para descrever o tipo e a posição dos grupos funcionais na substância.

penta-1,3-dien-1-ol, neste exemplo:

o prefixo é **penta-1,3-**

o infixos é **-di** e

o sufixo é **-ol**

en- é a base do nome, o nome raiz.

O conjunto de regras foi desenvolvido ao longo de vários anos e está em constante evolução de forma a abranger os novos componentes de diversidade molecular e os possíveis conflitos ou confusões que sejam identificados. As regras estabelecidas pela IUPAC só podem ser utilizadas para substâncias bem definidas.

São apresentadas, a seguir, algumas orientações gerais sobre a estrutura dos nomes IUPAC. Para um maior apoio, utilize as orientações fornecidas no capítulo 4 do guia de orientação.

1.1 Substâncias orgânicas

Etapa 1 Identificar o número de átomos de carbono na cadeia contínua de átomos de carbono mais extensa; este número determina o prefixo, a primeira parte, do nome raiz:

| Número de átomos de carbono | Raiz |
|-----------------------------|-------|
| 1 | met- |
| 2 | et- |
| 3 | prop- |
| 4 | but- |
| 5 | pent- |
| 6 | hex- |
| 7 | hept- |
| 8 | oct- |
| N | |

Etapa 2 Determinar a saturação da cadeia; a saturação da cadeia determina o sufixo, a segunda parte, do nome raiz:

| Saturação | Ligações | Sufixo |
|------------|-----------------|--------------------------|
| Insaturada | Dupla Tripla | -ene (-eno) -yn (-in) |
| Saturada | - | -ane (-ano) |

No caso de ligações duplas ou triplas, o número de ligações é indicado com «mono», «di», «tri», etc., antes do sufixo:

Pentene (penteno) com 2 ligações duplas: pentadiene (pentadieno)

Etapa 3 Combinar o prefixo, o sufixo e adições com o nome raiz

NB: Para o nome raiz também podem ser utilizados nomes comuns e semissistemáticos aprovados pela IUPAC:

Benzene (benzeno), toluene (tolueno), etc.

Etapa 4 Utilizar o quadro seguinte:

- Identificar substituintes e/ou grupos funcionais: grupos carbono ou sem carbono anexados aos átomos da cadeia de carbono identificados na etapa 1;
- determinar a ordem de precedência dos substituintes e/ou grupos funcionais;
- adicionar o sufixo para o primeiro substituinte/grupo funcional e outros subsequentes por ordem de precedência;
- adicionar o prefixo para os outros substituintes e grupos funcionais por ordem

alfabética.

| Precedência | Grupo | Fórmula | Sufixo | Prefixo |
|-------------|-------------------------------------|---------------------|-----------|-----------|
| 1 | Carboxylic acid (ácido carboxílico) | R-COOH | -oic acid | Carboxy |
| 2 | Ester (éster) | R-CO-O-R | -oate | - |
| 3 | Amide (amido) | R-CONH ₂ | -amide | Carbamoyl |
| 4 | Cyanide (cianeto) | R-CN | -nitrile | Cyano |
| 5 | Aldehyde (aldeído) | R-CHO | -al | Oxo |
| 6 | Ketone (cetona) | R-CO-R | -one | Oxo |
| 7 | Alcohol (álcool) | R-OH | -ol | Hydroxyl |
| 8 | Thiol (tiol) | R-SH | -thiol | Sulfanyl |
| 9 | Amine (amina) | R-NH ₂ | -amine | Amino |

1.2 Substâncias inorgânicas

1.2.1 Denominação de substâncias inorgânicas simples

A denominação de substâncias inorgânicas simples é baseada num conjunto de regras (livro vermelho da IUPAC, ver referência no ponto 7.1), das quais as mais elementares são apresentadas a seguir:

1 Os aniões de um átomo simples são denominados com um sufixo -ide [-ido]:

O²⁻ é oxide [óxido]

2 Os compostos iónicos simples são denominados com o catião seguido do anião. Para catiões com cargas > 1, as cargas são escritas utilizando numerais romanos entre parêntesis imediatamente seguidos do nome do elemento:

Cu²⁺ é copper(II) [cobre(II)]

3 Os hidratos são denominados da mesma forma que o composto iónico, seguido por um prefixo numérico e -hydrate [-hidrato]. Os prefixos numéricos são mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, deca-:

CuSO₄ · 5H₂O é «copper(II) sulphate pentahydrate» [sulfato de cobre(II) pentahidratado]

NB: para efeitos de registo, os hidratos e, se aplicável, a forma anidra, de um sal

metálico específico são considerados «substâncias idênticas».

4 Os compostos moleculares são denominados com um prefixo (ver hidratos) antes de cada elemento. Os elementos mais eletronegativos são escritos em último lugar, com um sufixo -ide [-ido ou -eto]:

CO₂ é carbon dioxide [dióxido de carbono] e CCl₄ é carbon tetrachloride [tetracloroeto de carbono].

5 Os ácidos são denominados de acordo com o anião formado quando o ácido é dissolvido em água. Existem várias possibilidades:

- a. Se, quando dissolvido em água, o ácido se dissocia num anião com a denominação «x»-ide [«x»-ido/eto], é denominado hydro-«x»-ic acid [ácido «x»-ídrico]:

o ácido clorídrico forma um anião cloreto.

- b. Se, quando dissolvido em água, o ácido se dissocia num anião com a denominação «x»-ate [«x»-ato], é denominado «x»-ic acid [ácido «x»-ico]:

em água, o ácido clórico dissocia-se em aniões clorato.

- c. Se, quando dissolvido em água, o ácido se dissocia num anião com a denominação «x»-ite [«x»-ito], é denominado «x»-ous acid [ácido «x»-oso]:

o ácido cloroso dissocia-se em aniões clorito.

1.2.2 Designação das fases mineralógicas

As fases mineralógicas complexas contêm geralmente três ou mais elementos em combinação. A maior parte dos elementos presentes são combinados com oxigénio e, a fim de simplificar a identificação, os mineralogistas consideram normalmente que os compostos complexos são constituídos por óxidos, dos quais uns têm caráter básico e outros têm caráter ácido. No caso dos silicatos, por exemplo, é comum representá-los como a soma de vários óxidos, como sais de ácido silícico ou silicatos de alumínio ácidos. Da mesma forma, o ortossilicato de cálcio pode ser representado como 2CaO.SiO₂, uma combinação de óxidos separados ou como Ca₂SiO₄, como o sal de cálcio do ácido H₄SiO₄. Este critério aplica-se a outros óxidos minerais complexos – são denominados com um prefixo antes de cada óxido (por exemplo, a₃SiO₅ = Silicato tricálcico = 3CaO.SiO₂). Em alguns setores industriais foi introduzida uma maior simplificação a fim de abreviar as fórmulas dos compostos. No caso do clínquer de Portland, por exemplo, 2CaO.SiO₂ (ortossilicato de cálcio ou silicato dicálcico) é abreviado para C₂S, em que C = CaO e S = SiO₂. Aconselha-se a consulta de documentos padrão mineralógicos ou da indústria sempre que for necessário denominar ou identificar fases mineralógicas complexas.

1.3 Produtos naturais e constituintes associados

No que respeita aos produtos naturais, a IUPAC criou várias regras para uma designação sistemática. Em resumo, tal significa que, para as substâncias extraídas a partir de uma fonte natural, a denominação é baseada, sempre que possível, na denominação da família, do género ou da espécie do organismo do qual a substância foi extraída:

Para uma proteína hipotética, *Hypothecalia Exemplare* as denominações são baseadas em *hypothecalia* e/ou *exemplare*, por exemplo, *Horse Exemplare*

Se possível, a denominação deve refletir a distribuição conhecida ou provável do produto

natural. Se adequado, a classe ou a ordem podem também ser utilizadas como base para a denominação de uma substância que ocorre em várias famílias relacionadas. A denominação de produtos naturais de estrutura desconhecida não deve conter nenhum dos prefixos, sufixos e/ou infixos utilizados na nomenclatura orgânica:

Produto da condensação de Horse exemplare, Valarine adicionado à terminação N

Muitas substâncias que ocorrem na natureza pertencem a classes estruturais bem definidas, que podem, cada uma delas, ser caracterizadas por um conjunto de estruturas principais estreitamente relacionadas, ou seja, cada uma pode ser derivada de uma estrutura fundamental. A denominação sistemática destas substâncias que ocorrem na natureza e dos seus derivados pode basear-se no nome da estrutura principal fundamental adequada:

As estruturas principais bem conhecidas são alcaloides, esteroides, terpenoides e vitaminas

Uma estrutura principal fundamental deve refletir uma estrutura de base comum à maior parte das substâncias dessa classe. As substâncias que ocorrem na natureza ou os seus derivados são denominados de acordo com a estrutura principal, adicionando prefixos, sufixos ou infixos que denotem:

- modificações da estrutura de base
- substituição de átomos de base
- alterações do estado de hidrogenação implicado pelo nome da estrutura principal
- átomos ou grupos que substituem átomos de hidrogénio da estrutura principal
- configurações ainda não implícitas a partir do nome da estrutura principal ou alteradas dessa configuração implícita

O cloreto de tiamina também é conhecido como vitamina B₁

Para informações mais pormenorizadas sobre a designação sistemática de produtos naturais e substâncias relacionadas, deve contactar a IUPAC (ver apêndice 1)

1.4 Não é possível determinar o nome IUPAC

Se não for possível determinar um nome IUPAC para determinadas substâncias, podem ser utilizadas outras nomenclaturas reconhecidas internacionalmente, específicas para essas substâncias, tais como:

- minerais e minérios; nomes mineralógicos;
- Substâncias petrolíferas;
- *Colour Index Generic Names* [Índice de Cor de Nomes Genéricos] ³;
- aditivos de óleos;
- INCI (Nomenclatura Internacional dos Ingredientes Cosméticos) ⁴;
- Nomes da SDA (Associação de Sabões e Detergentes) para surfatantes ⁵;
- etc.

2 Outras denominações

Todos os nomes e/ou identificadores públicos relevantes em todos os idiomas em que a substância é ou será comercializada na UE (por exemplo, nomes comerciais) são úteis para efeitos de registo no âmbito do REACH. Tal inclui nomes comerciais, sinónimos, abreviaturas, etc.

- <http://www.colour-index.com>, Colour Index International, quarta edição em linha
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, sítio Web oficial do Personal Care Products Council
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, sítio Web oficial do American Cleaning Institute (ACI).

3 Número CE a partir das listas EINECS, ELINCS ou NLP (Inventário CE)

O número CE, ou seja, o número EINECS, ELINCS ou NLP, é o número oficial da substância na União Europeia. O número CE pode ser obtido a partir das publicações oficiais do EINECS, ELINCS e NLP e da Agência Europeia dos Produtos Químicos.

O número CE é constituído por 7 dígitos do tipo $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$. O primeiro dígito é definido pela lista à qual a substância pertence:

| Lista | Primeiro dígito do número CE |
|--------|------------------------------|
| EINECS | 2 ou 3 |
| ELINCS | 4 |
| NLP | 5 |

4 Nome CAS e número CAS

O Serviço de Resumos de Química (CAS, *Chemical Abstracts Service*), uma divisão da Sociedade Americana de Química (ACS, *American Chemical Society*), atribui um nome e um número CAS a todos os produtos químicos que são introduzidos na base de dados do registo CAS. Os nomes e os números são atribuídos por ordem sequencial a substâncias únicas identificadas pelos cientistas do CAS. Cada substância registada no CAS tem um nome de acordo com a nomenclatura CAS, que o CAS adota na sequência de recomendações do seu comité para a nomenclatura (ver referência no apêndice 1).

4.1 Nome CAS

O nome CAS é o nome atribuído pelo CAS e é diferente do nome IUPAC. A nomenclatura CAS é baseada num conjunto limitado de critérios que nem sempre são suficientes para determinar o nome para uma substância. Por conseguinte, recomenda-se que o Serviço de Resumos de Química seja contactado para obtenção do nome CAS correto.

Em resumo, as regras básicas da nomenclatura são:

- Uma parte «principal» da substância é selecionada para funcionar como título ou denominação principal.
- Os substituintes são indicados a seguir ao título/principal, o qual é referenciado por ordem inversa.
- Quando existem mais substituintes, os mesmos são indicados por ordem alfabética (incluindo os prefixos):

o-Xylen-3-ol [o-Xylen-3-ol] é Benzene, 1,2-dimethyl, 3-hydroxy, [Benzeno, 1,2-dimetil, 3-hidroxi,]

4.2 Número CAS

O número CAS pode ser obtido a partir do Serviço de Resumos de Química.

O número CAS é constituído por um mínimo de 5 dígitos, dividido em três partes, separadas por hífenes. A segunda parte é sempre constituída por 2 dígitos e a terceira parte por um dígito:

$$N_i \dots N_4 N_3 - N_2 N_1 - R$$

Para efeitos de verificação do número CAS, está disponível uma «soma de verificação»:

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

O número CAS tem de estar correto de acordo com a soma de verificação.

5 Outros códigos de identidade

Também podem ser indicados outros códigos de identidade reconhecidos internacionalmente, tais como:

- Número da alfândega
- Número ONU;
- Número do índice de cor;
- Número de corante.

6 Fórmula molecular, fórmula estrutural e SMILES

6.1 Fórmula molecular

Uma fórmula molecular identifica cada tipo de elemento pelo seu símbolo químico e identifica o número de átomos de cada um desses elementos encontrados numa molécula discreta da substância.

As fórmulas moleculares devem ser indicadas de acordo com o sistema de Hill (tradicional) e, adicionalmente, de acordo com o sistema CAS, quando este difere da fórmula do sistema de Hill.

Para aplicar o método de Hill, podem ser seguidas as seguintes etapas:

1. Identificar os elementos e listar os símbolos químicos;
2. Ordenar os elementos pela ordem correta:
 - a. Substâncias que contêm carbono:

cada elemento é identificado pelo seu símbolo químico, na sequência seguinte:

 - (1) Carbono;
 - (2) Hidrogénio;
 - (3) Outros símbolos de elementos por ordem alfabética:

Pentano: C₅H₁₂

Penteno: C₅H₁₀

Pentanol: C₅H₁₂O

- b. Substâncias que não contêm carbono:

os elementos são indicados por ordem alfabética:

Hydrochloric acid [ácido clorídrico]: ClH

3. Para cada elemento, quando o número de átomos for > 1, indicar o número de átomos como um subscrito dos símbolos químicos;
4. Adicionar informações não relacionadas com a estrutura principal no final da fórmula molecular, separadas por um ponto ou uma vírgula:

Benzoato de sódio é C7H6O2, sal de sódio

Sulfato de cobre di-hidrato é CuO4S.2H2O

Caso não seja possível aplicar o método de Hill para uma substância específica, a fórmula molecular deve ser indicada de forma diferente, por exemplo, através de uma fórmula empírica, uma descrição simples dos átomos e a percentagem dos átomos disponíveis, ou através da fórmula apresentada pelo Serviço de Resumos de Química (ver capítulo 4 do guia de orientação).

6.2 Fórmula estrutural e descrição da estrutura cristalina

A fórmula estrutural é necessária para a visualização da disposição das moléculas na substância e das relações que estabelecem entre si. A fórmula estrutural deve indicar a localização dos átomos, iões ou grupos e a natureza das ligações que os unem. Tal inclui igualmente o isomerismo, ou seja, cis/trans, quiralidade, enantiómeros, etc.

A fórmula estrutural pode ser indicada em formatos diferentes: sob a forma de uma fórmula molecular e/ou sob a forma de um diagrama estrutural.

- *Fórmula estrutural sob a forma de fórmula molecular*

1. Escrever todo o grupo de elementos desta forma e pela ordem de aparecimento:

n-pentano: CH3CH2CH2CH2CH3

2. Cada substituinte é escrito entre parêntesis, logo a seguir ao átomo ao qual está ligado:

2-metilbutano: CH3CH(CH2)CH2CH3

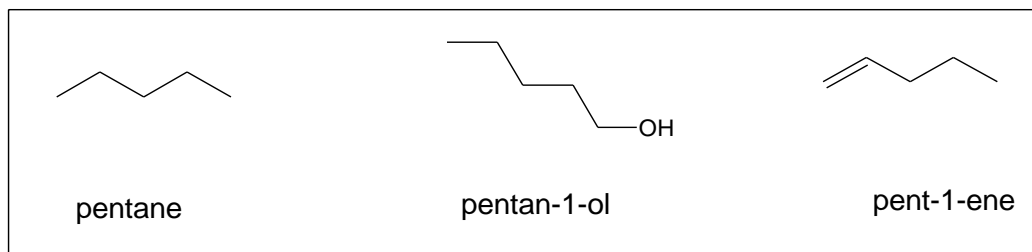
3. No caso de ligações duplas ou triplas, indique-as entre os grupos de elementos afetados:

pent-1-eno: CH2=CHCH2CH2CH3

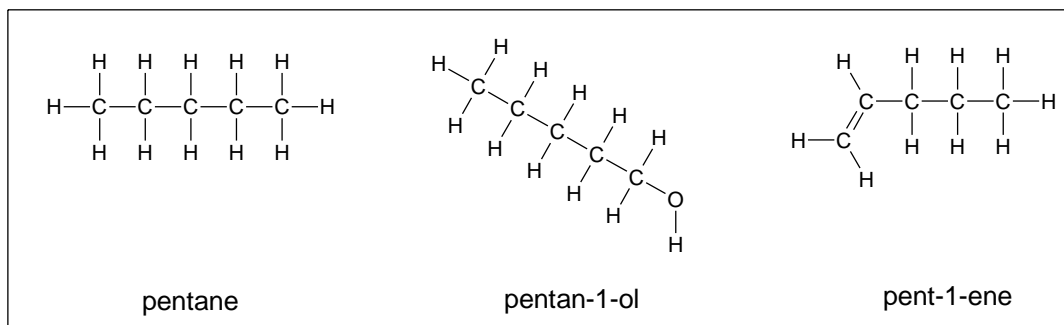
Fórmula estrutural sob a forma de diagrama molecular

Para um diagrama estrutural, os elementos e as ligações entre os elementos são visualizados numa imagem 2D ou 3D. Existem vários métodos:

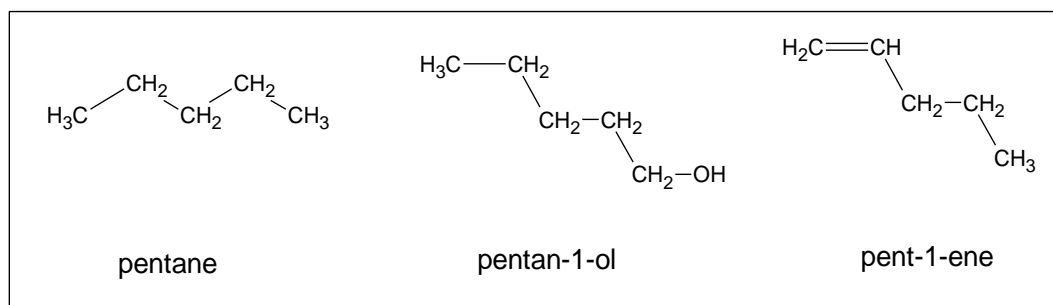
1. Apresentar todos os elementos não carbono e o hidrogénio ligado aos elementos não carbono.



2. Apresentar todos os elementos pelo nome



3. Apresentar o carbono e o hidrogénio como grupos (por exemplo, CH₃), todos os elementos não carbono e todos os hidrogénios não ligados a carbono.

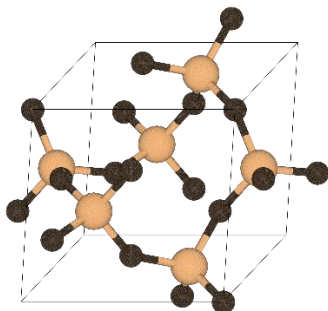


- - Fórmula estrutural sob a forma de fórmula molecular

1. Fornecer a fórmula molecular:



2. Fornecer uma estrutura cristal para a substância



3. Indicar o nome mineralógico e/ou cristalográfico com base no sistema de cristais³² e na classe de cristais:

α-quartzo [*β*-quartzo] / **sistema cristalino:** trigonal - hexagonal, **classe cristalina:** trigonal-trapezoidal 3 2

6.3 Notação SMILES

SMILES é o acrónimo de Especificação de entrada de linha de dados moleculares simplificada.³³ Trata-se de um sistema de notação química utilizado para representar uma estrutura molecular através de uma cadeia linear de símbolos. Com a notação SMILES padrão, o nome de uma molécula é sinónimo da sua estrutura: mostra indiretamente uma imagem bidimensional da estrutura molecular. Uma vez que uma estrutura química bidimensional pode ser desenhada de várias formas, existem várias notações SMILES corretas para uma só molécula. A base da notação SMILES é a representação de um modelo de valência de uma molécula; por conseguinte, não é adequada para descrever moléculas que não podem ser representadas através de um modelo de valência.

As notações SMILES são constituídas por átomos, designados por símbolos de elementos, ligações, parêntesis (utilizados para indicar ramificações) e números (utilizados para estruturas cíclicas). Uma notação SMILES representa uma estrutura molecular sob a forma de um gráfico com indicações quirais opcionais. Uma notação SMILES que descreva a estrutura apenas em termos de ligações e átomos é denominada notação SMILES genérica; uma notação SMILES escrita com especificações isotópicas e quirais é conhecida como notação SMILES isomérica.

Em resumo, a notação SMILES baseia-se em várias regras básicas:

1. Os átomos são representados pelos respetivos símbolos atómicos;
2. Cada átomo, com exceção do hidrogénio, é especificado independentemente;
 - a. Os elementos do «subconjunto orgânico» B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I são escritos sem parêntesis retos e sem o símbolo H ligado, desde que o número de átomos H esteja conforme com as menores valências normais consistentes com ligações explícitas:

| Elementos do «subconjunto orgânico» | «Menores valências normais» |
|-------------------------------------|-----------------------------|
| B | 3 |
| C | 4 |
| N | 3 e 5 |

³² cúbico/tetragonal/ortorrômbico/romboédrico (ou trigonal)/hexagonal/monoclínico/triclínico

³³ Weininger (1988) *SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules*; (SMILES, um sistema de informação e linguagem química. 1. Introdução às regras de metodologia e codificação); J. Chem. Inf. Comput. Sci.; 1988; 28(1); 31-36.

| | |
|----|----------|
| O | 2 |
| P | 3 e 5 |
| S | 2, 4 e 6 |
| F | 1 |
| Cl | 1 |
| Br | 1 |
| I | 1 |

- b. Os elementos do «subconjunto orgânico» são escritos com parêntesis retos caso o número de átomos H não esteja conforme com a menor valência normal:

o catião de amónio é NH₄⁺

- c. Os elementos que não pertencem ao «subconjunto orgânico» são escritos entre parêntesis retos com quaisquer átomos de hidrogénio ligados apresentados.

3. Os átomos alifáticos são escritos em maiúsculas; os átomos aromáticos são escritos em minúsculas:

o benzeno é c1ccccc1 e o ciclohexano é C1CCCCC1

4. O hidrogénio apenas é incluído nas seguintes situações:
- Hidrogénio com carga, ou seja, um protão, [H⁺];
 - Hidrogénios ligados a outros hidrogénios, ou seja, hidrogénio molecular, [H][H];
 - Hidrogénios com ligações que não sejam a outros átomos, por exemplo, pontes de hidrogénio;
 - Especificações de hidrogénio isotópico, por exemplo, deutério ([²H]);
 - Se o hidrogénio estiver ligado a um átomo quiral.
5. As quatro ligações básicas são as seguintes:

| Tipo de ligação | Notação SMILES |
|------------------------|----------------------------------|
| Simples | - (não é necessário representar) |
| Dupla | = |
| Tripla | # |
| Aromática | letras minúsculas |

6. Os substituintes são apresentados entre parêntesis e logo a seguir aos átomos a que estão ligados:

2-metilbutano é CC(C)CC

- a. Os substituintes são sempre apresentados diretamente a seguir aos átomos relevantes; não podem estar a seguir a um símbolo de ligação dupla ou tripla:

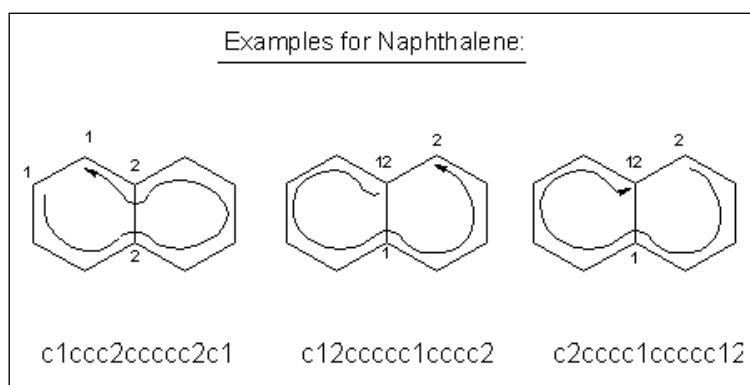
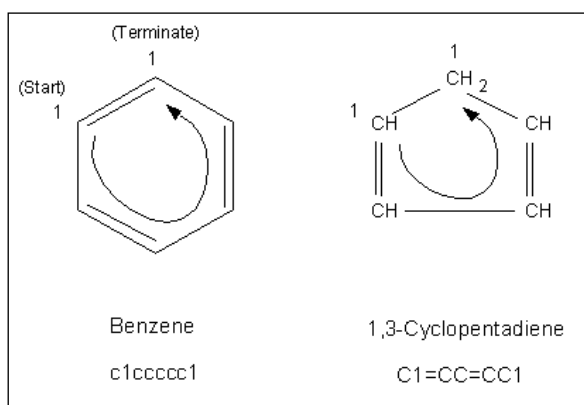
o ácido pentanoico é CCCCC(=O)O

- b. São permitidos substituintes dentro de substituintes:

o 2-(1-metiletil)butano é CC(C(C)C)CC

7. Para as estruturas cíclicas, são utilizados os números 1 a 9 para indicar os átomos inicial e terminal do ciclo.

- a. O mesmo número é utilizado para indicar os átomos inicial e terminal de cada anel. Os átomos inicial e terminal têm de estar ligados entre si.
- b. Os números são introduzidos imediatamente a seguir aos átomos utilizados para indicar as posições inicial e terminal.
- c. Um átomo inicial ou terminal pode ser associado a dois números consecutivos.



8. Os compostos não ligados são designados como estruturas individuais ou iões separados por um ponto («.»). Os átomos adjacentes separados por ponto («.») não estão diretamente ligados entre si (por exemplo, ligação de Van der Waals):

o hidrocloreto de aminopropeno é C=CC(N).HCl

9. A configuração isomérica é especificada com os caracteres de «barra» «\» e «/». Estes símbolos indicam a direção relativa entre duas ligações isoméricas. (cis = «/», trans = «\»). A notação SMILES utiliza a quiralidade local, o que significa que a quiralidade deve ser especificada na totalidade:

o cis-1,2-dibromoeteno é Br/C=C\Br

o trans-1,2-dibromoeteno é Br/C=C/Br

10. Os enantiômeros ou a quiralidade são especificados pelo símbolo «@». O símbolo «@» indica que os vizinhos do átomo quiral são indicados no sentido contrário ao dos ponteiros do relógio. Se for utilizado o símbolo «@@», os átomos são indicados no sentido dos ponteiros do relógio. O átomo quiral e o símbolo «@» são apresentados entre parêntesis retos:

o ácido 2-cloro-2-hidroxiopropanoico com

quiralidade específica é C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)

11. As especificações isotópicas são indicadas precedendo o símbolo atômico por um número igual à massa atômica integral relevante. As massas atômicas só podem ser especificadas entre parêntesis retos:

O Carbono-13 é [13C] e o Oxigênio-18 é [18O]

Estão disponíveis várias ferramentas (geradores SMILES) para a determinação da notação SMILES (ver apêndice 1).

7 Informação relativa à atividade ótica

A atividade ótica é a capacidade das substâncias assimétricas de rodar a orientação da luz polarizada planar. Essas substâncias, e as respectivas imagens especulares, são conhecidas como enantiômeros e têm um ou vários centros quirais. Embora difiram na disposição geométrica, os enantiômeros possuem propriedades físicas e químicas idênticas. Uma vez que cada tipo de enantiômero afeta a luz polarizada de forma diferente, a atividade ótica pode ser utilizada para identificar o enantiômero que está presente numa amostra e, desse modo, determinar também a pureza da substância. A magnitude da rotação é uma propriedade intrínseca da molécula.

Os enantiômeros têm sempre rotações opostas: polarizam a luz na mesma extensão, mas em direções opostas. A atividade ótica de uma mistura de enantiômeros é, assim, uma indicação da relação entre os dois enantiômeros. Uma mistura simétrica de enantiômeros (50 % de cada) tem uma atividade ótica zero.

A rotação observada depende da concentração, do comprimento do tubo da amostra, da temperatura e do comprimento de onda da fonte de luz.

A atividade ótica é, por conseguinte, o parâmetro de definição para identificar uma substância assimétrica e, também, o único parâmetro capaz de distinguir a substância da sua imagem especular. Por conseguinte, se aplicável, a atividade ótica da substância deve ser indicada.

O padrão para a atividade ótica é denominado rotação específica. A rotação específica é definida como a rotação observada da luz a 5896 angstrom numa amostra com uma concentração de 1 g/ml e num percurso de 1 dm. A rotação específica é a rotação observada dividida pelo percurso (dm) e multiplicada pela concentração (g/ml).

A atividade ótica pode ser medida através de vários métodos diferentes. Os mais comuns são:

- rotação ótica, na qual é medida a rotação do plano de polarização de um feixe de luz que atravessa a amostra;
- dicroísmo circular, no qual é medida a absorção de luz polarizada para a direita e para a esquerda por uma amostra.

Se a substância rodar a luz para a direita (sentido dos ponteiros do relógio), é denominada

dextrógira e é designada com um sinal +. Se a substância rodar a luz para a esquerda (sentido contrário ao dos ponteiros do relógio), é denominada levógira e é designada com um sinal -.

8 Massa molecular ou intervalo de massas moleculares

A massa molecular é a massa de uma molécula de uma substância expressa em unidades de massa atômica (amu ou u) ou como massa molar (g/mole). A massa molecular pode ser calculada a partir da fórmula molecular da substância: é a soma das massas atômicas dos átomos que formam a molécula. Para moléculas como algumas proteínas ou misturas reacionais indefinidas, para as quais não é possível determinar uma massa molecular única, pode ser indicado um intervalo de massa molecular.

Podem ser utilizados vários métodos para determinar a massa molecular de substâncias:

- Para determinar as massas moleculares de substâncias gasosas, pode ser utilizada a lei de Avogadro, a qual estabelece que, nas mesmas condições de pressão e temperatura, um dado volume de um gás contém um número específico de moléculas do gás;

$$PV = nRT = NkT$$

n = número de moles

R = constante universal dos gases perfeitos = 8,3145 J/mol K

N = número de moléculas

k = constante 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 substâncias sólidas e líquidas, a massa molecular pode ser calculada através da determinação dos seus efeitos sobre o ponto de fusão, o ponto de ebulição, a pressão de vapor ou a pressão osmótica de um solvente;
- Massa espetrométrica, um método de medição de grande precisão;
- Para moléculas de substâncias complexas com massas moleculares elevadas, como proteínas ou vírus, as massas moleculares podem ser determinadas através da medição, por exemplo, da velocidade de sedimentação numa ultracentrifugadora ou através da fotometria da dispersão da luz;
- Estão disponíveis várias ferramentas que podem calcular a massa molecular com base num diagrama estrutural ou numa fórmula molecular da substância (ver apêndice 1).

9 Composição da substância

Para cada substância, deve ser comunicada a respetiva composição expressa como uma combinação dos constituintes principais, aditivos e impurezas, em conformidade com as regras e os critérios descritos no capítulo 4 do guia de orientação.

Cada constituinte, aditivo ou impureza deve ser identificado adequadamente da seguinte forma:

- Denominação (nome IUPAC ou outra denominação reconhecida internacionalmente, caso exista);
- Número CAS (caso exista);
- Número CE (caso exista);
- Todos os outros identificadores disponíveis

Para cada constituinte, grupo de constituintes, aditivo ou impureza, deve ser indicada a concentração típica em percentagem nos lotes comerciais (de preferência por massa ou por volume), sempre que possível. Os valores indicados devem totalizar 100 %. Os limites de concentração superior e inferior, como o intervalo na substância comercial, devem sempre ser indicados.

10 Dados espectrais

Os dados espectrais são necessários para confirmar a estrutura indicada para uma substância monoconstituente ou para confirmar que uma mistura reacional não é uma preparação. Podem ser utilizados vários métodos para gerar espectros (ultravioleta, infravermelho, ressonância magnética nuclear ou espectrometria de massa). Nem todos os métodos são adequados para todos os tipos de substâncias. Sempre que possível, o guia de orientação indicará os espectros adequados a incluir para os diferentes tipos de substâncias (ECB, 2004; ECB, 2005).

Para vários dos métodos mais conhecidos, devem ser indicadas as informações seguintes nos próprios espectros ou em anexos:

Espectro Ultravioleta-Visível (UV-VIS)

- A identidade da substância;
- Solvente e concentração;
- Gama;
- Posição (e valores épsilon) dos picos principais;
- Efeito de ácido;
- Efeito de álcali.

Espectro de Espectroscopia de Infravermelho (IR)

- A identidade da substância;
- Meio;
- Gama;
- Resultados (indicar os picos principais importantes para a identificação, por exemplo, interpretação da área de impressão digital).

Espectro de Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

- A identidade da substância;
- Núcleo e frequência;
- Solvente;
- Se pertinente, referências internas ou externas;
- Resultados (indicar os sinais importantes para a identificação da substância e os sinais correspondentes para o solvente e para as impurezas);
- Para espectros NMR 1H, deve ser indicada a curva de integração;
- A intensidade dos picos NMR fracos deve ser aumentada verticalmente e os padrões

complexos devem ser expandidos.

Espetro de Espectroscopia de Massa (MS)

- A identidade da substância;
- Tensão de aceleração;
- Método de carga (inserção direta, através de cromatografia gasosa (CG), etc.);
- Modo de ionização (impacto de elétrons, ionização química, dessorção de campo, etc.);
- O íon molecular (M);
- Fragmentos importantes para a identificação da substância;
- Valores M/z ou atribuições dos picos importantes para a identificação da estrutura;
- Os padrões complexos devem ser expandidos.

X-Ray Diffraction Mass spectroscopy (XRD) Epectrum

- A identidade da substância;
- Tensão,
- Corrente,
- Fonte de raios X e quaisquer referências bibliográficas que permitam a identificação da(s) fase(s) cristalina(s) presente(s) na substância;

São necessários, pelo menos, os seguintes requisitos no caso de o método XRD ser utilizado para a identificação e quantificação das fases cristalinas ou amorfas presentes na substância:

- Descrição dos métodos de transformação e dos padrões internos utilizados,
- Quantitativo do valor de mérito que reflete o ajustamento entre o padrão de difração modelizada/de referência
- Padrão de medição, bem como a escala para o quantitativo do valor de mérito (por exemplo, 0-1 ou 0-100)

Também podem ser utilizados outros métodos reconhecidos cientificamente se os dados espectrais confirmarem a identificação da substância, por exemplo, a estrutura interna, nomeadamente a

Os requisitos seguintes são necessários para uma compreensão e/ou interpretação clara dos espectros:

- Descrever a preparação da amostra;
- Anotar os comprimentos de onda significativos ou outros dados, consoante adequado;
- Fornecer informações suplementares, por exemplo, espectros de materiais de base;
- Indicar o solvente utilizado e/ou outras informações essenciais, tal como indicado acima para alguns métodos;
- Fornecer cópias legíveis (em vez dos originais) com escalas devidamente marcadas;
- Fornecer informações sobre as concentrações utilizadas da substância;
- Assegurar que os picos mais intensos relativos à substância se aproximam da marcação total da escala.

11 Cromatografia líquida de elevado rendimento, cromatografia gasosa

Sempre que tal se afigure adequado para o tipo de substância, deve ser fornecido um cromatograma para confirmar a sua composição. Por exemplo, um cromatograma adequado confirmará a existência de impurezas e aditivos, bem como os constituintes de

uma mistura reacional. Os dois métodos mais conhecidos para separação e identificação de misturas são a cromatografia gasosa (CG) e a cromatografia líquida de elevado rendimento (HPLC). Os dois métodos são baseados na interação de uma fase móvel com uma fase estacionária, conduzindo à separação dos constituintes de uma mistura.

Para os cromatogramas CG/HPLC, devem ser indicadas as informações seguintes no próprio cromatograma ou em anexos (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC

- A identidade da substância;
- Propriedades da coluna, tais como o diâmetro, embalagem, comprimento;
- Temperatura (e o intervalo de temperaturas, se utilizado);
- Composição da fase móvel (e o intervalo, se utilizado);
- Intervalo de concentração da substância;
- Método de visualização, por exemplo, UV-VIS;
- Resultados (indicar os picos principais importantes para a identificação da substância).

CG

- A identidade da substância;
- Propriedades da coluna, tais como o diâmetro, embalagem, comprimento;
- Temperatura (e o intervalo de temperaturas, se utilizado);
- Temperatura de injeção;
- Gás condutor e pressão do gás condutor;
- Intervalo de concentração da substância;
- Método de visualização, por exemplo, MS;
- Identificação de picos;
- Resultados (indicar os picos principais importantes para a identificação da substância).

12 Descrição dos métodos analíticos

O *anexo VI* do REACH exige que o registante forneça uma descrição dos métodos analíticos e/ou a indicação das referências bibliográficas dos métodos utilizados para a identificação da substância e, eventualmente, das impurezas e aditivos. Estas informações devem ser suficientes para possibilitar a reprodução dos métodos.

Apêndice III - Identificação da substância e apresentação conjunta de dados

A parte central do presente guia de orientação descreve os princípios gerais que os potenciais registantes devem seguir ao identificar as substâncias específicas da sua entidade jurídica que devem ser registadas. O presente apêndice fornece orientações práticas aos potenciais registantes sobre como aplicar os princípios de identificação da substância quando definem coletivamente a identidade e o âmbito da identidade da substância para efeitos de registo conjunto de acordo com o princípio «uma substância - um registo» do REACH. Para mais informações sobre as obrigações de apresentação conjunta e o processo de partilha de dados em geral, consultar as Orientações sobre a partilha de dados disponíveis em <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

Está implícito que os mesmos princípios de identificação da substância indicados no guia de orientação principal são aplicáveis, de acordo com o tipo de substância, à identidade de uma substância para efeitos de registo conjunto.

Na verdade, as primeiras partes do artigo 11.º, n.º 1, e do artigo 19.º, n.º 1, do Regulamento REACH impõem um requisito de «apresentação conjunta de dados por vários registantes». Mais especificamente, estas disposições exigem que «quando se prever o fabrico de uma substância na Comunidade por um ou mais fabricantes e/ou a sua importação por um ou mais importadores», as informações relativas às propriedades da substância e à sua classificação «são primeiro apresentadas pelo registante que atue com o acordo do(s) restante(s) registante(s) (a seguir designado por "registante principal")».

O Regulamento de Execução (UE) 2016/9 da Comissão relativo à apresentação conjunta de dados e à partilha de dados reafirma e consolida a obrigação de os múltiplos registantes da mesma identidade da substância apresentarem conjuntamente determinadas informações. Na prática, a apresentação conjunta de informações exige que as partes envolvidas cheguem a acordo sobre os limites e o âmbito da identidade da substância. Isto é designado como o perfil da identidade da substância ou SIP. Espera-se que o SIP especifique os limites da substância que os registantes decidiram abranger com os dados apresentados conjuntamente. Isto também diz respeito às entidades registadas que podem ter optado por não receber determinadas informações apresentadas conjuntamente.

Assim, o acordo sobre o âmbito da identidade da substância abrangida pelo registo é um pré-requisito para a apresentação conjunta. A transparência sobre o âmbito desta identidade de uma substância e sobre os dados a que se refere é fundamental para a implementação. Consequentemente, o âmbito da substância ou do SIP deve ser comunicado em termos claros no dossiê do registante principal em nome de todos os outros registantes, enquanto todos os registantes comunicam as suas informações de composição individualmente.

Um exemplo ilustrativo simples de uma forma de estabelecer o perfil de identidade da substância para os produtos químicos fabricados/importados na UE por registantes individuais é apresentado esquematicamente em

Figura 2 abaixo. Ilustra a identificação da substância a registar, a agregação das diferentes composições, a geração dos dados e, por fim, a sua apresentação no formato IUCLID num dossiê de registo. O exemplo é para uma substância monoconstituente simples e bem definida. No caso de substâncias mais complexas, o processo de definição do SIP pode envolver iterações entre as etapas 3 e 5 da figura.

Durante as discussões entre os potenciais registantes, a documentação relativa ao perfil da identidade da substância pode ter a forma, por exemplo, de um documento Word ou

de uma folha Excel, onde as informações relevantes acordadas são registadas e disponibilizadas a todos os membros e potenciais membros. Algumas associações industriais disponibilizaram modelos para documentar o SIP, que têm sido utilizados por muitos registantes (por exemplo, o modelo do Cefic³⁴). Outros simplesmente documentaram as informações pertinentes num documento Word ou na página Web de um consórcio criado para trabalhar no registo da substância em causa.

2. Definição da identidade e do âmbito de uma substância correspondentes aos dados apresentados para registo

As etapas que podem ser seguidas por vários potenciais registantes na definição da identidade da substância correspondente aos dados que apresentam conjuntamente são ilustradas esquematicamente no exemplo apresentado em

Figura 2 (etapas 1 a 4) para substâncias simples bem definidas.

Cada potencial registante individual determina as suas obrigações relativamente ao que fabrica/importa com base na definição de substância constante do artigo 3.º, n.º 1, e aplicando os princípios de identificação da substância constantes da parte principal do presente guia de orientação (etapas 1 e 2 de

Figura 2).

Cada potencial registante pode então verificar se outros potenciais registantes utilizaram a mesma «designação e outros identificadores» (etapa 3). Deste ponto de partida, os potenciais registantes podem aplicar coletivamente os princípios da parte principal do presente guia de orientação para definir os limites da identidade da substância correspondentes aos dados que apresentam conjuntamente, ou seja, o perfil de identidade da substância (etapa 4).

O presente SIP descreve de forma genérica o âmbito da substância em termos de informação sobre a sua composição (incluindo quaisquer outros parâmetros relevantes, como a morfologia, por exemplo, forma física), a sua designação e outros identificadores para os quais serão relevantes os dados de classificação e de perigo apresentados conjuntamente. A definição do perfil de identidade da substância não deve adotar uma abordagem excessivamente conservadora para evitar a exclusão de concorrentes da apresentação conjunta.

Este perfil da identidade da substância estabelece a ligação inerente entre a identidade da substância e os dados de perigo que devem ser apresentados conjuntamente. Se for estabelecida com antecedência suficiente, pode facilitar a fase de produção/recolha de informações durante o processo de cumprimento das obrigações de registo (descrito no Guia de orientação sobre requisitos de informação e avaliação da segurança química; etapa 5 do

Figura 2 abaixo), a fim de assegurar que os dados produzidos ou recolhidos abrangem a totalidade da identidade da substância.

Tal como referido nas secções 4.2.3 e 4.3 do guia de orientação, no caso de substâncias mais complexas, os potenciais registantes utilizam normalmente parâmetros e/ou

³⁴ O SIP foi originalmente descrito no documento do Cefic «Guia de orientação para os registantes principais» disponível em <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Exemplos de SIP desenvolvidos pelos registantes utilizando este modelo podem ser encontrados, por exemplo, no sítio Web do REACH centrum <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

descritores adicionais para informações sobre a composição (por exemplo, descrição da fonte/processo) nas etapas 1-3 e os parâmetros acordados podem ser incluídos no perfil da identidade da substância (etapa 4). Em alguns casos, a ligação entre o limite da identidade da substância e os dados de perigo apresentados conjuntamente pode mesmo tornar-se totalmente clara apenas quando parte ou a totalidade dos dados de perigo disponíveis tiverem sido recolhidos. Poderá haver iterações entre as etapas 3 e 5, conforme necessário, dependendo da complexidade da identidade da substância e dos dados recolhidos na etapa 5, por exemplo, quando determinadas composições incluem constituintes que desencadeiam a classificação e rotulagem e/ou a avaliação PBT. O perfil de identidade da substância pode incluir mais do que um perfil de composição para descrever adequadamente os limites da identidade da substância.

O perfil de identidade da substância deve fornecer informações genéricas que permitam determinar os limites da identidade da substância correspondente aos dados apresentados conjuntamente:

- nome da substância
- outros identificadores (por exemplo, CAS, CE, informação molecular e estrutural, descrição, conforme relevante) abrangidos por todos os registantes múltiplos da identidade da substância em causa
- informação sobre a composição:
 - identidades dos constituintes pertinentes para a identificação da substância e respetivos intervalos de concentração,
 - lista genérica das identidades dos estabilizadores relevantes para a identificação da substância (e respetivos intervalos de concentração, quando aplicável);
 - lista genérica dos parâmetros adicionais relevantes para o tipo de substância (por exemplo, descritores do processo de origem para alguns UVCB)

É importante que os parâmetros que definem os limites da identidade da substância abrangidos pela apresentação conjunta sejam acordados por todos os registantes conjuntos e estejam claramente documentados no perfil da identidade da substância. Por conseguinte, poderá ser necessário alterar ou ampliar um perfil da identidade da substância na sequência de um pedido de qualquer novo registante potencial, caso este aceite que uma parte ou a totalidade dos dados apresentados em conjunto também é relevante para a substância fabricada ou importada por este registante.

O perfil de identidade da substância não deve resultar na partilha de informações comerciais confidenciais entre registantes nem na divulgação dessas informações a terceiros a partir da apresentação conjunta. Sempre que seja necessário partilhar informações comerciais potencialmente confidenciais com os registantes conjuntos, a fim de definir claramente o perfil da identidade da substância, estes podem utilizar um assessor, tal como descrito no Guia de orientação sobre a partilha de dados.

3. Orientações práticas sobre a documentação do perfil de identidade da substância

Os princípios gerais de identificação de substâncias para substâncias bem definidas e substâncias UVCB são descritos no guia de orientação principal. Seguem-se algumas orientações práticas sobre a forma de aplicar coletivamente estes princípios. O guia de orientação principal prevê a possibilidade de derrogações aos princípios gerais. Essas derrogações exigem que os registantes sejam capazes de demonstrar a ligação inerente entre a identidade da substância e os dados de perigo apresentados conjuntamente.

3.1 Substâncias bem definidas

Para uma substância bem definida, devem ser seguidos o princípio $\geq 80\%$ (m/m) para a identificação de substâncias monoconstituintes e o princípio $<80\%$, $\geq 10\%$ para a identificação de substâncias multiconstituintes ao definir o(s) principal(is) constituinte(s) e os seus intervalos de concentração e impurezas. Esta disposição aplica-se a cada registante individual e a todos os vários registantes coletivamente ao determinar o perfil da identidade da substância. Em particular, devem ser comunicados os perfis de impureza acordados no perfil de identidade da substância. Se o SIP incluir impurezas específicas que possam ter impacto na classificação e rotulagem e/ou na avaliação PBT, os registantes afetados por essas impurezas terão de as considerar na fase de recolha de dados (etapa 5). As informações pertinentes do anexo VII-XI podem ser apresentadas conjuntamente ou separadamente, em conformidade com o artigo 11.º, n.º 3, do Regulamento REACH (as chamadas opções de autoexclusão). Os valores de concentração a comunicar devem ter em conta o intervalo de concentração em toda a submissão conjunta.

No caso das substâncias que exigem parâmetros adicionais para registar inequivocamente a identificação da substância, cada registante terá de seguir os princípios enunciados no capítulo 4.2.3 da parte principal do presente guia de orientação. Deverá ser considerado se a variabilidade destes parâmetros desencadearia uma adaptação, se necessário, da classificação ou dos dados de perigo apresentados conjuntamente. Para efeitos de determinação do perfil da identidade da substância em relação à apresentação conjunta, podem ser aplicadas considerações semelhantes. Por exemplo, pode ser necessário incluir no perfil de identidade da substância os parâmetros (por exemplo, forma física e/ou parâmetros morfológicos como a porosidade, a dimensão das partículas, a forma das partículas) que podem ter impacto nas propriedades relevantes para a determinação do perfil de perigo (por exemplo, solubilidade, reatividade, toxicidade por inalação, etc.). Se for esse o caso, as gamas genéricas destes parâmetros abrangidas pelo SIP terão de ser apresentadas de forma transparente (por exemplo, gamas de tamanhos de partículas aplicáveis a todos os registantes e lista da(s) sua(s) forma(s) e lista das químicas superficiais). Assim, fica assegurada a abrangência dos dados de perigo apresentados conjuntamente em relação ao SIP.

Do mesmo modo, as diferenças na fase cristalina dos produtos químicos inorgânicos podem desencadear diferentes considerações de perfil de perigo específicas destas fases (por exemplo, quartzo, cristabolite, sílica amorfa). Tendo em conta a possível diferença nas propriedades das várias fases, cabe aos potenciais registantes destas substâncias considerar se devem apresentar um registo conjunto que abranja todas as fases, incluindo dados de perigo específicos para diferentes fases, ou se devem apresentar diferentes registos conjuntos para diferentes fases (ou seja, diferentes identidades de substâncias). Em qualquer dos casos, as fases abrangidas terão de ser enumeradas no perfil da identidade da substância e os dados pertinentes dos anexos VII a XI terão de abranger todas as fases abrangidas pelo registo, assegurando assim que os dados abrangem a totalidade do perfil da identidade da substância.

Importa notar que as composições podem ter perfis de impureza e/ou perigo diferentes e que estas diferenças não significam necessariamente que estas composições não possam ser registadas no mesmo registo.

3.2 Substâncias UVCB

Para as substâncias UVCB, a identificação pode ser mais complexa e, por este motivo, a documentação transparente é muito útil para chegar a acordo sobre a identidade da substância para o registo conjunto. Cada potencial registante terá de considerar individualmente os conselhos contidos na parte principal das presentes orientações e, em

seguida, aplicar os mesmos princípios coletivamente. Note-se que a agregação de gamas de concentração no SIP pode conduzir a um perfil com gamas de concentração muito amplas, possivelmente até um ponto em que já não pode ser considerado como uma substância.

Conforme indicado no guia de orientação principal, a base para a identificação de algumas substâncias UVCB é a fonte e o processo utilizados no seu fabrico e não diretamente as identidades e os intervalos de concentração dos seus constituintes. Nestes casos, outros descritores servem como substitutos para as identidades dos constituintes e as suas respetivas gamas de concentração. Os potenciais registantes podem descrever o processo de fabrico em termos de fonte e processo, na medida do necessário para identificar a substância. A descrição pode incluir quaisquer parâmetros/caracterizadores adicionais que os registantes decidam serem relevantes para a sua identidade da substância (ver, por exemplo, Quadro 5 no guia de orientação principal). Para efeitos do registo conjunto, as descrições são partilhadas apenas na medida do necessário para acordar o âmbito da identidade da substância UVCB para fins de registo. Os potenciais registantes podem seguir os princípios enunciados nas orientações fundamentais, tanto individualmente como coletivamente. O perfil de identidade da substância resulta, assim, na comunicação genérica dos parâmetros da fonte e do processo, de modo a abranger a totalidade das composições dos registantes individuais. Isto é ilustrado esquematicamente em Figura 3.

No caso das substâncias identificadas com base na origem e no processo, conforme indicado no guia de orientação principal, qualquer alteração significativa da origem ou do processo conduzirá provavelmente a uma identidade da substância diferente que deve ser registada separadamente. As derrogações a este princípio significariam que os registantes podem demonstrar que cada combinação de processo/fonte produz composições que podem ser abordadas no mesmo registo conjunto. Pequenas variações nos materiais de origem e nas condições dos processos e/ou dos processos podem ser tidas em conta no perfil da identidade da substância. Os registantes devem acordar que cada combinação de processos/fonte produz composições semelhantes, na medida em que seja pertinente incluí-las como identidade de uma substância, e certificar-se de que os dados de perigo são adequados para toda a área de variação do SIP. Mais especificamente, os registantes devem poder justificar que o conjunto de dados relativos aos perigos apresentado conjuntamente é pertinente para todas estas composições ou é adaptado, se for caso disso, com informações apresentadas separadamente para composições específicas nos termos do artigo 11.º, n.º 3, do REACH (autoexclusão).

A fim de demonstrar a relevância do conjunto de dados para cada combinação processo/fonte, estas combinações devem ser documentadas de forma transparente no perfil de identidade da substância para documentar os critérios de inclusão/exclusão aplicados aos registantes conjuntos atuais e futuros.

Para outros tipos de UVCB (ver capítulo 4.3.2 das orientações de base), os potenciais registantes podem utilizar uma combinação de descritores de composição e de descritores adicionais, conforme pertinente. Por exemplo, para alguns produtos oleoquímicos, a composição é variável devido à variabilidade nas distribuições do comprimento da cadeia alquílica dos constituintes e a distribuição do comprimento da cadeia alquílica pode ser um descritor adicional utilizado na identificação. A abordagem adotada pelo FIIS teria de ser documentada de forma transparente no seu SIP.

3.3 Perfil da identidade da substância

É da responsabilidade de todos os registantes que apresentem conjuntamente as informações chegarem a acordo sobre os parâmetros necessários para a identificação da sua substância e documentá-los de forma transparente no SIP correspondente. Os desvios

ou derrogações aos princípios normais de identidade da substância adotados coletivamente terão de ser documentados de forma transparente. Uma vez que o perfil de identidade da substância documenta os critérios de inclusão/exclusão, o FIIS teria de assegurar que os critérios aplicados são transparentes e que os dados pertinentes dos anexos VII a XI recolhidos/gerados abrangem comprovadamente todos os perfis de composição acordados.

Se os potenciais registantes incluírem individualmente aditivos estabilizadores no contexto do artigo 3.º, n.º 1, no seu perfil de identidade, as suas identidades e intervalos de concentração devem ser acordados e comunicados de forma transparente no perfil de identidade da substância.

Na fase de recolha de dados, seria necessário ter em conta a relevância dos materiais de ensaio utilizados para gerar/recolher dados para cumprir os requisitos de informação do anexo VII-XI. A fundamentação das conclusões sobre a sua representatividade para as composições abrangidas pelo SIP teria de ser documentada e incluída no dossiê técnico. Isto seria particularmente relevante para identidades de substâncias complexas que abrangem perfis de composição alargados.

Os potenciais registantes podem determinar, durante a recolha de dados, que o seu SIP é demasiado amplo e não se adequa ao objetivo de apresentar conjuntamente informações sobre os perigos que sejam representativas da identidade da substância em causa. Nesse caso, os potenciais registantes podem decidir dividir o FIIS para tratar separadamente duas ou mais substâncias³⁵. Cada substância teria, então, o seu próprio SIP e a sua própria apresentação conjunta das informações sobre os perigos, que devem ser especificamente representativas para a identidade da substância. Os motivos pelos quais determinadas informações de perigo não são representativas para determinados parâmetros da identidade da substância têm de ser documentados de forma transparente no SIP para cada registo separado. Os respetivos potenciais registantes podem também determinar, nesta fase, que os perfis de composição precisam de ser mais refinados com base nos constituintes e/ou impurezas que desencadeiam a classificação e rotulagem, a avaliação PBT, etc.

Os potenciais registantes que pretendam juntar-se a outros potenciais registantes, quando um SIP já tiver sido acordado por eles e o registo ainda não tiver sido apresentado, terão de considerar se as suas informações de identidade da substância estão dentro dos limites do SIP. Se não for o caso, terão de discutir e acordar com os potenciais registantes se é necessário alargar o âmbito do perfil para incluir o novo membro ou se é necessário concordar que não está abrangido pelo âmbito.

Seria necessária uma adaptação do SIP se a substância a registar pelo potencial registante tiver parâmetros específicos de identidade da substância que possam alterar a representatividade das informações de perigo apresentadas conjuntamente e, por conseguinte, exigir uma justificação específica (por exemplo, uma impureza específica, um rácio de composição diferente, uma fase diferente, um tamanho de partícula diferente, etc.). Por uma questão de transparência, este parâmetro terá de ser especificado no perfil de identidade da substância.

³⁵ As considerações sobre o papel do EINECS no estabelecimento da identidade da substância no âmbito do REACH podem ser consultadas no documento CARACAL acordado na 4.ª reunião das autoridades competentes para o REACH e o CRE (CARACAL): CA/74/2009 rev. 2 «Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)» [Identidade da substância e formação do FIIS (a função do EINECS)].

Em casos individuais, os registantes potenciais e existentes podem concordar que os dados de perigo apresentados conjuntamente não são fundamentalmente representativos da substância do registante potencial devido a parâmetros de identidade da substância divergentes que não se encontram dentro dos limites do SIP acordados. Nesse caso, o potencial registante deve apresentar um registo separado, quer juntamente com outros registantes com uma identidade de substância que inclua este parâmetro, quer individualmente, se não houver outros registantes para a mesma identidade de substância.

4. Comunicação do perfil de identidade da substância no dossiê de registo

Quando os potenciais registantes tiverem recolhido/gerado todos os dados exigidos do Anexo VII-XI para a sua substância (ou seja, a etapa 5 em

Figura 2), o pacote de dados está pronto para ser comunicado no formato IUCLID em dossiês para apresentação à Agência (ou seja, a etapa 6 em

Figura 2). Para comunicar o perfil de identidade da substância no formato IUCLID, o nome e outros identificadores, a informação sobre a composição e outros parâmetros, conforme relevante, são comunicados nas secções 1.1 e 1.2 da IUCLID.

| Perfil da identidade da substância | Comunicado na IUCLID |
|------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------|
| Denominação e outros identificadores | Secção 1.1 de todos os dossiês |
| informações sobre a composição e outros parâmetros, conforme relevante | Secção 1.2 do dossiê de registante principal |

O nome do SIP e outros identificadores são indicados na secção 1.1 de todos os dossiês. O registante principal comunica a informação sobre a composição do SIP e outros parâmetros conforme pertinente na secção 1.2 do seu dossiê sob a forma de uma «composição-limite da substância»³⁶. O registante principal deve também apresentar todos os dados pertinentes dos anexos VII a XI nas secções 4 a 14 (na ausência de autoexclusões justificadas para um ou mais requisitos de informação) em nome de todos os registantes.

Cada registante (incluindo o registante principal) comunica a informação sobre a composição da sua própria entidade jurídica relativa à substância que fabrica ou importa especificamente na secção 1.2 do seu próprio dossiê. Isto significa que o registante principal comunica tanto as informações de composição do SIP como as informações de composição da sua própria entidade jurídica na secção 1.2 do seu dossiê, enquanto todos os outros registantes comunicam as suas próprias informações de composição específicas. Cada registo normalizado deve também incluir as informações analíticas pertinentes na secção 1.4 da IUCLID.

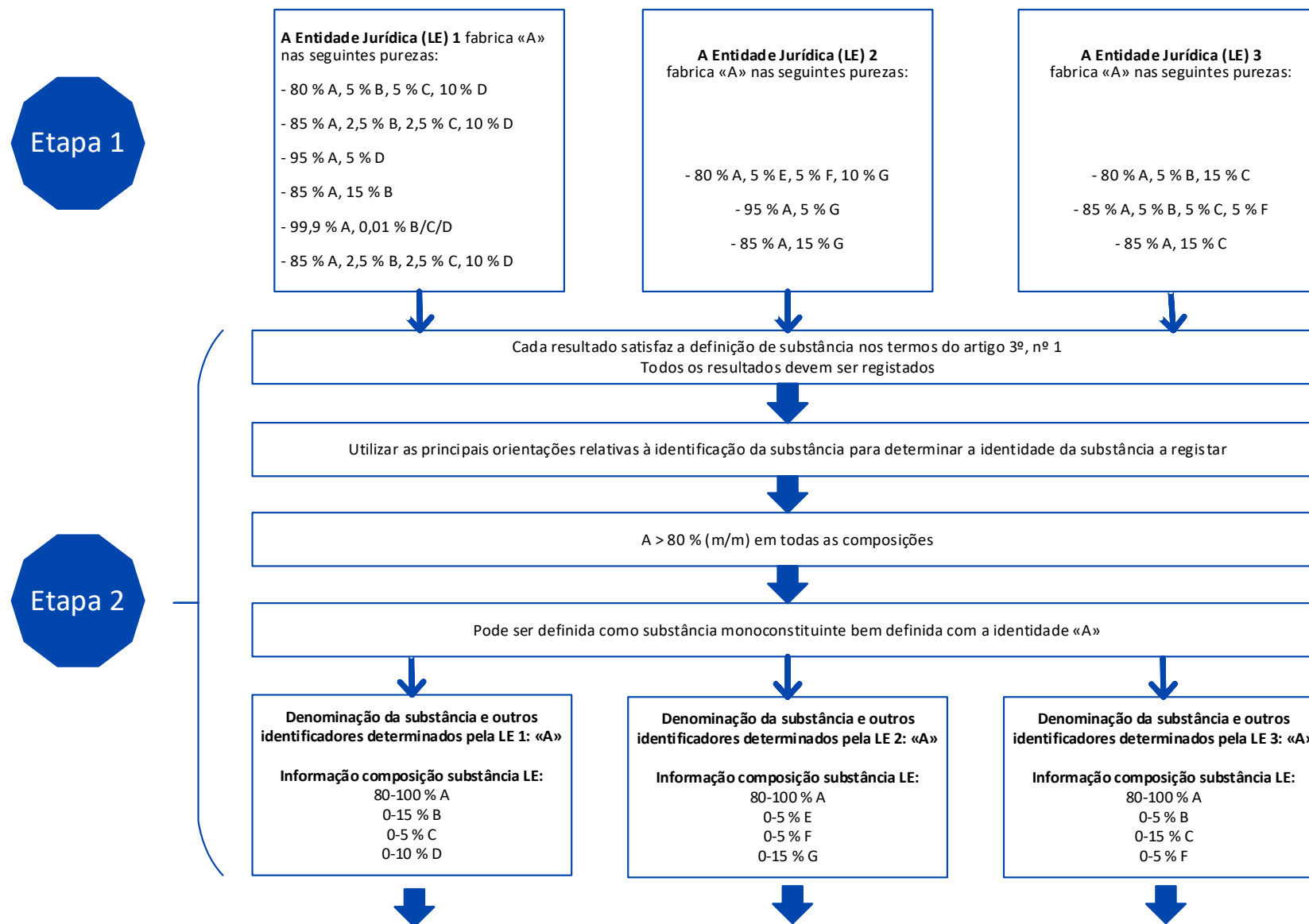
Cada registante deve demonstrar que a informação sobre a composição das substâncias que fabrica ou importa especificamente é abrangida pelo perfil de identidade da substância, tal como comunicado na «composição-limite» e, por sua vez, é abrangida pelos dados dos anexos VII a XI apresentados no dossiê do registante principal (na ausência de

³⁶ As instruções sobre como introduzir a «composição secundária da substância» podem ser consultadas no manual «Como preparar os dossiês de registo e PPORD», disponível em: <http://echa.europa.eu/manuals>.

autoexclusões justificadas).

As instruções técnicas sobre como comunicar informações sobre a composição no formato IUCLID estão disponíveis nos manuais IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

Figura 2 (página seguinte): Uma visão geral esquemática das etapas que os potenciais registantes percorrem desde a determinação das suas obrigações de registo (1) até à definição do seu SIP (4) e, por fim, à apresentação dos seus registos em cumprimento formal das obrigações de registo das suas substâncias (8).



Nota para a figura: A identidade da substância é um mono-constituente simples para facilitar a visualização. No caso de substâncias mais complexas, as etapas são as mesmas, mas podem ser utilizados elementos adicionais e/ou substituídos de informações sobre a composição para definir a identidade da substância. O processo de definição do perfil de identidade da substância também pode envolver iterações entre as etapas 2 e 5.

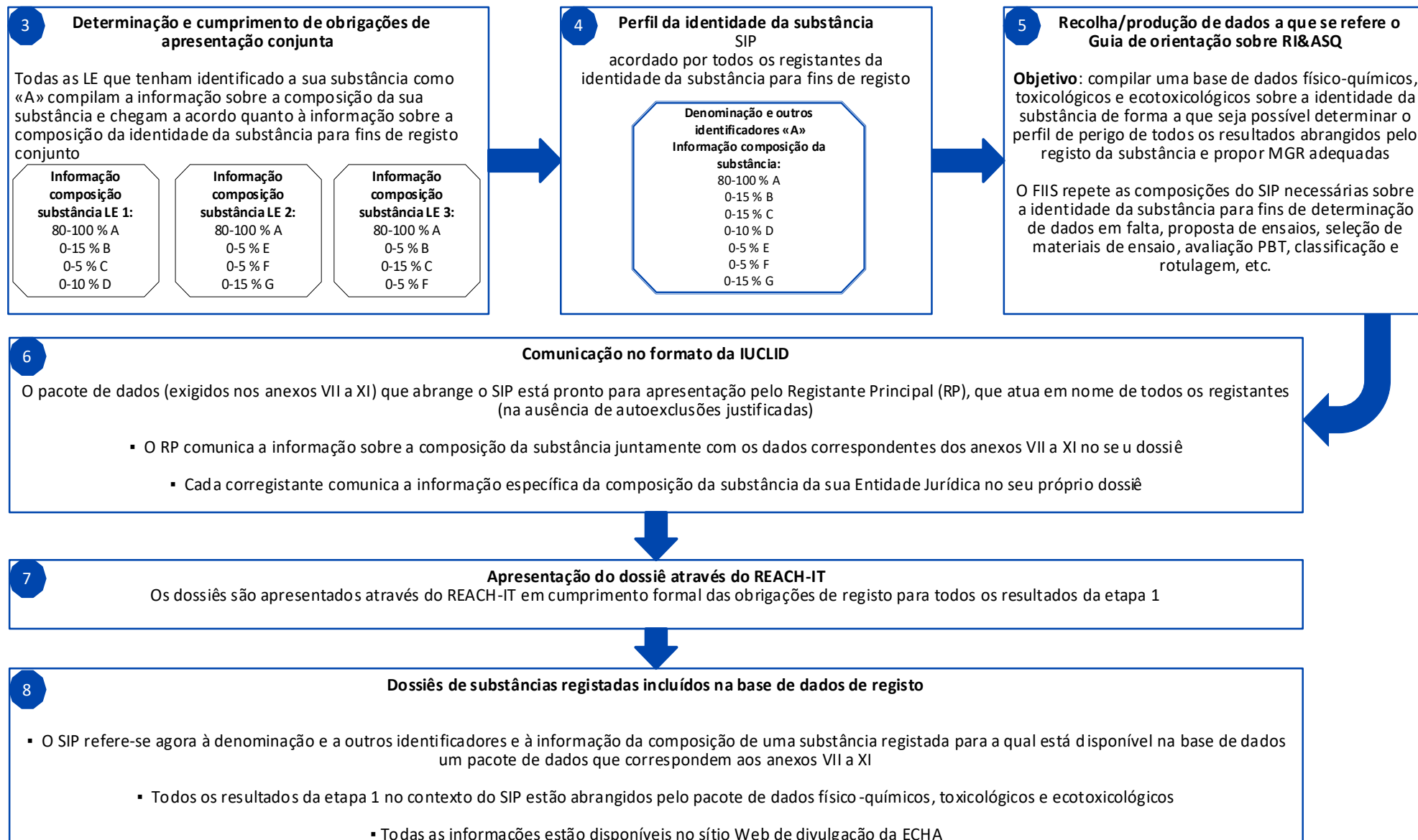
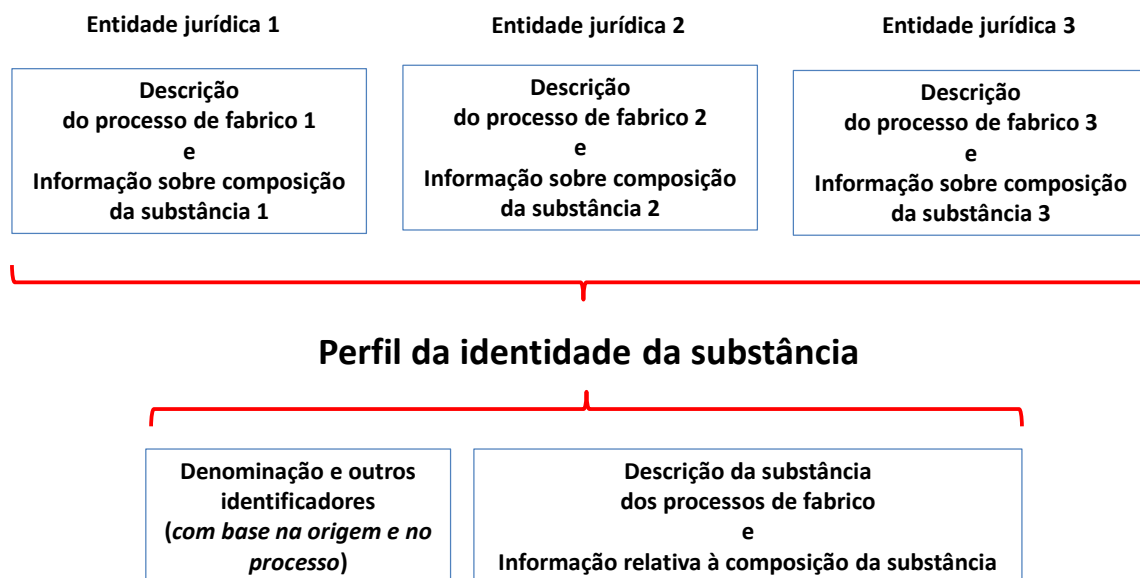


Figura 3: Esquema ilustrativo da definição de um SIP (etapa 4 da figura 2) para uma substância do tipo UVCB identificada com base em descritores de origem e de processo da entidade jurídica individual e em descrições de processo.



AGÊNCIA EUROPEIA DOS PRODUTOS QUÍMICOS
P.O. BOX 400, FI-00121 HELSÍNQUIA
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://ECHA.EUROPA.EU)