

Vejledning om identifikation og navngivning af stoffer i henhold til REACH og CLP

December 2023
Version 3.0



JURIDISK MEDDELELSE

Formålet med dette dokument er at hjælpe brugerne med at overholde deres forpligtelser i henhold til REACH- og CLP-forordningerne. Brugerne gøres dog opmærksomme på, at teksten i REACH- og CLP-forordningerne er den eneste autentiske retlige reference, og at oplysningerne i dette dokument ikke kan sidestilles med juridisk rådgivning. Brugerne har det fulde ansvar for, hvordan oplysningerne anvendes. Det Europæiske Kemikalieagentur påtager sig intet ansvar for, hvordan oplysningerne i dette dokument anvendes.

Vejledning om identifikation og navngivning af stoffer i henhold til REACH og CLP

Reference: ECHA-23-H-07-DA
Kat. nummer: ED-09-23-444-DA-N
ISBN: 978-92-9468-305-2
DOI: 10.2823/693484
Offentliggørelsesdato: December 2023
Sprog: DA

© Det Europæiske Kemikalieagentur, 2023
Forside © Det Europæiske Kemikalieagentur

Hvis du har spørgsmål eller kommentarer til dette dokument, bedes du sende dem ved hjælp af kontaktformularen (angiv dokumentreference og dato for offentliggørelse). Den findes på websiden "Kontakt ECHA" på adressen:

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

Det Europæiske Kemikalieagentur

Postadresse: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finland
Besøgsadresse: Telakkakatu 6, 00150, Helsinki, Finland

FORORD

Denne vejledning beskriver, hvordan man navngiver og identificerer et stof i henhold til REACH og CLP. Den er en del af en række vejledende dokumenter, der har til formål at hjælpe alle aktører med at opfylde deres forpligtelser i henhold til REACH- og CLP-forordningerne. Dokumenterne giver detaljeret vejledning i en række centrale REACH- og CLP-processer og i anvendelsen af visse særlige videnskabelige og/eller tekniske metoder, som industrien eller myndighederne skal benytte i forbindelse med REACH og CLP.

Vejledningerne er blevet udarbejdet og drøftet inden for rammerne af REACH-gennemførelsesprojekterne (RIP), som Kommissionens tjenestegrene står i spidsen for, og som omfatter alle aktører: medlemsstaterne, industrien og ngo'er. Vejledningerne findes på Det Europæiske Kemikalieagenturs websted (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Der vil blive offentliggjort flere vejledninger på webstedet, efterhånden som de bliver færdige eller opdateret.

DOKUMENTHISTORIK

Version	Bemærkninger	Dato
Version 1	Første udgave	Juni 2007
Version 1.1	<p>Berigtigelse</p> <ul style="list-style-type: none"> - Tilføjelse af en reference til CLP-forordningen (forordning (EF) nr. 1272/2008 af 16. december 2008) i titlen og i kapitlernes titler. - Tilføjelse af yderligere tekst for at præcisere vejledningens anvendelsesområde. Sletning af gentagelser i hele dokumentet. - Indsætning af referencer til CLP-forordningen i hele teksten, hvor det er hensigtsmæssigt. - Ændring af termen "TGD" til "guidance document" i hele dokumentet. - Ændring af termen "preparation" til "mixture" i hele dokumentet. - Ændring af termen "item" til "section" i hele dokumentet. - Ændring af termen "pre-registration" til "(late) pre-registration" i hele dokumentet. - Indsætning af forkortelserne AAS og CLP og sletning af RIP og TGD. - Ændring af beskrivelserne af legeringer, EF-fortegnelsen og IUCLID. Indføjelser af definitioner på EF-nummer, listenummer, blanding og anmeldt stof. Sletning af definitionen på "preparation". - Revision af afsnit 3.2 for at tydeliggøre indholdet. - Revision af afsnit 3.3 for at tydeliggøre indholdet med hensyn til CLP-forpligtelser. - Ændring i afsnit 4.2.2.1. af rækkefølgen, som bestanddele præsenteres i, fra % koncentration til alfabetisk, så den relative sammensætning ikke kan udledes af rækkefølgen i listen. - Ændring af termen "lattice" til "crystal" i afsnit 4.2.3.1. - Revision af afsnit 4.3.1.2.3 for at tydeliggøre indholdet. 	November 2011 (kun på engelsk)

	<ul style="list-style-type: none">- I afsnit 5 indføje en henvisning til Vejledning i dataindsendelse, del 18 – "Sådan rapporteres stoffets identitet i IUCLID 5 med henblik på registrering i henhold til REACH".- Revision af afsnit 5 for at tydeliggøre indholdet.- I afsnit 6 ændring af beskrivelsen af præregistrering til (sen) præregistrering.- Opdatering af døde hyperlinks i tillæg 1.- Sletning af afsnit 4.3 i tillæg 2, da dets indhold findes på det relevante websted.	
Version 1.2	<p>Berigtigelse</p> <p>Definitionen på "indfasningsstof" er tilpasset definitionen i forordning (EF) nr. 1907/2006, gennemført ved Rådets forordning (EF) nr. 1354/2007 og berigtigelsen, EUT L 36 af 5.2.2009, s. 84 (1907/2006).</p> <p>Bemærk, at ændringerne i version 1.1 og 1.2 er konsolideret til én enkelt oversat version 1.2 for alle andre sprog end engelsk.</p>	Marts 2012
Version 1.3	<p>Berigtigelse</p> <p>Der er indsat to strukturformler, som manglede i kapitel 7.6.</p>	Februar 2014
Version 1.4	<p>Berigtigelse</p> <ul style="list-style-type: none">- Ny formatering af dokumentet, så det er i tråd med den nuværende virksomhedsidentitet.- Sletning af kapitel 8, der giver tekniske anvisninger ud fra en forældet version af IUCLID.- Rettelse af beskrivelsen af cristobalit og kvarts og sletning af henvisningen til direktiv 2000/30/EF i afsnit 7.5.- Sletning af henvisninger til kapitel 8 og manualer om dataindsendelse, og tilføjelse af en henvisning til nye ECHA-manualer.- Sletning af tillæg III, og flytning af oplysningerne til dokumenthistoriktabellen.- Reparation af døde webstedslinks og rettelse af redaktionelle fejl.	Juni 2016

Version 2.0	Delvis opdatering begrænset til: <ul style="list-style-type: none">- Tilføjelse af et nyt tillæg III med beskrivelse af begrebet "stofidentitetsprofil".- Tilføjelse af ny tekst i kapitel 1 for at introducere det nye tillæg III.- Rettelse af stavefejl og redaktionelle fejl.	December 2016
Version 2.1	Berigtigelse for at rette typografiske fejl i teksten og fejl i oplysningerne om sammensætningen i eksemplerne i figur 2 i tillæg III.	Maj 2017
Version 3.0	Opdatering <ul style="list-style-type: none">- Tilpasning til de ændringer, som blev indført ved Kommissionens forordning (EU) 2022/477 af 24. marts 2022.- Sletning af henvisninger til (sen) prægistrering.- Rettelse af stavefejl og redaktionelle fejl.- Tilføjelse af links til ECHA's støttesider og Spørgsmål og svar.- Sletning af tillæg III, afsnit 5, om overgang fra IUCLID 5 til IUCLID 6.	December 2023

Indholdsfortegnelse

1. GENERELT	9
1.1. Formål	9
1.2. Anvendelsesområde	10
1.3. Vejledningens struktur	11
2. DEFINITIONER OG FORKORTELSER	12
2.1. Forkortelser	12
2.2. Definitioner	14
3. RAMMERNE FOR IDENTIFIKATION AF STOFFER I REACH OG CLP	17
3.1. Definition af et stof	17
3.2. Numeriske identifikatorer	17
3.2.1. EF-fortegnelsen	17
3.2.2. Listenumre	19
3.3. Krav til identifikation af stoffer i REACH og CLP	19
4. VEJLEDNING OM IDENTIFIKATION OG NAVNGIVNING AF STOFFER I HENHOLD TIL REACH OG CLP	22
4.1. Indledning	22
4.2. Stoffer med veldefineret sammensætning	28
4.2.1. Stoffer med kun én bestanddel	29
4.2.2. Stoffer med flere bestanddele	32
4.2.3. Stoffer af defineret kemisk sammensætning og andre hovedidentifikatorer	35
4.3. UVCB-stoffer	37
4.3.1. Generel vejledning om UVCB-stoffer	37
4.3.2. Specifikke UVCB-stoftyper	46
5. KRITERIER TIL AT KONTROLLERE, OM STOFFER ER DE SAMME	55
6. STOFIDENTITET VIA FORESPØRGSEL	62
7. EKSEMPLER	63
7.1. Diethylperoxydicarbonat	63
7.2. Zolimidin	64
7.3. Blanding af isomerer	64
7.4. Fragrance AH	68
7.5. Mineraler	74
7.6. Æterisk olie af Lavandin grosso	77
7.7. Chrysanthemumolie og isomerer isoleret deraf	83
7.8. Phenol, isopropylateret, fosfat	87

7.9. Kvaternære ammoniumforbindelser	88
7.10. Råoliestoffer	92
7.10.1. Benzinblandingsstrøm (C4-C12)	92
7.10.2. Gasolier (råolie)	93
7.11. Enzymer	94
7.11.1. Subtilisin	94
7.11.2. α -Amylase	96
TILLÆG I - STØTTEMATERIALER	98
TILLÆG II – TEKNISK VEJLEDNING FOR HVER PARAMETER TIL IDENTIFIKATION AF STOFFER	102
TILLÆG III – IDENTIFIKATION AF STOFFER OG FÆLLES INDSENDELSE AF DATA ..	118

Oversigt over tabeller

Tabel 1: Forkortelser	12
Tabel 2: Definitioner	14
Tabel 3: Parametre for identifikation af stoffer i punkt 2 i bilag VI til REACH	20
Tabel 4: Gruppering af hovedidentifikatorer for eksempler, der repræsenterer forskellige typer af veldefinerede lignende stoffer	23
Tabel 5: Gruppering af hovedidentifikatorer for eksempler, der repræsenterer forskellige typer af UVCB-stoffer	24

Oversigt over figurer

Figur 1: Vejviser til kapitler og tillæg med vejledning for forskellige stoftyper	27
Figur 2 (næste side): En skematisk oversigt over de skridt, som potentielle registranter tager, fra at fastlægge deres registreringsforpligtelser (1) til at definere deres SIP for deres ene stofidentitet (4) og i sidste ende indsende deres registreringer som led i den formelle opfyldelse af forpligtelserne til at registrere deres stoffer (8)	124
Figur 3: Skematisk visning af definitionen af en SIP (trin 4 i figur 2) for et stof af UVCB-typen, der er identificeret ud fra kilde- og procesdeskriptorer fra individuelle juridiske enheders kilde- og procesbeskrivelser.	127

1. Generelt

Med REACH-forordningen (forordning (EF) nr. 1907/2006) blev der oprettet et system til registrering, vurdering og godkendelse af samt begrænsninger for kemikalier såvel som et agentur, Det Europæiske Kemikalieagentur (ECHA), til at gennemføre forordningen¹.

CLP-forordningen (forordning (EF) nr. 1272/2008) er den nye EU-forordning om klassificering, mærkning og emballering af kemiske stoffer og blandinger². Den indfører et nyt EU-dækkende system til klassificering og mærkning af kemikalier baseret på FN's globalt harmoniserede system (GHS).

REACH-forordningen fokuserer på stoffer. For at sikre, at REACH-processerne fungerer effektivt, er det afgørende, at stoffer identificeres korrekt og utvetydigt. Hensigten med denne vejledning om identifikation og navngivning af stoffer er at støtte industrien, medlemsstaterne og Det Europæiske Kemikalieagentur på dette område.

Vejledningen er baseret på erfaringer med identifikation af stoffer under den tidligere kemikalielovgivning (direktiv 67/548/EØF og direktiv 98/8/EØF). Det er dog den nuværende praksis for fastlæggelse af stofidentitet i henhold til REACH-forordningen og forordningen om klassificering, mærkning og emballering af stoffer og blandinger (CLP), der danner grundlaget for den videre udbygning af vejledningen. I relevante tilfælde er der desuden inddraget fremgangsmåder fra andre kemikalieordninger uden for EU.

Der gives specifik vejledning for forskellige typer stoffer.

Denne vejledning skal anvendes til at identificere og navngive stoffer, der er reguleret i henhold til REACH- og CLP-forordningen.

1.1. Formål

Formålet med denne vejledning er at give producenter og importører vejledning i, hvordan de angiver og indberetter et stofs identitet inden for rammerne af REACH og CLP. Som et vigtigt element i forbindelse med identifikation af stoffer giver den vejledning om, hvordan man navngiver et stof. Den giver også vejledning om, hvorvidt stoffer kan betragtes som de samme inden for rammerne af REACH og CLP, og hvordan princippet om "ét stof, én registrering" (OSOR) kan implementeres ved at fastlægge stofidentitetsprofilen (SIP). Det er vigtigt at identificere stoffer, som er ens, og som kan være omfattet af den samme stofidentitetsprofil, i forbindelse med forespørgsler, datadeling, fælles indsendelse af data, anmeldelse til fortegnelsen over klassificeringer og mærkninger, og harmonisering af klassificering og mærkning.

Identifikationen af stoffer skal helst foretages af eksperter fra industrien. I et tillæg til vejledningen gives der yderligere oplysninger om identifikationsparametre til de parter i industrien, som har begrænset erfaring med identifikation af stoffer.

¹ Europa-Parlamentets og Rådets forordning (EF) nr. 1907/2006 af 18. december 2006 om registrering, vurdering og godkendelse af samt begrænsninger for kemikalier (REACH), om oprettelse af et europæisk kemikalieagentur og om ændring af direktiv 1999/45/EF og ophævelse af Rådets forordning (EØF) nr. 793/93 og Kommissionens forordning (EF) nr. 1488/94 samt Rådets direktiv 76/769/EØF og Kommissionens direktiv 91/155/EØF, 93/67/EØF, 93/105/EF og 2000/21/EF ("REACH").

² Europa-Parlamentets og Rådets forordning (EF) nr. 1272/2008 af 16. december 2008 om klassificering, mærkning og emballering af stoffer og blandinger og om ændring og ophævelse af direktiv 67/548/EØF og 1999/45/EF og om ændring af forordning (EF) nr. 1907/2006 (EØS-relevant tekst) ("CLP").

Vejledningen indeholder desuden en række links til relevante værktøjer til brug ved karakterisering og kontrol af et stofs kemiske identitet.

I ECHA-manualerne findes der mere detaljerede anvisninger i, hvordan oplysningerne om stofidentitet skal indsættes i IUCLID i forbindelse med forskellige processer i REACH og CLP. Manualerne er tilgængelige på <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Anvendelsesområde

I henhold til artikel 1 i REACH dækker forordningen fremstilling, import, markedsføring og anvendelse af stoffer som sådan og i blandinger og artikler. Blandinger og artikler som sådan er ikke reguleret i REACH.

I henhold til artikel 10 i REACH skal stoffets identitet ved registreringen angives ved hjælp af parametrene i punkt 2 i bilag VI til REACH (se Tabel 3). Der anvendes lignende parametre (jf. punkt 2.1-2.3.4 i bilag VI til REACH) til at angive stofidentiteten, når et stof anmeldes i henhold til artikel 40, stk. 1, i CLP. Vejledningen fokuserer på tilstrækkelig identifikation af stoffer, der er omfattet af den juridiske definition på et stof i REACH og CLP, og der gives vejledning omkring parametrene for identifikation af stoffer i punkt 2 i bilag VI til REACH. Den information, der gives om stoffets identitet, skal være tilstrækkelig til at identificere hvert stof. En eller flere af stoffets identifikationsparametre kan udelades, hvis det ikke er teknisk muligt, eller hvis det ikke skønnes videnskabeligt nødvendigt at anføre den krævede information. Der skal gives en tydelig og videnskabelig begrundelse for sådanne udeladelser.

Fremgangsmåden for identificeringen af et stof afhænger af stoftypen. Brugere af vejledningen henvises derfor til de specifikke kapitler for de forskellige stoftyper.

De EF-fortegnelser, der bruges inden for rammerne af direktiv 67/548/EØF (EINECS, ELINCS og NLP-fortegnelsen), er vigtige værktøjer til at identificere stoffer. Disse fortegnelsers rolle i henhold til REACH er beskrevet i kapitel 3.2.

Stoffer, som hører under REACH og CLP (og dermed denne vejledning) er typisk resultatet af kemiske reaktioner i forbindelse med fremstillingen af et stof og kan indeholde flere forskellige bestanddele. Stoffer – som defineret i REACH og CLP – omfatter også stoffer, der er kemisk afledt eller isoleret fra naturligt forekommende materialer, som kan bestå af ét grundstof eller ét molekyle (f.eks. rene metaller eller visse mineraler) eller flere forskellige bestanddele (f.eks. æteriske olier og metalstoffer, der dannes ved smeltning af svovlholdig malm). Stoffer, der er omfattet af anden fællesskabslovgivning, er dog i en række tilfælde fritaget fra registrering i henhold til REACH (se artikel 2 i REACH). Stofferne i bilag IV til REACH, og stoffer, som opfylder visse kriterier i bilag V til REACH, er også fritaget fra registrering. Selv om et stof kan fritages fra registrering, betyder det ikke nødvendigvis, at stoffet er fritaget fra de øvrige afsnit i REACH-forordningen eller kravene i CLP-forordningen.

REACH fastsætter, at registranter af det samme stof skal træde sammen og enes om fælles indsendelse af visse oplysninger om stoffet (princippet om ét stof, én registrering)³. For at kunne gennemføre et sådant princip er det nødvendigt at vide, hvordan registranten har afgrænset omfanget af stofidentitetsprofilen.

³ Detaljerede oplysninger om datadeling i fælles indsendelser for samme stof findes i *Vejledning om datadeling*.

1.3. Vejledningens struktur

Baggrundsoplysninger som f.eks. vejledningens formål og anvendelsesområde findes i kapitel 1, og forkortelser og definitioner i kapitel 2. Relevante oplysninger om rammen for identifikation af stoffer i REACH, f.eks. stofdefinition og informationskrav, findes i kapitel 3.

Den praktiske vejledning om identifikation og navngivning af stoffer findes i kapitel 4.

- Kapitel 4.1 beskriver sondringen mellem "veldefinerede" og "ikke veldefinerede" stoffer, og inden for disse to hovedgrupper kan forskellige stoftyper identificeres ved hjælp af de specifikke retningslinjer for identifikation af hvert af disse stoffer. Et nøglediagram henviser brugeren til det relevante kapitel med vejledning om identifikation for den specifikke stofstype.
- I de efterfølgende kapitler gives der specifik vejledning for hver stofstype i form af et sæt regler med forklaringer og eksempler.

Kapitel 5 beskriver, hvordan det kontrolleres, om stoffer kan anses for at være de samme. Kapitel 6 giver vejledning om stofidentitet inden for forespørgselsprocessen.

I kapitel 7 gives desuden nogle detaljerede eksempler på brug af den praktiske vejledning i kapitel 4.

Tillæg I indeholder links til relevante værktøjer til brug ved karakterisering og kontrol af et stofs kemiske identitet.

Tillæg II indeholder yderligere baggrundsoplysninger om de enkelte parametre for identifikation af stoffer, der bruges i stofidentifikationsprocessen, som f.eks. nomenklaturbestemmelser, EF- og CAS-numre, notationer i molekylformler og strukturformler samt analysemetoder.

Tillæg III indeholder oplysninger om begrebet stofidentitetsprofil, relevansen for forpligtelsen til fælles indsendelse, og hvordan profilen skal defineres og indberettes.

2. Definitioner og forkortelser

2.1. Forkortelser

De vigtigste forkortelser, der anvendes i denne vejledning, er opstillet og forklaret i Tabel 1.

Tabel 1: Forkortelser

Forkortelse	Betydning
AISE	International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Forordning (EF) nr. 1272/2008 om klassificering, mærkning og emballering af stoffer og blandinger
EC	Europa-Kommissionen
EINECS	Den europæiske fortegnelse over markedsførte kemiske stoffer
ELINCS	Den europæiske liste over anmeldte kemiske stoffer
ENCS	Existing and New Chemical Substances (Japan)
ESIS	Det europæiske informationssystem for kemiske stoffer
EU	Den Europæiske Union
GC	Gaskromatografi
GHS	Globalt harmoniseret system
HPLC	Højtryksvæskechromatografi
InChI	IUPAC International Chemical Identifier
INCI	Den internationale nomenklatur for kosmetiske bestanddele
IR	Infrarød
ISO	Den Internationale Standardiseringsorganisation
IUBMB	International Union of Biochemistry and Molecular Biology
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database
IUPAC	Den Internationale Union for Ren og Anvendt Kemi
MS	Massespektroskopi
NLP	No-Longer Polymer
NMR	Nuklear magnetisk resonans
ppm	Dele pr. million
REACH	Registrering, vurdering og godkendelse af samt begrænsninger for kemikalier

SIEF	Forum for informationsudveksling om stoffer
SIP	Stofidentitetsprofil
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification
TSCA	Toxic Substances Control Act (USA)
UV/Vis	Ultraviolet/synlig
UVCB	Stoffer af ukendt eller variabel sammensætning, komplekse reaktionsprodukter eller biologiske materialer
w/w	Vægtprocent
XRD	Røntgendiffraktion
XRF	Røntgenfluorescens
AAS	Atomabsorptionsspektroskopi

2.2. Definitioner

De vigtigste definitioner, der anvendes i denne vejledning, er opstillet og beskrevet i Tabel 2. De er baseret på de anvendte definitioner i REACH- og CLP-forordningen. Nogle begreber er derfor defineret anderledes end i direktiv 67/548/EØF.

Tabel 2: Definitioner

Definition	Beskrivelse
Anmeldt stof*	Et stof, der er indsendt en anmeldelse for, og som kunne markedsføres i overensstemmelse med direktiv 67/548/EØF.
Artikel*	En genstand, der under fremstillingen har fået en særlig form, overflade eller design, der i højere grad end den kemiske sammensætning er bestemmende for dens funktion.
Bestanddel	Enhver enkelt art, der findes i et stof, som kan karakteriseres ved dens unikke kemiske identitet.
Blanding*	Blanding eller opløsning, der er sammensat af to eller flere stoffer.
EF-fortegnelse	EF-fortegnelsen er ikke juridisk defineret i REACH-forordningen, men den er en kombination af tre uafhængige og retligt godkendte europæiske fortegnelser over stoffer fra EU's tidligere lovgivningsrammer for kemiske stoffer: EINECS, ELINCS og NLP-fortegnelsen ("No-Longer Polymers"). Indgangene i EF-fortegnelsen består af et kemisk navn og nummer (EF-navn og EF-nummer), et CAS-nummer, en molekylformel (hvis den findes) og en beskrivelse (for visse stoftyper).
EF-nummer	EF-nummeret er den numeriske identifikator for stoffer i EF-fortegnelsen.
Fremstilling*	Fremstilling eller udvinding af stoffer i naturlig form.
Hovedbestanddel	En bestanddel, der ikke er et tilsætningsstof eller en urenhed, i et stof, som udgør en væsentlig del af det pågældende stof og derfor bruges i stoffets navn og den detaljerede identifikation af stoffet.
Ikke kemisk modificeret stof*	Et stof, hvis kemiske struktur forbliver uændret, selv om det har gennemgået en kemisk proces eller behandling eller en fysisk mineralogisk omdannelse, f.eks. for at fjerne urenheder.
Indholdsstof	Stof, der bevidst er tilsat for at danne en blanding.

IUCLID	International database for ensrettet information om kemikalier ("International Uniform Chemical Information Database"). IUCLID er et database- og forvaltningssystem til administration af data om kemiske stoffer.
Kromatografisk fingeraftryk	Gengivelse af et stofs sammensætning ud fra den karakteristiske fordeling af bestanddele i et analysekromatogram.
Legering*	Et metallisk materiale, der er homogent på en makroskopisk skala, og som består af to eller flere grundstoffer, der er kombineret på en sådan måde, at de ikke umiddelbart kan adskilles mekanisk. Legeringer betragtes som særlige blandinger.
Listenummer	Nummer, som agenturet tildeler. Nummer, der automatisk tildeles af REACH-IT. Bruges i forbindelse med alle indkommende gyldige indsendelser (f.eks. PPORD, forespørgsler, registreringer samt anmeldelser af klassificering og mærkning).
Mellemprodukt*	Et stof, der fremstilles til og forbruges i eller anvendes til kemisk forarbejdning for at blive omdannet til et andet stof (i det følgende benævnt <i>syntese</i>): (a) <u>ikke-isoleret mellemprodukt</u> : et mellemprodukt, der under syntesen ikke bevidst fjernes (bortset fra prøveudtagning) fra det udstyr, hvori syntesen finder sted. Dette udstyr omfatter reaktionsbeholderen, hjælpeudstyr hertil samt udstyr, som stoffet/stofferne passerer igennem i en ubrudt strøm eller batchproces, og rørsystemer til overførsel fra én beholder til en anden med henblik på næste reaktionstrin, men det omfatter ikke tanke eller andre beholdere, som stoffet/stofferne opbevares i efter fremstillingen (b) <u>isoleret mellemprodukt anvendt på produktionsstedet</u> : et mellemprodukt, der ikke opfylder kriterierne for et ikke-isoleret mellemprodukt, og hvor fremstillingen af mellemproduktet og syntesen af et eller flere andre stoffer fra dette mellemprodukt finder sted på samme produktionssted, der drives af en eller flere juridiske enheder (c) <u>transporteret isoleret mellemprodukt</u> : et mellemprodukt, der ikke opfylder kriterierne for et ikke-isoleret mellemprodukt, og som transporteres mellem eller leveres til andre produktionssteder.
Monomer*	Et stof, der kan danne kovalente bindinger med en kæde af andre lignende eller ikke-lignende molekyler under de forhold, der karakteriserer den relevante polymerisationsreaktion, som anvendes til den specifikke proces.

Polymer*	<p>Et stof bestående af molekyler, der er karakteriseret ved sammenkobling af en eller flere typer monomere enheder. Disse molekyler skal være fordelt på en række molekylvægte, inden for hvilken forskellene i molekylvægt hovedsagelig skyldes forskelle i antallet af monomere enheder. En polymer består af:</p> <p>(a) et simpelt vægtflertal af molekyler, der indeholder mindst tre monomere enheder, som er kovalent bundet til mindst en anden monomer enhed eller anden reaktant</p> <p>(b) mindre end et simpelt vægtflertal af molekyler med samme molekylvægt.</p> <p>I denne definition forstås ved en "monomer enhed" en monomers form i en polymer efter reaktionen.</p>
Stof med én bestanddel	Som hovedregel et stof, defineret ved dets sammensætning, hvori én hovedbestanddel udgør mindst 80 vægtprocent.
Stof med flere bestanddele	Som hovedregel et stof, defineret ved dets sammensætning, hvori mere end én hovedbestanddel er til stede i en koncentration på over 10 vægtprocent og under 80 vægtprocent).
Stof*	Et grundstof og forbindelser heraf, naturligt eller industrielt fremstillet, indeholdende tilsætningsstoffer, som er nødvendige til at bevare stoffets stabilitet, og urenheder, som følger af fremstillingsprocessen, bortset fra opløsningsmidler, der kan udskilles, uden at det påvirker stoffets stabilitet eller ændrer dets sammensætning.
Stof, der forekommer i naturen*	Et stof, der forekommer i naturen som sådant, og som er uforarbejdet eller kun forarbejdet ved manuel, mekanisk eller tyngdemæssig påvirkning, ved opløsning i vand, ved flotation, ved ekstraktion med vand, ved dampdestillation eller ved opvarmning med det ene formål at fjerne vand, eller som er udvundet af luft på en hvilken som helst måde.
Tilsætningsstof	Et stof, der bevidst er tilsat for at stabilisere stoffet ⁴ .
Urenhed	En utilsigtet bestanddel, der forekommer i et fremstillet stof. Den kan stamme fra udgangsmaterialerne eller være resultatet af sekundære eller ufuldstændige reaktioner i løbet af produktionsprocessen. Selv om den forekommer i slutproduktet, blev den ikke tilsat bevidst.

* Definitioner i henhold til artikel 3 i REACH.

⁴ Inden for andre områder kan et tilsætningsstof have andre funktioner, f.eks. pH-regulerende middel eller farvestof. I REACH-forordningen og denne vejledning er et tilsætningsstof dog en stabilisator.

3. Rammerne for identifikation af stoffer i REACH og CLP

REACH og CLP indeholder en definition af et stof, og i REACH opstilles de parametre for identifikation af stoffer (bilag VI, punkt 2), som skal anvendes til at identificere stoffet med henblik på registrering.

Dette kapitel beskriver definitionen af et stof i REACH og CLP (kapitel 3.1), giver generel vejledning i, hvordan EF-fortegnelsen fra EU's tidligere kemikalielovgivning anvendes (kapitel 3.2), og giver yderligere baggrundsoplysninger om stofidentifikationskravene i REACH (kapitel 3.3).

3.1. Definition af et stof

Et stof er defineret på følgende måde i REACH (artikel 3, stk. 1) og CLP (artikel 2, stk. 7):

"stof": et grundstof og forbindelser heraf, naturligt eller industrielt fremstillet, indeholdende sådanne tilsætningsstoffer, som er nødvendige til bevarelse af stoffets stabilitet, og sådanne urenheder, som følger af fremstillingsprocessen, bortset fra opløsningsmidler, der kan udskilles, uden at det påvirker stoffets stabilitet eller ændrer dets sammensætning

Definitionen af stof i REACH og CLP svarer til den definition af stof, der blev anvendt i den syvende ændring af direktivet om farlige stoffer (direktiv 92/32/EØF om ændring af direktiv 67/548/EØF). I begge tilfælde går definitionen ud over den rent kemiske forbindelse, der defineres ved én molekylstruktur. Definitionen af stoffet omfatter forskellige bestanddele som f.eks. urenheder.

3.2. Numeriske identifikatorer

3.2.1. EF-fortegnelsen

Der er tre separate fortegnelser, som blev oprettet gennem den tidligere kemikalielovgivning: EINECS (den europæiske fortegnelse over markedsførte kemiske stoffer), ELINCS (den europæiske liste over anmeldte kemiske stoffer) og NLP (No-Longer Polymer-fortegnelsen).

Stoffer, som fandtes på det europæiske marked mellem 1. januar 1971 og 18. september 1981, er opført i den europæiske fortegnelse over markedsførte kemiske stoffer (EINECS)^{5, 6, 7}.

Denne fortegnelse indeholder ca. 100 000 stoffer, der er identificeret ved et kemisk navn (og en beskrivelse for visse stoftyper), et CAS-nummer og det 7-cifrede EINECS-nummer.

⁵ EINECS er baseret på den europæiske grundfortegnelse ("**E**uropean **C**ore **I**nventory", ECOIN)), hvortil industrien kan foretage yderligere indberetning af stoffer (i henhold til kriterierne for indberetning af stoffer til EINECS). ECOIN blev sammensat ved at kombinere forskellige lister over kemikalier, der blev antaget at være på det europæiske marked (f.eks. TSCA-listen). EINECS blev offentliggjort den 15. juni 1990 og indeholder over 100 000 stoffer. Ved brugen af fortegnelsen blev der konstateret en række fejl (trykfejl, f.eks. forkert kemisk navn, formel eller CAS-registreringsnummer). Der blev derfor offentliggjort en berigtigelse 1. marts 2002.

⁶ ECB (2005) Beslutningsmanual for gennemførelse af den sjette og syvende ændring af direktiv 67/548/EØF (direktiv 79/831/EØF og 92/32/EØF) (ikke-fortrolig udgave). EUR 20519 EN. Opdateret udgave, juni 2005.

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

EINECS-numre begynder altid med 2 eller 3 (2xx-xxx-x eller 3xx-xxx-xx). Stoffer, der er indberettet til EINECS, er blevet kontrolleret, inden de blev indført i fortegnelsen.

Stoffer, der er anmeldt og markedsført efter den 18. september 1981, er opført på den europæiske liste over anmeldte kemiske stoffer (ELINCS)⁶. Denne fortegnelse (liste) indeholder alle stoffer, der er anmeldt indtil den 31. maj 2008 i overensstemmelse med direktiv 67/548/EØF som ændret. Disse stoffer er såkaldte "nye stoffer", da de først blev markedsført i EF efter den 18. september 1981. Europa-Kommissionen tildelte et ELINCS-nummer til et stof, efter at det var kontrolleret af medlemsstaternes kompetente myndigheder. I modsætning til EINECS omfatter ELINCS ikke et CAS-nummer i sine indgange, men i stedet et anmeldelsesnummer (som medlemsstaternes kompetente myndigheder tildeler), et handelsnavn (hvis det findes), klassificeringen og IUPAC-navnet for klassificerede stoffer. ELINCS-numrene er også 7-cifrede tal, men de starter altid med 4 (4xx-xxx-x).

Polymerer var udelukket fra indberetning til EINECS og var underlagt særlige regler i henhold til direktiv 67/548/EØF⁸ ⁹. Termen "polymer" blev yderligere defineret i den syvende ændring af direktiv 67/548/EØF (direktiv 92/32/EØF). Som følge af implementeringen af denne definition blev nogle stoffer, som i henhold til indberetningsreglerne for EINECS blev betragtet som polymerer, ikke længere ("*no longer*") betragtet som polymerer i den syvende ændring af direktivet. Eftersom alle stoffer, der ikke er opført i EINECS, skulle anmeldes, burde alle "*No-Longer Polymers*" (NLP'er) i teorien være blevet anmeldt. Ministerrådet gjorde det dog klart, at disse tidligere polymerer ikke skulle være underlagt et anmeldelseskrav med tilbagevirkende kraft. Kommissionen blev anmodet om at opstille en fortegnelse over NLP'er (NLP-fortegnelsen). De stoffer, der skulle med i denne fortegnelse, var stoffer, der var markedsført i EU mellem 18. september 1981 (datoen for ikrafttrædelsen af direktiv 79/831/EØF, den sjette ændring af direktiv 67/548/EØF) og 31. oktober 1993 (datoen for ikrafttrædelsen af direktiv 92/32/EØF, den syvende ændring af direktiv 67/548/EØF), og som levede op til kravet om, at de blev betragtet som polymerer i henhold til indberetningsreglerne for EINECS, men ikke længere blev betragtet som polymerer i henhold til den syvende ændring. NLP-fortegnelsen er ikke udtømmende. Stofferne i NLP-fortegnelsen er identificeret ved hjælp af et kemisk navn, et CAS-nummer og det syvcifrede NLP-nummer. Et NLP-nummer begynder altid med 5 (5xx-xxx-x).

Disse tre fortegnelser over stoffer, EINECS, ELINCS og NLP-fortegnelsen, kaldes under ét EF-fortegnelsen. Europa-Kommissionen har tildelt et EF-nummer til hvert stof i denne fortegnelse (læs mere om EF-nummeret i tillæg II).

Oplysningerne om disse stoffer fås på webstedet for Det Europæiske Kemikalieagentur (<http://echa.europa.eu/da/information-on-chemicals/ec-inventory>), som også fører og offentliggør en fortegnelse over registrerede stoffer (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Producenter og importører kan bruge EF-fortegnelsen som værktøj til at finde EF-nummeret på deres stof.

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

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

3.2.2. Listenumre

Ved etableringen af REACH-IT-systemet vurderede ECHA, at det ville være en fordel automatisk at tildele et nummer til alle indkommende teknisk fuldstændige indsendelser (præregistreringer, PPORD, forespørgsler, registreringer, anmeldelser af klassificering og mærkning osv.), som ikke havde et EF-nummer (se kriterierne for tildeling af listenumre nedenfor). Teknisk set har dette gjort håndteringen, viderebehandlingen og identifikationen af stofferne i disse indsendelser lettere. Disse "listenumre" har samme numeriske format som numrene i EINECS-, ELINCS- og NLP-fortegnelserne, men de begynder med andre tal.

Listenumrene har det samme numeriske format som indgangene i EINECS-, ELINCS- og NLP-fortegnelsen. Langt størstedelen af listenumrene og den stofidentifikation, der er forbundet med dem, er aldrig blevet kontrolleret for korrekthed, gyldighed eller overensstemmelse med konventionerne i denne vejledning.

Det skal fremhæves, at forskellige listenumre kan være tildelt det samme stof, hvis der anvendes forskellige identifikatorer (f.eks. navn) for stoffet. Derfor er det også muligt, at der tildeles et listenummer til et stof, der er opført i EINECS-, ELINCS- eller NLP-fortegnelsen. Dette kan ske, hvis der i en indsendelse til ECHA via REACH-IT anvendes et andet stofnavn end det, der anvendes i EF-fortegnelsen.

Listenumrene kan f.eks. starte med 6, 7, 8 eller 9 (6xx-xxx-x, 7xx-xxx-x, 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

Det er vigtigt at bemærke, at beskrivelsen af et stof er relativt bred for visse EINECS-indgange og kan omfatte mere end én stofidentitet i henhold til REACH, artikel 3, stk. 1. I disse tilfælde opfordres den potentielle registrant til at beskrive det pågældende stof mere præcist (f.eks. ved hjælp af IUPAC-navnet og andre tilgængelige identifikatorer). Registranten skal dog angive, hvilken EINECS-indgang stoffet tilhører. I sådanne tilfælde overvejer Det Europæiske Kemikalieagentur, om det pågældende stof skal tildeles et listenummer.

3.3. Krav til identifikation af stoffer i REACH og CLP

Når en registrering er påkrævet i henhold til REACH-forordningen, skal den indeholde oplysninger om stoffets identifikation, jf. bilag VI, punkt 2. Disse oplysninger skal være fyldestgørende og tilstrækkelige til, at hvert stof kan identificeres. Hvis det ikke er teknisk muligt, eller hvis det ikke forekommer videnskabeligt nødvendigt at give oplysninger om en eller flere af stoffets identifikationsparametre, skal dette tydeligt begrundes, jf. bemærkning 1 i bilag VI.

Når en anmeldelse er påkrævet i henhold til CLP-forordningen (CLP-forordningens artikel 40), skal den ligeledes indeholde oplysninger om stoffets identifikation, jf. punkt 2.1-2.3.4 i bilag VI til REACH. Disse oplysninger skal være tilstrækkelige til, at hvert stof kan identificeres. Hvis det ikke er teknisk muligt, eller hvis det ikke forekommer videnskabeligt nødvendigt at give oplysninger om én eller flere af stoffets identifikationsparametre, skal dette tydeligt begrundes, jf. bemærkning 1 i bilag VI.

En oversigt over parametrene for identifikation af stoffer i bilag VI til REACH findes i Tabel 3.

Tabel 3: Parametre for identifikation af stoffer i punkt 2 i bilag VI til REACH

Parametre for identifikation af stoffer i punkt 2 i bilag VI til REACH	
2.	<p>IDENTIFIKATION AF STOFFET</p> <p><i>Oplysningerne for hvert enkelt stof skal være tilstrækkelige til, at stoffet kan identificeres. Hvis det ikke er teknisk muligt at give de pågældende oplysninger, eller det af videnskabelige grunde ikke forekommer nødvendigt at give dem, skal dette tydeligt begrundes.</i></p>
2.1	Navn eller anden identifikator for hvert stof
2.1.1	<i>Navn(e) i IUPAC-nomenklaturen. Hvis de(t) ikke foreligger, andet (andre) internationalt (internationale) (kemisk(e) navn(e))</i>
2.1.2	<i>Andre navne (trivialnavn, handelsnavn, forkortelse)</i>
2.1.3	<i>EF-nummer, dvs. EINECS-, ELINCS- eller NLP-nummer, eller det nummer, som agenturet har tildelt (hvis det foreligger, og det er hensigtsmæssigt)</i>
2.1.4	<i>CAS-navn og CAS-nummer (hvis de foreligger)</i>
2.1.5	<i>Anden identitetskode (hvis den foreligger), f.eks. toldnummer</i>
2.2	Oplysninger vedrørende molekyl- og strukturformel eller krystalstruktur for hvert stof
2.2.1	<i>Molekyl- og strukturformel (herunder SMILES-notation og en anden repræsentation, hvis den foreligger) og beskrivelse af krystalstruktur(er)</i>
2.2.2	<i>Oplysninger om optisk aktivitet og typisk andel af (stereo)isomerer (hvis det er relevant og hensigtsmæssigt)</i>
2.2.3	<i>Molekylvægt eller molekylvægtsinterval</i>
2.3.	Sammensætning af hvert stof
2.3.1	<i>Renhedsgrad (%), hvis relevant</i>

2.3.2	<p>Navne på bestanddele og urenheder</p> <p>I tilfælde af et stof med ukendt eller variabel sammensætning, komplekse reaktionsprodukter eller biologiske materialer (UVCB):</p> <ul style="list-style-type: none">– navne på bestanddele, der er til stede i en koncentration på $\geq 10\%$– navne på kendte bestanddele, der er til stede i en koncentration på $< 10\%$– for bestanddele, der ikke kan identificeres individuelt, beskrivelse af grupper af bestanddele baseret på kemisk beskaffenhed– beskrivelse af oprindelse eller kilde og af fremstillingsprocessen
2.3.3	<p>Typisk koncentration og koncentrationsinterval (i procent) af bestanddele, grupper af bestanddele, der ikke kan identificeres individuelt, og urenheder som angivet i punkt 2.3.2</p>
2.3.4	<p>Navne og typisk koncentration og koncentrationsinterval (i procent) for tilsætningsstoffer</p>
2.3.5	<p>Alle nødvendige kvalitative analysedata, der er specifikke for identifikationen af stoffet, såsom data om UV, IR, nuklear magnetisk resonans, massespektrum eller diffraktion</p>
2.3.6	<p>Alle nødvendige kvantitative analysedata, der er specifikke for identifikationen af stoffet, såsom kromatografiske og titrimetriske data, grundstofanalyser eller diffraktionsdata</p>
2.3.7	<p>Beskrivelse af de analysemetoder eller relevante bibliografiske referencer, der er nødvendige for identifikationen af stoffet (herunder identifikation og kvantificering af dets bestanddele og, hvis det er relevant, urenheder og tilsætningsstoffer). Beskrivelsen skal bestå af de forsøgsprotokoller, der er fulgt, og den relevante fortolkning af de resultater, der rapporteres under punkt 2.3.1-2.3.6. Disse oplysninger skal være tilstrækkelige til, at metoderne kan reproducere.</p>
2.5	<p>Alle andre tilgængelige oplysninger, der er relevante for identifikationen af stoffet.</p>

4. Vejledning om identifikation og navngivning af stoffer i henhold til REACH og CLP

4.1. Indledning

Reglerne for identifikation og navngivning varierer efter stofstype. Af praktiske grunde er denne vejledning opbygget, så brugeren for hver stofstype føres direkte til det kapitel, der indeholder den relevante vejledning. De forskellige stoftyper forklares nedenfor, og det beskrives, hvordan man finder det relevante kapitel.

Identifikation af stoffer skal baseres på mindst de stofidentifikationsparametre, der er opført i REACH i bilag VI, punkt 2 (se Tabel 3). Ethvert stof skal derfor identificeres ved hjælp af en kombination af de relevante identifikationsparametre:

- IUPAC-identifikator og/eller navn og andre identifikatorer, f.eks. CAS-nummer, EF-nummer (bilag VI, punkt 2.1)
- oplysninger vedrørende molekyl- og strukturformel for hvert stof (bilag VI, punkt 2.2)
- kemisk sammensætning (bilag VI, punkt 2.3).

Et stof identificeres ud fra dets kemiske sammensætning, dvs. den kemiske identitet og indholdet af de enkelte bestanddele i stoffet. De fleste stoffer kan identificeres direkte, men direkte identifikation er ikke mulig eller tilstrækkelig for visse stoffer inden for rammerne af REACH og CLP. I de tilfælde kræves der andre eller yderligere oplysninger om identifikation af stoffer.

Stofferne kan derfor inddeles i to hovedgrupper:

1. "Veldefinerede stoffer": stoffer med en defineret kvalitativ og kvantitativ sammensætning, som kan identificeres tilstrækkeligt på grundlag af identifikationsparametrene i REACH, bilag VI, punkt 2.
2. "UVCB-stoffer": stoffer med ukendt eller variabel sammensætning, komplekse reaktionsprodukter eller biologiske materialer. Disse stoffer kan ikke identificeres tilstrækkeligt ud fra de ovennævnte parametre.

Variabilitet i sammensætningen for veldefinerede stoffer angives med den øvre og nedre grænse i hovedbestanddelens koncentrationsintervaller. For UVCB-stoffer er variabiliteten relativt stor og/eller svær at forudsige.

Det erkendes, at der vil være stoffer, som vil befinde sig i en gråzone mellem veldefinerede stoffer (reaktionsprodukter med mange bestanddele, som hver især falder inden for et bredt interval) og UVCB-stoffer (reaktionsprodukter med en variabel sammensætning, der er svær at forudsige). Det er registrantens ansvar at identificere et stof på den mest hensigtsmæssige måde.

Reglerne for identifikation og navngivning varierer for "veldefinerede stoffer" med én bestanddel og "veldefinerede stoffer" med mere end én hovedbestanddel. For de forskellige stoftyper i kategorien "UVCB" beskrives forskellige regler for identifikation og navngivning.

I

Tabel 4 og Tabel 5 vises hovedidentifikatorerne for en række eksempler på forskellige stoftyper. Disse eksempler er grupperet, så ligheder og forskelle med hensyn til identifikation af stofferne fremgår tydeligt.

Tabel 4 og Tabel 5 er ikke en udtømmende liste over alle mulige stoftyper. Denne gruppering af stoffer i forhold til regler for identifikation og navngivning skal ikke betragtes som et officielt klassificeringssystem for stoffer, men som en praktisk hjælp til at anvende de specifikke regler hensigtsmæssigt og til at finde de relevante oplysninger i denne vejledning.

Table 4: Gruppering af hovedidentifikatorer for eksempler, der repræsenterer forskellige typer af veldefinerede lignende stoffer

Fælles træk	Eksempler eller repræsenterende eksempler	Hovedidentifikatorer
Veldefinerede stoffer efter kemisk sammensætning [kapitel 4.2.]	Stoffer med én bestanddel, f.eks. - benzen (95 %) - nikkel (99 %) [kapitel 4.2.1]	Kemisk sammensætning: én hovedbestanddel ≥ 80 %: - Hovedbestanddelens kemiske identitet (kemisk navn, CAS-nummer, EF-nummer osv.) - Typisk koncentration samt øvre og nedre grænse
	Stoffer med flere bestanddele, f.eks. definerede reaktionsprodukter som f.eks. reaktionsmasse af 2-, 3- og 4-Chlortoluen (30 % hver) [kapitel 4.2.2]	Kemisk sammensætning: en blanding (reaktionsmasse) af hovedbestanddele, som hver udgør mellem ≥ 10 og < 80 vægtprocent: - hver hovedbestanddels kemiske identitet - typiske koncentrationer samt øvre og nedre grænse for hver bestanddel og for selve reaktionsmassen
	Stoffer, der er defineret ved mere end den kemiske sammensætning, f.eks. grafit og diamant [kapitel 4.2.3]	Kemisk sammensætning som et stof med én eller flere bestanddele OG Andre fysiske parametre eller karakteriseringsparametre: f.eks. krystal morfologi, (geologisk) mineralsammensætning osv.

Tabel 5: Gruppering af hovedidentifikatorer for eksempler, der repræsenterer forskellige typer af UVCB-stoffer

Fælles træk		Eksempler eller repræsenterende eksempler	Hovedidentifikatorer		
			Kilde	Proces	Andre identifikatorer
UVCB-stoffer (stoffer med ukendt eller variabel sammensætning, komplekse reaktionsprodukter eller biologiske materialer) [kapitel 4.3]	Biologiske materialer (B)	Ekstrakter af biologiske materialer, f.eks. naturlige duftstoffer, naturlige olier, naturlige farvestoffer og pigmenter	- Plante- eller dyreart og -familie - Del af plante/dyr	- Ekstraktion - Fraktionering, koncentrering, isolering, rensning osv. - <u>Afledning*</u>	- Kendt eller generisk sammensætning - Kromatografiske og andre fingeraftryk - Reference til standarder - Farveindeks
		Komplekse biologiske makromolekyler, f.eks. enzymer, proteiner, DNA eller RNA-fragmenter, hormoner eller antibiotika			- Standardenzymindeks - Genetisk kode - Stereokonfiguration - Fysiske egenskaber - Funktion/aktivitet - Struktur - Aminosyresekvens
	Fermenteringsprodukter, f.eks. antibiotika, biopolymerer, enzymblandinger, vinasse (produkt af sukkerfermentering), sophorolipider osv.	- Vækstmedium - Anvendt mikroorganisme	- Fermentering - Isolering af produkter - Rensningstrin	- Produkttype: f.eks. antibiotika, biopolymerer, proteiner osv. - Kendt sammensætning	
	Kemiske og mineralske stoffer med	Reaktionsblandinger med sammensætning, som er svær at forudsige og/eller variabel	Udgangsmaterialer	<u>Kemisk reaktionstype</u> , f.eks. esterificering, alkylering eller hydrogenering	- Kendt sammensætning - Kromatografiske og andre fingeraftryk - Reference til standarder

	utilstrækkeligt defineret, kompleks eller variabel sammensætning (UVC)	<ul style="list-style-type: none"> - Fraktioner eller destillater, f.eks. råoliestoffer - Ler, f.eks. bentonit - Tjære 	<ul style="list-style-type: none"> - Råolier - Kul/tørv - Mineralske gasser - Mineraler 	<ul style="list-style-type: none"> - Fraktionering, destillation - <u>Konvertering af fraktioner</u> - Fysisk forarbejdning - Rester 	<ul style="list-style-type: none"> - Afskæringsværdier - Kædelængdeinterval - Forhold mellem aromatisk og alifatisk - Kendt sammensætning - Standardindeks
		Koncentrater eller smeltemasser, f.eks. metalliske mineraler, eller rester af forskellige smelteprocesser eller metallurgiske processer, f.eks. slagge	Malme	<ul style="list-style-type: none"> - Smeltning - Varmebehandling - Forskellige smelteprocesser 	<ul style="list-style-type: none"> - Kendt eller generisk sammensætning - Koncentration af metaller

* Understregede processer angiver syntese af nye molekyler

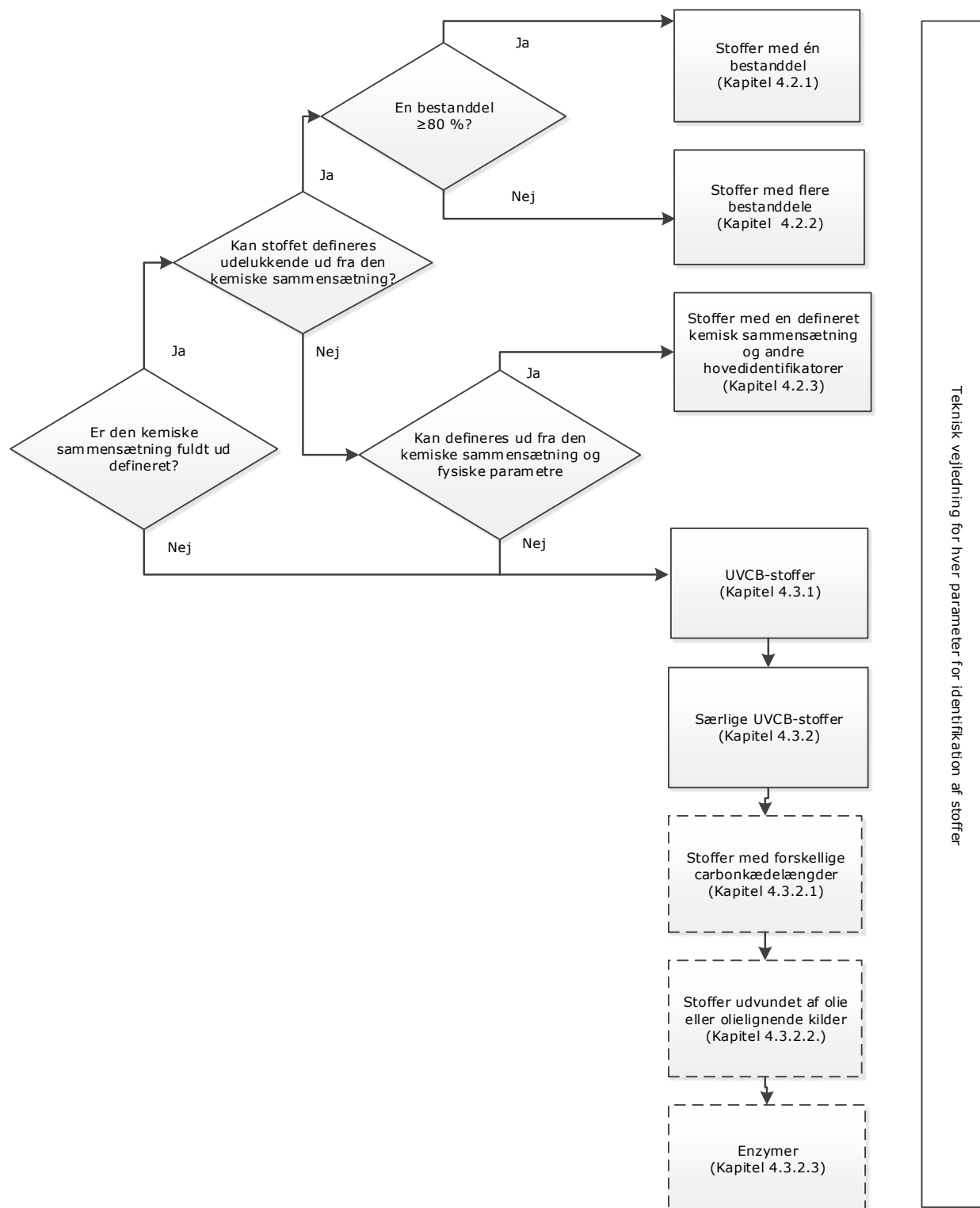
Dette kapitel er opdelt i underkapitler, som indeholder specifik vejledning om stofidentifikation i forbindelse med forskellige stoftyper. Figur 1 viser vej til de relevante kapitler.

Figur 1 viser vej ud fra kriterier, som er "tommelfingerregler". Registranten er ansvarlig for at vælge det mest relevante kapitel og angive stoffets identitet i overensstemmelse med reglerne og kriterierne for den pågældende stoftype.

Grundreglen er, at stoffer så vidt muligt defineres ved deres kemiske sammensætning og identifikationen af bestanddelene. Hvis dette ikke er tekniske muligt, benyttes andre identifikatorer som anført for de forskellige typer UVCB-stoffer.

Hvis registranten afviger fra reglerne og kriterierne for identifikation af stoffer i denne vejledning, skal dette begrundes. Stofidentifikationen skal være gennemsigtig, være forsvarlig og sikre overensstemmelse.

Figur 1: Vejviser til kapitler og tillæg med vejledning for forskellige stoftyper



Der skal gives en beskrivelse af analysemetoderne og/eller de relevante bibliografiske henvisninger til identifikation af stoffet og, hvor det er relevant, til identifikation af urenheder og tilsætningsstoffer (REACH bilag VI, afsnit 2.3.5, 2.3.6 og 2.3.7). Disse oplysninger skal være tilstrækkelige til, at metoderne kan reproduceres. Der bør også fremlægges typiske resultater ved anvendelse af analyseteknikkerne.

4.2. Stoffer med veldefineret sammensætning

Stoffer med en veldefineret kemisk sammensætning navngives i overensstemmelse med hovedbestanddelen/-delene. For nogle stoftyper er den kemiske sammensætning alene ikke nok til at foretage en karakterisering. I disse tilfælde skal identifikationen af stoffet suppleres med fysiske parametre vedrørende de kemiske strukturer.

Generelt skal det forsøges at dække sammensætningen op til 100 %, og der skal være en fuldstændig kemisk specifikation for hver bestanddel, herunder oplysninger om struktur. For stoffer, der defineres ved deres kemiske sammensætning, skelnes der mellem:

- hovedbestanddel: en bestanddel, der ikke er et tilsætningsstof eller en urenhed, i et stof, som udgør en væsentlig del af det pågældende stof og derfor bruges i stoffets navn og den detaljerede identifikation af stoffet
- urenhed: en utilsigtet bestanddel, der er til stede i et fremstillet stof. Det kan stamme fra udgangsmaterialerne eller være resultatet af sekundære eller ufuldstændige reaktioner i løbet af produktionsprocessen. Urenhederne er til stede i slutproduktet, men de blev ikke tilsat bevidst.
- tilsætningsstof: et stof, der bevidst er tilsat for at stabilisere stoffet.

Alle bestanddele (undtagen tilsætningsstoffer), som ikke er hovedbestanddel(e) i stoffet med én bestanddel eller et stof med flere bestanddele, betragtes som urenheder. Selv om det i visse brancher er almindeligt at bruge termen "spor", bruges kun termen "urenheder" i denne vejledning.

Der er forskellige identifikationskrav til de forskellige bestanddele:

- hovedbestanddele bidrager til navngivningen af stoffet, og hver hovedbestanddel skal identificeres præcist
- urenheder bidrager ikke til navngivningen af stoffet, men hver urenhed skal identificeres præcist
- tilsætningsstoffer bidrager til stoffets sammensætning (men ikke til navngivningen) og skal altid identificeres præcist
- den præcise identifikation af hovedbestanddele, urenheder og tilsætningsstoffer skal bestå af et IUPAC-navn, et kemisk navn, en strukturformel, et EF-nummer, et CAS-nummer, hvis det foreligger.

Der bruges en række konventioner til at skelne mellem stoffer med én bestanddel og stoffer med flere bestanddele:

- Et stof med én bestanddel er et stof, hvori en bestanddel forekommer i en koncentration på mindst 80 vægtprocent, og som indeholder op til 20 vægtprocent urenheder.

Et stof med én bestanddel navngives i overensstemmelse med den ene hovedbestanddel.

- Et stof med flere bestanddele er et stof, der består af flere hovedbestanddele, som forekommer i koncentrationer, der generelt ligger på ≥ 10 og < 80 vægtprocent.

Et stof, der består af flere forskellige bestanddele, betegnes en reaktionsmasse med to eller flere hovedbestanddele.

Ovennævnte regler er udelukkende vejledende. Afvigelser tillades, hvis der gives en holdbar begrundelse.

Urenheder, der er til stede i en koncentration på ≥ 1 %, skal normalt specificeres. Urenheder, der er relevante for klassificering og/eller for PBT-vurdering¹⁰, skal dog altid specificeres, uanset koncentrationen. Generelt skal der gives oplysninger om sammensætning op til 100 %.

Tilsætningsstoffer som defineret i REACH- og CLP-forordningen og i denne vejledning er midler, der er nødvendige for at bevare stoffets stabilitet. Tilsætningsstoffer er dermed en vigtig bestanddel af stoffet og tages i betragtning ved fastlæggelse af massebalancen. Foruden definitionen i REACH og denne vejledning bruges termen "tilsætningsstof" dog også for bevidst tilsatte stoffer med andre funktioner, f.eks. pH-regulerende midler eller farvestoffer. Disse bevidst tilsatte stoffer er ikke en del af stoffet som sådan og tages derfor ikke i betragtning ved fastlæggelse af massebalancen.

Blandinger som defineret i REACH og CLP er tilsigtede blandinger af stoffer og betragtes derfor ikke som stoffer med flere bestanddele.

Specifik vejledning om stoffer med én bestanddel findes i kapitel 4.2.1, og specifik vejledning om stoffer med flere bestanddele findes i kapitel 4.2.2. Vejledning om stoffer, der kræver yderligere information (f.eks. visse mineraler), findes i kapitel 4.2.3.

4.2.1. Stoffer med kun én bestanddel

Et stof med én bestanddel er et stof, der defineres ud fra dets kvantitative sammensætning, hvori en hovedbestanddel udgør mindst 80 vægtprocent.

Navngivningskonvention

Et stof med én bestanddel får navn efter hovedbestanddelen. Navnet skal i princippet anføres på engelsk i overensstemmelse med IUPAC-nomenklaturen (se tillæg I). Andre internationalt anerkendte betegnelser kan gives som ekstra information.

Identifikatorer

Et stof med én bestanddel identificeres ved hovedbestanddelens kemiske navn og alle andre tilgængelige identifikatorer (herunder molekyl- og strukturformel eller krystalstruktur). Alle urenheder og/eller tilsætningsstoffer i stoffet med én bestanddel skal identificeres. De(n) typiske koncentration(er) og koncentrationsområde(r) for hovedbestanddelen, urenhederne og/eller tilsætningsstofferne skal angives. Alle disse oplysninger skal være underbygget af analyseoplysninger.

Eksempel				
Hovedbestanddel	Indhold (%)	Urenhed	Indhold (%)	Stoffets identitet
m-xylen	91	o-xylen	5	m-xylene
o-xylen	87	m-xylen	10	o-xylene

¹⁰ Flere oplysninger om PBT-vurdering og relevante kriterier findes i Vejledning om informationskrav og kemikaliesikkerhedsvurdering, kapitel R11: PBT-vurdering.

Normalt udgør hovedbestanddelen > 80 % og skal specificeres udførligt ved hjælp af alle ovennævnte parametre. Summen af de typiske koncentrationer for hovedbestanddelen og urenhederne skal være 100 %. Urenheder, der er til stede i en koncentration > 1 %, skal specificeres ved navn og identifikatorer. Urenheder, der er relevante for klassificering og/eller for PBT-vurdering¹¹, skal altid specificeres ved de samme identifikatorer, uanset koncentrationen.

For at sikre korrekt anvendelse af 80 %-reglen medregnes bevidst tilsatte stoffer som f.eks. pH-regulatorer eller farvestoffer ikke i massebalancen.

"80%-reglen" er anvendt til anmeldelse af nye stoffer (direktiv 67/548/EØF), og den er gældende i REACH. Afvigelser fra denne 80 %-regel skal begrundes. Afvigelser kan f.eks. begrundes, hvis:

- hovedbestanddelen udgør < 80 %, men det kan påvises, at stoffet har samme fysisk-kemiske egenskaber og samme fareprofil som andre stoffer med én bestanddel med samme identitet, der opfylder 80 %-reglen
- intervallet af koncentrationer for hovedbestanddelen og urenheder overlapper 80 %-kriteriet, og hovedbestanddelen kun lejlighedsvis udgør ≤ 80 %.

Eksempler

Stof	Hovedbestanddel	Maks. indhold (%)	Typisk indhold (%)	Min. indhold (%)	Urenhed	Maks. indhold (%)	Typisk indhold (%)	Min. indhold (%)	Stofidentitet
1	o-xylen	90	85	65	m-xylen	35	15	10	o-xylene
2	o-xylen m-xylen	90 35	85 15	65 10	p-xylen	5	4	1	o-xylene

På grund af hovedbestanddelens og urenhedens koncentrationsintervaller kan stof 1 og 2 betragtes som stoffer med flere bestanddele, nemlig de to hovedbestanddele, o-xylen og m-xylen, eller som stoffer med én bestanddel. I et sådant tilfælde betragtes begge som stoffer med én bestanddel, fordi o-xylen typisk udgør > 80 %.

Analyseoplysninger

Der skal fremlægges tilstrækkelige kvalitative data til at bekræfte identiteten af bestanddelene og urenhederne i et stof med én bestanddel. Flere spektroskopiske metoder kan være egnede til at bekræfte stoffets identitet, ultraviolet og synlig absorptionsspektroskopi (UV/Vis), infrarød spektroskopi (IR), nuklear magnetisk resonansspektroskopi (NMR) og massespektroskopi (MS). For uorganiske stoffer eller organiske og/eller metalorganiske stoffer, der kan påvises/måles ved hjælp af krystalstruktur, er brugen af røntgendiffraction (XRD) i de fleste tilfælde at foretrække.

Kvantitative metoder, såsom kromatografiske teknikker som gaskromatografi (GC) eller højtryksvæskekromatografi (HPLC), kombineret med en detekteringsteknik, skal anvendes for at bekræfte stoffets sammensætning. For uorganiske stoffer kan røntgendiffraction (XRD), røntgenfluorescens (XRF), atomabsorptionsspektroskopi (AAS), induktivt koblet plasmaoptisk emissionsspektroskopi (ICP-OES) eller induktivt koblet plasmamassespektrometri (ICP-MS) være de mest egnede. Andre gyldige teknikker til separation af bestanddele skal evt. også anvendes.

Beskrivelsen af analysemetoderne skal omfatte de forsøgsprotokoller, der er fulgt, og fortolkningen af de angivne resultater.

¹¹ Flere oplysninger om PBT-vurdering og relevante kriterier findes i Vejledning om informationskrav og kemikaliesikkerhedsvurdering, kapitel R11: PBT-vurdering.

Analysemetoder er genstand for løbende udvikling og forbedringer Registranten er derfor ansvarlig for at indgive tilstrækkelige analytiske data.

4.2.2. Stoffer med flere bestanddele

Et stof med flere bestanddele er et stof, der defineres ud fra dets kvantitative sammensætning, hvori mere end én hovedbestanddel er til stede i en koncentration på ≥ 10 vægtprocent og < 80 vægtprocent. Et stof med flere bestanddele er resultatet af en fremstillingsproces¹².

I henhold til REACH skal et stof registreres som fremstillet. Hvis et stof med flere bestanddele er fremstillet, skal stoffet med flere bestanddele registreres^{13 14}. Det afgøres i hvert tilfælde, i hvilket omfang de forskellige trin i fremstillingen af stoffet er omfattet af definitionen "fremstilling". Det er ikke nødvendigt at teste stoffet som sådant, hvis stoffets fareprofil kan beskrives tilstrækkeligt af informationen om de individuelle bestanddele.

Navngivningskonvention

Et stof, der består af flere forskellige bestanddele, betegnes en reaktionsmasse af stoffets hovedbestanddele, dvs. ikke de udgangsmaterialer, der bruges til at fremstille stoffet. Det generiske format er: "Reaction mass of [navne på hovedbestanddelene]". Det anbefales at angive navnene på bestanddelene i alfabetisk orden, adskilt af bindeordet "and". Kun hovedbestanddele, der typisk udgør ≥ 10 %, bidrager til navnet. Navnet skal anføres på engelsk i overensstemmelse med IUPAC-nomenklaturen. Andre internationalt anerkendte betegnelser kan gives som ekstra information.

Identifikatorer

Et stof med flere bestanddele identificeres ved det kemiske navn og alle andre tilgængelige identifikatorer for stoffet som sådan, og ved bestanddelenes kemiske identitet (herunder molekyl- og strukturformel eller krystalstruktur(er)). Alle urenheder og/eller tilsætningsstoffer i stoffet med flere bestanddele skal identificeres. De(n) typiske koncentration(er) og koncentrationsinterval(ler) for bestanddelene, urenhederne og/eller tilsætningsstofferne skal oplyses. Alle disse oplysninger skal være underbygget af analyseoplysninger.

Eksempel				
Hovedbestanddele	Indhold (%)	Urenhed	Indhold (%)	Stofidentitet
m-xylen o-xylen	50 45	p-xylen	5	Reaktionsmasse af m-xylen og o-xylen

For stoffer med flere bestanddele er den kemiske sammensætning kendt, og mere end én hovedbestanddel er relevant for identifikationen af stoffet. Stoffets kemiske sammensætning kan desuden forudsiges ved hjælp af typiske værdier og intervaller. Hovedbestanddelene skal angives udførligt ved hjælp af alle relevante parametre. Summen af de typiske koncentrationer af hovedbestanddele (≥ 10 %) og urenheder (< 10 %) skal være 100 %.

For at sikre korrekt identifikation af stoffer med flere bestanddele skal bevidst tilsatte stoffer (f.eks. pH-regulatorer eller farvestoffer) ikke medtages i massebalancen.

¹² Forskellen mellem en blanding og et stof med flere bestanddele er, at en blanding opnås ved at blande to eller flere stoffer uden en kemisk reaktion. Et stof med flere bestanddele opnås ved en kemisk reaktion.

¹³ Et antal stoffer er fritaget fra registrering i henhold til REACH (f.eks. stofferne i bilag IV).

¹⁴ Denne fremgangsmåde finder ikke anvendelse på en række specifikke stoffer som f.eks. mineraler (se kapitel 7.5 for flere oplysninger).

Urenheder, der er til stede i en koncentration $\geq 1\%$, skal specificeres ved navn og alle tilgængelige identifikatorer. Urenheder, der er relevante for klassificering og/eller for PBT-vurdering, skal altid specificeres ved de samme identifikatorer, uanset koncentrationen.

Eksempel								
Hovedbestanddel	Maks. indhold (%)	Typisk indhold (%)	Min. indhold (%)	Urenhed	Maks. indhold (%)	Typisk indhold (%)	Min. indhold (%)	Stofidentitet
anilin	90	75	65	phenantren	5	4	1	Reaktionsmasse af anilin og naftalin
naftalin	35	20	10					

Ifølge reglerne i denne vejledning er dette et stof med flere bestanddele. Den ene bestanddels interval er $> 80\%$, men dette sker kun lejlighedsvis. Den typiske sammensætning er $< 80\%$.

Når en hovedbestanddel af et stof med flere bestanddele er ≥ 80 eller < 10 vægtprocent, skal der gives en begrundelse for denne afvigelse. Et muligt eksempel på en berettiget afvigelse er:

- Bestanddelen er kun lejlighedsvis $\geq 80\%$ eller $\leq 10\%$.

Et stof indeholder f.eks. to bestanddele, én, som udgør 85% , og en anden, som udgør 10% , mens resten udgøres af urenheder. Begge bestanddele bidrager til og er afgørende for stoffets ønskede tekniske effekt. Selv om den ene bestanddel udgør $> 80\%$, kan stoffet i dette tilfælde beskrives som et stof med to bestanddele.

Analyseoplysninger

Der skal fremlægges tilstrækkelige kvalitative data til at bekræfte identiteten af bestanddelene og urenhederne i et stof med flere bestanddele. Flere spektroskopiske metoder kan være egnede til at bekræfte stoffets identitet, ultraviolet og synlig absorptionsspektroskopi (UV/Vis), infrarød spektroskopi (IR), nuklear magnetisk resonansspektroskopi (NMR) og massespektroskopi (MS). For uorganiske stoffer eller organiske og/eller metalorganiske stoffer, der kan påvises/måles ved hjælp af krystalstruktur, er brugen af røntgendiffraction (XRD) i de fleste tilfælde at foretrække.

Kvantitative metoder, såsom kromatografiske teknikker som gaskromatografi (GC) eller højtryksvæskekromatografi (HPLC), kombineret med en detekteringsteknik, skal anvendes for at bekræfte stoffets sammensætning. For uorganiske stoffer kan røntgendiffraction (XRD), røntgenfluorescens (XRF), atomabsorptionsspektroskopi (AAS), induktivt koblet plasmaoptisk emissionsspektroskopi (ICP-OES) eller induktivt koblet plasmamassespektrometri (ICP-MS) være de mest egnede. Andre gyldige teknikker til separation af bestanddele skal evt. også anvendes.

Beskrivelsen af analysemetoderne skal omfatte de forsøgsprotokoller, der er fulgt, og fortolkningen af de angivne resultater.

Analysemetoder er genstand for løbende udvikling og forbedringer Registranten er derfor ansvarlig for at indgive korrekte spektraldata.

Registrering af individuelle bestanddele i et stof med flere bestanddele

Generelt bør angivelsen af stofidentiteten i forbindelse med registrering følge fremgangsmåden for stoffer med flere bestanddele (dvs. registrering af et stof med flere bestanddele). Som en undtagelse fra denne fremgangsmåde kan individuelle bestanddele registreres, hvis det kan begrundes. Der kan afviges fra den almindelige fremgangsmåde, så stoffer identificeres (og evt. registreres) ved deres individuelle bestanddele, når:

- informationskravene ikke er begrænsede
- der foreligger tilstrækkelige data til at begrunde registreringen af de individuelle bestanddele, dvs. at fremgangsmåden ikke normalt må kræve yderligere forsøg (på hvirveldyr) sammenlignet med den almindelige fremgangsmåde
- registrering af de individuelle bestanddele fører til en mere effektiv situation (dvs. der undgås flere registreringer af stoffer, som består af de samme bestanddele)
- der gives information om sammensætningen af de individuelle reaktionsmasser.

Denne fleksibilitet må ikke misbruges til at undvige datakravene. Ved f.eks. 1 200 tons pr. år af et stof med flere bestanddele "(C + D)" sammensat af 50 % C og 50 % D, ville denne fremgangsmåde føre til to registreringer med følgende information:

Stof C

- Mængde 600
- Datakrav opfyldes for > 1 000 tons (bilag X)

Stof D

- Mængde 600
- Datakrav opfyldes for > 1 000 tons (bilag X)

Denne fremgangsmåde skal kombineres med REACH-kravet om at opsummere mængder af det samme stof for hver juridisk enhed. Det foreslås, at datakravene fastlægges på følgende måde:

- opsummer alle mængder af de individuelle bestanddele (i henhold til mængderne i stoffet)
- henvis til den største mængde af et stof, som indeholder den pågældende bestanddel.

Informationskravene skal fastlægges ud fra det højeste resultat. Ved rapportering af mængder skal resultatet af opsummeringen af mængden for hver individuel bestanddel benyttes. Forenklede eksempler gives i det følgende for at illustrere denne fremgangsmåde i praksis:

Eksempel 1

Stof med flere bestanddele "C+D+E" er et resultat af en proces i en juridisk enhed, som resulterer i forskellige stoffer:

- Stof 1: 50 % C, 25 % D og 25 % E, 1 100 tons pr. år
- Stof 2: 50 % C og 50 % D, 500 tons pr. år

Også i dette tilfælde er reaktionsproduktet udgangspunktet: To stoffer skal registreres som stoffer med flere bestanddele. Hvis fremgangsmåden med registrering af individuelle bestanddele benyttes¹⁵, gælder følgende:

Rapportering af stof D har i dette tilfælde følgende resultat:

- Mængde: $(25 \% * 1\ 100) + (50 \% * 500) = 525$ tons pr. år

¹⁵ Eksemplet skal blot illustrere fastlæggelsen af informationskravene og rapporteringen af mængder. Det ser ikke på, om fremgangsmåden er begrundet.

Informationskravene fastlægges ud fra det strengeste krav. I dette tilfælde: > 1 000 tons pr. år, da den samlede mængde af stoffet med flere bestanddele "C+D+E" overstiger 1 000 tons pr. år.

Bemærk: I dette eksempel registreres C og E tilsvarende.

Eksempel 2

Stof med flere bestanddele "G+H+I" er et resultat af en proces i en juridisk enhed, som resulterer i forskellige stoffer:

- Stof 3: 65 % G, 15 % H og 20 % I, 90 tons pr. år
- Stof 4: 60 % G og 40 % H, 90 tons pr. år

Rapportering af stof G:

- Mængde: $(65 \% * 90) + (60 \% * 90) = 112,5$ tons pr. år

Informationskravene fastlægges ud fra det strengeste krav. I dette tilfælde: > 100 tons pr. år, da den samlede mængde af bestanddelen G overstiger 100 tons pr. år.

Bemærk: I dette eksempel registreres H og I tilsvarende.

Ud over fastlæggelsen af det nævnte informationskrav skal der tages hensyn til antallet af nye forsøg (på hvirveldyr), der skal gennemføres. Inden der fastlægges en strategi, skal potentielle registranter overveje, om der foreligger tilstrækkelige forsøg (på hvirveldyr), og om den foreslåede fleksibilitet vil føre til færre eller flere nye forsøg (på hvirveldyr). Den strategi, der undgår nye forsøg (på hvirveldyr), skal vælges.

I tvivlstilfælde er den almindelige fremgangsmåde for angivelsen af stofidentiteten i forbindelse med registrering altid identifikation af stoffet, som det er fremstillet.

4.2.3. Stoffer af defineret kemisk sammensætning og andre hovedidentifikatorer

Nogle stoffer (f.eks. uorganiske mineraler), som kan identificeres ud fra deres kemiske sammensætning, skal yderligere specificeres ved hjælp af flere identifikatorer, for at de kan få deres egen stofidentifikation. Et sådant stof kan være et stof med én bestanddel eller et stof med flere bestanddele, men kræver – ud over de beskrevne parametre for stofidentifikation i de foregående kapitler – andre hovedidentifikatorer for at blive angivet utvetydigt.

Eksempler

Ved nogle ikke-metalliske mineraler (naturlige eller menneskeskabte) med unikke strukturer skal også morfologi og mineralsammensætning angives, for at stoffet kan identificeres entydigt. Et eksempel er kaolin (CAS 1332-58-7), der er sammensat af kaolinit, kaliumaluminiumsilikat, feldspat og kvarts.

Vejledning i overholdelse af de specifikke REACH-forpligtelser for stoffer i "naniform" findes i *tillægget om nanoformer, der finder anvendelse på vejledningen om registrering og identifikation af stoffer*¹⁶. Det behandler nanospecifikke problemstillinger i forbindelse med identificering og karakterisering af nanoformer.

Navngivningskonvention

I princippet skal samme navngivningskonvention som ved stoffer med én bestanddel (se kapitel 4.2.1) eller flere bestanddele (se kapitel 4.2.2) benyttes.

For uorganiske mineraler kan de mineralogiske navne benyttes for bestanddelene. Apatit er f.eks. et stof med flere bestanddele, der består af en gruppe af mineralske fosfater, normalt betegnet som hydroxylapatit, fluorapatit og chlorapatit, der er navngivet for høje koncentrationer af henholdsvis ionerne OH⁻, F⁻ eller Cl⁻ i krystallen. Formlen for blandingen af de tre mest almindelige arter er Ca₅(PO₄)₃(OH, F, Cl). Et andet eksempel er aragonit, en af krystalstrukturene i calciumcarbonat.

Identifikatorer

Disse stoffer identificeres og navngives i henhold til reglerne for stoffer med én bestanddel (se kapitel 4.2.1) eller flere bestanddele (se kapitel 4.2.2). De andre specifikke primære parametre for identifikation, som skal tilføjes, afhænger af stoffet. Eksempler på andre primære identifikatorer er grundstofsammensætning med spektraldata, krystalstruktur som påvist ved røntgendiffraktion, IR-absorptionspeaks, swellingtal, kationsadsorptionskapacitet eller andre fysiske og kemiske egenskaber.

For mineraler er det vigtigt at kombinere resultaterne af grundstofsammensætningen med spektraldata for at identificere den mineralogiske sammensætning og krystalstrukturen. Dette bekræftes derefter af karakteristiske fysisk-kemiske egenskaber, som f.eks. krystalstruktur (som påvist ved røntgendiffraktion), form, hårdhed, swellingtal, massefylde og/eller overfladeareal.

Eksempler på specifikke yderligere hovedidentifikatorer kan gives for specifikke mineraler, idet mineraler har karakteristiske fysisk-kemiske egenskaber, der bidrager til deres identifikation, f.eks.: meget lav hårdhed for talkum, swellingtal for bentonit, former af diatomit, meget høj massefylde af barit og overfladeareal (nitrogenadsorption).

Analyseoplysninger

Hovedkriteriet er, at alle nødvendige oplysninger skal fremlægges for at bekræfte stoffets struktur. Der skal gives de samme analyseoplysninger som for stoffer med én bestanddel (se kapitel 4.2.1) eller flere bestanddele (se kapitel 4.2.2).

¹⁶ Tillæg om nanoformer til vejledningen om registrering og identifikation af stoffer, tilgængelig på <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

4.3. UVCB-stoffer

Stoffer med ukendt eller variabel sammensætning, komplekse reaktionsprodukter eller biologiske materialer^{17, 18, 19}, også kaldet "UVCB-stoffer", kan ikke identificeres tilstrækkeligt ved deres kemiske sammensætning, fordi:

- antallet af indholdsstoffer er relativt stort og/eller
- sammensætningen er i væsentlig grad ukendt, og/eller
- sammensætningens variabilitet er relativt stor eller svær at forudsige.

For at identificere UVCB-stoffer er det derfor nødvendigt med andre typer oplysninger ud over de allerede foreliggende oplysninger om deres kemiske sammensætning.

Det fremgår af Tabel 5, at hovedidentifikatorer for de forskellige typer UVCB-stoffer er knyttet til stoffets kilde og den anvendte proces, eller at de tilhører en gruppe af "andre hovedidentifikatorer" (f.eks. "kromatografiske eller andre fingeraftryk"). Antallet og typen af identifikatorer i Tabel 5 illustrerer typernes variabilitet og udgør ikke en fuldstændig oversigt. Hvis den kemiske sammensætning af f.eks. et komplekst reaktionsprodukt eller et stof af biologisk oprindelse er kendt, skal identifikationen af stoffet identificeres som et stof med én bestanddel eller flere bestanddele. Konsekvensen af at definere et stof som UVCB er, at enhver signifikant ændring i kilden eller processen sandsynligvis vil føre til et andet stof, som skal registreres igen. Hvis en reaktionsblanding identificeres som et "stof med flere bestanddele", kan stoffet være udledt af en anden kilde og/eller andre processer, når blot sammensætningen af det endelige stof forbliver inden for det angivne interval. Der kræves derfor ikke en ny registrering.

Generel vejledning om UVCB-stoffer findes i kapitel 4.3.1, og specifik vejledning om stoffer med varierende carbonkædelængde, stoffer udvundet af olie eller olielignende kilder og enzymer som specifikke typer af UVCB-stoffer findes i kapitel 4.3.2.

4.3.1. Generel vejledning om UVCB-stoffer

Dette kapitel indeholder generel vejledning om, hvordan visse hovedidentifikatorer – ud over parametrene for identifikation af stoffer i REACH, bilag VI, punkt 2 – bruges til at identificere UVCB-stoffer.

Information om kemisk sammensætning

UVCB-stoffer kan enten ikke specificeres entydigt med bestanddelens IUPAC-navn, eftersom ikke alle bestanddele kan identificeres, eller de kan specificeres generisk, men med manglende specificitet på grund af variabilitet i den præcise sammensætning. Som følge af den manglende opdeling mellem bestanddele og urenheder er udtrykkene "hovedbestanddele" og "urenheder" ikke relevante for UVCB-stoffer.

Bestanddelens kemiske sammensætning og identitet skal imidlertid stadig angives, for så vidt de kendes. Beskrivelsen af sammensætningen kan ofte gives på en mere generisk måde, f.eks. "lineære fedtsyrer C8-C16" eller "alkoholethoxylat med alkoholer C10-C14 og 4-10 ethoxylatenheder". Endvidere kan oplysninger om kemisk sammensætning gives på grundlag

¹⁷ Rasmussen K, Pettau D, Vollmer G et al. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. Tox Env Chem Vol. 69, s. 403-416.

¹⁸ US EPA (2005-B) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Combinations of two or more substances: complex reaction products.

¹⁹ US EPA (2005-D) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Chemical Substances of Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Materials: UVCB Substances.

af velkendte referenceprøver eller standarder, og i mange tilfælde kan indekser og eksisterende koder også bruges. Andre generiske oplysninger om sammensætningen kan bestå af "fingeraftryk", som f.eks. kromatografiske eller spektrale billeder, der viser et karakteristisk fordelingsmønster for maksimumsværdier.

For et UVCB-stof skal alle bestanddele, der er til stede i koncentrationer på $\geq 10\%$, og alle andre kendte bestanddele, der er til stede i koncentrationer på $< 10\%$, specificeres med det engelske IUPAC-navn og de typiske koncentrationer og koncentrationsintervaller.

Derudover skal du for hver bestanddel angive en numerisk identifikator (CAS-nummer og/eller EF- eller listenummer), hvis de foreligger.

Bestanddele, der ikke kan identificeres individuelt, skal beskrives i grupper baseret på kemisk beskaffenhed. I så fald skal du for hver gruppe som minimum angive et kemisk navn, typisk koncentration og koncentrationsinterval. Hvis det er muligt, skal du desuden angive molekyl- og strukturoplysninger.

Bestanddele, der er relevante for klassificering og/eller for PBT-vurdering²⁰ af stoffet, skal altid specificeres ved de samme identifikatorer, uanset koncentrationen.

Ukendte bestanddele, der ikke bidrager til klassificeringen, skal så vidt muligt identificeres ved en generisk beskrivelse af deres kemiske beskaffenhed. Tilsætningsstoffer skal specificeres udførligt på samme måde som ved veldefinerede stoffer.

Primære identifikationsparametre – navn, kilde og proces

Da den kemiske sammensætning alene ikke er nok til identifikation af et stof, skal stoffet generelt identificeres ved dets navn, dets oprindelse eller kilde og en beskrivelse af fremstillingsprocessen. Andre stofegenskaber kan også være vigtige identifikatorer, enten som relevante generiske identifikatorer (f.eks. kogepunkt) eller som afgørende identifikatorer for specifikke stofgrupper (f.eks. katalytisk aktivitet for enzymer).

1. Navngivningskonvention

Navnet på et UVCB-stof er sædvanligvis en kombination af kilde og proces i det generelle format: først kilden og derefter processen/processerne.

- Et stof, der er udledt af biologiske kilder, identificeres ved artens navn.
- Et stof, der er udledt af ikke-biologiske kilder, identificeres ved udgangsmaterialerne.
- Processer identificeres ved typen af kemisk reaktion i tilfælde af syntese af nye molekyler eller ved raffineringstrinnets type, f.eks. ekstraktion, fraktionering eller koncentration, eller som rest.

Eksempler	
EF-nummer	EF-navn
296-358-2	Lavendel, Lavandula hybrida, ekstrakt, acetyleret
307-507-9	Lavendel, Lavandula latifolia, ekstrakt, svovlbehandlet, palladiumsalt

I tilfælde af reaktionsprodukter er der anvendt forskellige formater i EF-fortegnelsen, f.eks.

²⁰ Flere oplysninger om PBT-vurdering og relevante kriterier findes i Vejledning om informationskrav og kemikaliesikkerhedsvurdering, kapitel R11: PBT-vurdering.

- EINECS: Primært udgangsmateriale, reaktionsprodukt(er) af andre udgangsmateriale(r)
- ELINCS: Reaktionsprodukt(er) af udgangsmateriale(r)

Eksempler	
EF-nummer	EF-navn
232-341-8	Salpetersyring, reaktionsprodukter med 4-methyl-1,3-benzenediamin hydrochlorid
263-151-3	Fedtsyrer, kokos, reaktionsprodukter med diethylentriamin
400-160-5	Reaktionsprodukter af talloliefedtsyrer, diethanolamin og borsyre
428-190-4	Reaktionsprodukt af: 2,4-diamino-6-[2-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)ethyl]-1,3,5-triazine og cyanuric acid

I denne vejledning benyttes det generiske format for navnet på reaktionsproduktet/-erne "Reaktionsprodukt af [navne på udgangsmaterialer]". I princippet skal navnene angives på engelsk i overensstemmelse med IUPAC's nomenklaturregler. Andre internationalt anerkendte betegnelser kan gives som ekstra information. Ordet "reaktion" i navnet bør erstattes med den specifikke reaktionstype beskrevet på en generisk måde, f.eks. esterificering eller saltdannelse osv. (se vejledningen under de fire specifikke UVCB-underekategorier nedenfor).

2. Kilde

Kilden kan inddeles i to grupper:

2.1. Kilder af biologisk art

Stoffer af biologisk oprindelse skal defineres ved slægt, art og familie, f.eks. *Pinus cembra*, hvor *Pinaceae* betyder *Pinus* (slægt), *cembra* (art), *Pinaceae* (familie), samt stamme eller genetisk type, hvis det er relevant. Hvis det er relevant, angives også det væv eller den del af organismen, der er anvendt til ekstraktion af stoffet, f.eks. knoglemarv eller pancreas eller stængler, frø eller rødder.

Eksempler	
EF-nummer	EF-navn
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ext. EF-beskrivelse Ekstrakter og deres fysisk modificerede derivater, som f.eks. tinkturer, faste bestanddele, absolutter, æteriske olier, olieharpikser, terpener, terpenfrie fraktioner, destillater, restprodukter osv., udvundet af <i>Saccharomyces cerevisiae</i> , Saccharomycelaceae.

296-350-9	Arnica mexicana, ekstrakt EF-beskrivelse Ekstrakter og deres fysisk modificerede derivater, som f.eks. tinkturer, faste bestanddele, absolutter, æteriske olier, olieharpikser, terpener, terpenfri fraktioner, destillater, restprodukter osv., udvundet af Arnica mexicana, Compositae.
-----------	--

2.2. Kemiske eller mineralske kilder

For reaktionsprodukter af kemiske reaktioner skal udgangsmaterialerne beskrives ved deres IUPAC-navn på engelsk. Mineralske kilder skal beskrives generisk, f.eks. fosfatmalm, bauxit, kaolin, mineralsk gas, kul eller tørv.

3. Proces

Processer identificeres ved typen af kemisk reaktion, hvis der er tale om syntese af nye molekyler, eller ved raffineringstrinnets type, f.eks. ekstraktion, fraktionering eller koncentration, eller som raffineringsrest.

For visse stoffer, f.eks. kemiske derivater, skal processen beskrives som en kombination af raffinering og syntese.

3.1 Syntese

Der sker en bestemt kemisk eller biokemisk reaktion mellem udgangsmaterialerne, hvorved stoffet dannes. Her kan f.eks. nævnes Grignard-reaktion, sulfonering, enzymatisk spaltning bevirket af protease eller lipase osv. Mange reaktioner, hvor der dannes derivater, tilhører også denne type.

For nysyntetiserede stoffer, for hvilken den kemiske sammensætning ikke kan gives, er udgangsmaterialer den primære identifikator sammen med en specifikation af reaktionen, dvs. typen af kemisk reaktion. Typen af kemisk reaktion er indikativ for de molekyler, der forventes at være til stede i stoffet. Der er flere typer endelig kemisk reaktion: hydrolyse, esterificering, alkylering, klorering osv. Da dette kun giver generiske oplysninger om de stoffer, der muligvis dannes, er et kromatografisk fingeraftryk i mange tilfælde også nødvendigt for at kunne karakterisere og identificere et stof fuldstændigt.

Eksempler	
EC-numre	EF-navn
294-801-4	Linseed oil, epoxidised, reaction products with tetraethylenepentamine
401-530-9	Reaktionsprodukt af (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzophenone og triethoxysilane) med (hydrolyseprodukt af silica og methyltrimethoxysilane)

3.2 Raffinering

Raffinering kan anvendes på mange måder i forbindelse med stoffer af naturlig eller mineralsk oprindelse, hvor bestanddelenes kemiske identitet ikke ændres, men hvor koncentrationen af bestanddele ændres, f.eks. koldbehandling af plantevæv efterfulgt af ekstraktion ved hjælp af alkohol.

Raffinering kan yderligere defineres i processer, som f.eks. ekstraktion. Identifikation af

stoffet afhænger af procestypen:

- for stoffer, der udledes ved hjælp af fysiske metoder, f.eks. raffinering eller fraktionering, angives afskæringsværdierne og fraktionsparameteren (f.eks. molekylstørrelse, kædelængde, kogepunkt, volatilitet osv.)
- for stoffer, der udledes ved hjælp af koncentrering, f.eks. produkter fra metallurgiske processer, centrifugerede udfældninger, filterrester osv., angives koncentrationstrinnet sammen med den generiske sammensætning af det dannede stof sammenlignet med udgangsmaterialet

Eksempler

EF-nummer	EF-navn
408-250-6	Organotungsten Compound Concentrate (reaktionsprodukter af tungsten hexachloride med 2-methylpropan-2-ol, nonylphenol og pentane-2,4-dione)

- for reststoffer af en specifik reaktion, f.eks. slagger, tjære og svære komponenter, beskrives processen sammen med den generiske sammensætning af det resulterende stof

Eksempler

EF-nummer	EF-navn
283-659-9	Tin, melting residues EF-beskrivelse Stof, der er et resultat af brugen og produktionen af tin og legeringer heraf udvundet af primære og sekundære kilder, inklusive genanvendte plantemellemprodukter. Består primært af tinforbindelser og kan indeholder andre rester af non-ferrometaller og deres forbindelser.
293-693-6	Soybean meal, protein extn. Residue EF-beskrivelse Biprodukt, der hovedsageligt indeholder kulhydrater, fremstillet ved alkoholisk ekstraktion af affedtede sojabønner.

- For ekstrakter angives ekstraktionsmetoden, det opløsningsmiddel, der er anvendt til ekstraktionen, og andre relevante betingelser, f.eks. temperatur/temperaturområde).
- Ved kombineret forarbejdning angives hvert procestrin (på en generisk måde) i tillæg til kildeinformationen. Denne kombinerede forarbejdning er især relevant i forbindelse med kemiske derivationer.

Eksempler:

- Først ekstraheres en plante, ekstraktet destilleres, og den destillerede fraktion af planteekstraktet bruges til kemisk derivation. Det resulterende stof kan renses yderligere. Det rensede produkt er muligvis til sidst veldefineret ved sin kemiske sammensætning, og det er ikke nødvendigt at identificere stoffet som et UVCB. Hvis produktet stadig skal betragtes som et UVCB, kan den kombinerede

forarbejdning beskrives som et "renset kemisk derivat af en destilleret fraktion af et planteekstrakt".

- Hvis den videre forarbejdning af et ekstrakt kun omfatter fysisk derivation, ændres sammensætningen, men uden tilsigtet syntese af nye molekyler. Ændringen af sammensætningen resulterer dog i et andet stof, f.eks. et destillat eller en udfældning af et planteekstrakt.
- Ved fremstilling af olieprodukter bruges ofte en kombination af kemisk derivation og fraktionering. Oliedestillation efterfulgt af krakning genererer f.eks. en fraktion af udgangsmaterialet og også nye molekyler. I det tilfælde skal begge typer processer identificeres, eller destillatet skal angives som udgangsmateriale for krakningen. Dette gælder navnlig for råoliederivater, der ofte er resultatet af en kombination af processer. Der kan dog anvendes et separat specifikt system til identifikation af råoliestoffer (se kapitel 4.3.2.2).

Da et kemisk derivat af et ekstrakt ikke indeholder de samme bestanddele som udgangsekstraktet, betragtes det som et forskelligt stof. Denne regel kan betyde, at identifikationen ved navn og beskrivelse afviger fra det tidligere navn og den tidligere beskrivelse i EINECS. Ved etableringen af EINECS-fortegnelsen var ekstrakter fra forskellige processer, forskellige opløsningsmidler og endda fysiske eller kemiske derivater ofte dækket under én indgang. I henhold til REACH skal disse stoffer dog registreres som separate stoffer.

4. Andre parametre for identifikation af stoffer

Ud over det kemiske navn, kilden og specifikationen af processen skal et UVCB-stof omfatte alle andre relevant oplysninger, der kræves i henhold til REACH-forordningens bilag VI, punkt 2.

Navnlig for specifikke typer af UVCB-stoffer kan andre identifikationsparametre være relevante. Andre identifikatorer kan yderligere være:

- generisk beskrivelse af kemisk sammensætning
- kromatografiske eller andre fingeraftryk
- referencemateriale (f.eks. ISO)
- fysisk-kemiske parametre (f.eks. kogepunkt)
- Colour Index-nummer
- AISE-nummer.

Specifik vejledning om regler, om kriterier og om, hvordan navn, kilde og procesinformation bruges til identifikation af UVCB-stoffer, ses nedenfor for forskellige typer kilder og processer. I de følgende afsnit beskrives fire undertyper af UVCB-stoffer som en kombination af biologiske eller kemiske/mineralske kilder og processer (syntese eller raffinering).

UVCB-undertype 1, hvor kilden er biologisk, og processen er en syntese

Stoffer af biologisk beskaffenhed kan modificeres gennem bio(kemisk) forarbejdning for at generere bestanddele, der ikke forekom i udgangsmaterialet, f.eks. kemiske derivater af planteekstrakter eller produkter af enzymatisk behandling af ekstrakterne. Proteiner kan f.eks. hydrolyseres ved hjælp af protease for at generere oligopeptider, eller cellulose fra træ kan carboxyleres til at danne carboxymethylcellulose (CMC).

Produkter af fermentering kan også tilhøre denne UVCB-undertype. Vinasse er f.eks. et produkt af sukkerfermentering, der sammenlignet med sukker indeholder mange forskellige bestanddele. Når fermenteringsprodukter renses yderligere, er det muligt, at stofferne til sidst kan identificeres ved deres kemiske sammensætning, så de ikke længere skal identificeres som et UVCB-stof.

Enzymer er en særlig gruppe af stoffer, der kan udvindes ved ekstraktion og yderligere raffinering fra en kilde af biologisk oprindelse. Selv om kilden og processen skal specificeres i detaljer, genererer dette ikke specifik information om enzymet. For sådanne stoffer anvendes et specifikt system til klassificering, navngivning og identifikation (se kapitel 4.3.2.3).

Ved identifikation af et stof anføres det endelige procestrin og/eller et andet procestrin, der er relevant for stoffets identitet.

En beskrivelse af den kemiske proces skal være en generisk beskrivelse af procestypen (esterificering, alkalisk hydrolyse, alkylering, klorering, substitution osv.) sammen med de relevante procesomstændigheder.

En beskrivelse af den biokemiske proces kan være en generisk beskrivelse af den katalyserede reaktion sammen med navnet på det enzym, der har katalyseret reaktionen.

For stoffer, der produceres ved fermentering eller (vævs)kulturer af art, angives fermenteringsart, type og generelle betingelser for fermentering (batch eller løbende, aerob, anaerob, anoxisk, temperatur, pH osv.) sammen med yderligere procestrin, der anvendes til at isolere fermenteringsprodukterne, f.eks. centrifugering, fældning, ekstraktion osv. Hvis disse stoffer raffineres yderligere, kan dette resultere i en fraktion, et koncentrat eller en rest. Disse yderligere forarbejdede stoffer identificeres ved også at specificere de næste procestrin.

UVCB-undertype 2, hvor kilden er kemisk eller mineralsk, og processen er en syntese

UVCB-stoffer, der er udvundet af kemiske eller mineralske kilder og udledt via en proces, hvor nye molekyler syntetiseres, er "reaktionsprodukter". Eksempler på kemiske reaktionsprodukter er esterificerings-, alkylerings- og kloreringsprodukter. Biokemiske reaktioner, hvor der anvendes isolerede enzymer, er særlige typer kemiske reaktioner. Hvis en kompleks biokemisk syntesevej anvendes ved hjælp af komplette mikroorganismer, bør det resulterende stof i stedet betragtes som et fermenteringsprodukt og identificeres ved fermenteringsprocessen og fermenteringsarten og ikke ved udgangsmaterialerne (se UVCB-undertype 4).

Ikke alle reaktionsprodukter skal automatisk specificeres som et UVCB-stof. Hvis et reaktionsprodukt kan defineres tilstrækkeligt ved den kemiske sammensætning (herunder en vis variabilitet), er det at foretrække, at det identificeres som et stof med flere bestanddele (se kapitel 4.2.2). Stoffet skal kun identificeres som et UVCB-stof ("reaktionsprodukt"), når reaktionsproduktets sammensætning ikke er tilstrækkeligt kendt eller er svær at forudsige. Identifikationen af et reaktionsprodukt er baseret på udgangsmaterialerne for reaktionen og den (bio)kemiske reaktionsproces, hvori stoffet genereres.

Eksempler		
EF-nummer	EINECS-navn	CAS-nummer
294-006-2	Nonanedioic acid, reaktionsprodukter med 2-amino-2-methyl-1-propanol	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyde, reaktionsprodukter med diethylene glycol og phenol	91673-32-4

En primær identifikator for reaktionsprodukter er beskrivelsen af fremstillingsprocessen. Ved identifikation af et stof anføres det endelige eller mest relevante procestrin. Beskrivelsen af den kemiske proces skal være en generisk beskrivelse af procestypen (f.eks. esterificering, alkalisk hydrolyse, alkylering, klorering, substitution osv.) sammen med de relevante procesomstændigheder. En biokemisk proces skal beskrives ved reaktionstypen sammen med navnet på det enzym, der katalyserer reaktionen.

UVCB-undertype 3, hvor kilden er biologisk, og processen er raffinering

UVCB-stoffer af biologisk oprindelse, der er resultatet af en raffineringsproces, hvori der ikke tilsigtet genereres nye molekyler, kan f.eks. være ekstrakter, fraktioner af et ekstrakt, koncentratet af et ekstrakt, rensede ekstrakt eller procesrester af stoffer af biologisk oprindelse.

Når et ekstrakt videreforarbejdes, er stoffet ikke længere identisk med ekstraktet, men er et andet stof, der tilhører en anden UVCB-undertype, f.eks. en fraktion eller rest af et ekstrakt. Disse stoffer specificeres med yderligere parametre for (videre)forarbejdning. Hvis ekstraktet modificeres i kemiske eller biokemiske reaktioner, som genererer nye molekyler (derivater), er identifikationen af stoffet omfattet af vejledningen for UVCB-undertype 2 eller kapitel 4.2 for et veldefineret stof.

Denne differentiering af videreforarbejdede ekstrakter kan bevirke, at det nye navn og den nye beskrivelse adskiller sig fra oplysningerne i EINECS-fortegnelsen. Da EINECS-fortegnelsen blev oprettet, blev der ikke foretaget en sådan differentiering, og alle typer ekstrakter med forskellige opløsningsmidler og videreforarbejdningstrin kan være dækket af én indgang.

Den første primære identifikator for denne UVCB-undertype er familien, slægten og arten for den organisme, som stoffet stammer fra. Hvis det er relevant, angives det væv eller den del af organismen, der er anvendt til ekstraktion af stoffet, f.eks. knoglemarv eller bugspytkirtel eller stængler, frø eller rødder. For stoffer af mikrobiologisk oprindelse defineres artens stamme og genetiske type.

Hvis UVCB-stoffet er udledt af en anden art, betragtes det som et andet stof, selv om den kemiske sammensætning er den samme.

Eksempler

EF-nummer	EINECS-navn
290-977-1	Oxidised logwood (Haematoxylon campechianum) extract EF-beskrivelse Dette stof er i farveindekset identificeret ved Colour Index Constitution No. C.I. 75290 oxidiseret.
282-014-9	Pancreatiske ekstrakter, deproteineret

Den anden primære identifikator er forarbejdningen af stoffet, f.eks. ekstraktionsprocessen, fraktionerings-, rensnings- eller koncentreringsprocessen eller den proces, der påvirker reststoffets sammensætning. Raffinering af ekstrakter, der sker ved forskellige processer, f.eks. brug af forskellige opløsningsmidler eller forskellige rensningstrin, resulterer derfor i forskellige stoffer.

Jo flere trin der anvendes ved raffinering, jo bedre bliver muligheden for at definere stoffet ved dets kemiske sammensætning. I dette tilfælde fører forskellige kildearter eller forskellige procesmodifikationer ikke automatisk til et forskelligt stof.

En primær identifikationsparameter for stoffer af biologisk oprindelse er beskrivelsen af de relevante processer. For ekstrakter beskrives ekstraktionsprocessen i den detaljeringsgrad, der er relevant for stoffets identitet. Det anvendte opløsningsmiddel skal som minimum anføres.

Hvis yderligere procestrin anvendes til fremstilling af stoffet, f.eks. fraktionering eller koncentrering, beskrives kombinationen af relevante procestrin, f.eks. kombinationen af ekstraktion og fraktionering, herunder afskæringsværdier.

UVCB-undertype 4, hvor kilden er kemisk eller mineralisk, og processen er raffinering

Stoffer af ikke-biologisk oprindelse, dvs. stoffer, som er eller stammer fra mineraler, malme, kul, naturgas og råolie, eller andre råmaterialer til den kemiske industri, og som er resultatet af forarbejdning uden tilsigtede kemiske reaktioner, kan være (rensede) fraktioner, koncentratrater eller rester af disse processer.

Kul og råolie bruges i destillations- eller forgasningsprocesser til at producere en lang række stoffer, f.eks. råoliestoffer og brændselsgasser osv., samt reststoffer, som f.eks. tjære og slagger. Meget ofte videreforarbejdes et destilleret eller på anden måde fraktioneret produkt straks, herunder kemiske reaktioner. I sådanne tilfælde følger stofidentifikationen vejledningen for UVCB-undertype 2, da processen er mere relevant end kilden.

For råoliestoffer bruges et særligt identifikationssystem (se kapitel 4.3.2.2). Stoffer, der er omfattet af dette system, omfatter fraktioner og produkter af kemiske reaktioner.

Andre stoffer i UVCB-undertype 4 kan bl.a. omfatte malme, malmkoncentratrater og slagger, der indeholder varierende mængder af metal, som kan ekstraheres ved metallurgisk forarbejdning.

Mineraler som bentonit eller calciumcarbonat kan forarbejdes ved hjælp af f.eks. opløsning i syre og/eller kemisk fældning eller i ionbyttersøjler. Når den kemiske sammensætning er fuldstændig defineret, identificeres mineraler i overensstemmelse med vejledningen i den relevante del af kapitel 4.2. Hvis mineraler kun forarbejdes mekanisk, f.eks. ved slibning, sigtning, centrifugering, flotation osv., betragtes de stadig som identiske med de udvundne mineraler. Mineraler, der produceres via en fremstillingsproces, kan – hvad angår identifikation²¹ – betragtes som identiske med deres naturligt forekommende modstykke, såfremt sammensætningen er tilsvarende, og toksicitetsprofilen er identisk.

En primær identifikationsparameter for stoffer af ikke-biologisk oprindelse er beskrivelsen af de(t) relevante procestrin.

For fraktioner beskrives fraktioneringsprocessen med parametrene og afskæringsværdierne for den isolerede fraktion, og der gives en beskrivelse af de tidligere procestrin, hvis det er relevant.

For koncentreringstrinnet anføres procestypen, f.eks. fordampning, fældning osv., og forholdet mellem hovedbestanddelens udgangskoncentration og slutkoncentration anføres sammen med oplysninger om de(t) tidligere procestrin.

²¹ Den samme fremgangsmåde til identifikation af naturligt forekommende mineraler og kemisk fremstillede mineraler betyder ikke nødvendigvis, at de lovmæssige krav (f.eks. fritagelse fra registrering) er de samme.

En primær identifikationsparameter for reststoffer af ikke-biologisk oprindelse er beskrivelsen af den proces, som reststoffet stammer fra. Processen kan være enhver fysisk reaktion, der genererer reststoffer, f.eks. en fraktionerings-, rensnings- eller koncentreringsproces.

Analyseoplysninger

UVCB-stoffer omfatter meget forskellige typer af stoffer, der adskiller sig på parametre som kilde og fremstillingsproces. Der bør derfor fremlægges egnede analysemetoder til at give oplysninger om sammensætningen af UVCB-stoffet, og som afhænger af de enkelte tilfælde. Desuden er indsigt i, hvordan man bruger sådanne metoder, genstand for løbende udvikling og forbedringer. Registranten er derfor ansvarlig for at fremlægge relevante analysedata for at tilvejebringe de bedst mulige oplysninger til at identificere stoffet.

Flere kvalitative metoder kan bruges til at karakterisere UVCB-stoffer; eksempler inkluderer UV/Vis, infrarød og massespektrometri, nuklearmagnetisk resonans og røntgendiffraction.

Kvantitative data, såsom kromatogrammer eller diffraktionsdata, der kan bruges som et fingeraftryk, skal fremlægges for at karakterisere stoffets sammensætning.

Beskrivelsen af analysemetoderne skal omfatte de forsøgsprotokoller, der er fulgt, og fortolkningen af de angivne resultater.

4.3.2. Specifikke UVCB-stoftyper

I dette afsnit gives der vejledning om specifikke grupper af UVCB-stoffer: stoffer med varierende carbonkædelængde (4.3.2.1), stoffer, der er udvundet af olie eller olielignende kilder (4.3.2.2), og enzymer (4.3.2.3).

4.3.2.1 Stoffer med carbonkæder i varierende længde

Denne gruppe af UVCB-stoffer omfatter langkædede alkylstoffer med carbonkæder af varierende længde, f.eks. paraffiner og olefiner. Disse stoffer er enten udledt af naturlige fedtstoffer og olier eller produceret syntetisk. De naturlige fedtstoffer stammer fra planter eller dyr. Stoffer med lange carbonkæder, der er udledt af planter, har normalt kæder med et lige nummer, mens stoffer med lange carbonkæder, der er udvundet af dyrekilder, også indeholder (nogle) kæder med ulige numre. Syntetisk fremstillede stoffer med lange carbonkæder kan omfatte hele intervallet af carbonkæder med både lige og ulige numre.

Identifikatorer og navngivningskonvention

Denne gruppe består af stoffer, hvis individuelle bestanddele har en fælles struktur: en eller flere langkædede alkylgrupper, som en funktionel gruppe ofte er tilknyttet. Bestanddelene adskiller sig fra hinanden med hensyn til et eller flere af følgende karakteristika for alkylkædegrupper:

- Carbonkædens længde (carbonnummer)
- Mætning
- struktur (ligekædet eller forgrenet)
- den funktionelle gruppes position.

Bestanddelenes kemiske identitet kan beskrives tilstrækkeligt og navngives systematisk ved hjælp af følgende tre deskriptorer:

- **alkyldeskriptoren**, som beskriver antallet af carbonatomer i længden af alkylgruppens eller -gruppernes carbonkæde(r)

- **funktionalitetsdeskriptoren**, som angiver stoffets funktionelle gruppe, f.eks. amin, ammonium eller carboxylsyre
- **saltdeskriptoren**, kation/anion af ethvert salt, f.eks. natrium (Na⁺), carbonat (CO₃²⁻) eller chlorid (Cl⁻).

Alkyldeskriptor

- Sædvanligvis beskriver alkyldeskriptoren C_{x-y} mættede, lineære alkylkæder med alle kædelængder fra x til y, f.eks. svarer C₈₋₁₂ til C₈, C₉, C₁₀, C₁₁ og C₁₂.
- Det skal angives, hvis alkyldeskriptoren kun refererer til alkylkæder med lige eller ulige numre, f.eks. C₈₋₁₂ (med lige numre)
- Det skal angives, hvis alkyldeskriptoren (også) refererer til forgrenede alkylkæder, f.eks. C₈₋₁₂ (forgrenede) eller C₈₋₁₂ (ligekædede og forgrenede)
- Det skal angives, hvis alkyldeskriptoren (også) refererer til umættede alkylkæder, f.eks. C₁₂₋₂₂ (C₁₈ umættet)
- Et smalt alkylkædeinterval omfatter ikke et bredere og omvendt. C₁₀₋₁₄ svarer f.eks. ikke til C₈₋₁₈.
- Alkyldeskriptoren kan også referere til alkylkædernes kilde, f.eks. kokos eller talg. Carbonkædeintervallet skal dog svare til kildens.

Ovennævnte system anvendes til at beskrive stoffer med carbonkæder i varierende længde. Det kan ikke bruges til veldefinerede stoffer, som kan identificeres ved en klar kemisk struktur.

Oplysningerne om alkyldeskriptor, funktionalitetsdeskriptor og saltdeskriptor danner grundlaget for navngivningen af denne type UVCB-stof. Oplysninger om kilden og processen kan desuden bruges til at identificere stoffet mere præcist.

Eksempler		
Deskriptorer		Kemisk betegnelse
Alkyldeskriptor Funktionalitetsdeskriptor Saltdeskriptor	alkylkædeintervaller C ₁₀₋₁₈ fedtsyrer (carboxylsyre) cadmiumsalte	fedtsyrer (C ₁₀₋₁₈) cadmiumsalte
Alkyldeskriptor Funktionalitetsdeskriptor Saltdeskriptor	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl-dimethyl ammonium chlorid	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl- dimethylammoniumchlorid
Alkyldeskriptor Funktionalitetsdeskriptor Saltdeskriptor	trimethyl talgalkyl ammonium chlorid	trimethyl-talgalkyl- ammoniumchlorid

4.3.2.2 Stoffer udvundet af olie eller olielignende kilder

Stoffer, der er udvundet af olie (råoliestoffer) eller olielignende kilder (f.eks. kul), er stoffer af en meget kompleks og variabel eller delvist udefineret sammensætning. I dette kapitel bruges råoliestoffer til at vise, hvordan denne specifikke UVCB-stoftype identificeres. Samme fremgangsmåde kan dog benyttes ved andre stoffer, der er udvundet af olie eller olielignende kilder, som f.eks. kul.

Som udgangsmaterialer bruger råolieraffineringsindustrien bl.a. råolie eller anden specifik raffinaderistrøm, der udvindes af en eller flere processer. De endelige produkters sammensætning afhænger af den råolie, der er anvendt til fremstillingsprocessen (da råoliens sammensætning varierer afhængigt af oprindelsesstedet), og de efterfølgende raffinaderiprocesser. Der er derfor en naturlig, procesafhængig variation i sammensætningen af råoliestoffer¹⁷.

1. Navngivningskonvention

Ved identifikation af råoliestoffer bør der gives et navn, som er i overensstemmelse med et anerkendt nomenklaturesystem²². Dette navn består normalt af raffinaderiprocessen samt strømmens kilde og generelle sammensætning og karakteristika. Hvis stoffet indeholder > 5 vægtprocent aromatiske carbonhydrider, bestående af 4- til 6-leddede kondenserede ringe, angives denne oplysning i beskrivelsen. For råoliestoffer med et EINECS-nummer bruges navnet i EF-fortegnelsen.

2. Identifikatorer

Udtryk og definitioner til identifikation af råoliestoffer omfatter generelt strømmens kilde, raffinaderiprocessen, generelle sammensætning, antal carbonatomer, kogepunktinterval eller andre relevante fysiske karakteristika samt den overvejende carbonhydridtype²².

Identifikationsparametrene i REACH, bilag VI, punkt 2, skal anføres. Det er anerkendt, at råoliestoffer fremstilles efter ydelsesspecifikationer snarere end sammensætningsmæssige specifikationer. Karakteristika, som f.eks. navn, carbonkædeinterval, kogepunkt, viskositet, afskæringsværdier og andre fysiske egenskaber, er generelt mere nyttige end sammensætningsmæssige oplysninger, når et råoliestof skal identificeres så præcist som muligt.

Selv om kemisk sammensætning ikke er den primære identifikator for UVCB-stoffer, skal alle bestanddele i en koncentration på $\geq 10\%$ og de kendte bestanddele i en koncentration på $< 10\%$ angives generisk, f.eks. molekylvægtsinterval, forhold mellem aromatisk og alifatisk, hydrogeneringsgrad og andre væsentlige oplysninger. Grupper af bestanddele, som ikke kan identificeres individuelt, bør også beskrives med de samme parametre. Andre bestanddele i lavere koncentration, som indvirker på fareklassificeringen, identificeres med navn og typisk koncentration.

4.3.2.3 Enzymer

Enzymer produceres oftest ved fermentering af mikroorganismer, men lejlighedsvis med oprindelse i planter eller dyr. Det flydende enzymkoncentrat, der er resultatet af fermenteringen eller ekstraktionen og efterfølgende rensningstrin, indeholder – ud over vand – det aktive enzymprotein og andre bestanddele bestående af reststoffer fra fermenteringen, dvs. proteiner, peptider, aminosyrer, kulhydrater, lipider og uorganiske salte.

Enzymproteinet og de øvrige bestanddele, der udledes af fermenterings- eller ekstraktionsprocessen, dog eksklusive evt. vand, som kan udskilles uden at påvirke enzymproteinets stabilitet eller ændre dets sammensætning, skal betragtes som stoffet, hvad angår identifikation.

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

Enzymstoffet indeholder typisk 10-80 vægtprocent af enzymproteinet. De øvrige bestanddele varierer i vægtprocent og afhænger af den anvendte produktionsorganisme, fermenteringsmediet og de operationelle parametre for fermenteringsprocessen samt den anvendte downstream-rensning, men sammensætningen er typisk inden for de intervaller, der er anført i tabellen nedenfor.

Aktivt enzymprotein	10–80 %
Andre proteiner + peptider og aminosyrer	5–55 %
Kulhydrater	3–40 %
Lipider	0–5 %
Uorganiske salte	1–45 %
I alt	100 %

Enzymstoffet skal betragtes som et "UVCB-stof" på grund af dets variabilitet og delvist ukendte sammensætning. Enzymproteinet skal betragtes som en bestanddel af UVCB-stoffet. Superrene enzymer kan identificeres som stoffer af veldefineret sammensætning (med én eller flere bestanddele) og skal identificeres tilsvarende.

I EINECS er den primære identifikator for enzymer den katalytiske aktivitet. Enzymer er opført som generiske indgange uden yderligere specifikation eller med specifikke indgange, som angiver kildeorganismen eller substratet.

Eksempler		
EF-nummer	EINECS-navn	CAS-nummer
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Proteinase, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Elastase (svinepancreas)	39445-21-1
262-402-4	Mannanase	60748-69-8

I henhold til en undersøgelse af enzymer iværksat af Europa-Kommissionen er det hensigtsmæssigt at identificere enzymer i overensstemmelse med det internationale system for enzymnomenklatur, IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology).²³ Denne fremgangsmåde er brugt i denne vejledning og sikrer en mere systematisk, detaljeret og omfattende identifikation af enzymer end 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.

1. Navngivningskonvention

Enzymer navngives i henhold til konventionerne i IUBMB-nomenklaturen.

IUBMB-klassificeringssystemet tildeler et unikt firecifret nummer til hver enzymtype og katalytisk funktion (f.eks. 3.2.1.1 for α -amylase)²⁴. Hvert nummer kan omfatte enzymer med variabel aminosyresekvens og oprindelse, men enzymfunktionen er identisk. Navnet og nummeret fra IUBMB-nomenklaturen skal bruges til identifikation af stoffer. IUBMB-nomenklaturen klassificerer enzymerne i seks hovedgrupper:

1. oxidoreduktaser
2. transferaser
3. hydrolaser
4. lyaser
5. isomeraser
6. ligaser.

I følgende eksempel vises en indgang i henhold til IUBMB-nomenklaturen:

EC 3.4.22.33

Godkendt navn: fruit bromelain

Reaktion: Hydrolyse af proteiner med bred specificitet for peptidbindinger. Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec er et godt syntetisk substrat, men der er ingen virkning på Z-Arg-Arg-NHMec (jf. stem bromelain)

Andre navne: juicebromelain; ananase; bromelase; bromelin; extranase; juice bromelain; pinase; ananasenzym; traumanase; frugtbromelain FA2

Bemærkninger: Fra ananasplanten, *Ananas comosus*. Hæmmes kun i ringe grad af kyllingecystatin En anden cysteinendopeptidase med tilsvarende virkning på små molekylsubstrater, pinguinain (tidligere EC 3.4.99.18), udvindes af den beslægtede plante *Bromelia pinguin*, men pinguinain adskiller sig fra frugtbromelain ved at blive hæmmet af kyllingecystatin[4].²⁵ I peptidase-familie C1²⁶ (papainfamilien). Tidligere EC 3.4.22.5 og opført i EC 3.4.22.4, CAS-nummer: 9001-00-7

Link til andre databaser:

[BRENDA](#)

(<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 Termerne "EF-nummer" (= Enzyme Commission number) og "IUBMB nummer" bruges ofte synonymt. For at undgå misforståelser anbefales det at anvende termen "IUBMB-nummer" for den firecifrede kode fra IUBMB.

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

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

Generelle referencer:

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

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

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

Eksempler på enzymklassificering i henhold til IUBMB-systemet

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

Proteaser nummereres efter følgende kriterier:

3.	Hydrolaser
3.4	Virker på peptidbindinger (peptidaser) med underkategorier:
3.4.1	α -Amino-Acyl-Peptid- hydrolaser (nu i EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidyl-aminosyrehydrolaser (nu i EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptidhydrolaser (nu i EC 3.4.13)
3.4.4	Peptidylpeptid-hydrolaser (nu omklassificeret under EC 3.4)
3.4.11	Aminopeptidaser
3.4.12	Peptidylaminosyre-hydrolaser eller Acylaminoaminosyre-hydrolaser (nu omklassificeret under 3.4)
3.4.13	Dipeptidaser
3.4.14	Dipeptidyl-peptidaser og tripeptidyl-peptidaser
3.4.15	Peptidyl-dipeptidaser
3.4.16	Carboxypeptidaser af serintypen
3.4.17	Metallo-carboxypeptidaser
3.4.18	Carboxypeptidaser af cysteintypen
3.4.19	Omegapeptidaser
3.4.21	Serin-endopeptidaser
	Endvidere identificeres specifikke enzymer:
3.4.21.1	chymotrypsin

3.4.21.2	chymotrypsin C
3.4.21.3	metridin
3.4.21.4	trypsin
3.4.21.5	thrombin
3.4.21.6	koagulationsfaktor Xa
3.4.21.7	plasmin
3.4.21.8	nu omfattet af EC 3.4.21.34 og EC 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidase
3.4.21.10	acrosin
3.4.21.11	nu omfattet af EC 3.4.21.36 og EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-lytisk endopeptidase
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Endopeptidaser af ukendt katalytisk mekanisme

Eksempler fra EINECS med tilføjet IUBMB-nummer

EF-nummer	EINECS-navn	CAS-nummer	IUBMB-nummer
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisin	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cellulase	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identifikatorer

Enzymstoffer identificeres ved det indeholdende enzymprotein (IUBMB-nomenklaturen) og andre bestanddele fra fermenteringen. Ud over enzymproteinet er hver specifik bestanddel normalt ikke til stede i koncentrationer på over 1 %. Hvis identiteten af disse specifikke bestanddele ikke er kendt, kan de angives som gruppe (dvs. proteiner, peptider, aminosyrer, kulhydrater, lipider og uorganiske salte). De individuelle bestanddele skal dog angives, hvis deres identitet er kendt, eller hvis deres koncentration er lig med eller overstiger 10 %, eller hvis de er relevante for klassificering og mærkning og/eller PBT-vurdering²⁷.

Enzymproteiner

Enzymproteiner i koncentratet skal identificeres ved

- IUBMB-nummer
- Navne tildelt af IUBMB (systemisk navn, enzymnavne, synonymer)
- Bemærkninger fra IUBMB
- Reaktion og reaktionstype
- EF-nummer og EF-navn (hvis tilgængeligt)
- CAS-nummer og CAS-navn (hvis tilgængeligt).

Den reaktion, som enzymet skaber, skal specificeres. Denne reaktion er defineret af IUBMB.

Eksempel

.alfa.-amylase: Polysakkarid indeholdende .alfa-(1-4)-bundne glukoseenheder + H₂O = maltooligosakkarider; endohydrolyse af 1,4-.alfa-d-glukosidbindinger i polysakkarider indeholdende tre eller flere 1,4-alfa-bundne d-glukoseenheder.

I henhold til enzymklassen tildeles en reaktionstype. Dette kan være oxidering, reduktion, eliminering, addition eller navn på reaktion.

Eksempel

.alfa.-amylase: Hydrolyse af o-glykosylbinding (endohydrolyse).

Andre bestanddele end enzymproteinet

Alle bestanddele ≥ 10 vægtprocent, eller som er relevante for klassificering og mærkning og/eller PBT-vurdering²⁸, skal identificeres. Identiteten af bestanddele, der udgør mindre end 10 %, kan angives som en kemisk gruppe. Deres typiske koncentration(er) eller koncentrationsintervaller skal angives, dvs.:

- (glyco)proteiner
- peptider og aminosyrer
- kulhydrater
- lipider
- uorganiske materialer (f.eks. natriumchlorid eller andre uorganiske salte).

²⁷ Flere oplysninger om PBT-vurdering og relevante kriterier findes i Vejledning om informationskrav og kemikaliesikkerhedsvurdering, kapitel R11: PBT-vurdering.

²⁸ Flere oplysninger om PBT-vurdering og relevante koncentrationer findes i RIP 3.2 TGD i kemikaliesikkerhedsvurderingsafsnittet om PBT-vurdering.

Hvis de øvrige bestanddele i et enzymkoncentrat ikke kan identificeres, skal navnet på produktionsorganismen (slægt og stamme eller genetisk type, hvis det er relevant) angives som ved andre UVCB-stoffer af biologisk oprindelse.

Hvis yderligere parametre er tilgængelige, kan de angives, f.eks. funktionelle parametre (dvs. pH- eller temperaturoptima og -intervaller), kinetiske parametre (dvs. specifikt aktivitets- eller omsætningsnummer), ligander, substrater samt produkter og co-faktorer.

5. Kriterier til at kontrollere, om stoffer er de samme

Ved kontrollen af, om stoffer fra forskellige producenter/importører kan anses for at være de samme, skal visse regler overholdes. Disse regler, der blev anvendt til at oprette EINECS, bør betragtes som et fælles grundlag for identifikation og navngivning af et stof og dermed for at finde en potentiel medregistrant af dette bestemte stof^{5, 6, 16, 29,30}. Stoffer, der ikke anses for at være de samme, kan dog godt anses for at være strukturelt beslægtede, i kraft af en ekspertvurdering. Datadeling kan derfor godt tillades for sådanne stoffer, hvis det er videnskabeligt begrundet. Dette behandles dog ikke i denne vejledning, men i *Vejledning om datadeling*.

- "≥ 80 %"-reglen for stoffer med én bestanddel samt definitionen af stoffer med flere bestanddele bør anvendes.

Der foretages ingen sondring mellem stoffernes tekniske, rene eller analytiske kvaliteter. Det betyder, at det "samme" stof kan have en forskellig renheds-/urenhedsprofil afhængigt af dets kvalitet. Veldefinerede stoffer skal dog indeholde de samme hovedbestanddele, og de eneste urenheder, der tillades, er urenheder, der er udledt af produktionsprocessen (se kapitel 4.2 for flere oplysninger), og tilsætningsstoffer, som er nødvendige for at stabilisere stoffet.

- Hydrerede og vandfrie former af forbindelser betragtes dog som det samme stof ved registrering.

Eksempler			
Navn og formel	CAS-nummer	EF-nummer	Regel
Kobbersulfat (Cu · H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Kobbersulfat (2+) salt (1:1), pentahydrat (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Dette stof er dækket af en registrering af sin vandfrie form (EF-nummer: 231-847-6)

Hydrerede og vandfrie former har forskellige kemiske navne og forskellige CAS-numre.

- Syrer eller baser og deres salte betragtes som forskellige stoffer.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
201-186-8	Pereddikesyre C ₂ H ₄ O ₃	Dette stof betragtes ikke som det samme som f.eks. sit natriumsalt (EINECS 220-

²⁹ Vollmer et al. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, s. 113-122.

³⁰ Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, ECB web-site; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999.

220-624-9	Natriumglykolat C ₂ H ₄ O ₃ · Na	624-9) Dette stof betragtes ikke som det samme som dets tilsvarende syre (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-chloranilin C ₆ H ₆ ClN	Dette stof betragtes ikke som det samme som f.eks. 2-chloranilinhydrobromid (1:1) (C ₆ H ₆ ClN · HBr)

- Individuelle salte (f.eks. natrium eller kalium) betragtes som forskellige stoffer.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
208-534-8	Natriumbenzoat C ₇ H ₅ O ₂ · Na	Dette stof betragtes ikke som det samme som f.eks. kaliumsaltet (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Kaliumbenzoat C ₇ H ₅ O ₂ · K	Dette stof betragtes ikke som det samme som f.eks. natriumsaltet (EINECS 208-534-8)

- Forgrenede eller ligekædede alkylkæder betragtes som forskellige stoffer.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
295-083-5	Phosphorsyre, dipentylester, forgrenet og ligekædet	Dette stof betragtes ikke som det samme som de individuelle stoffer phosphorsyre, dipentylester, forgrenet, eller phosphorsyre, dipentylester, ligekædet

- Forgrenede grupper skal nævnes som sådanne i navnet. Stoffer, der indeholder alkylgrupper uden yderligere information, omfatter kun ikke-forgrenede lineære kæder, medmindre andet er angivet.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
306-791-1	Fedtsyrer, C12-16	Kun stoffer med ligekædede og ikke-forgrenede alkylgrupper anses for at være de samme stoffer
279-420-3	Alkoholer, C12-14	
288-454-8	Aminer, C12-18-alkylmethyl	

- Stoffer med alkylgrupper, der bruger yderligere termer, som f.eks. iso, neo, forgrenet osv., betragtes ikke som det samme stof som stofferne uden denne specifikation.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
266-944-2	Glycerider, C ₁₂₋₁₈ Denne forbindelse identificeres ved SDA-stofnavn: C12-C18 trialkyl glyceride og SDA-indberetningsnummer: 16-001-00	Stoffet anses ikke for at være det samme som C ₁₂₋₁₈ -iso Dvs. et stof med mættede alkylkæder forgrenet i en vilkårlig position

- Hvis det ikke er angivet udtrykkeligt, repræsenterer alkylkæder i syrer eller alkoholer osv. kun de mættede kæder. Umættede kæder skal angives som sådanne og betragtes som forskellige stoffer.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
200-313-4	Stearinsyre, ren C18H36O2	Dette stof anses ikke for at være det samme som oliesyre, ren, C18H34O2 (EINECS 204-007-1)

- Stoffer med chiralt centrum

Et stof med ét stereocenter kan eksistere i venstre- og højrehåandede former (enantiomerer). Hvis ikke andet er angivet, antages det, at et stof er en ligelig (racemisk) blanding af de to former.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
201-154-3	2-chlorpropan-1-ol	De individuelle enantiomerer (R)-2-chlorpropan-1-ol og (S)-2-chlorpropan-1-ol betragtes ikke som lig med denne indgang

Racemater betragtes som stoffer med flere bestanddele. Hvis et stof er beriget med en enkelt enantiomerisk form, gælder reglerne for stoffer med én eller flere bestanddele, dvs. afhængigt af isomerkoncentrationsintervallerne, er stoffet et stof med én bestanddel eller et stof med flere bestanddele.

Stoffer med flere stereocentre kan eksistere i 2^n former (hvor n er antallet af stereocentre). Disse forskellige former kan have forskellige fysisk-kemiske, toksikologiske og/eller økotoksikologiske egenskaber i forhold til hinanden. De skal betragtes som forskellige stoffer.

- Uorganiske katalysatorer

Uorganiske katalysatorer betragtes som blandinger. Hvad angår identifikation, skal metalbestanddele eller metalforbindelser betragtes som individuelle stoffer (uden specifikation af anvendelse).

Eksempler		
	Kemisk betegnelse	Regel
	Cobalt oxid-aluminiumoxidkatalysator	Identificeres særskilt som: - Cobalt II oxid - Cobalt III oxid - Aluminiumoxid - Aluminiumcobaltoxid

- Enzymkoncentrater med samme IUBMB-nummer kan betragtes som det samme stof, selv om der er anvendt en anden produktionsorganisme, forudsat at de farlige egenskaber ikke er markant forskellige og sikrer samme klassificering.

Stoffer med flere bestanddele

Direktiv 67/548/EØF regulerede markedsføringen af stoffer. Metoden til produktion af stoffet var ikke relevant. Et markedsført stof med flere bestanddele var derfor omfattet af EINECS, hvis *alle* de individuelle bestanddele var opført i EINECS. Den isomeriske blanding difluorobenzene var f.eks. omfattet af EINECS-indgangene 1,2-Difluorobenzene (206-680-7), 1,3-Difluorobenzene (206-746-5) og 1,4-Difluorobenzene (208-742-9), selv om selve den isomeriske blanding ikke var opført i EINECS.

REACH kræver i stedet, at det fremstillede stof registreres. Det afgøres i hvert tilfælde, i hvilket omfang de forskellige trin i produktionen af stoffet er omfattet af definitionen "fremstilling" (f.eks. forskellige rensnings- eller destillationstrin). Hvis der fremstilles et stof med flere bestanddele, skal det registreres (medmindre det er omfattet af en registrering af de enkelte bestanddele, se kapitel 4.2.2.4); hvis der f.eks. fremstilles den isomere blanding

diflurobenzen, skal "diflurobenzen" registreres som en isomer blanding. For stoffer med flere bestanddele er det dog ikke nødvendigt at teste stoffet som sådant, hvis stoffets fareprofil kan beskrives tilstrækkeligt ud fra informationen om de individuelle bestanddele. Hvis de individuelle isomerer 1,2-Difluorobenzen, 1,3-Difluorobenzen og 1,4-Difluorobenzen produceres og blandes efterfølgende, skal de individuelle isomerer registreres, og den isomeriske blanding skal betragtes som en blanding.

Et stof med flere bestanddele med hovedbestanddelene A, B og C anses ikke for at være det samme som et stof med flere bestanddele med hovedbestanddelene A og B eller det samme som en reaktionsmasse af A, B, C og D.

- Et stof med flere bestanddele anses ikke for at være det samme som et stof med kun en delmængde af de enkelte bestanddele.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
207-205-6	2,5-Difluorotoluen	Disse to stoffer betragtes ikke som det samme som den isomeriske blanding difluorotoluener, fordi disse to stoffer kun er en delmængde af alle mulige isomerer.
207-211-9	2,4-Difluortoluen	

- Registreringen af et stof med flere bestanddele omfatter ikke de individuelle bestanddele.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
208-747-6	1,2-Dibromoethylen	Dette stof beskriver en blanding af cis- og trans-isomerer. De individuelle stoffer (1Z)-1,2-Dibromoethen og (1E)-1,2-Dibromoethen er ikke omfattet af registreringen af den isomeriske blanding.

UVCB-stoffer

- Et UVCB-stof med en smal fordeling af bestanddele anses ikke for at være det samme som et UVCB-stof med en bredere sammensætning og omvendt.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
288-450-6	Aminer, C12-18-alkyl, acetater	Stofferne "aminer, C12-14-alkyl, acetater" eller "aminer, C12-20-alkyl, acetater" eller "aminer, dodecyl (C12-alkyl), acetater" eller stoffer med kun alkylkæder med lige numre anses ikke for at være det samme som dette stof

- Et stof, der er karakteriseret ved en art/slægt, anses ikke for at være det samme som et stof, der er isoleret fra en anden art/slægt.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
296-286-1	Glycerider, solsikkeolie di-	Stoffet anses ikke for at være det samme som Glycerider, soya di- (EINECS: 271-386-8), eller det samme som Glycerider, talg di- (EINECS: 271-388-9).
232-401-3	Linolie, epoxyderet	Dette stof anses ikke for at være det samme som linolie, oxideret (EINECS: 272-038-8), eller som linolie, maleineret (EINECS: 268-897-3), eller som ricinusolie, epoxideret (ikke opført i EINECS).

- Et rensset ekstrakt eller et koncentrat betragtes som et andet stof end ekstraktet.

Eksempler		
EF-nummer	Kemisk betegnelse	Regel
232-299-0	Rapsolie Ekstrakter og deres fysisk modificerede derivater. De består primært af glycerider af fedtsyrerne erucasyre, linolsyre og oliesyre (Brassica napus, Cruciferae)	Stoffet "(Z)-Docos-13-erucasyre" er en bestanddel i stoffet "rapsolie". Erucasyre betragtes ikke som det samme som rapsolie, da det er isoleret som et rent stof fra rapsolien. Erucasyre har sin egen EINECS-indgang (204-011-3). En isoleret blanding af palmitinsyre, oliesyre, linolsyre, linolensyre, erucasyre og eicosansyre betragtes ikke som det samme som rapsolie, da disse bestanddele ikke repræsenterer hele olien.

6. Stofidentitet via forespørgsel

Kapitel 4 i denne vejledning indeholder oplysninger om, hvordan stoffer identificeres og navngives. Denne vejledning skal følges for at afgøre, om stoffer kan betragtes som de samme i henhold til REACH og CLP. Dette uddybes yderligere nedenfor i forbindelse med forespørgslen om stoffer.

I henhold til artikel 4 kan producenter eller importører, uden at de derved fritages for det fulde ansvar for at opfylde deres forpligtelser i henhold til REACH-forordningen, udpege en tredjepart til at repræsentere sig med henblik på alle procedurer i henhold til afsnit III, der indebærer diskussioner med andre producenter eller importører.

For alle stoffer er den potentielle registrant forpligtet til forud for registreringen at forespørge i agenturet, hvorvidt der allerede er indgivet en registrering for det samme stof (artikel 26 i REACH). Denne forespørgsel skal indeholde:

- den potentielle registrants identitet som angivet i REACH, bilag VI, punkt 1, undtagen anvendelsessteder
- stoffets identitet som angivet i REACH, bilag VI, punkt 2
- oplysninger om, hvilke informationskrav der vil betyde, at den potentielle registrant skal udføre nye forsøg på hvirveldyr
- oplysninger om, hvilke informationskrav der vil betyde, at den potentielle registrant skal udføre andre former for nye forsøg.

Den potentielle registrant skal angive stoffets identitet og navn i overensstemmelse med reglerne i denne vejlednings kapitel 4.

Agenturet fastslår, om det samme stof tidligere er blevet registreret. Dette sker også ved anvendelse af reglerne i denne vejlednings kapitel 4. Resultatet meddeles den potentielle registrant, og tidligere eller andre potentielle registranter underrettes.

Yderligere oplysninger om forespørgselsprocessen findes i *Vejledning om datadeling* og på ECHA's særlige webside:

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

7. Eksempler

Eksemplerne på de følgende sider har til formål at vise, hvordan brugeren kan arbejde med oplysningerne i denne vejledning. De repræsenterer ikke præcedens for, hvordan forpligtelser i henhold til REACH skal opfyldes.

Der gives følgende eksempler:

- "Diethyl peroxydicarbonat" er et eksempel på et stof med én bestanddel, der indeholder et opløsningsmiddel, som også fungerer som stabilisator (se kapitel 7.1).
- "Zolimidin" er et eksempel på et stof, der kan identificeres som et stof med én bestanddel eller et stof med flere bestanddele (se kapitel 7.2).
- En "blanding af isomerer", som dannes under fremstillingsreaktionen, er medtaget som et eksempel på et stof med flere bestanddele (se kapitel 7.3). Dette stof var tidligere omfattet af EINECS-indgangene for de individuelle isomerer.
- "Fragrance AH" er et eksempel på et stof, der produceres i forskellige kvaliteter, som kan beskrives ved en reaktionsmasse med fem bestanddele med koncentrationsintervaller (se kapitel 7.4). Det er også et eksempel på en begrundet afvigelse fra 80 %- og 10 %-tærsklerne.
- Ikke-metalliske "minerale", herunder montmorillonit, som et eksempel på et veldefineret stof, der kræver yderligere fysisk karakterisering, findes i kapitel 7.5.
- En "æterisk olie af lavendula" er et eksempel på et UVCB-stof udvundet af planter (se kapitel 7.6).
- "Chrysanthemumolie og isomerer isoleret deraf" er et eksempel på et UVCB-stof af biologisk oprindelse, som videreforarbejdes (se kapitel 7.7).
- "Phenol, isopropylateret, fosfat" er et eksempel på et variabelt UVCB-stof, som ikke kan defineres fuldt ud (se kapitel 7.8).
- "Kvaternære ammoniumforbindelser" er eksempler på stoffer med carbonkæder af varierende længde (se kapitel 7.9).
- To eksempler på "råoliestoffer", en benzinblandingsstrøm og gasolier, gives i kapitel 7.10.
- To eksempler på, hvordan enzymer, laccase og amylase identificeres, gives i kapitel 7.11.

7.1. Diethylperoxydicarbonat

Stoffet "diethylperoxydicarbonat" (EF 238-707-3, CAS 14666-78-5, C₆H₁₀O₆) produceres som en opløsning på 18 % i isododecan (EF 250-816-8, CAS 31807-55-3). Isododecan fungerer også som stabilisator over for eksplosive egenskaber. Den højest mulige koncentration, der garanterer sikker håndtering af stoffet, er en opløsning på 27 %.

Hvordan skal dette stof identificeres og navngives med henblik på registrering?

I henhold til definitionen af stof i REACH skal opløsningsmidler, der kan udskilles, uden at det påvirker stoffets stabilitet eller ændrer dets sammensætning, udelukkes. Eftersom isododecan i ovennævnte tilfælde også fungerer som stabilisator og ikke helt kan udskilles på grund af stoffets eksplosive egenskaber, skal isododecan betragtes som et tilsætningsstof og ikke kun som et opløsningsmiddel. Stoffet skal dog stadig betragtes som et stof med én bestanddel. Stoffet skal derfor registreres som opløsningen med den laveste koncentration af isododecan, der garanterer sikker håndtering af stoffet:

Diethylperoxydicarbonat (maks. koncentration: 27 %). Isodecan skal indberettes under "Tilsætningsstoffer", og den stabiliserende funktion skal specificeres.

7.2. Zolimidin

Den fremstillede methanolløsning indeholder "zolimidin" (EC 214-947-4; CAS 1222-57-7, C₁₄H₁₂N₂O₂S) og "imidazol" (EC 206-019-2; CAS 288-32-4, C₃H₄N₂). Når opløsningsmidlet "methanol" er fjernet, og fremstillingsprocessen er optimeret, har stoffet et renhedsinterval på 74-86 % zolimidin og 4-12 % imidazol.

Hvordan skal dette stof identificeres og navngives med henblik på registrering?

I henhold til definitionen af stof i REACH skal opløsningsmidler, der kan udskilles, uden at det påvirker stoffets stabilitet eller ændrer dets sammensætning, udelukkes. Da methanol i ovennævnte tilfælde kan udskilles uden vanskeligheder, skal stoffet uden opløsningsmiddel registreres.

Generelt betragtes et stof som et stof med én bestanddel, hvis en hovedbestanddel udgør ≥ 80 %. Et stof betragtes som et stof med flere bestanddele, hvis mere end én hovedbestanddel udgør ≥ 10 % og < 80 %. Ovennævnte eksempel er et grænsetilfælde, da tærskelværdierne overskrides. Stoffet kan derfor betragtes som et stof med én bestanddel ("zolimidin") eller som et stof med flere bestanddele (en reaktionsmasse af "zolimidin" og "imidazol").

I et sådant grænsetilfælde kan den typiske koncentration af hovedbestanddelene i stoffet bruges til at afgøre, hvordan stoffet bedst beskrives:

- 1) Hvis den typiske koncentration for zolimidin er 77 % og 11 % for imidazol, bør stoffet betragtes som en reaktionsmasse af zolimidin og imidazol.
- 2) Hvis den typiske koncentration for zolimidin er 85 % og 5 % for imidazol, bør stoffet betragtes som et stof med én bestanddel, "zolimidin".

7.3. Blanding af isomerer

Det pågældende stof er en blanding (reaktionsmasse) af to isomerer, der dannes under fremstillingsreaktionen. Isomererne var indberettet hver for sig for EINECS. Direktiv 67/548/EØF regulerede markedsføringen af stoffer. Da metoden for produktion af stoffet ikke var relevant, var blandingen omfattet af EINECS-indgangene for de to individuelle isomerer. REACH kræver registrering af fremstillede stoffer. Det afgøres i hvert tilfælde, i hvilket omfang de forskellige trin i produktionen af stoffet er omfattet af definitionen "fremstilling". Hvis isomerblandingen registreres som et stof med flere bestanddele (i henhold til vejledningen i kapitel 4.2.2), er det ikke nødvendigt at teste stoffet som sådant, hvis stoffets fareprofil kan beskrives tilstrækkeligt ved hjælp af informationen om de individuelle bestanddele.

1. Navn og andre identifikatorer

Eksempler	
IUPAC-navn eller andet internationalt kemisk navn (på stoffet)	Reaktionsmasse af 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol og 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
Andre navne (på stoffet)	2,2'-[[[methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol Reaktionsmasse af Ethanol, 2,2'-[[[methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- og vand Ethanol, 2,2'-[[[methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- (9CI) isomerisk forbindelse
EF-nummer (på stoffet) EF-navn EF-beskrivelse	Der findes intet EF-nummer for stoffet, da blandingen af isomerer ikke blev indberettet for EINECS. Stoffet er dog omfattet af EINECS-indgangene for indholdsstofferne (279-502-9, 279-501-3).
CAS-nummer (på stoffet) CAS-navn	ikke tilgængelig ikke tilgængelig
EF-nummer (indholdsstof A) EF-navn EF-beskrivelse	279-502-9 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
EF-nummer (indholdsstof B) EF-navn EF-beskrivelse	279-501-3 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
CAS-nummer (indholdsstof A) CAS-navn	80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
CAS-nummer (indholdsstof B) CAS-navn	80584-88-9 Ethanol, 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
Anden identitetskode Reference	ENCS-nummer 5-5917

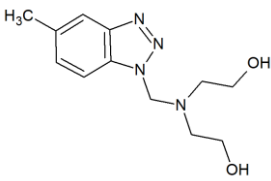
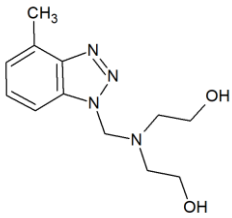
2. Oplysninger om sammensætning – hovedbestanddele

Hovedbestanddele						
	IUPAC-navn	CAS-nummer	EF-nummer	Molekylformel Hill-metode	Typisk konc. (vægtprocent)	Konc. interval (vægtprocent)
A	Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	Ethanol, 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Hovedbestanddele	
Andre navne	
A	2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
B	2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol

Hovedbestanddele		
	EF-navn	EF-beskrivelse
A	2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/
B	2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/

Hovedbestanddele		
	CAS-navn	CAS-nummer
A	Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0
B	Ethanol, 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9

Hovedbestanddele			
	Molekylformel CAS-metoden	Strukturformel	SMILES-kode
A	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12
B	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12

Hovedbestanddele		
	Molekylvægt [g/mol-1]	Molekylvægtinterval
A	250	/
B	250	/

7.4. Fragrance AH

Fragrance AH består af gamma-(iso-alfa)-methylionon og dets isomerer. Det produceres i tre forskellige kvaliteter (kvalitet A, B og C), som adskiller sig i forholdet mellem isomererne.

I følgende tabel gives en oversigt over sammensætningen i de forskellige kvaliteter.

Sammensætning i de forskellige kvaliteter af Fragrance AH				
Koncentrationsinterval [%]	Kvalitet A	Kvalitet B	Kvalitet C	Samlede intervaller
gamma-(iso-alfa)-methylionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta-(iso-beta)-methylionon	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa-n-methylionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma-n-methylionon	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0,5-4
beta-methylionon	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15	0,5-15
pseudo-methylionon	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3	0,5-3

Der er flere muligheder for identifikation af stoffet:

- Kvalitet A indeholder mindst 80 % af isomeren gamma (iso-alfa) methyl-ionon og kan derfor betragtes som et stof med én bestanddel baseret på isomeren gamma (iso-alfa) methyl-ionon med de øvrige isomerer som urenheder.
- Kvalitet B og C indeholder mindre end 80 % af isomeren gamma (iso-alfa) methyl-ionon og ≥ 10 % af andre isomerer. De kan derfor betragtes som stoffer med flere bestanddele:
 - Kvalitet B: som en reaktionsmasse af gamma-(iso-alfa)-methylionon (65-75 %) og alfa-n-methylionon (10-20 %) med de øvrige isomerer som urenheder.
 - Kvalitet C: som en reaktionsmasse af gamma-(iso-alfa)-methylionon (50-60 %) og alfa-n-methylionon (20-30 %) med de øvrige isomerer som urenheder.

Sammensætningen er variabel, og nogle gange udgør en isomer ≥ 10 % (kaldes derfor normalt hovedbestanddelen) og andre gange < 10 % (kaldes derfor normalt en urenhed).

De forskellige kvaliteter kan registreres separat. Det vil medføre tre registreringer. Analogislutning ud fra data kan dog være berettiget.

Alternativt kan følgende overvejes:

- en registrering som et stof med én bestanddel med to underkvaliteter; i det tilfælde afviger underkvaliteterne fra 80 %-reglen (se kapitel 4.2.1)
- en registrering som en defineret reaktionsmasse af fem isomerer (stof med flere bestanddele); i det tilfælde afviger nogle isomerer (hovedbestanddele) fra 10 %-tærsklen, som adskiller hovedbestanddele fra urenheder (se kapitel 4.2.2)
- en registrering som en defineret reaktionsmasse, hvor sammensætningens variabilitet er omfattet af hver isomers fulde interval.

Det kan være vigtigt, at overveje, om

- de tre kvaliteter har samme eller meget lignende fysisk-kemiske egenskaber
- de tre kvaliteter har tilsvarende anvendelses- og eksponeringsscenarier
- alle kvaliteter har samme fareklassificering og -mærkning, og indholdet af sikkerhedsdatablade og sikkerhedsrapporter er identisk
- de tilgængelige forsøgsdata (og fremtidige forsøg) dækker de tre kvaliteters variabilitet.

I dette eksempel beskrives identifikationen af stoffet som en defineret reaktionsmasse af fem isomerer (stof med flere bestanddele). Der skal angives en begrundelse, fordi 80 %-reglen (se kapitel 4.2.1) og 10 %-tærsklen (definition af stof med flere bestanddele, se kapitel 4.2.2) fraviges. Da hver kvalitet produceres som sådan, skal sammensætningen af hver af de tre kvaliteter specificeres i registreringsdossieret. Formelt kan mindst to registreringer dog være påkrævet: 1) gamma-(iso-alpha)-methylionon og 2) reaktionsmasse af gamma-(iso-alpha)-methylionon og alfa-n-methylionon.

Stofidentifikation

Fragrance AH produceres i tre forskellige kvaliteter (kvalitet A, B og C) med samme kvalitative sammensætning, men med forskellig kvantitativ sammensætning. Alle tre kvaliteter beskrives i ét registreringsdossier for et stof med flere bestanddele. Selv om dette betyder, at definitionen ikke anvendes strengt, er registrering som et stof med flere bestanddele berettiget, idet 1) tilgængelige forsøgsdata dækker alle tre kvaliteters variabilitet, 2) de tre kvaliteter har næsten ens fysisk-kemiske egenskaber, 3) alle kvaliteter har samme fareklassificering og -mærkning (sikkerhedsdatabladene er derfor ens), og 4) de tre kvaliteter har næsten ens anvendelses- og eksponeringsscenarier (dermed næsten ens kemikaliesikkerhedsrapporter).

1. Navn og andre identifikatorer

IUPAC-navn eller andet internationalt kemisk navn	Reaction mass of 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one 1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one
Andre navne	Methyl Ionone Gamma Quality A Methyl Ionone Gamma Quality B Methyl Ionone Gamma Quality C
EF-nummer	ikke tilgængelig
EF-navn	/
EF-beskrivelse	/

CAS-nummer	ikke tilgængeligt
CAS-navn	/

2. Oplysninger om sammensætning – hovedbestanddele

I teorien kan der forekomme yderligere enantiomerer. Følgende isomerer blev dog analyseret:

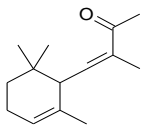
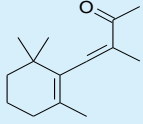
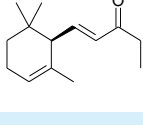
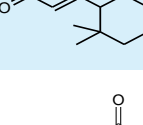
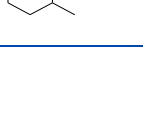
Hovedbestanddele						
	IUPAC-navn	CAS-nummer	EF-nummer	Molekylformel Hill-metode	Min. konc. (vægtprocent)	Maks. konc. (vægtprocent)
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	30
D	1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one	ikke tilgængeligt	ikke tilgængeligt	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	15

Hovedbestanddele	
Andre navne	
A	alpha-iso-methyl ionone, gamma methyl ionone
B	beta-iso-methyl ionone, delta methyl ionone
C	alpha-n-methyl ionone
D	gamma-n-methyl ionone
E	beta-n-methyl ionone

Hovedbestanddele		
	EF-navn	EF-beskrivelse
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
C	[<i>R-(E)</i>]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
D	1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/

Hovedbestanddele		
	CAS-navn	CAS-nummer
A	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	127-51-5
B	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	79-89-0
C	1-Penten-3-one, 1-[(1 <i>R</i>)-2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl]-, (1 <i>E</i>)-	127-42-4
D	ikke tilgængeligt	ikke tilgængeligt
E	1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	127-43-5

Hovedbestanddele		
	Anden identitetskode	Reference
A	2714 07.036	FEMA EU's liste over aromastoffer
B	07.041	EU's liste over aromastoffer
C	2711 07.009	FEMA EU's liste over aromastoffer
D	ikke tilgængelig	ikke tilgængelig
E	2712 07.010	FEMA EU's liste over aromastoffer

Hovedbestanddele			
	Molekylformel CAS-metode	Strukturformel	SMILES-kode
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>

Hovedbestanddele		
	Molekylvægt / g mol⁻¹	Molekylvægtinterval
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Oplysninger om sammensætning – urenheder og tilsætningsstoffer

Urenheder						
	IUPAC- navn	CAS- nummer	EF- nummer	Molekyl- formel	Typisk konc. (vægt- procent)	Konc. interval (vægt- procent)
F						
Antal ikke-specificerede urenheder:				11 (pseudo-methylioner)		
Samlet koncentration af ikke-specificerede urenheder:				0,5-3 vægtprocent		
Tilsætningsstoffer						
	IUPAC- navn	CAS- nummer	EF- nummer	Molekyl- formel	Typisk konc. (vægt- procent)	Konc. interval (vægt- procent)
G	Butylated Hydroxytoluene (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05-0,15

4. Information om de forskellige kvaliteter

Nedenfor angives intervallerne for de fem hovedbestanddele i de tre forskellige kvaliteter:

Koncentrationsinterval [%]	Kvalitet A	Kvalitet B	Kvalitet C
gamma-(iso-alfa)-methylionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta-(iso-beta)-methylionon	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alfa-n-methylionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma-n-methylionon	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4
beta-n-methylionon	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo-methylionon	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Mineraler

Et mineral defineres som en kombination af uorganiske bestanddele som fundet i jordskorpen med et karakteristisk sæt af kemiske sammensætninger, krystalformer (fra højt krystallinske til amorf) og fysisk-kemiske egenskaber.

Mineraler er fritaget fra registrering, hvis de opfylder definitionen af et stof, der forekommer i naturen (REACH, *artikel 3, stk. 39*), og hvis de ikke er kemisk modificeret (REACH, *artikel 3, stk. 40*). Dette gælder for mineraler, hvis kemiske struktur forbliver uændret, selv om de har gennemgået en kemisk proces eller behandling eller en fysisk mineralogisk omdannelse, f.eks. for at fjerne urenheder.

Nogle mineraler kan beskrives unikt ved deres sammensætning (se kapitel 4.2.1 og 4.2.2 for stoffer med én bestanddel og flere bestanddele), mens den kemiske sammensætning alene ikke er tilstrækkelig til at identificere andre mineraler (se kapitel 4.2.3).

I modsætning til andre stoffer med én eller flere bestanddele skal identifikationen af mange mineraler baseres på den kemiske sammensætning og den interne struktur (f.eks. som påvist ved røntgendiffraktion), fordi disse sammen repræsenterer det væsentlige ved mineralet og afgør dets fysisk-kemiske egenskaber.

Som for andre stoffer med flere bestanddele skal mineralets CAS-nummer bruges som en del af identifikationen (dvs. kombinationen af uorganiske bestanddele). CAS-numrene for de uorganiske bestanddele (som defineret ved systematisk mineralogi) bruges til at beskrive de forskellige bestanddele. Hvis en individuel uorganisk bestanddel produceres (et stof med én bestanddel), anvendes CAS-nummeret for dette stof til identifikation af stoffet. F.eks.:

- Mineralet kaolin (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) består grundlæggende af primære og sekundære kaolinitter (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), som er en lerart af hydreret aluminiumsilikat.

Hvis en raffineringproces anvendes på kaolin for at producere en enkelt bestanddel af kaolin, f.eks. kaolinitter, er CAS-/ EINECS-nummeret for stoffet EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Mineralet bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), der i EINECS beskrives som "En kolloid lerart, hovedsagelig bestående af montmorillonit", indeholder en høj andel af den uorganiske bestanddel montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), men ikke alene denne.

I det tilfælde, hvor der fremstilles rent montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), skal CAS-nummeret anvendes for montmorillonit til at identificere stoffet.

Det må understreges, at bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) og montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) ikke anses for at være det samme stof.

Mineraler navngives altså generelt efter deres kombination af uorganiske bestanddele. De kan betragtes som stoffer med én eller flere bestanddele (se generel vejledning i kapitel 4.2.1 og 4.2.2). Nogle mineraler kan ikke beskrives unikt ved deres kemiske sammensætning, men kræver yderligere fysisk karakteriserings- eller forarbejdningsparametre for at blive identificeret tilstrækkeligt (se kapitel 4.2.3). Der gives en række eksempler i tabellen nedenfor.

Eksempler på mineraler

Kemisk betegnelse	CAS	EINECS	Yderligere beskrivelse
Cristobalit	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (krystalsystem: kubisk/tetragonal)
Kvarts	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (krystalsystem: trigonal/hexagonal)
Kiselgur	61790-53-2	-	Kaldes også diatomit, kieselguhr og celit Beskrivelse: Blødt kiselholdigt fast stof bestående af skeletter af små forhistoriske vandplanter. Indeholder hovedsageligt silica.
Dolomit	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Gruppen af feldspatmineraller	68476-25-5	270-666-7	Uorganisk stof, som er reaktionsproduktet af højtemperaturkalcinering, hvor varierende mængder af aluminiumoxid, bariumoxid, calciumoxid, magnesiumoxid, siliconoxid og strontiumoxid diffunderes ensartet og ionisk for at danne en krystallinsk matrix.
Talkum	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Vermiculit	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)

Krævede analyseoplysninger – mineraler

Grundstofsammensætning	Den kemiske sammensætning giver et samlet billede af mineralets sammensætning uanset antallet af bestanddele og deres andele af mineralet. Den kemiske sammensætning udtrykkes konventionelt for oxider.
Spektraldata (XRD eller tilsvarende)	XRD eller andre teknikker kan identificere mineraler baseret på deres krystallografiske struktur. De karakteristiske XRD-data eller passende alternative data, der identificerer mineralet, skal angives sammen med en kort beskrivelse af analysemetoden eller en bibliografisk reference.
Typiske fysisk-kemiske egenskaber	Mineraler har karakteristiske fysisk-kemiske egenskaber, der bidrager til deres identifikation, f.eks. <ul style="list-style-type: none">- - meget lille hårdhed- - swellingtal- - diatomitformer (optisk mikroskop)- - meget høj tæthed- - overfladeområde (nitrogenadsorption).

7.6. Æterisk olie af Lavandin grosso

Æteriske olier er stoffer, der er udvundet af planter. Æteriske olier kan derfor også karakteriseres som botanisk udledte stoffer.

Generelt er botanisk udledte stoffer komplekse naturlige stoffer, der udvindes ved at forarbejde en plante eller dens dele ved f.eks. ekstraktion, destillation, presning, fraktionering, rensning, koncentrering eller fermentering. Disse stoffers sammensætning varierer afhængigt af kildernes slægt, art, vækstbetingelser og høsttidspunkt og afhængigt af de anvendte procesteknikker.

Æteriske olier kan defineres ved deres hovedbestanddele på samme måde som stoffer med flere bestanddele. Æteriske olier kan dog bestå af flere hundrede bestanddele, der kan variere betydeligt afhængigt af mange faktorer (f.eks. slægt, art, vækstbetingelser, høsttidspunkt og anvendte processer). En beskrivelse af hovedbestanddele er derfor i mange tilfælde ikke tilstrækkeligt til at beskrive disse UVCB-stoffer. Æteriske olier skal beskrives ved plantekilde og forarbejdningsproces som beskrevet i kapitel 4.3.1 (ved hjælp af UVCB-undertype 3).

I mange tilfælde findes der industristandarder for æteriske olier (og ISO-standarder for mange æteriske olier). Der kan angives oplysninger om standarder som ekstra information. Identifikation af stoffet skal dog baseres på stoffet, som det er fremstillet.

Eksemplet nedenfor beskriver "den æteriske olie af Lavandin grosso", for hvilken en ISO-standard foreligger (ISO 8902-1999).

1. Navn og andre identifikatorer

Kilde

Art	<i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
-----	---

Proces

Beskrivelse af de (bio)kemiske reaktionsprocesser, der er anvendt under fremstillingen af stoffet:

Vanddampdestillation af blomsterhovederne af *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) og efterfølgende separation af vandet fra den æteriske olie.

Den efterfølgende separation er en spontan, fysisk proces, der normalt foretages i en separator (en "florentinerflaske"), som gør det nemt at isolere den separerede olie. Temperaturen i denne fase af destillationsprocessen er ca. 40 °C.

Navn

IUPAC-navn eller andet internationalt kemisk navn	Æteriske olier af <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
EF-nummer EF-navn EF-beskrivelse	297-385-2 Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstrakt Ekstrakter og deres fysisk modificerede derivater, som f.eks. tinkturer, faste bestanddele, absolutter, æteriske olier, olieharpikser, terpener, terpenfrie fraktioner, destillater, restprodukter osv., udvundet af <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³¹ .
CAS-nummer CAS-navn	Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstrakt

³¹ "Labiatae" og "Lamiaceae" er synonymmer.

2. Oplysninger om sammensætning – kendte bestanddele

Kendte bestanddele					
	Kemisk navn EF CAS IUPAC andet	Nummer EF CAS	Mol. formel Hill- metoden	Typisk konc. (vægt- procent)	Konc. interval (vægt- procent)
A	EF linalyl acetate CAS 1,6-Octadien-3-ol, 3,7- dimethyl-, acetate IUPAC 3,7-Dimethyl octa-1,6-dien- 3-yl acetate	EF 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
B	EF linalool CAS 1,6-octadien-3-ol, 3,7- dimethyl- IUPAC 3,7-Dimethyl octa-1,6-diene- 3-ol	EF 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24 – 35
C	EF Bornan-2-one CAS Bicyclo[2.2.1] heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- IUPAC 1,7,7- Trimethylbicyclo[2.2.1]-2- heptanone Andet camphor	EF 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
D	EF Cineol CAS 2-oxabicyclo [2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- IUPAC 1,3,3-Trimethyl-2- oxabicyclo[2.2.2]octane Andet 1,8-cineol	EF 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7

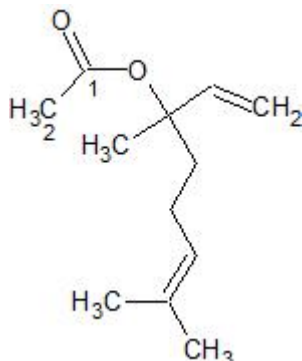
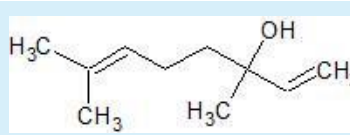
E	<p>EF P-menth-1-en-4-ol</p> <p>CAS 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-</p> <p>IUPAC 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol</p> <p>Andet terpinene-4-ol</p>	<p>EF 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5-5
F	<p>EF 2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetate</p> <p>CAS 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate</p> <p>IUPAC 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol</p> <p>Andet (±)-Lavandulol acetate</p>	<p>EF 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5-3
G	<p>EF DL-borneol</p> <p>CAS Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol</p> <p>Andet borneol</p>	<p>EF 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5-3
H	<p>EF Caryophyllene</p> <p>CAS Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylene bicyclo[7.2.0]undec-4-ene</p> <p>Andet trans-beta-caryophyllene</p>	<p>EF 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1-2,5

I	<p>EF (E)-7,11-dimethyl-3-methylenedodeca-1,6,10-triene</p> <p>CAS 1,6,10-Dodecatriene, 7,11-dimethyl-3-methylene-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-Dimethyl-3-methylene-1,6,10-dodecatriene</p> <p>Andet trans-beta-farnesene</p>	<p>EF 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2-2
J	<p>EF (R)-p-mentha-1,8-diene</p> <p>CAS cyclohexen, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (4R)-</p> <p>IUPAC (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexene</p> <p>Andet limonene</p>	<p>EF 227-813-5</p> <p>CAS 5989-27-5</p>	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5-1,5
K	<p>EF 3,7-dimethylocta-1,3,6-triene</p> <p>CAS 1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-</p> <p>IUPAC 3,7-Dimethylocta-1,3,6-triene</p> <p>Andet cis-beta-ocimene</p>	<p>EF 237-641-2</p> <p>CAS 13877-91-3</p>	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5-1,5

Kendte bestanddele ≥ 10 %

Kendte bestanddele	
	EF-beskrivelse
A	linalyl acetate C ₁₂ H ₂₀ O ₂
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O

Kendte bestanddele		
	CAS-navn	Relaterede CAS-numre
A	linalyl acetate C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Kendte bestanddele			
	Molekylformel CAS-metode	Strukturformel	SMILES-kode
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Kendte bestanddele		
	Molekylvægt	Molekylvægtinterval
A	196.888	/
B	154.2516	/

7.7. Chrysanthemumolie og isomerer isoleret deraf

En virksomhed producerer en chrysanthemumolie, der ekstraheres efter knusning af blomster og blade af *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae ved hjælp af et opløsningsmiddel, der indeholder en blanding af vand/ethanol (1:10). Efter ekstraktion udskilles opløsningsmidlet, og det "rene" ekstrakt raffineres i yderligere trin, som resulterer i den færdige chrysanthemumolie.

To isomerer isoleres desuden fra ekstraktet som en reaktionsmasse af:

Jasmolin I

(Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; CAS-nummer 4466-14-2), og

Jasmolin II

(Cyclopropanecarboxylic acid, 3-[(1E)-3-methoxy-2-methyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-dimethyl-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-ylester, (1R,3R)-; CAS-nummer 1172-63-0

Virksomheden har endvidere besluttet at syntetisere den isomeriske reaktionsmasse af jasmolin I og II.

Virksomheden stiller følgende spørgsmål:

1. Hvordan skal chrysanthemumolien identificeres med henblik på registrering?
2. Er reaktionsmassen af de isolerede isomerer jasmolin I og II omfattet af registreringen af olien?
3. Kan den syntetiserede blanding af de to isomerer betragtes som det samme som blandingen af isomerer, der er isoleret fra chrysanthemumolien?

1. Hvordan skal chrysanthemumolien identificeres med henblik på registrering?

Chrysanthemumolie betragtes som et UVCB-stof, der ikke kan identificeres tilstrækkeligt ud fra dets kemiske sammensætning (se kapitel 4.3 for detaljerede oplysninger). Andre identifikationsparametre, som f.eks. navn, kilde og proces, er væsentlige. Chrysanthemumolie er af biologisk beskaffenhed og skal identificeres via arten og den del af organismen, den udvindes af, og raffineringprocessen (ekstraktion med opløsningsmiddel). Bestanddelens kemiske sammensætning og identitet skal imidlertid stadig angives, for så vidt de kendes.

Følgende oplysninger betragtes som nødvendige for at identificere stoffet tilstrækkeligt:

Stoffets navn	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; olie udvundet af knuste blomster og blade ved ekstraktion med vand:ethanol (1:10)
Kilde	
Slægt, art, underart	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae
Plantedel anvendt til olie	Blomster og blade

Proces				
Fremstillingsmetode	Knusning efterfulgt af ekstraktion			
Opløsningsmiddel anvendt til ekstraktion	Vand:ethanol (1:10)			
Oplysninger om sammensætning – kendte bestanddele i vægtprocent				
Navn på bestanddel	EF-nr.	CAS-nr.	Min. %	Maks. %
Pyrethrin I: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-chrysanthemate	204-455-8	121-21-1	30	38
Pyrethrin II: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerin I: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerin II: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropane carboxylate	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolin I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	ingen	4466-14-2	4	10

Jasmolin II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	ingen	1172-63-0	4	10
Stoffet indeholder desuden op til 40 bestanddele under 1 %.				

Det kan overvejes at identificere stoffet som et veldefineret stof med flere bestanddele med seks hovedbestanddele (reaktionsmasse af pyrethrin I, pyrethrin II, cinerin I, cinerin II, jasmolin I og jasmolin II).

Stoffet betragtes som et "stof, der forekommer i naturen", hvis fremstillingsprocessen kun omfatter "knusning", og er fritaget fra registreringspligten, medmindre det opfylder kriterierne for klassificering som farligt stof i henhold til direktiv 67/548/EØF.

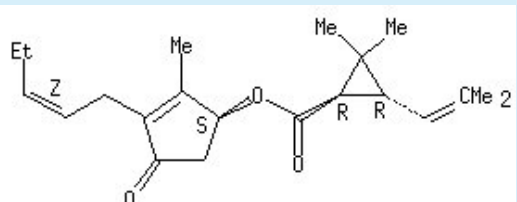
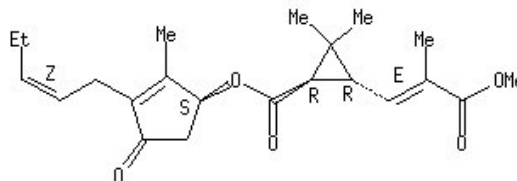
2. Er reaktionsmassen af de isolerede isomerer jasmolin I og II omfattet af registreringen af olien?

Reaktionsmassen af de isolerede isomerer jasmolin I og II er ikke omfattet af registreringen af "*Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae oil", eftersom individuelle bestanddele ikke er omfattet af hele UVCB-stoffet og omvendt. Reaktionsmassen af jasmolin I og II betragtes som et andet stof.

Reaktionsmassen af jasmolin I og jasmolin II kan betragtes som et stof med flere bestanddele (se kapitel 4.2.3 for detaljerede oplysninger) med to bestanddele.

Følgende oplysninger betragtes som nødvendige for at identificere stoffet tilstrækkeligt:

Stoffets IUPAC-navn	Reaction mass of (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) og (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)			
Andet navn:	Reaktionsmasse af jasmolin I og jasmolin II			
Stoffets renhed	95-98 vægtprocent			
Oplysninger om sammensætning – hovedbestanddele i vægtprocent				
Navn på bestanddel	EF-nr.	CAS-nr.	Min. %	Maks. %

Jasmolin I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	ingen	4466-14-2	40	60
Molekylformel				
Strukturformel Molekylvægt		C ₂₂ H ₃₀ O ₅ M = 374 g/mol		
Jasmolin II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	ingen	1172-63-0	35	65
Molekylformel				
Strukturformel Molekylvægt		C ₂₁ H ₃₀ O ₃ M = 330 g/mol		

3. Kan den syntetiserede blanding af de to isomerer betragtes som det samme som blandingen af isomerer, der er isoleret fra chrysanthemumolien?

For kemisk veldefinerede stoffer, der beskrives tilstrækkeligt ved deres bestanddele, er det ikke relevant, om stoffer er isoleret fra et ekstrakt eller syntetiseret ved hjælp af en kemisk proces. Den syntetiserede reaktionsmasse af jasmolin I og jasmolin II kan derfor betragtes som det samme som blandingen af isomerer, der er isoleret fra chrysanthemumolien, selv om den er udledt af forskellige fremstillingsprocesser, såfremt blandingens renhed og hovedbestanddelenes koncentrationsinterval er de samme.

4. Konklusion

Der identificeres to stoffer:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; olie udvundet af knuste blomster og blade ved ekstraktion med vand:ethanol (1:10)

2. Reaktionsmasse er isomererne jasmolin I og jasmolin II uafhængigt af fremstillingsprocessen for stoffet.

Hvis ovennævnte stoffer *alene* bruges i plantebeskyttelsesmidler og biocidholdige produkter, betragtes de som registrerede i henhold til REACH (*artikel 15*).

7.8. Phenol, isopropylateret, fosfat

Phenol, isopropylateret, fosfat (3:1) er et UVCB-stof, hvor variabiliteten af det isopropylaterede præparat ikke kan defineres fuldt ud.

1. *Navn og andre identifikatorer*

IUPAC-navn eller andet internationalt kemisk navn	Phenol, isopropylateret, fosfat (3:1)
Andre navne	Phenol, isopropylated, phosphate Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (based on a 1:1 mol ratio propylene to phenol)
EF-nummer EF-navn EF-beskrivelse	273-066-3 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) /
CAS-nummer CAS-navn	68937-41-7 Phenol, isopropylateret, fosfat (3:1)

2. *Oplysninger om sammensætning – hovedbestanddele*

Hovedbestanddele					
IUPAC-navn	CAS-nummer	EF-nummer	Molekylformel Hill-metode	Typisk konc. (vægtprocent)	Konc. interval (vægtprocent)
Phenol, isopropylateret, phosphat (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Ikke specificeret		

Hovedbestanddele	
EF-navn	EF-beskrivelse
Fenol, isopropylateret fosfat (3:1)	/
CAS-navn	CAS-nummer
Fenol, isopropylateret fosfat (3:1)	68937-41-7

7.9. Kvaternære ammoniumforbindelser

En virksomhed syntetiserer følgende stoffer:

Stof A

Kvaternære ammoniumforbindelser, di-C₁₀₋₁₈-alkyldimethyl, chlorider

EF-nummer 294-392-2

CAS-nr. 91721-91-4

Carbonkædeinterval:

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 %

Stof B

Kvaternære ammoniumforbindelser, dicoco alkyldimethyl, chlorider

EF-nr. 263-087-6

CAS-nummer 61789-77-3

Den præcise sammensætning af dette stof kendes ikke af virksomheden.

Stof C

Didodecyldimethylammoniumbromid

Stof D

Didodecyldimethylammoniumchlorid

Stof E

Stof E fremstilles som en reaktionsmasse af didodecyldimethylammoniumbromid og didodecyldimethylammoniumchlorid (reaktionsmasse af stof C og D)

Stof F

Kvaternære ammoniumforbindelser, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimethylammonium, chlorider

EC-nummer 268-072-8

CAS-nummer 68002-59-5

Carbonkædeinterval:

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

Stof G

Kvaternære ammoniumforbindelser, C₄₋₂₂-alkyldimethyl, chlorider

Carbonkædeinterval (et enkelt primtegn angiver én dobbeltbinding, og et dobbelt primtegn angiver én tredobbelt binding):

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 %

Indtil videre bruger virksomheden kun stof B (kvaternære ammoniumforbindelser, dicoco alkyldimethyl chlorider, EF-nummer 263-087-6, CAS-nummer 61789-77-3) til navngivning, fordi det passer bedst til alle stoffer (stof A-G). Virksomheden vil gerne vide, om alle stoffer (A-G) kan dækkes i én registrering af stof B.

1. Generelle bemærkninger

Carbonhydrider (paraffiner og olefiner) udledt af fedtstoffer og olier eller syntetiske substitutter identificeres ved deres carbonkædeinterval, ved deres oprindelse (alkyldeskriptor) eller ved en funktionel gruppe (funktionalitetsdeskriptor), f.eks. ammonium, og anion/kation (saltdeskriptor), f.eks. chlorid. Kædeintervallet, f.eks. C₈₋₁₈, refererer til

mættede

ligekædede (ikke-forgrenede)

alle antal carbonatomer inklusive de nævnte (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈), mens et smalt interval ikke omfatter et bredere og omvendt

Ellers skal det angives på følgende måde:

umættet (C₁₆ umættet)

forgrenet (C₁₀ forgrenet)

lige antal (C₁₂₋₁₈ lige antal)

Carbonkæder, der beskrives ved kilden, skal omfatte det interval, der forekommer i kilden, f.eks. talg-alkyl-aminer:

Talg-alkyl-aminer er 99 % primære ligekædede alkyl-aminer med følgende carbonkædeinterval (Ullmann, 1985) [et enkelt primtegn angiver én dobbeltbinding, og et dobbelt primtegn angiver én tredobbelt binding]:

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

2. Hvordan skal stofferne identificeres med henblik på registrering?

Hvert stof sammenlignes med stof B (der indtil videre er anvendt som navn) for at afgøre, om de to stoffer kan betragtes som det samme.

Sammenligning mellem stof A og B

Følgende carbonkædeinterval forekommer for "kokos" i stof B (Ullmann, 1985) [et enkelt primtegn angiver én dobbeltbinding, og et dobbelt primtegn angiver én tredobbelt binding]:

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

Kædeintervallet for stof A afviger dermed fra kædeintervallet for stof B ("kokos"). Da den kvalitative og kvantitative sammensætning af de to stoffer er markant forskellig, kan de ikke betragtes som det samme.

Sammenligning mellem stof B og C

Stof B "kvaternære ammoniumforbindelser, dicoco alkyldimethyl chlorider" beskriver en blanding af bestanddele med carbonkæder af forskellig længde (C₆ to C₁₈ med lige antal, ligekædede, mættede og umættede), mens stof C kun beskriver én bestanddel med én defineret og mættet kæde (C₁₂) med en anden anion (bromid). Stof C kan derfor ikke betragtes som det samme som stof B.

Sammenligning mellem stof B og D

Stof B "kvaternære ammoniumforbindelser, dicoco alkyldimethyl chlorider" beskriver en blanding af bestanddele med carbonkæder af forskellig længde (C₆ til C₁₈ med lige antal, ligekædede, mættede og umættede), mens stof D kun beskriver én bestanddel med én defineret og mættet kæde (C₁₂) og den samme anion (chlorid). Stof B og D har forskellige navne og kan ikke betragtes som det samme stof, da en enkelt bestanddel ikke er omfattet af en blanding, som indeholder en bestemt bestanddel, og omvendt.

Sammenligning mellem stof B og E

Stof E er en blanding af stof C og D. Begge har en mættet kædelængde på C₁₂, men forskellige anioner (bromid og chlorid). Stof B "kvaternære ammoniumforbindelser, dicoco alkyldimethyl chlorider" beskriver en blanding af bestanddele med forskellig carbonkæder (C₆ til C₁₈ med lige antal, ligekædede, mættede og umættede) og chlorid som anion. Stof E beskrives imidlertid kun ved carbonkæden C₁₂ med bromid som yderligere anion. Stof B og E kan derfor ikke betragtes som det samme. Der skal derfor foretages en særskilt registrering af stof E.

Sammenligning mellem stof B og F

Stof F "kvaternære ammoniumforbindelser, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimethylammonium, chlorider" er en blanding af bestanddele med forskellige carbonkæder (C₁₄ til C₁₈ med lige og ulige antal, ligekædede og mættede). Stof F adskiller sig fra stof B med hensyn til sammensætning og carbonkædeinterval. Stof F har et smalt carbonkædeinterval og også carbonkæderne C₁₅ og C₁₇. Stof B og F kan derfor ikke betragtes som det samme.

Sammenligning mellem stof B og G

Stof B og G er tilsyneladende meget ens, da carbonkædeintervallet er næsten ens. Stof G indeholder dog også carbonkæderne C₄, C₂₀ og C₂₂. Carbonkædeintervallet i stof G er bredere end i stof B. Stof B og G kan derfor ikke betragtes som det samme.

3. Konklusion

Carbonhydrider (paraffiner og olefiner) kan kun betragtes som det samme stof, når alle tre deskriptorer (alkyl, funktionalitet og salt) er de samme.

I eksemplet ovenfor er deskriptorerne altid forskellige. Stofferne kan derfor ikke omfattes af én registrering af stof B.

7.10. Råoliestoffer

Med udgangspunkt i vejledningen om specifikke UVCB-stoffer i kapitel 4.3.2 gives der to eksempler.

7.10.1. Benzinblandingsstrøm (C4-C12)

1. Navn og andre identifikatorer

Navn

IUPAC-navn eller andet internationalt kemisk navn	Naphtha (råolie), katalytisk reformeret	Naphtha (petroleum), catalytic reformed
--	---	---

Kilde

Identifikation eller beskrivelse af strømmens kilde	Råolie
--	--------

Proces

Beskrivelse af raffinaderiproces	Katalytisk reformeringsproces
Carboninterval	C4-C12
Kogepunkt/kogepunktsinterval eller afskæringsværdi	30 °C til 220 °C

Andre fysiske egenskaber, f.eks. viskositet	under 7 mm ² /s ved 40 °C (viskositet)
EF-nummer	273-271-8
CAS-nummer	68955-35-1
EF-navn/CAS-navn	Naphtha (petroleum), catalytic reformed
EF-beskrivelse/CAS-beskrivelse	En sammensat blanding af carbonhydrider fremstillet ved destillationen af produkter fra en katalytisk reformeringsproces. Den består af carbonhydrider, overvejende C4 til og med C12, med koginterval omtrent fra 30 C til 220 C (90 F til 430 F). Den indeholder en relativt stor mængde aromatiske og forgrenede carbonhydrider. Denne strøm kan indeholde 10 volumenprocent eller mere benzen.

2. Oplysninger om sammensætning

Kendte bestanddele			
IUPAC-navn	CAS-nummer	EF-nummer	Konc. interval (vægtprocent)
Benzene	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluene	108-88-3	203-625-9	20-25
Xylene	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Gasolier (råolie)

1. Navn og andre identifikatorer

IUPAC-navn eller andet internationalt kemisk navn	Gas oils (petroleum), heavy atmospheric
--	---

Kilde

Identifikation eller beskrivelse af strømmens kilde	Råolie
--	--------

Proces

Beskrivelse af raffinaderiproses	Atmosfærisk destillation
Carboninterval	C7-C35
Kogepunkt/kogepunktsinterval eller afskæringsværdi	121 °C til 510 °C
Andre fysiske egenskaber, f.eks. viskositet	20 mm ² /s ved 40 °C (viskositet)
EF-nummer CAS-nummer EF-navn/CAS-navn EF-beskrivelse/CAS-beskrivelse	272-184-2 68783-08-4 Gasolier (råolie), tunge, atmosfæriske En sammensat blanding af carbonhydrider udvundet af destillationen af råolie. Den består af carbonhydrider, overvejende C7 til og med C35, med koginterval omtrent fra 121 C til 510 C (250 F til 950 F).

2. *Kemisk sammensætning*

Ingen foreliggende data.

7.11. Enzymer

Med udgangspunkt i vejledningen om specifikke UVCB-stoffer i kapitel 4.3.3.2 gives der to eksempler vedrørende enzymkoncentrater: subtilisin (identificeret ved IUBMB-nomenklaturen + andre bestanddele) og α -amylase (identificeret ved IUBMB-nomenklaturen + produktionsorganisme)

7.11.1. Subtilisin

Enzymprotein	Subtilisin
IUBMB-nummer	3.4.21.62

Navne tildelt af IUBMB (systemisk navn, enzymnavne, synonymer)	Subtilisin; alcalase; alcalase 0.6L; alcalase 2.5L; ALK-enzyme; bacillopeptidase A; bacillopeptidase B; Bacillus subtilis alkaline proteinase biopraxe; biopraxe AL 15; biopraxe APL 30; colistinase; (se også bemærkninger); subtilisin J; subtilisin S41; subtilisin Sendai; subtilisin GX; subtilisin E osv.
Bemærkninger fra IUBMB	Subtilisin er en serin-endopeptidase, typeeksempel på peptidasefamilie S8 . Det indeholder ingen cysteinrester (selv om sådanne findes i homologe enzymer). Artsvarianter omfatter subtilisin BPN' (også subtilisin B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse, Nagarse proteinase, subtilisin Novo og bacterial proteinase Novo) og subtilisin Carlsberg (subtilisin A, subtilopeptidase A og alcalase Novo). Tidligere EC 3.4.4.16 og opført i EC 3.4.21.14. Lignende enzymer produceres af forskellige <i>Bacillus subtilis</i> -stammer og andre <i>Bacillus</i> -arter [1,3].
Reaktion	Hydrolyse af proteiner med bred specificitet for peptidbindinger og en præference for en stor uladet rest i P1. Hydrolyserer peptidamider.
Reaktionstype	Hydrolaser Virker på peptidbindinger (peptidaser) Serin-endopeptidaser
EF-nummer	232-752-2
EF-navn	Subtilisin
CAS-nummer	9014-01-1
CAS-navn	Subtilisin
Koncentration af enzymprotein	26 %

Andre bestanddele	
Andre proteiner, peptider og aminosyrer	39 %
Kulhydrater	11 %
Lipider	1 %
Uorganiske salte	23 %
Yderligere parametre	
Substrater og produkter	Proteiner eller oligopeptider, vand peptider

7.11.2. α -Amylase

Enzymprotein	α -amylase
IUBMB-nummer	3.2.1.1
Navne tildelt af IUBMB (systemisk navn, enzymnavne, synonymer)	1,4- α -D-glucan glucanohydrolase glycogenase; α -amylase alpha-amylase, endoamylase, Taka-amylase A
Bemærkninger fra IUBMB	Virker vilkårligt på stivelse, glycogen og relaterede polysaccharider og oligosaccharider; reducerende grupper frigives i α -konfigurationen. Termen "a" henviser til den indledende anomerske konfiguration af den frie sukkergruppe, som frigives, og ikke til konfigurationen af den hydrolyserede binding.
Reaktion	Endohydrolyse af 1,4- α -D-glycosidbindinger i polysaccharider, der indeholder tre eller flere 1,4- α -bundne D-glucoseenheder

Reaktionstype	hydrolaser, glycosidaser, glycosidaser, dvs. enzymer, der hydrolyserer O- og S- glycosylforbindelser
EF-nummer	232-565-6
EF-navn	Amylase, α -
CAS-nummer	9000-90-2
Relaterede CAS-numre	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319- 50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (alle udgået)
CAS-navn	Amylase, α -
Koncentration af enzymprotein	37 %
Andre bestanddele	
Andre proteiner, peptider og aminosyrer	30 %
Kulhydrater	19 %
Uorganiske salte	14 %
Yderligere parametre	
Substrater og produkter	stivelse, glykogen, vand, polysaccharid, oligosaccharid

Tillæg I - Støttematerialer

Dette tillæg indeholder en liste over websteder, databaser og manualer, der kan bruges til at finde de relevante IUPAC-, CAS- og EF-navne, CAS- og EF-numre, molekylformler og strukturformler, herunder SMILES-notation, og andre parametre, der kræves ved identifikation af stoffer. Kommercielle databaser og vejledninger er ikke medtaget.

Generelt		
Parameter for stofidentitet	Kilde	Beskrivelse af kilde
U.S. Department of Health and Human Services	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	En række databaser og værktøjer til at hjælpe brugerne med at søge efter kemiske oplysninger
Perkin Elmer Informatics	https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	En gratis database med kemiske strukturer, fysiske egenskaber og link til relevante oplysninger
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Alfabetisk produktfortegnelse

Navn og andre identifikatorer		
Parameter for stof-identitet	Kilde	Beskrivelse af kilde
IUPAC-navn	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	IUPAC's officielle websted
	https://iupac.qmul.ac.uk/	IUPAC's kemiske nomenklatur og anbefalinger (udgivet under IUPAC's ansvar)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	IUPAC's primære nomenklaturpublikationer, opdatering forventes i 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	IUPAC's primære nomenklaturpublikationer, opdatering forventes i 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	IUPAC's primære nomenklaturpublikationer, opdatering forventes i 2005.
IUPAC-navn	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	IUPAC's primære nomenklaturpublikationer
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Introduktionsbind, der dækker alle typer forbindelser
IUPAC-navn	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Kommercielt computerprogram til navngivning, der kan være særdeles nyttigt ved navngivning af strukturer af moderat kompleksitet. Freeware findes til små molekyler (anbefales af IUPAC)

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	IUPAC-nomenklatur for organisk kemi (anbefales af IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Komplet liste over godkendte trivialnavne og halvsystematiske rodnavne og organiske forbindelser
	http://www.chemexper.com/	ChemExper Chemical Directory har til formål at etablere en fælles database over kemikalier med gratis adgang via internettet. Denne database indeholder kemikalier med deres fysiske karakteristika. Alle kan indgive kemiske oplysninger og hente oplysninger via en webbrowser
IUBMB-nomenklatur	https://iubmb.qmul.ac.uk/	IUBMB's biokemiske nomenklaturdatabase (udgivet under IUBMB's ansvar)
Andre navne	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Generiske navne i Colour Index, Colour Index International, fjerde udgave (online)
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients), websted for Official Personal Care Products Council
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	US EPA (stoffer, der indeholder carbonkæder af varierende længde (alkylintervaller ved hjælp af CX-Y-notationen)
Andre identifikatorer	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	CE-normer, europæisk officielt CE-websted
EF-nummer	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	Søgning i EF-fortegnelsen: søg i EINECS, ELINCS, NLP og <i>bilag I</i> til direktiv 67/548/EØF
CAS-nummer	http://www.cas.org	Officielt websted for CAS Registry Service
	http://www.chemistry.org	Officielt websted for American Chemical Society

Molekyl- og strukturformler

Parameter for stofidentitet	Kilde	Beskrivelse af kilde
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html	Gratis SMILES-generator
Molekylvægt og SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html	ACDChemsSketch, freeware (findes også i handelen)
Flere fysisk-kemiske parametre	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ er en Windows®-baseret suite af beregningsmodeller vedrørende fysisk-kemiske egenskaber og skæbne i miljøet udviklet af EPA's Office of Pollution Prevention Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC).
Yderligere støtte til specifikke stoffer	Spørgsmål og svar – ECHA Sektorspecifik støtte til identifikation af stoffer – ECHA	Der findes støtte til navngivnings- og karakteriseringstilgange for specifikke stoffer på ECHA's websted og i Spørgsmål og svar.

Tillæg II – Teknisk vejledning for hver parameter til identifikation af stoffer

Oplysningerne i dette tillæg er tiltænkt brugere af vejledningen, som ikke har kendskab til de tekniske regler for nomenklaturer, brug af forskellige registernumre og notationsregler for molekyl- og strukturoplysninger, spektraldata osv.

Der gives en generel introduktion, som opsummerer de væsentligste principper og henviser brugeren til den oprindelige kilde, hvor der kan findes udførlige oplysninger.

Oversigten er en forenklet version, som ikke er udførlig eller udtømmende, og som ikke er tilstrækkeligt detaljeret til den professionelle bruger. Den bør under ingen omstændigheder sidestilles med den officielle kilde.

1 Navn(e) i IUPAC-nomenklaturen eller en anden international nomenklatur

Ved registrering angives det engelske IUPAC-navn eller et andet veldefineret internationalt anerkendt navn på stoffet.

Et IUPAC-navn er baseret på den internationale kemiske standardnomenklatur, som er fastsat af den internationale organisation IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) (se henvisninger i tillæg I). IUPAC-nomenklaturen er et system til navngivning af kemiske stoffer, både organiske og uorganiske. I IUPAC-nomenklaturen bruges præfikser, suffikser og infikser til at beskrive typen og positionen af funktionelle grupper i stoffet.

penta-1,3-dien-1-ol, i dette eksempel:

præfikset er **penta-1,3-**

infikset er **-di**

suffikset er **-ol**

en- er basis i navnet, rodnævnet.

Regelsættet er udviklet over en årrække og ændres løbende for at håndtere nye indholdsstoffer med forskellig molekylsammensætning og mulige konflikter eller forvekslinger, der konstateres. IUPAC's regler kan kun anvendes for veldefinerede stoffer.

I det følgende gives der generel vejledning om opbygningen af IUPAC-navne. Der findes mere detaljerede oplysninger i kapitel 4 i vejledningen.

1.1 Organisk stof

Trin 1 Identificer antallet af C-atomer i den længste sammenhængende kæde af carbonatomer. Dette antal afgør præfikset, som er den første del af rodnævnet:

Antal carbonatomer	Rod
1	meth-
2	eth-

3	prop-
4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	oct-
N

Trin 2 Fastlæg mætningen af kæden. Mætningen af kæden afgør suffikset, som er den anden del af rodnavnet:

Mætning	Bindinger	Suffiks
Umættet	Dobbelt Tredobbelt	-ene -yn
Mættet	-	-ane

Ved dobbelt eller tredobbelt binding er antallet af bindinger angivet med "mono", "di", "tri" osv. før suffikset:

Penten med to dobbeltbindinger: pentadien

Trin 3 Kombiner præfiks, suffiks og tilføjelser til rodnavnet

Bemærk: For rodnavnet kan IUPAC-godkendte trivialnavne og halvsystematiske navne også anvendes:

Benzene, toluene osv.

Trin 4 Brug nedenstående tabel:

- Identificer substituerter og/eller funktionelle grupper: carbon- eller ikke-carbongrupper, der er knyttet til den kæde af carbonatomer, der blev identificeret i trin 1.
- Afgør rangordenen mellem substituerterne og/eller de funktionelle grupper.
- Tilføj suffikset for den første substituent/funktionel gruppe og evt. efterfølgere i rangordenen.
- Tilføj præfikset for de øvrige substituerter og funktionelle grupper i alfabetisk rækkefølge.

Rangorden	Gruppe	Formel	Suffiks	Præfiks
1	Carboxylic acid	R-COOH	-oic acid	Carboxy
2	Ester	R-CO-O-R	-oate	-
3	Amide	R-CONH ₂	-amide	Carbamoyl
4	Cyanide	R-CN	-nitrile	Cyano
5	Aldehyde	R-CHO	-al	Oxo
6	Ketone	R-CO-R	-one	Oxo
7	Alcohol	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Thiol	R-SH	-thiol	Sulfanyl
9	Amine	R-NH ₂	-amine	Amino

1.2 Uorganisk stof

1.2.1 Navngivning af simple uorganiske stoffer

Navngivningen af uorganiske stoffer er baseret på et sæt regler (IUPAC Red Book, se reference i 7.1), hvoraf de mest grundlæggende er beskrevet i det følgende:

- 1 Anioner med ét atom navngives med suffikset *-ide*:

O²⁻ er "oxide"

- 2 Simple ionforbindelser er navne med "*cation*" efterfulgt af "*anion*". For kationer med ladninger over 1 skrives ladningen med romertal i parentes umiddelbart efter grundstofnavnet:

Cu²⁺ er "copper(II)"

- 3 Hydrater navngives som ionforbindelsen efterfulgt af et numerisk præfiks og -hydrat. De numeriske præfikser er *mono-*, *di-*, *tri-*, *tetra-*, *penta-*, *hexa-*, *hepta-*, *octa-*, *nona-* og *deca-*:

CuSO₄ · 5H₂O er "copper(II) sulphate pentahydrate"

Ved registrering betragtes hydrater og evt. den vandfrie form af en bestemt metalsalt som "det samme stof".

- 4 Uorganiske molekylære forbindelser navngives med et præfiks (se hydrater) før hvert grundstof. Det mest elektronegative grundstof skrives sidst med suffikset *-ide*:

CO₂ er "carbon dioxide", og CCl₄ er "carbon tetrachloride".

5. Syrer navngives efter den anion, der dannes, når syren opløses i vand. Der er flere muligheder:
 - a. Hvis syren, når den opløses i vand, dissocieres til en anion med navnet "*x*"-ide, navngives syren hydro-"*x*"-ic acid:

"hydrochloric acid" danner en "chloride"-anion.

- b. Hvis syren, når den opløses i vand, dissocieres til en anion med navnet "x"-ate, navngives syren "x"-ic acid:

"chloric acid" dissocieres til "chlorate"-anioner i vand.

- c. Hvis syren, når den opløses i vand, dissocieres til en anion med navnet "x"-ite, navngives syren "x"-ous acid:

"chlorous acid" dissocieres til "chlorite"-anioner.**1.2.2 Navngivning af mineralogiske faser**

Komplekse mineralogiske faser indeholder generelt en kombination af tre eller flere grundstoffer. De fleste forekommende grundstoffer kombineres med oxygen, og for at forenkle identifikationen vurderer mineraloger normalt, at de komplekse forbindelser er opbygget af oxider, hvoraf nogle af basiske og andre er sure. Hvad angår f.eks. silicater, gengives de ofte som en sum af et antal oxider eller som salte af kiselsyre eller aluminiumsiliciumsyre. Calciumorthosilicat kan således gengives som $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$, en kombination af separate oxider, eller som Ca_2SiO_4 , calciumsaltet af orthosiliciumsyre H_4SiO_4 . Det samme gælder for andre komplekse mineraloxider – de navngives med et præfiks før hvert oxid (f.eks. $\text{Ca}_3\text{SiO}_5 = \text{tricalciumsilicat} = 3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$). I nogle brancher er der indført yderligere forenkling for at forkorte formlerne for forbindelser. For Portland-cementklinker forkortes f.eks. $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ (calciumorthosilicat eller dicalciumsilicat) til C_2S , hvor C = CaO og S = SiO_2 . Der henvises til mineralogiske standarder eller industritekster ved navngivning eller identifikation af komplekse mineralogiske faser.

1.3 Naturlige produkter og tilknyttede indholdsstoffer

IUPAC har udviklet en række regler for systematisk navngivning af naturlige produkter. For stoffer, der ekstraheres fra en naturlig kilde, betyder det kort sagt, at navnet så vidt muligt baseres på navnet på familie-, slægts- eller artsnavnet på den organisme, som stoffet er ekstraheret fra:

For et hypotetisk eksempel på et protein, *Hypothecalia Exemplare*, er navnene baseret på *hypothecalia* og/eller *exemplare*, f.eks. *Horse Exemplare*

Hvis det er muligt, skal navnet afspejle den kendte eller sandsynlige fordeling af det naturlige produkt. Klasse eller orden kan evt. bruges som grundlag for navnet på et stof, der forekommer i en række relaterede familier. Navnet på naturlige produkter af ukendt struktur bør ikke indeholde præfikser, suffikser og/eller infikser, der anvendes i organisk nomenklatur:

Kondensationsprodukt af *Horse exemplare*, hvor Valarine er adderet i N-positionen

Mange naturligt forekommende stoffer tilhører veldefinerede strukturklasser, som hver især kan karakteriseres ved et sæt overordnede strukturer, der er tæt forbundne, dvs. at de hver især kan udledes af en grundlæggende struktur. Det systematiske navn på sådanne naturligt forekommende stoffer og deres derivater kan baseres på navnet på en hensigtsmæssig grundlæggende overordnet struktur:

Velkendte overordnede strukturer er alkaloider, steroider, terpenoider og vitaminer.

En grundlæggende overordnet struktur skal afspejle det basisskelet, der er fælles for de fleste stoffer i denne klasse. Naturligt forekommende stoffer eller derivater navngives efter den overordnede struktur med tilføjelse af præfikser, suffikser eller infikser, som angiver:

- modifikationer af skeletstrukturen
- udskiftning af skeletatomer
- ændringer i hydrogeneringstilstand angivet ved navnet på den overordnede struktur
- atomer eller grupper af udskiftningshydrogenatomer i den overordnede struktur
- konfigurationer, der ikke i forvejen angives ved navnet på den overordnede struktur, eller som er ændret i forhold til det angivne.

”Thiamin chloride” kaldes også vitamin B₁

Kontakt IUPAC for at få mere detaljerede oplysninger om systematisk navngivning af naturlige produkter og relaterede stoffer (se tillæg I).

1.4 IUPAC-navn kan ikke udledes

Hvis et IUPAC-navn ikke kan udledes for visse stoffer, kan en anden internationalt anerkendt nomenklatur for sådanne stoffer anvendes, f.eks.:

- mineraler og malme, mineralogiske navne
- råoliestoffer
- generiske navne i Colour Index³
- olietilsætningsstoffer
- INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients)⁴
- SDA-navne (Soap and Detergent Association) for overfladeaktive stoffer⁵
- osv.

2 Andre navne

Alle relevante navne og/eller offentlige identifikatorer på alle sprog, hvorunder stoffet markedsføres eller vil blive markedsført i EU (f.eks. handelsnavne), kan medtages i registreringen inden for REACH-rammen. Det omfatter handelsnavne, synonymmer, forkortelser osv.

- <http://www.colour-index.com>, Colour Index International, fjerde udgave online.
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, officielt websted for Personal Care Products Council.
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, officielt websted for American Cleaning Institute (ACI).

3 EF-nummer fra EINECS, ELINCS eller NLP (EF-fortegnelsen)

EF-nummeret, dvs. EINECS-, ELINCS- eller NLP-nummeret, er det officielle nummer på stoffet i Den Europæiske Union. EF-nummeret findes i de officielle publikationer af EINECS, ELINCS og NLP og kan oplyses af Det Europæiske Kemikalieagentur.

EF-nummeret består af 7 cifre af typen X₁X₂X₃-X₄X₅X₆-X₇. Det første ciffer defineres af den fortegnelse, som stoffet tilhører:

Listevisning	Første ciffer i EF-nummer
EINECS	2 eller 3
ELINCS	4
NLP	5

4 CAS-navn og CAS-nummer

Chemical Abstracts Service (CAS), en division af American Chemical Society (ACS), tildeler et CAS-navn og -nummer til alle kemiske stoffer, der registreres i CAS-registreringsdatabasen. Navnene og numrene tildeles i fortløbende rækkefølge til unikke stoffer, der identificeres af CAS-videnskabsfolk. Hvert stof, der er registreret i Chemical Abstracts Service, har et navn i overensstemmelse med CAS-nomenklaturen, som ACS vedtager efter anbefaling fra ACS-udvalget for nomenklatur (se referencer i tillæg I).

4.1 CAS-navn

CAS-navnet er det navn, der tildeles af Chemical Abstract Service, og det er ikke det samme som IUPAC-navnet. CAS-nomenklaturen er baseret på et begrænset sæt kriterier, der ikke altid er tilstrækkeligt til at udlede navnet på et stof. Generelt anbefales det derfor at kontakte Chemical Abstract Service for at få oplyst det korrekte CAS-navn.

De grundlæggende nomenklaturregler er:

- En "hoveddel" af stoffet vælges som overskrift eller overordnet stof.
- Substituenten anføres efter overskriften/det overordnede stof, der betegnes som omvendt rækkefølge.
- Hvis der er flere substituenten, anføres de i alfabetisk rækkefølge (herunder præfikserne):

o-Xylen-3-ol er "Benzene, 1,2-dimethyl, 3-hydroxy"

4.2 CAS-nummer

CAS-numre kan fås ved at kontakte Chemical Abstract Service.

CAS-nummeret består af mindst fem cifre opdelt i tre dele adskilt af bindestreger. Den anden del består altid af to cifre, og den tredje del af ét ciffer.

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

Til kontrol af CAS-numre kan en "kontrolsum" bruges:

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

CAS-nummeret skal være korrekt i henhold til kontrolsummen.

5 Andre identitetskoder

Andre internationalt anerkendte identitetskoder kan også angives, f.eks.:

- toldnummer
- UN-nummer
- nummer i Colour Index

- indfarvningsnummer

6 Molekylformel, strukturformel og SMILES

6.1 Molekylformel

En molekylformel identificerer hver grundstoftype ved dens kemiske symbol og antallet af atomer i ethvert sådant grundstof, som forekommer i et diskret molekyle i stoffet.

Molekylformler skal angives i overensstemmelse med det traditionelle Hill-system og også i overensstemmelse med CAS-systemet, hvis formlen her adskiller sig fra formlen i Hill-systemet.

Ved anvendelse af Hill-metoden kan følgende trin følges:

1. Identificer grundstofferne, og angiv de kemiske symboler.
2. Opstil grundstofferne i korrekt rækkefølge:

- a. Carbonholdige stoffer:

Hvert grundstof angives ved sit kemiske symbol i følgende sekvens:

(1) Carbon

(2) Hydrogen

(3) Andre grundstofsymboler i alfabetisk rækkefølge:

Pentan: C₅H₁₂

Penten: C₅H₁₀

Pentanol: C₅H₁₂O

- b. Ikke-carbonholdige stoffer:

Hvert grundstof anføres i alfabetisk rækkefølge:

Hydrogenchlorid: HCl

3. For hvert grundstof, hvor antallet af atomer er > 1, angives antallet af atomer som nedre indeks til de kemiske symboler.

4. Information, der ikke vedrører hovedstrukturen, indsættes sidst i molekylformlen adskilt af punktum eller komma:

Natriumbenzoat er "C₇H₆O₂, sodium salt"

Kobbersulfatdihydrat er CuO₄S.2H₂O

Hvis Hill-metoden ikke kan anvendes i forbindelse med et specifikt stof, angives molekylformlen på en anden måde, f.eks. som en empirisk formel, en simpel beskrivelse af atomerne og forholdet mellem atomerne, eller som formlen fra Chemical Abstract Service (se kapitel 4 i vejledningen).

6.2 Strukturformel og beskrivelse af krystalstrukturen

En strukturformel bruges til at visualisere molekylernes disposition i stoffet og deres indbyrdes forhold. Strukturformlen skal også angive placeringen af atomer, ioner eller grupper og typen af bindinger mellem dem. Dette omfatter isomerisme, dvs. cis/trans, chiralitet, enantiomerer osv.

Strukturformlen kan angives i forskellige formater: som en molekylformel og/eller som et strukturdiagram.

- Strukturformel som en molekylformel

1. Angiv alle grundstoffer efter gruppe og i den rækkefølge, de forekommer:

n-pentane: CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

2. Angiv hver substituent i parentes direkte efter det atom, den er tilknyttet:

2-methylbutane: CH₃CH(CH₂)CH₂CH₃

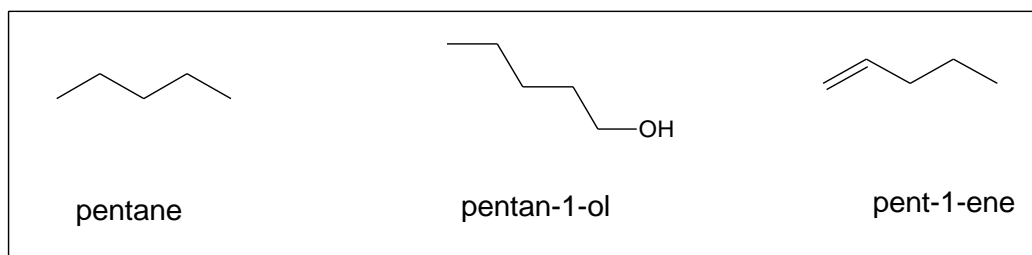
3. Dobbelte eller tredobbelte bindinger angives mellem de berørte grundstofgrupper:

pent-1-ene: CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

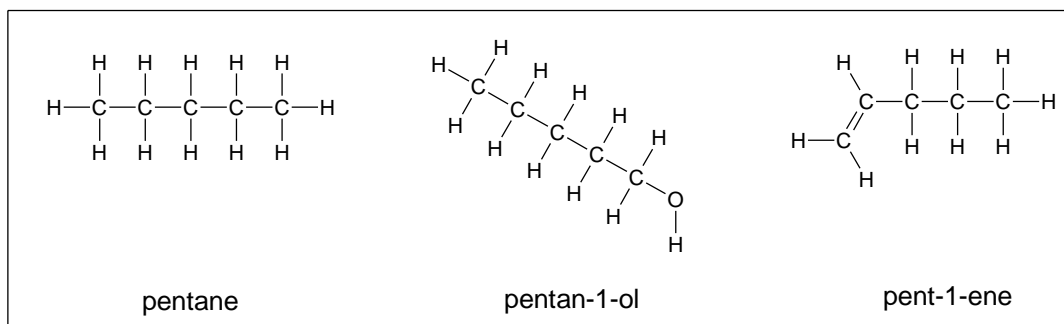
Strukturformel som et strukturdiagram

I et strukturdiagram visualiseres grundstofferne og bindingerne mellem grundstofferne i en to- eller tredimensional figur. Der findes flere metoder:

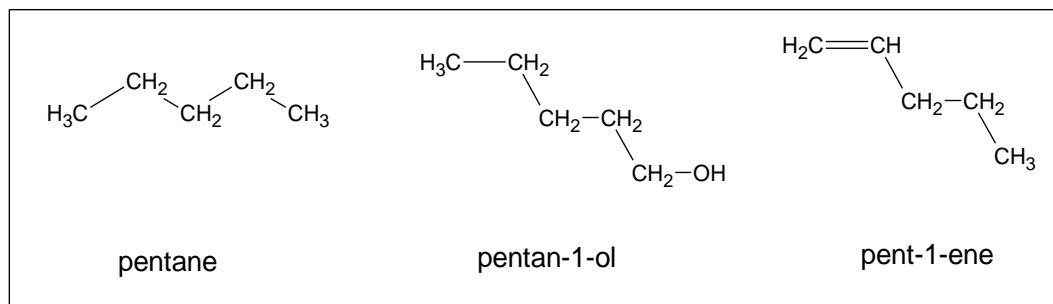
1. Visning af alle ikke-carbonholdige grundstoffer og hydrogen bundet til ikke-carbonholdige grundstoffer.



2. Visning af alle grundstoffer ved navn



3. Visning af carbon og hydrogen som grupper (f.eks. CH₃), alle ikke-carbonholdige grundstoffer og hydrogen, der ikke er bundet til carbon

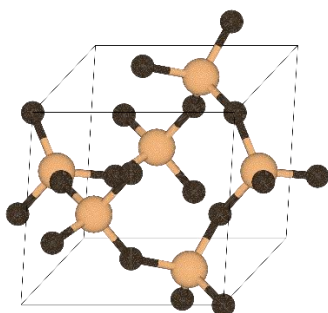


- Strukturformel som en molekylformel:

1. Angiv molekylformlen:

SiO₂

2. Angiv en krystalstruktur for stoffet



3. Angiv mineralogisk og/eller krystallografisk navn baseret på krystalsystem³² og krystalklasse:

α-kvarts [*β*-kvarts] / **krystalsystem**: trigonal - hexagonal, **krystalklasse**: trigonal-trapezohedral 3 2

6.3 SMILES-notation

SMILES er akronym for Simplified Molecular Input Line Entry Specification³³. Det er et kemisk notationssystem, der bruges til at vise en molekylstruktur med en lineær streng af symboler. I standard-SMILES er navnet på et molekyle synonymt med dets struktur: Det viser indirekte en todimensional figur af molekylstrukturen. Eftersom en todimensional kemisk struktur kan tegnes på flere måder, findes der flere korrekte SMILES-notationer for ét molekyle. Udgangspunktet i SMILES er gengivelsen af en valensmodel af et molekyle. Det kan derfor ikke bruges til at beskrive molekyler, der ikke kan gengives af en valensmodel.

SMILES-notationer er sammensat af atomer, angivet ved grundstofsymboler, bindinger,

³² Kubisk/tetragonal/orthorhombisk/rhombohedral (eller trigonal)/hexagonal/monoklin/triklin

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

parenteser, som bruges til at vise forgrening, og tal, der bruges for cykliske strukturer. En SMILES-notation angiver en molekylstruktur, f.eks. en graf med eventuelle chirale indikationer. En SMILES-notation, der kun beskriver strukturen med hensyn til bindinger og atomer, kaldes en generisk SMILES. En SMILES-notation med isotopiske og chirale specifikationer kaldes en isomerisk SMILES.

SMILES-notationen er baseret på en række grundregler:

1. Atomer gengives med deres atomsymboler.
2. Hvert atom, undtagen hydrogen, angives separat.
 - a. Grundstoffer i den "organiske delmængde" B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br og I skrives uden parentes og uden tilknyttet H, så længe antallet af H svarer til den laveste normale valens i overensstemmelse med eksplicite bindinger:

Grundstof i "organisk delmængde"	"Laveste normale valens(er)"
B	3
C	4
N	3 og 5
O	2
P	3 og 5
S	2, 4 og 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Grundstoffer i den "organiske delmængde" angives i parentes, når antallet af H ikke svarer til den laveste normale valens:

Ammoniumkation er NH₄⁺

- c. Andre grundstoffer end grundstofferne i den "organiske delmængde" angives i parentes, og evt. tilknyttet hydrogen vises.
3. Aliphatiske atomer anføres med store bogstaver, og aromatiske atomer anføres med små bogstaver:

benzen er c1ccccc1, og cyclohexan er C1CCCCC1

4. Hydrogen anføres kun i følgende situationer:
 - a. ladet hydrogen, dvs. en proton, [H⁺]

- b. hydrogen bundet til andre hydrogen, dvs. molekylært hydrogen, [H][H]
- c. hydrogen bundet til andet end ét andet atom, f.eks. bindende hydrogen
- d. isotopiske specifikationer for hydrogen, f.eks. deuterium ([2H])
- e. hvis hydrogenet er bundet til et chiralt atom.

5. De fire grundlæggende bindinger vises på følgende måde:

Bindingstype	SMILES-notation
Enkelt	- (visning ikke nødvendig)
Dobbelt	=
Tredobbelt	#
Aromatisk	Små bogstaver

6. Substituer vises i parenteser og umiddelbart efter de atomer, de er tilknyttet:

2-methylbutan er CC(C)CC

- a. Substituer vises altid direkte efter de relevante atomer. De kan ikke efterfølge et symbol for dobbelt eller tredobbelt binding:

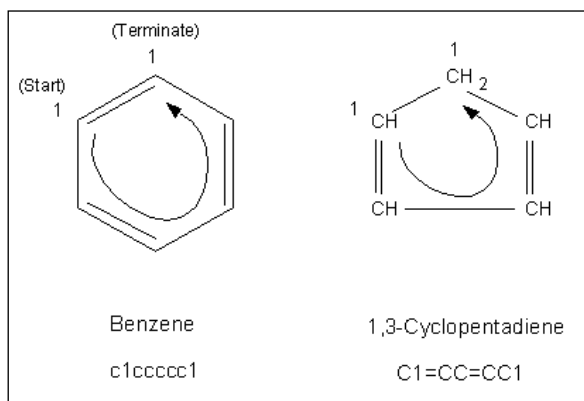
Pentansyre er CCCCC(=O)O

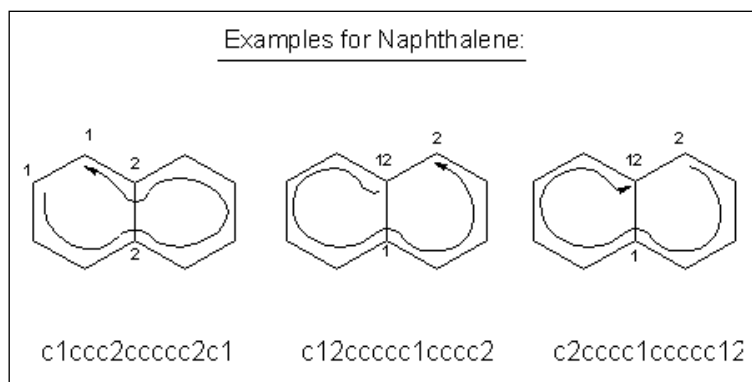
- b. Substituer i substituer tillades:

2-(1-methylethyl)butan er CC(C(C)C)CC

7. For cykliske strukturer bruges tallene 1 til og med 9 til at angive start- og slutatomet for cyklussen.

- a. Det samme tal bruges til at angive start- og slutatomet for hver ring. Start- og slutatomet skal være forbundet med hinanden.
- b. Tal indsættes umiddelbart efter de atomer, der bruges til at angive start- og slutpositionen.
- c. Et start- og slutatom kan tilknyttes to fortløbende tal.





8. Særskilte forbindelser betegnes som individuelle strukturer eller ioner adskilt af en prik ("."). Tilstødende atomer adskilt af en prik (".") er ikke direkte bundet til hinanden, f.eks. ved Van der Waals binding:

Aminopropenhydrochlorid er C=CC(N).HCl

9. Isomer konfiguration angives med skråstreger "\" og "/". Disse symboler angiver den relative retning mellem to isomeriske bindinger. (cis = "/\" , trans = "/" /"). SMILES bruger lokal chiralitet, hvilket betyder, at chiralitet skal specificeres fuldt ud:

cis-1,2-dibromoethen er Br/C=C\Br

trans-1,2-dibromoethen er Br/C=C/Br

10. Enantiomerer eller chiralitet angives med symbolet "@". Symbolet "@" angiver, at de følgende naboer i det chirale atom er angivet mod uret. Hvis symbolet "@@" anvendes, er atomerne angivet med uret. Det chirale atom og "@" vises i parentes:

**2-chloro-2-hydroxypropansyre med
specificeret chiralitet er C[C@](Cl)(O)C(=O)O**

11. Isotopiske specifikationer angives ved at indsætte et tal, der svarer til den samlede atommasse, før atomsymbolet. En atommasse kan kun angives i parentes:

Carbon-13 er [13C], og Oxygen-18 er [18O]

Der findes flere værktøjer (SMILES-generatorer) til at fastlægge SMILES-notationen (se tillæg I).

7 Oplysninger om optisk aktivitet

Optisk aktivitet er asymmetriske stoffers evne til at rotere retningen af plant polariseret lys. Sådanne stoffer og deres spejlbilleder kaldes enantiomerer og har et eller flere chirale centre. Selv om enantiomerers geometriske konfiguration varierer, besidder de identiske kemiske og fysiske egenskaber. Eftersom hver enantiomertype påvirker polariseret lys på forskellig måde, kan optisk aktivitet bruges til at identificere, hvilken enantiomer der er til stede i en prøve, og dermed også stoffets renhed. Rotationens størrelse er en iboende egenskab i molekylet.

Enantiomerer har altid modsatte rotationer: De polariserer lys i samme omfang, men i modsatte retninger. En enantiomerblanding optiske aktivitet angiver derfor forholdet mellem de to enantiomerer. En 50-50 blanding af enantiomerer har en optisk aktivitet på 0.

Den observerede rotation afhænger af koncentrationen, reagensglasets længde, temperaturen og lyskildens bølgelængde.

Optisk aktivitet er derfor den definerende parameter ved identifikation af et asymmetrisk stof, og det er den eneste parameter, der kan bruges til at skelne stoffet fra dets spejlbillede. Den optiske aktivitet for et stof skal derfor angives, når det er hensigtsmæssigt.

Standarden for optisk aktivitet kaldes den specifikke rotation. Den specifikke rotation defineres som den observerede rotation af lys ved 5896 ångstrøm med en strålelængde på 1 dm og ved en prøvekonzentration på 1 g/ml. Den specifikke rotation er den observerede rotation divideret med strålelængden (dm) ganget med koncentrationen (g/ml).

Optisk aktivitet kan måles ved hjælp af flere forskellige metoder. De mest almindelige er:

- optisk rotation, hvor rotationen af planet for polariseringen af en lysstråle, der passerer gennem prøven, måles
- cirkulær dichroisme, hvor en prøves absorption af højre- og venstrepolariseret lys måles.

Hvis stoffet roterer lyset mod højre (med uret), kaldes det højredrejende og betegnes med tegnet "+". Hvis stoffet roterer lyset mod venstre (mod uret), kaldes det venstredrejende og betegnes med tegnet "-".

8 Molekylvægt eller molekylvægtsinterval

Molekylvægten er vægten af et molekyle af et stof udtrykt i atommasseenheder (amu) eller som molmasse (g/mol). Molekylvægten kan beregnes ud fra stoffets molekylformel, idet den er summen af atomvægten for de atomer, der udgør molekylet. For molekyler, som f.eks. visse proteiner eller udefinerede reaktionsblandinger, hvor en enkelt molekylvægt ikke kan bestemmes, kan et molekylvægtsinterval angives.

Der kan benyttes flere metoder til at bestemme molekylvægten af stoffer:

- Til at bestemme molekylvægten af gasstoffer bruges Avogadros lov, som fastsætter, at en given mængde gas indeholder et bestemt antal molekyler af gassen under givne temperatur- og trykforhold.

$$PV = nRT = NkT$$

n = antal mol

R = universel gaskonstant = 8,3145 J/mol K

N = antal molekyler

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

k = R/NA

NA = Avogadros konstant = $6,0221 \times 10^{23}$ /mol

- For væsker og faste stoffer kan molekylvægten bestemmes ved at bestemme deres virkning på et opløsningsmiddels smeltepunkt, kogepunkt, damptryk eller osmotiske tryk.
- Massespektrometri, en meget nøjagtig målemetode.

- For molekyler af komplekse stoffer med høj molekylvægt, f.eks. proteiner eller vira, kan molekylvægten bestemmes ved måling af f.eks. sedimentationshastighed i en ultracentrifuge eller ved brug af lysspredningsfotometri.
- Der findes flere værktøjer, der kan beregne molekylvægten ud fra et strukturdiagram eller en molekylformel for stoffet (se tillæg I).

9 Stoffets sammensætning

For hvert stof skal stoffets sammensætning som en kombination af hovedbestanddelene, tilsætningsstofferne og urenhederne indberettes i overensstemmelse med de regler og kriterier, der er beskrevet i kapitel 4 i denne vejledning.

Hver bestanddel, hvert tilsætningsstof og hver urenhed skal identificeres korrekt ved:

- navn (IUPAC-navn eller, hvis det ikke foreligger, et andet internationalt anerkendt navn)
- CAS-nummer (hvis tilgængeligt)
- EF-nummer (hvis tilgængeligt).
- Alle andre tilgængelige identifikatorer

For hver bestanddel, gruppe af bestanddele, tilsætningsstof eller urenhed skal den typiske koncentration i procent i produktionsbatcherne angives (helst i vægt eller volumen), hvor det er muligt. De angivne værdier skal give 100 % i alt. De øvre og nedre koncentrationsgrænser, som intervallet i det markedsførte stof, skal altid angives.

10 Spektraldata

Spektraldata bruges til at bekræfte den angivne struktur for et stof med én bestanddel eller til at bekræfte, at en reaktionsblanding ikke er et præparat. Der kan bruges forskellige metoder til at generere spektra (ultraviolet-, infrarød-, nuklear magnetisk resonans- eller massespektra). Ikke alle metoder er egnede til alle typer stoffer. Så vidt muligt gives der i vejledningen oplysninger om de relevante spektra, der skal angives for de forskellige typer stoffer (ECB, 2004; ECB, 2005).

For flere af de velkendte metoder skal følgende oplysninger angives i selve spektret eller i bilag:

UV/Vis-spektrum

- stoffets identitet
- opløsningsmiddel og koncentration
- interval
- position (og epsilon-værdier) for hovedpeaks
- virkning af syre
- virkning af alkali.

IR-spektroskopi-spektrum

- stoffets identitet
- medium
- interval
- resultater (angiv hovedpeaks, som er vigtige for identifikationen, f.eks. fortolkning af fingeraftrykksområde).

Nuklear magnetisk resonansspektroskopi-spektrum (NMR)

- stoffets identitet
- kerne og hyppighed
- opløsningsmiddel
- evt. intern eller ekstern reference
- resultater (angiv de signaler, der er vigtige for identifikationen af stoffet, og de signaler, der svarer til opløsningsmidlet og urenhederne)
- for ¹H NMR-spektra angives integrationskurven
- intensiteten af svage NMR-peaks skal øges vertikalt, og komplekse mønstre skal udvides.

Massespektroskopi-spektrum

- stoffets identitet
- accelerationsspænding
- indføringsmetode (direkte indføring, via GC osv.)
- ioniseringstilstand (electron impact, kemisk ionisering, feltdesorption osv.)
- molekylær ion (M)
- væsentlige fragmenter til identifikationen af stoffet
- M/z-værdier eller tildelinger af peaks, der er vigtige for identifikationen af stoffet
- komplekse mønstre bør udvides.

Røntgendiffraktions-massespektroskopi (XRD)-spektrum

- stoffets identitet
- spænding
- strøm
- røntgenkilde og eventuelle bibliografiske henvisninger, der gør det muligt at identificere den eller de krystallinske faser, der findes i stoffet.

Følgende krav er som minimum nødvendige, hvis XRD-metoden bruges til identificering og kvantificering af de krystallinske eller amorfe faser, der findes i stoffet:

- beskrivelse af de anvendte raffineringmetoder og interne standarder
- figure of merit-værdien, der afspejler overensstemmelsen mellem det modellerede diffraktionsmønster og referencediffraktionsmønsteret
- målt mønster samt figure of merit-skalaen (f.eks. 0-1 eller 0-100)

Andre videnskabeligt anerkendte metoder kan også anvendes, hvis de pågældende spektraldata bekræfter stofidentifikationen, f.eks. den interne struktur.

Følgende generelle krav skal opfyldes for at sikre en klar forståelse og/eller fortolkning af spekteret:

- Beskriv forberedelsen af prøven.
- Angiv væsentlige bølgelængder og andre data efter behov.
- Giv yderligere oplysninger, f.eks. spektre for udgangsmaterialer.
- Angiv anvendt opløsningsmiddel og/andre væsentlige detaljer (som nævnt ovenfor) ved bestemte metoder.
- Indgiv tydelige kopier (ikke originaler) med tydeligt markerede skalaer.
- Oplys de anvendte stofkoncentrationer.
- Sørg for, at de mest intense stofrelaterede peaks nærmer sig mærket for fuld skala.

11 Højtryksvæskekromatografi og gaskromatografi

Når det er relevant for stoftypen, skal der fremlægges et kromatogram, som bekræfter sammensætningen. Et kromatogram kan f.eks. bekræfte forekomsten af urenheder, tilsætningsstoffer og bestanddele i en reaktionsblanding. De to bedst kendte metoder til separation og identifikation af blandinger er gaskromatografi (GC) og højtryksvæskekromatografi (HPLC). De to metoder er baseret på interaktionen mellem en mobil fase og en stationær fase, som resulterer i separation af bestanddelene i en blanding.

For GC-/HPLC-kromatogrammer angives følgende oplysninger på selve kromatogrammet eller i bilag (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC

- stoffets identitet
- søjleegenskaber, f.eks. diameter, pakning og længde
- temperatur, herunder evt. temperaturinterval
- sammensætning af den mobile fase, herunder evt. interval
- stoffets koncentrationsinterval
- visualiseringsmetode, f.eks. UV/Vis
- resultater (angiv de hovedpeaks, der er vigtige for identifikationen af stoffet).

GC

- stoffets identitet
- søjleegenskaber, f.eks. diameter, pakning og længde
- temperatur, herunder evt. temperaturinterval
- injektionstemperatur
- bæregas og bæregassens tryk
- stoffets koncentrationsinterval
- visualiseringsmetode, f.eks. MS
- identifikation af peaks
- resultater (angiv de hovedpeaks, der er vigtige for identifikationen af stoffet).

12 Beskrivelse af analysemetoder

I henhold til *bilag VI* til REACH skal registranten beskrive de anvendte analysemetoder og/eller anføre bibliografiske henvisninger til de anvendte metoder til identifikation af stoffet og, hvis relevant, af eventuelle urenheder og tilsætningsstoffer. Disse oplysninger skal være tilstrækkelige til, at metoderne kan reproduceres.

Tillæg III – Identifikation af stoffer og fælles indsendelse af data

Hoveddelen af denne vejledning skitserer de generelle principper, som potentielle registranter skal følge, når de identificerer de specifikke stoffer, som deres juridiske enhed skal registrere. Dette tillæg giver praktisk vejledning til potentielle registranter om, hvordan de skal anvende stofidentifikationsprincipperne, når de i fællesskab definerer identiteten og omfanget af stofidentiteten med henblik på fælles registrering ud fra princippet om "ét stof, én registrering" (OSOR) i REACH. Yderligere oplysninger om de fælles indsendelsesforpligtelser og datadelingsprocessen generelt findes i vejledningen om datadeling på <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

De samme principper for stofidentifikation, som er beskrevet i hoveddelen af vejledningen, gælder selvsagt – ud fra stoftypen – for den ene stofidentitet, som er omfattet af den fælles registrering.

De første dele af artikel 11, stk. 1, og artikel 19, stk. 1, i REACH-forordningen stiller nemlig krav om "fælles indsendelse af data af flere registranter". Mere specifikt kræver disse bestemmelser, at "når det er hensigten, at et stof skal fremstilles i Fællesskabet af en eller flere producenter og/eller importeres af en eller flere importører", skal oplysningerne om stoffets egenskaber og dets klassificering "først indsendes af én registrant, der handler med den eller de andre registranters samtykke (i det følgende benævnt "den ledende registrant")".

Kommissionens gennemførelsesforordning (EU) 2016/9 om fælles indsendelse af data og datadeling bekræfter og konsoliderer forpligtelsen for flere registranter af den samme stofidentitet til at indsende visse oplysninger i fællesskab. I praksis kræver den fælles indsendelse af oplysninger, at de berørte parter bliver enige om afgrænsningen og omfanget af stofidentiteten. Dette kaldes stoffets identitetsprofil eller SIP. Stoffets identitetsprofil forventes at specificere afgrænsningen af det stof, som registranterne er enedes om at dække med de data, der er indsendt i fællesskab. Dette gælder også de registrerede, som for visse oplysninger kan have fravalgt at deltage i den fælles indsendelse.

Det er således en forudsætning for en fælles indsendelse, at registranterne er enige om omfanget af den stofidentitet, som registreringen omfatter. Gennemsigtighed med hensyn til omfanget af denne ene stofidentitet og de data, den henviser til, er central for gennemførelsen. Derfor skal stoffets eller SIP'ens omfang indberettes tydeligt i den ledende registrants dossier på vegne af alle de andre registranter, mens alle registranter indberetter deres oplysninger om sammensætningen individuelt.

Et enkelt illustrativt eksempel på en metode til at fastlægge stofidentitetsprofilen for kemikalier, der fremstilles/importeres i EU af individuelle registranter, er vist skematisk i

Figur 2 nedenfor. Eksemplet illustrerer, hvordan man identificerer det stof, der skal registreres, samler de forskellige sammensætninger, genererer dataene og til sidst indsender dem i IUCLID-format i et registreringsdossier. Eksemplet er for et simpelt, veldefineret stof med én bestanddel. For mere komplekse stoffer kan processen med at definere stofidentitetsprofilen omfatte gentagelser mellem trin 3 og 5 i figuren.

Under drøftelserne mellem potentielle registranter kan SIP-dokumentationen f.eks. være et Word-dokument eller et Excel-ark, som indeholder de aftalte oplysninger, og som gøres tilgængeligt for alle medlemmer og potentielle medlemmer. Nogle brancheforeninger stiller skabeloner til rådighed til SIP-dokumentationen, og disse er blevet anvendt af

mange registranter (f.eks. Cefic-skabelonen³⁴). Andre har blot dokumenteret de relevante oplysninger i et Word-dokument eller på websiden for et konsortium, der er oprettet for at arbejde på registreringen af det pågældende stof.

2. Definition af et stofs identitet og omfang svarende til de data, der indsendes ved registrering.

De trin, som flere potentielle registranter kan følge for at definere den stofidentitet, der svarer til de data, de indsender i fællesskab, er vist skematisk i eksemplet i

Figur 2 (trin 1 til 4) for enkle, veldefinerede stoffer.

Hver enkelt potentiel registrant finder frem til sine forpligtelser for det, han fremstiller/importerer, baseret på definitionen af stof i artikel 3, stk. 1, og ved at anvende principperne for stofidentifikation i hoveddelen af denne vejledning (trin 1 og 2 i

Figur 2).

Hver potentiel registrant kan derefter tjekke, om andre potentielle registranter er nået frem til det samme "navn og andre identifikatorer" (trin 3). Fra dette udgangspunkt kan de potentielle registranter i fællesskab anvende principperne i hoveddelen af denne vejledning til at definere grænserne for stoffets identitet svarende til de data, de indsender i fællesskab, dvs. stoffets identitetsprofil (trin 4).

Denne stofidentitetsprofil beskriver på en generisk måde afgrænsningen af stoffet i forhold til oplysningerne om dets sammensætning (herunder alle andre relevante parametre såsom morfologi, f.eks. fysisk form, form), dets navn og andre identifikatorer, som de klassificerings- og faredata, der indsendes i fællesskab, er relevante for. For at undgå at udelukke konkurrenter fra den fælles indsendelse bør definitionen af SIP'en ikke være alt for konservativ.

Denne SIP fastlægger den iboende forbindelse mellem stofidentiteten og de faredata, der skal indsendes i fællesskab. Hvis den fastlægges tidligt nok, kan det lette stadiet med informationsgenerering/-indsamling under processen med at opfylde registreringsforpligtelser (beskrevet i Vejledning om informationskrav og kemikaliesikkerhedsvurdering, trin 5 i

Figur 2 nedenfor) med henblik på at sikre, at de genererede eller indsamlede data dækker hele stofidentiteten.

Som beskrevet i afsnit 4.2.3 og 4.3 i hoveddelen af vejledningen, anvender potentielle registranter for mere komplekse stoffer normalt yderligere parametre og/eller deskriptorer for oplysninger om sammensætning (f.eks. beskrivelse af kilde/proces) i trin 1-3, og de aftalte parametre kan derefter indsættes i SIP'en (trin 4). I nogle tilfælde kan forbindelsen mellem afgrænsningen af stofidentiteten og de faredata, der indsendes i fællesskab, endda først blive helt klar, når en del af eller alle de tilgængelige faredata er blevet indsamlet. Trin 3-5 skal måske gentages efter behov afhængigt af kompleksiteten af stofidentiteten og de indsamlede data i trin 5, f.eks. når visse sammensætninger indeholder bestanddele, der udløser klassificering og mærkning og/eller PBT-vurdering. SIP'en kan omfatte mere end én sammensætningsprofil for på passende vis at beskrive afgrænsningen af

³⁴ SIP'en blev oprindeligt beskrevet i Cefics "Guidance for Lead Registrants", som findes på <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Eksempler på SIP'er, der er udarbejdet af registranter ved hjælp af denne skabelon, findes f.eks. på webstedet REACH centrum <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

stofidentiteten.

SIP'en skal indeholde generiske oplysninger, der gør det muligt at bestemme afgrænsningen af stofidentiteten svarende til de data, der indsendes i fællesskab:

- stoffets navn
- andre identifikatorer (f.eks. CAS, EF, molekyl- og strukturoplysninger, beskrivelse, hvis relevant), der er dækket af alle de deltagende registranter af den pågældende stofidentitet
- oplysninger om sammensætning
 - identiteten af de bestanddele, der er relevante for stofidentifikationen, og de respektive koncentrationsintervaller
 - generisk liste over identiteten af de stabilisatorer, der er relevante for stofidentifikationen (og respektive koncentrationsområder, hvis det er relevant)
 - generisk liste over de yderligere parametre, der er relevante for stoftypen (f.eks. kildeprocesdeskriptorer for visse UVCB-stoffer)

Det er vigtigt, at parametrene til afgrænsning af den stofidentitet, der er omfattet af den fælles indsendelse, aftales mellem alle de fælles registranter og er klart dokumenteret i SIP'en. Derfor kan det være nødvendigt at ændre eller udvide en SIP efter anmodning fra en ny potentiel registrant, hvis de er enige om, at en del af eller alle de data, der er indsendt i fællesskab, også er relevante for det stof, der fremstilles eller importeres af denne registrant.

SIP'en må ikke resultere i udveksling af fortrolige forretningsoplysninger mellem registranter eller videregivelse af forretningsoplysninger fra den fælles indsendelse til tredjeparter. Hvis potentielt fortrolige forretningsoplysninger skal deles af de fælles registranter for klart at definere SIP'en, kan de anvende en betroet part, som beskrevet i vejledningen om datadeling.

3. Praktisk vejledning om dokumentation af stoffets identitetsprofil

De generelle principper for stofidentifikation for veldefinerede stoffer og UVCB-stoffer er beskrevet i hoveddelen af vejledningen. Nedenfor findes en række praktiske retningslinjer for, hvordan disse principper skal anvendes i fællesskab. Ifølge hoveddelen af vejledningen er det muligt at gøre undtagelser fra de generelle principper. Sådanne undtagelser kræver, at registranterne kan påvise den iboende forbindelse mellem stoffets identitet og de fælles indsendte faredata.

3.1 Veldefinerede stoffer

For et veldefineret stof skal princippet om ≥ 80 vægtprocent ved identifikation af stoffer med én bestanddel og princippet om < 80 %, ≥ 10 % ved identifikation af stoffer med flere bestanddele følges ved definitionen af hovedbestanddel(e) og deres koncentrationsintervaller og urenheder. Dette gælder for hver enkelt registrant og for alle fælles registranter ved fastlæggelsen af SIP'en. Navnlig skal de urenhedsprofiler, der er opnået enighed om i SIP'en, indberettes. Hvis SIP'en omfatter specifikke urenheder, som vil påvirke klassificeringen og mærkningen og/eller PBT-vurderingen, vil de registranter, der er berørt af disse urenheder, skulle tage hensyn til disse i dataindsamlingsfasen (trin 5). De relevante oplysninger i bilag VII-XI kan indsendes i fællesskab eller indsendes særskilt af hver af dem i overensstemmelse med REACH-forordningens artikel 11, stk. 3 (de såkaldte fravalgsmuligheder). De koncentrationsværdier, der skal indberettes, bør tage højde for koncentrationsintervallet på tværs af den fælles indsendelse.

For stoffer, hvor yderligere parametre er nødvendige for at angive stofidentifikationen entydigt, skal hver registrant følge de principper, der er beskrevet i kapitel 4.2.3 i hoveddelen af denne vejledning. Det bør overvejes, om variabilitet i disse parametre vil medføre, at klassificeringen eller de faredata, der indsendes i fællesskab, om nødvendigt skal tilpasses. Med henblik på at bestemme SIP'en i forbindelse med fælles indsendelse kan lignende overvejelser gøres. For eksempel kan det være nødvendigt at inkludere de parametre i stofidentitetsprofilen (f.eks. fysisk form og/eller morfologiske parametre som porøsitet, partikelstørrelse, partikelform), som kan påvirke egenskaber, der er relevante for at bestemme fareprofilen (f.eks. opløselighed, reaktivitet, indåndingstoksicitet osv.). Hvis dette er tilfældet, skal de generiske intervaller for disse parametre, der er omfattet af SIP'en, angives på en gennemsigtig måde (f.eks. partikelstørrelsesintervaller, der gælder for alle registranter, og en liste over deres form(er) og en liste over overfladekemier). Dette sikrer, at de faredata, der indsendes i fællesskab i forbindelse med SIP'en, er fuldstændige.

På samme måde kan forskelle i den krystallinske fase af uorganiske kemikalier give anledning til forskellige overvejelser om fareprofiler, der er specifikke for disse faser (f.eks. kvarts, kristabolt, amorf silica). Under hensyntagen til de mulige forskelle i egenskaberne ved de forskellige faser er det op til de potentielle registranter af disse stoffer at overveje, om de skal indsende én fælles registrering, der dækker alle faser, herunder faredata, der er specifikke for forskellige faser, eller om de skal indsende forskellige fælles registreringer for forskellige faser (dvs. forskellige stofidentiteter). I begge tilfælde skal de omfattede faser opføres i SIP'en, og de relevante data i bilag VII-XI skal omfatte alle faser, der er omfattet af registreringen, således at det sikres, at dataene dækker hele SIP'en.

Det skal bemærkes, at sammensætninger kan have forskellige urenheds- og/eller fareprofiler, og at disse forskelle ikke nødvendigvis betyder, at sammensætningerne ikke kan registreres i den samme registrering.

3.2 UVCB-stoffer

For UVCB-stoffer kan identifikationen være mere udfordrende, og gennemsigtig dokumentation er derfor meget nyttig for at kunne nå til enighed om stoffets identitet til den fælles registrering. Hver potentiel registrant skal overveje rådene i hoveddelen af denne vejledning individuelt og derefter anvende de samme principper i fællesskab. Bemærk, at aggregeringen af koncentrationsintervaller i SIP'en kan føre til en profil med meget brede koncentrationsintervaller, muligvis op til et punkt, hvor det ikke længere kan betragtes som ét stof.

Som beskrevet i hoveddelen af vejledningen er grundlaget for identifikationen af nogle UVCB-stoffer den kilde og proces, der anvendes ved fremstillingen af dem, og ikke direkte identiteten og koncentrationsintervallerne for deres bestanddele. I disse tilfælde kan andre deskriptorer fungere som proxyer for bestanddelens identitet og deres respektive koncentrationsintervaller. Potentielle registranter kan beskrive fremstillingsprocessen hvad angår kilde og proces i det omfang, det er nødvendigt for at identificere stoffet. Beskrivelsen kan omfatte eventuelle yderligere parametre/karakteristika, som registranterne beslutter er relevante for deres stofidentitet (se f.eks. Tabel 5 i hoveddelen af vejledningen). I forbindelse med den fælles registrering deles beskrivelserne kun i det omfang, det er nødvendigt for at blive enige om afgrænsningen af UVCB-stofidentiteten til registreringen. Potentielle registranter kan følge de principper, der er skitseret i hoveddelen af vejledningen, både individuelt og derefter i fællesskab. SIP'en resulterer således i en generisk rapportering af kilde- og procesparametre, så den dækker det fulde omfang af de enkelte registranternes sammensætninger. Dette er vist skematisk i Figur 3.

For stoffer, der er identificeret på grundlag af kilde og proces, som beskrevet i hoveddelen af vejledningen, vil enhver væsentlig ændring af kilden eller processen sandsynligvis føre til en anden stofidentitet, der bør registreres separat. Afvigelse fra dette princip vil betyde, at registranterne kan påvise, at hver proces-/kildesammensætning giver sammensætninger, der kan behandles i samme fælles registrering. Mindre variationer i udgangsmaterialer og proces- og/eller procesbetingelser kan tages i betragtning i SIP'en. Registranterne skal være enige om, at hver proces/kilde-kombination giver sammensætninger, der ligner hinanden så meget, at det giver mening at samle dem under én stofidentitet, og sikre, at faredataene er passende for hele variationsområdet i SIP'en. Registranterne skal nærmere bestemt kunne begrunde, at det faredatasæt, der er indsendt i fællesskab, er relevant for alle disse sammensætninger eller er tilpasset, hvor det er relevant, med oplysninger, der er indsendt separat for specifikke sammensætninger i henhold til artikel 11, stk. 3, i REACH (fravalg).

For at påvise datasættets relevans for hver kombination af proces/kilde skal disse kombinationer dokumenteres på en gennemsigtig måde i SIP'en for at dokumentere de medtagelses-/udelukkelseskriterier, der anvendes for nuværende og fremtidige fælles registranter.

For andre typer UVCB-stoffer (se kapitel 4.3.2 i hoveddelen af vejledningen) kan de potentielle registranter anvende en kombination af sammensætningsdeskriptorer og yderligere deskriptorer, alt efter hvad der er relevant. For nogle oleokemikalier varierer sammensætningen f.eks. på grund af variabiliteten i alkylkædeintervallet for bestanddelene, og alkylkædeintervallet kan være en yderligere deskriptor, der anvendes til identifikation. Den fremgangsmåde, som SIEF'et valgte, skal dokumenteres på en gennemsigtig måde i deres SIP.

3.3 Stofidentitetsprofil

Alle registranter, der indsender oplysninger i fællesskab, er ansvarlige for at enses om de nødvendige parametre til stofidentifikationen og for at dokumentere dem på en gennemsigtig måde i den tilhørende SIP. Hvis de i fællesskab afviger eller gør undtagelser fra almindelige stofidentitetsprincipper, skal det dokumenteres på en gennemsigtig måde. Da SIP'en dokumenterer medtagelses-/udelukkelseskriterierne, skal SIEF'et sikre, at de anvendte kriterier er gennemsigtige, og at de relevante indsamlede/genererede data i bilag VII-XI påviseligt dækker alle aftalte sammensætningsprofiler.

Hvis potentielle registranter individuelt medtager stabiliserende tilsætningsstoffer i forbindelse med artikel 3, stk. 1, i deres stofidentitetsprofil, skal der være enighed om deres identitet og koncentrationsintervaller, og de skal angives på en gennemsigtig måde i SIP'en.

I dataindsamlingsfasen skal relevansen af det eller de testmaterialer, der bruges til at generere/indsamle data for at opfylde informationskravene i bilag VII-XI, overvejes. Begrundelsen for konklusionerne om deres repræsentativitet for de sammensætninger, der er omfattet af SIP'en, skal dokumenteres og inkluderes i det tekniske dossier. Dette vil navnlig være relevant for komplekse stofidentiteter, der dækker brede sammensætningsprofiler.

De potentielle registranter kan under dataindsamlingen bestemme, at deres SIP er for bred, og at det ikke er egnet til fælles indsendelse af fareoplysninger, der er repræsentative for den pågældende stofidentitet. I så fald kan de potentielle registranter

beslutte at opdele SIEF'et og behandle to eller flere stoffer hver for sig³⁵. Hvert stof vil så have sin egen SIP og sin egen fælles indsendelse af fareoplysninger, der skal være specifikt repræsentative for netop den stofidentitet. Årsagerne til, at visse fareoplysninger ikke var repræsentative for visse stofidentitetsparametre, skal dokumenteres på en gennemsigtig måde i SIP'en for hver separat registrering. De respektive potentielle registranter kan også på dette tidspunkt bestemme, at sammensætningsprofilerne skal præciseres yderligere på grundlag af de bestanddele og/eller urenheder, der udløser klassificering og mærkning, PBT-vurdering osv.

Potentielle registranter, der har til hensigt at slutte sig til andre potentielle registranter, som allerede har udarbejdet en SIP, der endnu ikke er indsendt til registrering, skal undersøge, om deres oplysninger om stoffets identitet ligger inden for SIP'ens grænser. Hvis det ikke er tilfældet, skal de drøfte og aftale med potentielle registranter, om det er nødvendigt enten at udvide profilens omfang til at omfatte det nye medlem, eller enes om, at det ikke ligger inden for omfanget.

SIP'en skal tilpasses, hvis det stof, der skal registreres af den potentielle registrant, har specifikke stofidentitetsparametre, der kan ændre repræsentativiteten af den fareinformation, der indsendes i fællesskab, og derfor kræver en specifik begrundelse (f.eks. en specifik urenhed, et andet sammensætningsforhold, en anden fase, en anden partikelstørrelse osv.) Af hensyn til gennemsigtigheden skal denne parameter specificeres i stofidentifikationsprofilen.

I enkelte tilfælde kan de potentielle og eksisterende registranter aftale, at de faredata, der er indsendt i fællesskab, grundlæggende ikke er repræsentative for den potentielle registrants stof på grund af afvigende parametre for stofidentitet, der ikke ligger inden for de vedtagne SIP-grænser. I så fald skal den potentielle registrant indsende en separat registrering enten sammen med andre registranter med en stofidentitet, der omfatter denne parameter, eller individuelt, hvis der ikke er andre registranter af samme stofidentitet.

4. Indberetning af stoffets identitetsprofil i registreringsdossieret

Når de potentielle registranter har indsamlet/genereret alle de nødvendige bilag VII-XI-data for deres stof (dvs. trin 5 i

Figur 2), er datapakken klar til at blive indsendt i IUCLID-format i dossierer til agenturet (dvs. trin 6 i

Figur 2). For at indsende SIP'en i IUCLID-format anføres navnet og andre identifikatorer, oplysninger om sammensætningen og andre parametre, alt efter hvad der er relevant, i IUCLID's afsnit 1.1 og 1.2.

Stofidentitetsprofil	Angivet i EUCLID
Navn og andre identifikatorer	Afsnit 1.1 i alle dossierer
oplysninger om sammensætning og andre	Afsnit 1.2 i den ledende registrants

³⁵ Betragtninger om EINECS' rolle i forbindelse med fastlæggelse af stofidentitet i henhold til REACH findes i CARACAL-dokumentet, der blev vedtaget på det 4. møde mellem de kompetente myndigheder for REACH og CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 "Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)".

parametre, alt efter hvad der er relevant	dossier
---	---------

SIP-navnet og andre identifikatorer angives i afsnit 1.1 i alle dossierer. Den ledende registrant angiver oplysningerne om sammensætning fra SIP'en og andre parametre, som er relevante, i dossierets afsnit 1.2 i form af en afgrænsning af stoffets sammensætning ("boundary composition of the substance")³⁶. Den ledende registrant skal også indsende alle relevante bilag VII-XI-data i afsnit 4-14 (i mangel af begrundede fravalg for et eller flere informationskrav) på vegne af alle registranter.

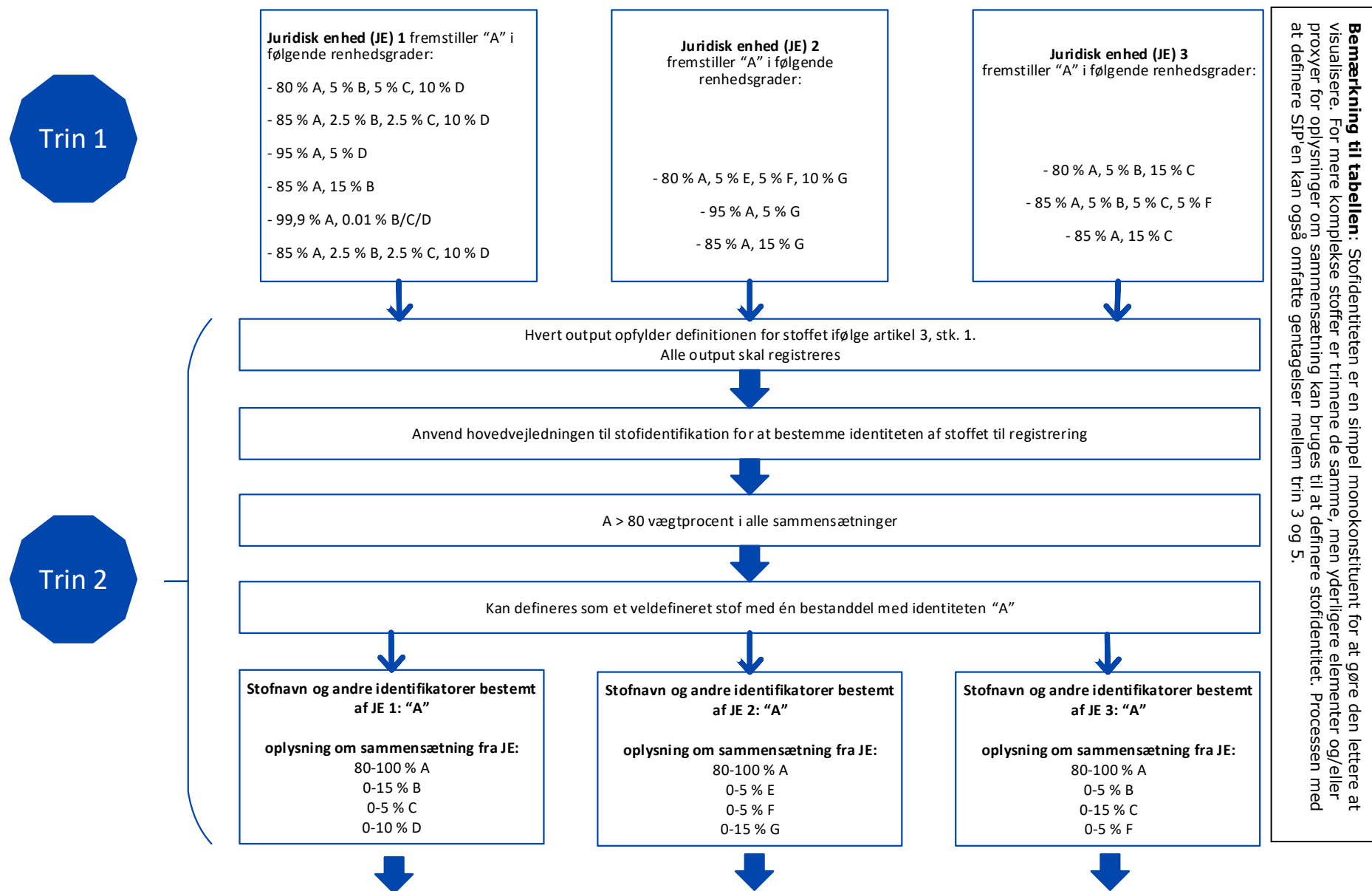
Hver registrant (herunder den ledende registrant) angiver sin egen juridiske enheds oplysninger om sammensætningen af det stof, han specifikt fremstiller eller importerer, i afsnit 1.2 i sit eget dossier. Det vil sige, at den ledende registrant både skal angive sammensætningsoplysninger for SIP'en og sin for sin egen juridiske enhed i afsnit 1.2 i sit dossier, mens alle andre registranter blot angiver deres egne specifikke sammensætningsoplysninger. Hver standardregistrering skal også indeholde de relevante analyseoplysninger i afsnit 1.4 i IUCLID.

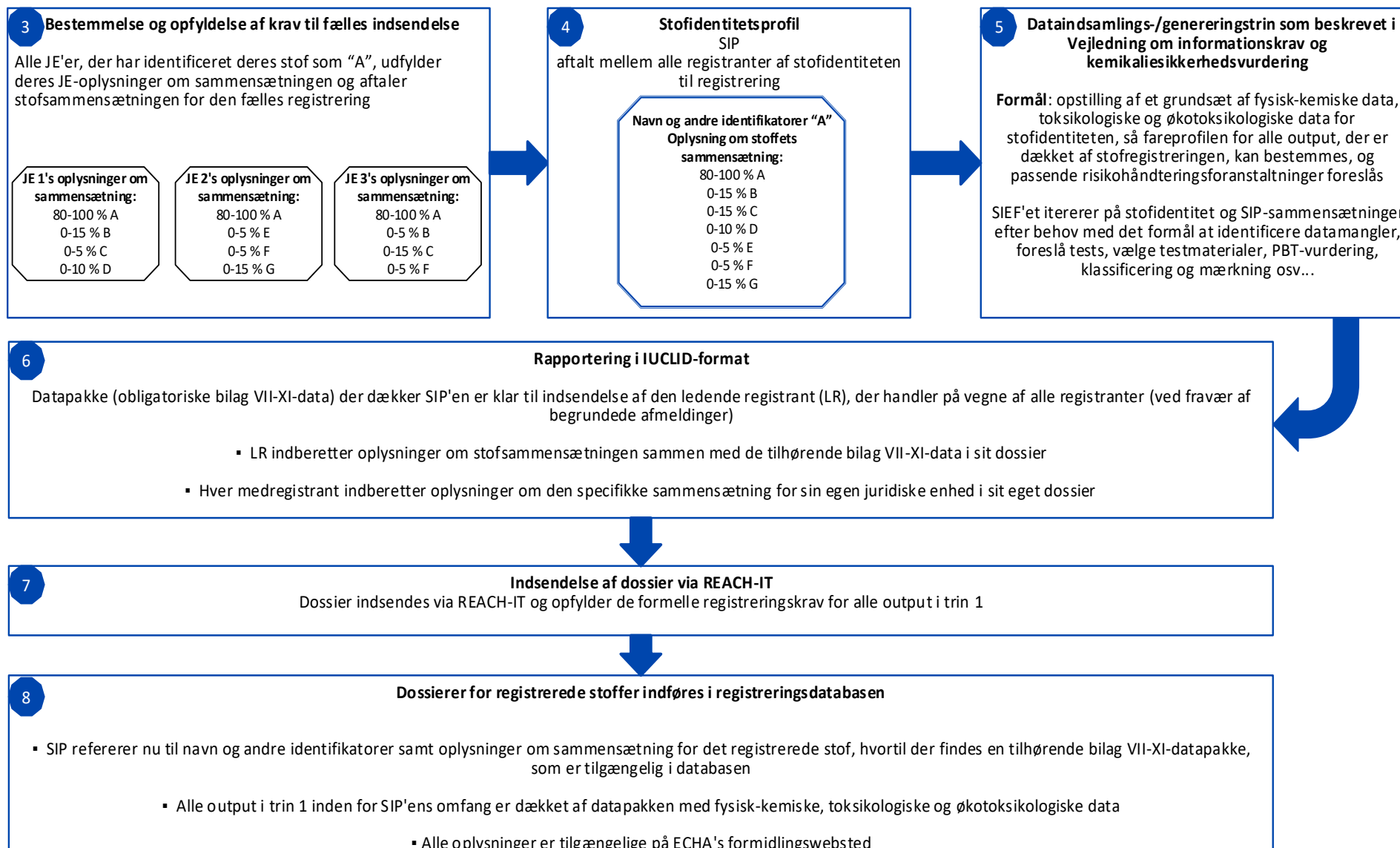
Hver registrant skal påvise, at oplysningerne om sammensætningen for de stoffer, vedkommende specifikt fremstiller eller importerer, både er dækket af SIP'en (under afgrænsningen af stoffets sammensætning) og de bilag VII-XI-data, der er indsendt i den ledende registrants dossier (når der ikke er begrundede fravalg).

I IUCLID-manualerne findes der tekniske anvisninger i, hvordan man angiver sammensætningsoplysninger i IUCLID-format <http://echa.europa.eu/manuals>

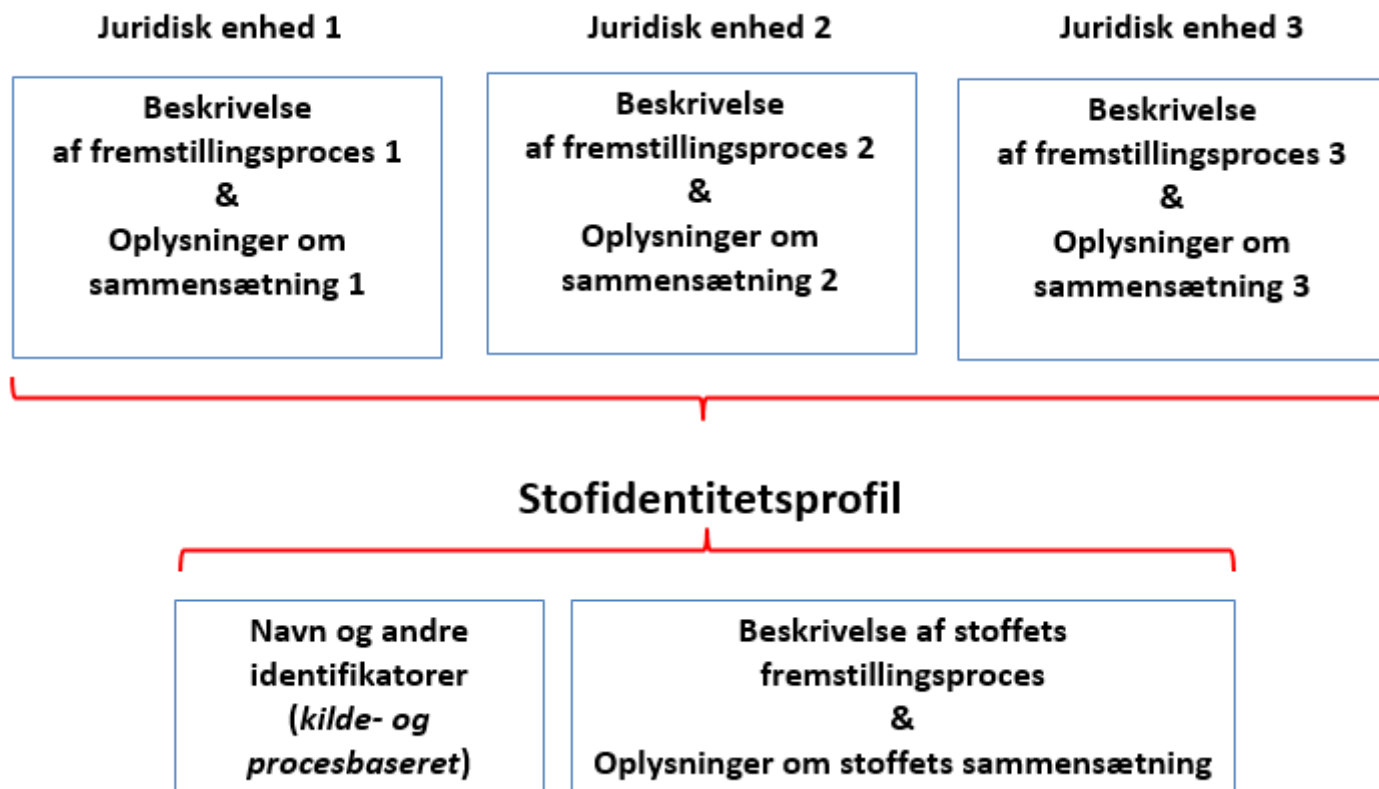
Figur 2 (næste side): En skematisk oversigt over de skridt, som potentielle registranter tager, fra at fastlægge deres registreringsforpligtelser (1) til at definere deres SIP for deres ene stofidentitet (4) og i sidste ende indsende deres registreringer som led i den formelle opfyldelse af forpligtelserne til at registrere deres stoffer (8).

³⁶ Der gives nærmere instrukser i, hvordan man angiver afgrænsningen af stoffets sammensætning, i manualen "Udarbejdelse af registrerings- og PPORD-dossierer", som findes på <http://echa.europa.eu/manuals>.





Figur 3: Skematisk visning af definitionen af en SIP (trin 4 i figur 2) for et stof af UVCB-typen, der er identificeret ud fra kilde- og procesdeskriptorer fra individuelle juridiske enheders kilde- og procesbeskrivelser.



**DET EUROPÆISKE KEMIKALIEAGENTUR
P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI, FINLAND
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://echa.europa.eu)**