

ΚΑΘΟΔΗΓΗΣΗ

Καθοδήγηση σχετικά με τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία ουσιών δυνάμει των κανονισμών REACH και CLP

Δεκέμβριος 2023
Έκδοση 3.0



ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΗ ΝΟΜΙΚΟΥ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟΥ

Σκοπός του παρόντος εγγράφου είναι να βοηθήσει τους χρήστες να συμμορφωθούν με τις υποχρεώσεις τους δυνάμει των κανονισμών REACH και CLP. Ωστόσο, υπενθυμίζεται στους χρήστες ότι τα κείμενα των κανονισμών REACH και CLP είναι η μόνη αυθεντική νομική αναφορά και ότι οι πληροφορίες στο παρόν έγγραφο δεν συνιστούν νομική συμβουλή. Ο χρήστης έχει την αποκλειστική ευθύνη για τη χρήση των πληροφοριών. Ο Ευρωπαϊκός Οργανισμός Χημικών Προϊόντων δεν φέρει καμία ευθύνη όσον αφορά οποιαδήποτε ενδεχόμενη χρήση των πληροφοριών που περιέχονται στο παρόν έγγραφο.

Καθοδήγηση σχετικά με τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία ουσιών δυνάμει των κανονισμών REACH και CLP

Κωδ. αναφοράς: ECHA-23-H-07-EL
Κατηγορία Αριθμός: ED-09-23-444-EL-N
ISBN: 978-92-9468-300-7
DOI: 10.2823/559986
Ημερ. έκδοσης: Δεκέμβριος 2023
Γλώσσα: EL

© Ευρωπαϊκός Οργανισμός Χημικών Προϊόντων, 2023
Εξώφυλλο © Ευρωπαϊκός Οργανισμός Χημικών Προϊόντων

Εάν έχετε ερωτήσεις ή παρατηρήσεις σχετικά με το παρόν έγγραφο, μπορείτε να τις υποβάλετε χρησιμοποιώντας το έντυπο αίτησης πληροφοριών (παραθέτοντας τον κωδικό αναφοράς και την ημερομηνία έκδοσης). Το έντυπο αίτησης πληροφοριών διατίθεται στη σελίδα επικοινωνίας του δικτυακού τόπου του ECHA, στη διεύθυνση:

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

Ευρωπαϊκός Οργανισμός Χημικών Προϊόντων

Ταχυδρομική διεύθυνση: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Φινλανδία
Διεύθυνση: Telakkakatu 6, 00150, Helsinki, Φινλανδία

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Το παρόν έγγραφο περιγράφει τον τρόπο προσδιορισμού και ονοματοδοσίας μιας ουσίας δυνάμει των κανονισμών REACH και CLP. Αποτελεί μέρος σειράς εγγράφων καθοδήγησης των οποίων στόχος είναι να συνδράμουν όλους τους ενδιαφερόμενους φορείς κατά την προετοιμασία για την εκπλήρωση των υποχρεώσεών τους βάσει των κανονισμών REACH και CLP. Τα εν λόγω έγγραφα παρέχουν λεπτομερή καθοδήγηση σε σειρά σημαντικών διαδικασιών των κανονισμών REACH και CLP, καθώς και ορισμένες ειδικές επιστημονικές ή/και τεχνικές μεθόδους που πρέπει να χρησιμοποιεί ο κλάδος ή οι αρχές βάσει των εν λόγω κανονισμών.

Τα εν λόγω έγγραφα καθοδήγησης καταρτίστηκαν και εξετάστηκαν στο πλαίσιο των σχεδίων υλοποίησης του REACH (RIP), υπό την αιγίδα των υπηρεσιών της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, με συμμετοχή όλων των ενδιαφερόμενων φορέων: κράτη μέλη, κλάδος και μη κυβερνητικοί οργανισμοί. Τα εν λόγω έγγραφα καθοδήγησης είναι διαθέσιμα μέσω του διαδικτυακού τόπου του Ευρωπαϊκού Οργανισμού Χημικών Προϊόντων (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Περισσότερα έγγραφα καθοδήγησης θα δημοσιευτούν στον συγκεκριμένο δικτυακό τόπο όταν θα έχουν ολοκληρωθεί ή επικαιροποιηθεί.

ΙΣΤΟΡΙΚΟ ΕΓΓΡΑΦΟΥ

Έκδοση	Παρατήρηση	Ημερομηνία
Έκδοση 1	Πρώτη έκδοση	Ιούνιος 2007
Έκδοση 1.1	<p>Διορθωτικό στα εξής:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Προσθήκη παραπομπής στον κανονισμό CLP [κανονισμός (ΕΚ) αριθ. 1272/2008 της 16ης Δεκεμβρίου 2008] στον τίτλο του εγγράφου και στους τίτλους των ενότητων. - Προσθήκη επιπλέον κείμενου ώστε να διασαφηνιστεί το πεδίο εφαρμογής του εγγράφου καθοδήγησης. Αφαίρεση πλεονάζοντος κειμένου σε ολόκληρο το έγγραφο. - Συμπερίληψη παραπομπών στον κανονισμό CLP σε ολόκληρο το κείμενο, όπως αρμόζει. - Αντικατάσταση του όρου «TGD» με τον όρο «έγγραφο καθοδήγησης» σε ολόκληρο το έγγραφο. - Αντικατάσταση του όρου «παρασκεύασμα» με τον όρο «μείγμα» σε ολόκληρο το έγγραφο. - Αντικατάσταση του όρου «στοιχείο» με τον όρο «σημείο» σε ολόκληρο το έγγραφο. - Αντικατάσταση του όρου «προκαταχώριση» με τον όρο «(καθυστερημένη) προκαταχώριση» σε ολόκληρο το έγγραφο. - Εισαγωγή των αρκτικόλεξων AAS και CLP και αφαίρεση των αρκτικόλεξων RIP και TGD. - Τροποποίηση των περιγραφών του κράματος, του ευρετηρίου ΕΚ και του IUCLID. Εισαγωγή των ορισμών του αριθμού ΕΚ, του αριθμού καταλόγου, του μείγματος και της κοινοποιημένης ουσίας. Διαγραφή του ορισμού του «παρασκευάσματος». - Αναθεώρηση του σημείου 3.2 ώστε να διασαφηνιστεί το περιεχόμενο. - Αναθεώρηση του σημείου 3.3 ώστε να διασαφηνιστεί το περιεχόμενο σε ό,τι αφορά τις υποχρεώσεις βάσει του κανονισμού CLP. 	Νοέμβριος 2011 (μόνο στην αγγλική γλώσσα)

	<ul style="list-style-type: none">- Αλλαγή στο σημείο 4.2.2.1 του τρόπου παρουσίασης των συστατικών από ποσοστό συγκέντρωσης σε αλφαβητική σειρά, ούτως ώστε να μην είναι εφικτή η συναγωγή της σχετικής σύνθεσης από τη σειρά του καταλόγου.- Αντικατάσταση στο σημείο 4.2.3.1 του όρου «πλέγμα» με τον όρο «κρύσταλλος».- Αναθεώρηση του σημείου 4.3.1.2.3 ώστε να διασαφηνιστεί το περιεχόμενο.- Συμπερίληψη στο σημείο 5 παραπομπής στο Εγχειρίδιο υποβολής δεδομένων, Μέρος 18 «Αναφορά της ταυτότητας ουσίας στο IUCLID 5 για καταχώριση δυνάμει του κανονισμού REACH».- Αναθεώρηση του σημείου 5 ώστε να διασαφηνιστεί το περιεχόμενο.- Αντικατάσταση στο σημείο 6 της περιγραφής της προκαταχώρισης με την περιγραφή της (καθυστερημένης) προκαταχώρισης.- Επικαιροποίηση των κατεστραμμένων υπερσυνδέσμων στο παράρτημα 1.- Διαγραφή του σημείου 4.3 του παραρτήματος 2 δεδομένου ότι το περιεχόμενό του διατίθεται στον σχετικό δικτυακό τόπο.	
Έκδοση 1.2	<p>Διορθωτικό</p> <p>Ο ορισμός της «σταδιακά εισαγόμενης ουσίας» ευθυγραμμίζεται με τον ορισμό στον κανονισμό (ΕΚ) αριθ. 1907/2006, όπως εισάγεται με τον κανονισμό (ΕΚ) αριθ. 1354/2007 του Συμβουλίου και με το διορθωτικό, ΕΕ L 36 της 5.2.2009, σ. 84 (1907/2006). Σημειώνεται ότι οι αλλαγές στην έκδοση 1.1 και 1.2 ενοποιούνται σε μία ενιαία μεταφρασμένη έκδοση 1.2 για όλες τις γλώσσες πέραν της αγγλικής.</p>	Μάρτιος 2012
Έκδοση 1.3	<p>Διορθωτικό</p> <p>Προστέθηκαν οι δύο συντακτικοί τύποι που έλειπαν στην ενότητα 7.6.</p>	Φεβρουάριος 2014
Έκδοση 1.4	<p>Διορθωτικό στα εξής:</p> <ul style="list-style-type: none">- Ανανέωση της μορφής του εγγράφου σύμφωνα με την τρέχουσα εταιρική ταυτότητα.- Διαγραφή της ενότητας 8 που παρέχει τεχνικές οδηγίες βάσει μιας παρωχημένης έκδοσης του IUCLID.	Ιούνιος 2016

	<ul style="list-style-type: none"> - Διόρθωση της περιγραφής του χριστοβαλίτη και του χαλαζία στο σημείο 7.5 και διαγραφή της παραπομπής στην οδηγία 2000/30/ΕΚ. - Διαγραφή παραπομπών στην ενότητα 8 και στα Εγχειρίδια υποβολής δεδομένων και προσθήκη παραπομπής στα νέα εγχειρίδια του ECHA. - Διαγραφή του παραρτήματος III και μεταφορά των πληροφοριών στον πίνακα ιστορικού του εγγράφου. - Επιδιόρθωση των κατεστραμμένων συνδέσμων προς δικτυακούς τόπους και διόρθωση συντακτικών σφαλμάτων. 	
Έκδοση 2.0	<p>Μερική επικαιροποίηση που περιορίζεται στα εξής:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Προσθήκη νέου παραρτήματος III με περιγραφή της έννοιας του προφίλ ταυτότητας ουσίας. - Προσθήκη νέου κειμένου στην ενότητα 1 ως εισαγωγή στο νέο παράρτημα III. - Διόρθωση τυπογραφικών λαθών και συντακτικών σφαλμάτων. 	Δεκέμβριος 2016
Έκδοση 2.1	<p>Διορθωτικό για τη διόρθωση τυπογραφικών λαθών στο κείμενο και σφαλμάτων στις πληροφορίες σχετικά με τη σύνθεση στα παραδείγματα που παρατίθενται στο σχήμα 2 του παραρτήματος III.</p>	Μάιος 2017
Έκδοση 3.0	<p>Επικαιροποίηση προκειμένου:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Να επιτευχθεί ευθυγράμμιση με τις τροποποιήσεις που εισήχθησαν με τον κανονισμό (ΕΕ) 2022/477 της Επιτροπής, της 24ης Μαρτίου 2022. - Να αφαιρεθούν οι παραπομπές στην (καθυστερημένη) προκαταχώριση - Να διορθωθούν τυπογραφικά λάθη και συντακτικά σφάλματα. - Να προστεθούν σύνδεσμοι στις ιστοσελίδες υποστήριξης και στις συχνές ερωτήσεις του ECHA - Να αφαιρεθεί η παράγραφος 5 του παραρτήματος III σχετικά με τη μετάβαση από το IUCLID 5 στο IUCLID 6 	Δεκέμβριος 2023

Πίνακας περιεχομένων

1. ΓΕΝΙΚΑ	9
1.1. Στόχοι	9
1.2. Πεδίο εφαρμογής	10
1.3. Δομή του εγγράφου καθοδήγησης.....	11
2. ΟΡΙΣΜΟΙ ΚΑΙ ΑΡΚΤΙΚΟΛΕΞΑ	13
2.1. Αρκτικόλεξα	13
2.2. Ορισμοί	15
3. ΠΛΑΙΣΙΟ ΓΙΑ ΤΟΝ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟ ΟΥΣΙΩΝ ΔΥΝΑΜΕΙ ΤΩΝ ΚΑΝΟΝΙΣΜΩΝ REACH ΚΑΙ CLP	19
3.1. Ορισμός ουσιών	19
3.2. Αριθμητικοί αναγνωριστικοί κωδικοί.....	19
3.2.1. Ευρετήριο ΕΚ.....	19
3.2.2. Αριθμοί καταλόγου	21
3.3. Απαιτήσεις για τον προσδιορισμό ουσιών στο πλαίσιο των κανονισμών REACH και CLP.....	22
4. ΚΑΘΟΔΗΓΗΣΗ ΓΙΑ ΤΟΝ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟ ΚΑΙ ΤΗΝ ΟΝΟΜΑΤΟΔΟΣΙΑ ΟΥΣΙΩΝ ΣΤΟ ΠΛΑΙΣΙΟ ΤΩΝ ΚΑΝΟΝΙΣΜΩΝ REACH ΚΑΙ CLP	25
4.1. Εισαγωγή.....	25
4.2. Ουσίες σαφώς καθορισμένης σύνθεσης	31
4.2.1. Μονοσυστατικές ουσίες	32
4.2.2. Πολυσυστατικές ουσίες	35
4.2.3. Ουσίες σαφώς καθορισμένης χημικής σύνθεσης και άλλα κύρια αναγνωριστικά	38
4.3. Ουσίες UVCB	40
4.3.1. Γενική καθοδήγηση σχετικά με τις ουσίες UVCB	40
4.3.2. Ειδικοί τύποι ουσιών UVCB	50
5. ΚΡΙΤΗΡΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΤΟΥ ΕΑΝ ΟΙ ΟΥΣΙΕΣ ΕΙΝΑΙ ΙΔΙΕΣ.....	59
6. Η ΤΑΥΤΟΤΗΤΑ ΟΥΣΙΑΣ ΣΤΟ ΠΛΑΙΣΙΟ ΤΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑΣ ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗΣ	66
7. ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ	67
7.1. Υπεροξυδιανθρακικό διαιθύλιο	67
7.2. ΖΟΛΙΜΙΔΙΝΗ	68
7.3. Μείγμα ισομερών	68
7.4. Αρωματική ουσία ΑΗ.....	72
7.5. Ορυκτά.....	78
7.6. Αιθέριο έλαιο του Lavandin grosso	81
7.7. Έλαιο χρυσάνθεμου και τα απομονωμένα ισομερή αυτού	87

7.8. Phenol, isopropylated, phosphate.....	91
7.9. Τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου.....	93
7.10. Πετρελαϊκές ουσίες.....	97
7.10.1. Ροή ανάμιξης βενζίνης (C4-C12).....	97
7.10.2. Ακάθαρτα πετρέλαια (πετρελαίου).....	99
7.11. Ένζυμα.....	100
7.11.1. Σουμπτιλισίνη.....	100
7.11.2. α-αμυλάση.....	101
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι - ΥΛΙΚΑ ΥΠΟΣΤΗΡΙΞΗΣ.....	104
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙ – ΤΕΧΝΙΚΗ ΚΑΘΟΔΗΓΗΣΗ ΑΝΑ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΥ ΟΥΣΙΩΝ.....	108
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙΙ - ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΣ ΟΥΣΙΑΣ ΚΑΙ ΚΟΙΝΗ ΥΠΟΒΟΛΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ ..	126

Κατάλογος πινάκων

Πίνακας 1: Αρκτικόλεξα.....	13
Πίνακας 2: Ορισμοί.....	15
Πίνακας 3: Παράμετροι προσδιορισμού ουσιών βάσει του σημείου 2 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH.....	23
Πίνακας 4: Ομαδοποίηση των κύριων αναγνωριστικών για παραδείγματα που αντιπροσωπεύουν διάφορους τύπους παρόμοιων σαφώς καθορισμένων ουσιών.....	26
Πίνακας 5: Ομαδοποίηση των κύριων αναγνωριστικών για παραδείγματα που αντιπροσωπεύουν διάφορους τύπους ουσιών UVCB.....	27

Πίνακας σχημάτων

Εικόνα 1: Διάγραμμα για την εξεύρεση των διαφόρων τύπων ουσιών στις ενότητες και στα παραρτήματα του εγγράφου καθοδήγησης.....	30
Εικόνα 2 (επόμενη σελίδα): Σχηματική επισκόπηση των βημάτων που πρέπει να πραγματοποιούν οι δυνητικοί καταχωρίζοντες από το στάδιο του προσδιορισμού των οικείων υποχρεώσεων καταχώρισης (1) έως το στάδιο του προσδιορισμού του προφίλ ταυτότητας της ουσίας τους για την καταχώριση της μοναδικής ταυτότητας ουσίας τους (4) και, εντέλει, την υποβολή των αιτήσεων καταχώρισης στο πλαίσιο της επίσημης εκπλήρωσης των υποχρεώσεων καταχώρισης των ουσιών τους (8). ...	133
Εικόνα 3: Σχηματική επεξήγηση της κατάρτισης του προφίλ ταυτότητας ουσίας (βήμα 4 στην εικόνα 2) για ουσία UVCB το οποίο προσδιορίζεται με βάση τις περιγραφικές παραμέτρους της προέλευσης και της διεργασίας από τη μεμονωμένη νομική οντότητα.....	136

1. Γενικά

Στον κανονισμό REACH [κανονισμός (ΕΚ) αριθ. 1907/2006] θεσπίζεται ένα σύστημα για την καταχώριση, την αξιολόγηση, την αδειοδότηση και τους περιορισμούς των χημικών προϊόντων και ιδρύεται ο Ευρωπαϊκός Οργανισμός Χημικών Προϊόντων (ECHA) με σκοπό την εφαρμογή του κανονισμού.¹

Ο κανονισμός CLP [κανονισμός (ΕΚ) αριθ. 1272/2008] είναι ο νέος ευρωπαϊκός κανονισμός σχετικά με την ταξινόμηση, την επισήμανση και τη συσκευασία των χημικών ουσιών και των μειγμάτων.² Η εν λόγω νομοθεσία εισάγει, σε ολόκληρη την ΕΕ, ένα νέο σύστημα για την ταξινόμηση και επισήμανση των χημικών ουσιών με βάση το Παγκοσμίως Εναρμονισμένο Σύστημα Ταξινόμησης και Επισήμανσης των Χημικών Προϊόντων των Ηνωμένων Εθνών (ΠΕΣ ΟΗΕ).

Ο κανονισμός REACH επικεντρώνεται στις ουσίες. Για να διασφαλιστεί η ορθή λειτουργία των διαδικασιών του κανονισμού REACH είναι απαραίτητος ο ορθός και αναμφισβήτητος προσδιορισμός των ουσιών. Το παρόν έγγραφο καθοδήγησης σχετικά με τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία ουσιών αποσκοπεί στην παροχή υποστήριξης προς τον κλάδο, τα κράτη μέλη και τον Ευρωπαϊκό Οργανισμό Χημικών Προϊόντων.

Το εν λόγω έγγραφο καθοδήγησης βασίζεται στην πείρα που αποκτήθηκε στο πλαίσιο του προσδιορισμού ουσιών βάσει της προγενέστερης νομοθεσίας για τα χημικά (οδηγία 67/548/ΕΟΚ και οδηγία 98/8/ΕΟΚ). Εντούτοις, τη βάση για την περαιτέρω βελτίωση της παρούσης καθοδήγησης αποτελούν οι ισχύουσες πρακτικές σε σχέση με τον προσδιορισμό των ουσιών βάσει του κανονισμού REACH και του κανονισμού για την ταξινόμηση, την επισήμανση και τη συσκευασία των ουσιών και των μειγμάτων (CLP). Επιπλέον, και ανάλογα με την περίπτωση, έχουν ληφθεί υπόψη προσεγγίσεις που προέρχονται από νομικά καθεστώτα άλλων χωρών εκτός της Ευρωπαϊκής Ένωσης.

Έχει συμπεριληφθεί καθοδήγηση προσαρμοσμένη σε διαφορετικούς τύπους ουσιών.

Το παρόν έγγραφο καθοδήγησης πρέπει να χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία ουσιών που διέπονται από τις διατάξεις των κανονισμών REACH και CLP.

1.1. Στόχοι

Το παρόν έγγραφο καθοδήγησης έχει στόχο να βοηθήσει τους παρασκευαστές και τους εισαγωγείς σχετικά με τον τρόπο καταγραφής και αναφοράς της ταυτότητας μιας ουσίας στο πλαίσιο των κανονισμών REACH και CLP. Όντας σημαντικός παράγοντας του προσδιορισμού ουσιών, το παρόν έγγραφο καθοδήγησης παρέχει οδηγίες σχετικά με τον τρόπο ονοματοδοσίας της ουσίας. Παρέχει επίσης καθοδήγηση σχετικά με το κατά πόσον οι ουσίες μπορούν να θεωρηθούν ίδιες στο πλαίσιο του κανονισμού REACH και του κανονισμού CLP, καθώς και σχετικά με τον τρόπο εφαρμογής της αρχής «μία ουσία, μία καταχώριση» (OSOR) μέσω του

¹ Κανονισμός (ΕΚ) αριθ. 1907/2006 του Ευρωπαϊκού Κοινοβουλίου και του Συμβουλίου, της 18ης Δεκεμβρίου 2006, για την καταχώριση, την αξιολόγηση, την αδειοδότηση και τους περιορισμούς των χημικών προϊόντων (REACH) και για την ίδρυση του Ευρωπαϊκού Οργανισμού Χημικών Προϊόντων καθώς και για την τροποποίηση της οδηγίας 1999/45/ΕΚ και για την κατάργηση του κανονισμού (ΕΟΚ) αριθ. 793/93 του Συμβουλίου και του κανονισμού (ΕΚ) αριθ. 1488/94 της Επιτροπής, καθώς και της οδηγίας 76/769/ΕΟΚ του Συμβουλίου και των οδηγιών της Επιτροπής 91/155/ΕΟΚ, 93/67/ΕΟΚ, 93/105/ΕΚ και 2000/21/ΕΚ («REACH»).

² Κανονισμός (ΕΚ) αριθ. 1272/2008 του Ευρωπαϊκού Κοινοβουλίου και του Συμβουλίου, της 16ης Δεκεμβρίου 2008, για την ταξινόμηση, την επισήμανση και τη συσκευασία των ουσιών και των μειγμάτων, την τροποποίηση και την κατάργηση των οδηγιών 67/548/ΕΟΚ και 1999/45/ΕΚ και την τροποποίηση του κανονισμού (ΕΚ) αριθ. 1907/2006 (Κείμενο που παρουσιάζει ενδιαφέρον για τον ΕΟΧ) («CLP»).

προσδιορισμού του προφίλ ταυτότητας ουσίας (SIP). Ο προσδιορισμός των ουσιών που μπορούν να καλυφθούν από το ίδιο προφίλ ταυτότητας ουσίας είναι σημαντικός για τα αιτήματα διερεύνησης, για την κοινοχρησία δεδομένων, για την κοινή υποβολή δεδομένων, για την κοινοποίηση στο ευρετήριο ταξινόμησης και επισήμανσης και για την εναρμόνιση της ταξινόμησης και της επισήμανσης.

Ο προσδιορισμός των ουσιών πρέπει να διεξάγεται, κατά προτίμηση, από εμπειρογνώμονες του κλάδου. Για τους ενδιαφερόμενους φορείς του κλάδου με περιορισμένη πείρα όσον αφορά τον προσδιορισμό ουσιών, στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης παρατίθενται εν είδει παραρτήματος πρόσθετες οδηγίες σχετικά με τις παραμέτρους προσδιορισμού.

Επιπλέον, στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης παρατίθενται ορισμένοι σύνδεσμοι προς συναφή εργαλεία με σκοπό την παροχή υποστήριξης στο πλαίσιο του χαρακτηρισμού και του ελέγχου της χημικής ταυτότητας μιας ουσίας.

Λεπτομερέστερες οδηγίες σχετικά με τον τρόπο συμπλήρωσης των πληροφοριών ταυτότητας ουσίας στο IUCLID, στο πλαίσιο διαφόρων διαδικασιών δυνάμει των κανονισμών REACH και CLP, παρέχονται στα εγχειρίδια του ECHA που διατίθενται στην ηλεκτρονική διεύθυνση <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Πεδίο εφαρμογής

Σύμφωνα με το άρθρο 1 του κανονισμού REACH, ο κανονισμός αφορά την παρασκευή, την εισαγωγή, τη διάθεση στην αγορά και τη χρήση ουσιών υπό καθαρή μορφή, σε παρασκευάσματα και σε αντικείμενα. Τα μείγματα και τα αντικείμενα καθαυτά δεν διέπονται από τον κανονισμό REACH.

Σύμφωνα με το άρθρο 10 του κανονισμού REACH, για την πραγματοποίηση καταχώρισης απαιτείται η καταγραφή της ταυτότητας της ουσίας χρησιμοποιώντας τις παραμέτρους που καθορίζονται στο σημείο 2 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH (βλ. Πίνακας 3). Η χρήση παρόμοιων παραμέτρων (όπως καθορίζεται στα σημεία 2.1 έως 2.3.4 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH) απαιτείται για την καταγραφή της ταυτότητας της ουσίας με σκοπό την κοινοποίηση σύμφωνα με το άρθρο 40 παράγραφος 1 του κανονισμού CLP. Το παρόν έγγραφο καθοδήγησης επικεντρώνεται στον ορθό προσδιορισμό των ουσιών που εμπίπτουν στον νομικό ορισμό μιας ουσίας βάσει των κανονισμών REACH και CLP και παρέχει οδηγίες σχετικά με τις παραμέτρους προσδιορισμού ουσιών που περιλαμβάνονται στο σημείο 2 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH. Οι πληροφορίες σχετικά με την ταυτότητα της ουσίας πρέπει να είναι επαρκείς ώστε να επιτρέπουν τον προσδιορισμό της. Εάν δεν είναι τεχνικώς εφικτό ή εάν φαίνεται να μην είναι επιστημονικώς αναγκαίο να δοθούν οι απαιτούμενες πληροφορίες, μία ή περισσότερες από τις παραμέτρους προσδιορισμού της ουσίας μπορούν να παραλείπονται. Οι λόγοι της παράλειψης πρέπει να δηλώνονται με σαφήνεια και να τεκμηριώνονται επιστημονικά.

Η προσέγγιση για τον προσδιορισμό μιας ουσίας εξαρτάται από τον τύπο της ουσίας. Ως εκ τούτου, το παρόν έγγραφο καθοδήγησης κατευθύνει τον χρήστη προς τις ειδικές για κάθε διαφορετικό τύπο ουσίας ενότητες.

Τα ευρετήρια EK που χρησιμοποιούνται στο πλαίσιο της οδηγίας 67/548/EOK (EINECS, ELINCS και κατάλογος NLP) αποτελούν σημαντικά εργαλεία για τον προσδιορισμό των ουσιών. Καθοδήγηση σχετικά με τον ρόλο των εν λόγω ευρετηρίων στο πλαίσιο του κανονισμού REACH παρέχεται στην ενότητα 3.2.

Οι ουσίες που εμπίπτουν στο πεδίο εφαρμογής των κανονισμών REACH και CLP (και κατά συνέπεια του παρόντος εγγράφου καθοδήγησης) είναι, τυπικά, το αποτέλεσμα χημικών αντιδράσεων κατά την παρασκευή της ουσίας και ενδέχεται να περιλαμβάνουν πολλαπλά διακριτά συστατικά. Ο ορισμός των ουσιών, σύμφωνα με τους κανονισμούς REACH και CLP,

περιλαμβάνει επίσης τις ουσίες που παράγονται χημικά ή απομονώνονται από φυσικά υλικά που απαντούν στο περιβάλλον και οι οποίες μπορούν να αποτελούνται από ένα μεμονωμένο στοιχείο ή μόριο (π.χ. καθαρά μέταλλα ή ορισμένα ορυκτά) ή από αρκετά συστατικά (π.χ. αιθέρια έλαια, συμπήγματα μετάλλων που σχηματίζονται από την τήξη θειούχων μεταλλευμάτων). Εντούτοις, σε αρκετές περιπτώσεις, ουσίες οι οποίες διέπονται από άλλη κοινοτική νομοθεσία εξαιρούνται από την υποχρέωση καταχώρισης βάσει του κανονισμού REACH (βλ. άρθρο 2 του κανονισμού REACH). Από την υποχρέωση καταχώρισης εξαιρούνται επίσης οι ουσίες που παρατίθενται στο παράρτημα IV του κανονισμού REACH και οι ουσίες που πληρούν ορισμένα κριτήρια που καθορίζονται στο παράρτημα V του κανονισμού REACH. Πρέπει να επισημανθεί ότι παρ' όλο που μια ουσία μπορεί να εξαιρεθεί από την υποχρέωση καταχώρισης, αυτό δεν σημαίνει απαραίτητως ότι η ουσία εξαιρείται από άλλους τίτλους του κανονισμού REACH ή από τις απαιτήσεις του κανονισμού CLP.

Ο κανονισμός REACH απαιτεί από τους καταχωρίζοντες την ίδια ουσία να καταλήξουν σε συμφωνία για την από κοινού υποβολή συγκεκριμένων πληροφοριών σχετικά με την ουσία (αρχή «μία ουσία, μία καταχώριση»)³. Η εφαρμογή της εν λόγω αρχής απαιτεί σαφήνεια σχετικά με τον τρόπο με τον οποίο ο καταχωρίζων έχει προσδιορίσει το πεδίο εφαρμογής του οικείου προφίλ ταυτότητας ουσίας.

1.3. Δομή του εγγράφου καθοδήγησης

Στην ενότητα 1 του παρόντος εγγράφου καθοδήγησης παρατίθενται βασικές πληροφορίες, όπως οι στόχοι και το πεδίο εφαρμογής του, ενώ στην ενότητα 2 παρατίθενται τα χρησιμοποιούμενα αρκτικόλεξα και οι ορισμοί. Στην ενότητα 3 παρατίθενται οι πληροφορίες που σχετίζονται με το πλαίσιο του προσδιορισμού των ουσιών βάσει του REACH, π.χ. συμπερίληψη στο νομικό κείμενο ορισμού ουσιών και απαιτήσεων πληροφοριών .

Η πρακτική καθοδήγηση για τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία των ουσιών παρέχεται στην ενότητα 4.

- Στην ενότητα 4.1 περιγράφεται η διάκριση μεταξύ «σαφώς καθορισμένων» και «ασαφώς καθορισμένων» ουσιών ενώ, εντός των εν λόγω κύριων ομάδων μπορούν να αναγνωριστούν διαφορετικοί τύποι ουσιών για τις οποίες ισχύουν ειδικές οδηγίες σε ό,τι αφορά τον προσδιορισμό τους. Παρατίθεται ένα βασικό διάγραμμα με σκοπό την καθοδήγηση του χρήστη στην κατάλληλη ενότητα όπου περιλαμβάνονται οδηγίες προσδιορισμού για τον συγκεκριμένο τύπο ουσίας.
- Στις επακόλουθες ενότητες, παρέχεται ειδική καθοδήγηση για κάθε τύπο ουσίας, εν είδει συνόλου κανόνων με διευκρινίσεις και παραδείγματα.

Στην ενότητα 5 παρέχονται οδηγίες για τον τρόπο ελέγχου του εάν κάποιες ουσίες μπορούν να θεωρούνται ίδιες. Στην ενότητα 6 παρέχεται καθοδήγηση σχετικά με την ταυτότητα των ουσιών στο πλαίσιο της διαδικασίας διερεύνησης.

Επιπλέον, στην ενότητα 7 έχουν συνταχθεί ορισμένα αναλυτικά παραδείγματα, με βάση την πρακτική καθοδήγηση της ενότητας 4.

Στο παράρτημα I παρατίθενται ορισμένοι σύνδεσμοι προς συναφή εργαλεία με σκοπό την παροχή υποστήριξης για τον χαρακτηρισμό και έλεγχο της χημικής ταυτότητας μιας ουσίας.

³ Λεπτομερείς πληροφορίες σχετικά με την κοινή υποβολή και κοινοχρησία δεδομένων για την ίδια ουσία παρέχονται στην *Καθοδήγηση σχετικά με την κοινοχρησία δεδομένων*.

Στο παράρτημα II παρέχονται περισσότερα πληροφοριακά στοιχεία σχετικά με καθεμία από τις παραμέτρους προσδιορισμού ουσιών που χρησιμοποιούνται κατά τη διαδικασία προσδιορισμού ουσιών, όπως οι κανόνες ονοματολογίας, οι αριθμοί ΕΚ και οι αριθμοί CAS, οι αναπαραστάσεις μοριακού και συντακτικού τύπου και οι αναλυτικές μέθοδοι.

Το παράρτημα III παρέχει πληροφορίες σχετικά με την έννοια του προφίλ ταυτότητας ουσίας, τη σημασία του για τις υποχρεώσεις κοινής υποβολής και τον τρόπο προσδιορισμού και αναφοράς του.

2. Ορισμοί και αρκτικόλεξα

2.1. Αρκτικόλεξα

Τα κύρια αρκτικόλεξα που χρησιμοποιούνται στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης παρατίθενται και επεξηγούνται στον Πίνακα 1.

Πίνακας 1: Αρκτικόλεξα

Αρκτικόλεξο	Επεξήγηση
AAS	Φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης
AISE	Διεθνής ένωση βιομηχανιών σαπουνιών, απορρυπαντικών και προϊόντων συντήρησης
CAS	Chemical Abstracts Service (Υπηρεσία χημικής ταυτοποίησης)
CLP	Κανονισμός (ΕΚ) αριθ. 1272/2008 για την ταξινόμηση, την επισήμανση και τη συσκευασία των ουσιών και των μειγμάτων
EINECS	Ευρωπαϊκό ευρετήριο των χημικών ουσιών που κυκλοφορούν στο εμπόριο
ELINCS	Ευρωπαϊκός κατάλογος των κοινοποιηθεισών ουσιών
ENCS	Υπάρχουσες και νέες χημικές ουσίες (Ιαπωνία)
ESIS	Ευρωπαϊκό σύστημα πληροφοριών για χημικές ουσίες
GC	Αεριοχρωματογραφία
HPLC	Υγρή χρωματογραφία υψηλής απόδοσης
InChI	Διεθνές χημικό προσδιοριστικό κατά IUPAC
INCI	Διεθνής ονοματολογία των συστατικών των καλλυντικών προϊόντων
IR	Φασματοσκοπία υπερύθρου
ISO	Διεθνής οργανισμός τυποποίησης
IUBMB	Διεθνής ένωση βιοχημείας και μοριακής βιολογίας
IUCLID	Διεθνής βάση δεδομένων ενιαίων χημικών πληροφοριών.
IUPAC	Διεθνής ένωση καθαρής και εφαρμοσμένης χημείας
MS (ΦΜ)	Φασματοσκοπία μάζας
NLP	Πρώην πολυμερές
NMR	Φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού
ppm	Μέρη ανά εκατομμύριο
REACH	Καταχώριση, αξιολόγηση, αδειοδότηση και περιορισμοί των χημικών προϊόντων
SIP	Προφίλ ταυτότητας ουσίας

SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification
TSCA	Νόμος για τον έλεγχο των τοξικών ουσιών (ΗΠΑ)
UV/VIS	Φασματοσκοπία υπεριώδους/ορατού
UVCB	Ουσίες άγνωστης ή ασταθούς σύνθεσης, προϊόντα πολύπλοκων αντιδράσεων ή βιολογικά υλικά
w/w	Κατά βάρος
XRD	Φασματοσκοπία περίθλασης ακτίνων Χ
XRF	Φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων Χ
ΕΕ	Ευρωπαϊκή Ένωση
ΕΚ	Ευρωπαϊκή Επιτροπή
ΠΕΣ	Παγκοσμίως Εναρμονισμένο Σύστημα
ΦΑΠΟ	Φόρουμ Ανταλλαγής Πληροφοριών για τις Ουσίες

2.2. Ορισμοί

Οι βασικοί ορισμοί που χρησιμοποιούνται στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης παρατίθενται και περιγράφονται στον Πίνακα 2.

Για τους παρόντες ορισμούς λαμβάνονται υπόψη οι ορισμοί που χρησιμοποιούνται στους κανονισμούς REACH και CLP. Για αυτόν τον λόγο, ορισμένοι όροι ορίζονται διαφορετικά σε σύγκριση με τον τρόπο που χρησιμοποιήθηκαν στο πλαίσιο της οδηγίας 67/548/ΕΟΚ.

Πίνακας 2: Ορισμοί

Ορισμός	Περιγραφή
IUCLID	Διεθνής βάση δεδομένων ενιαίων χημικών πληροφοριών. Το IUCLID είναι μια βάση δεδομένων και ένα σύστημα διαχείρισης δεδομένων σχετικών με χημικές ουσίες.
Αντικείμενο*	Αντικείμενο το οποίο, κατά τη διαδικασία παραγωγής, αποκτά ειδικό σχήμα, επιφάνεια ή σχεδιασμό που καθορίζει τη χρηστική λειτουργία του σε μεγαλύτερο βαθμό από ό,τι η χημική του σύνθεση.
Αριθμός ΕΚ	Ο αριθμός ΕΚ είναι το αριθμητικό αναγνωριστικό για τις ουσίες στο ευρετήριο ΕΚ.
Αριθμός καταλόγου	Αριθμός που αποδόθηκε από τον Οργανισμό. Αριθμός που εκχωρείται αυτόματα από το REACH-IT. Εφαρμόζεται σε όλες τις εισερχόμενες έγκυρες υποβολές (π.χ. PPORD, αιτήματα διερεύνησης, καταχωρίσεις, κοινοποιήσεις ταξινόμησης και επισήμανσης).

Ενδιάμεσο προϊόν*	<p>Ουσία η οποία παρασκευάζεται και καταναλώνεται ή χρησιμοποιείται αποκλειστικά στο πλαίσιο χημικών διεργασιών με σκοπό να μετατραπεί σε άλλη ουσία (στο εξής «σύνθεση»):</p> <p>(α) <u>μη απομονωμένο ενδιάμεσο προϊόν</u> είναι ενδιάμεση ουσία η οποία, κατά τη σύνθεση, δεν αφαιρείται σκόπιμα (παρά μόνο για δειγματοληψία) από τον εξοπλισμό μέσα στον οποίο πραγματοποιείται η σύνθεση. Ο εξοπλισμός αυτός περιλαμβάνει το δοχείο αντίδρασης, τον βοηθητικό του εξοπλισμό, και κάθε άλλο εξοπλισμό μέσα από τον οποίο περνά η ουσία ή οι ουσίες κατά τη διεργασία συνεχούς ροής ή ασυνεχούς ροής, καθώς και τους σωλήνες για τη μεταφορά από το ένα δοχείο στο άλλο για το επόμενο βήμα της αντίδρασης, αλλά δεν περιλαμβάνει δεξαμενές ή άλλα δοχεία στα οποία φυλάσσεται η ουσία ή οι ουσίες μετά την παρασκευή.</p> <p>(β) <u>απομονωμένο ενδιάμεσο προϊόν</u> στις εγκαταστάσεις παρασκευής είναι η ενδιάμεση ουσία η οποία δεν ανταποκρίνεται στα κριτήρια του μη απομονωμένου ενδιάμεσου προϊόντος, υπό τον όρο ότι η παρασκευή του ενδιάμεσου προϊόντος και η σύνθεση άλλης ουσίας ή ουσιών από το συγκεκριμένο ενδιάμεσο προϊόν γίνεται στις ίδιες εγκαταστάσεις παρασκευής, τις οποίες εκμεταλλεύονται μία η περισσότερες νομικές οντότητες.</p> <p>(γ) <u>μεταφερόμενο απομονωμένο ενδιάμεσο προϊόν</u> είναι η ενδιάμεση ουσία η οποία δεν ανταποκρίνεται στα κριτήρια του μη απομονωμένου ενδιάμεσου προϊόντος και η οποία μεταφέρεται ή παραδίδεται σε άλλες εγκαταστάσεις.</p>
Ευρετήριο EK	<p>Αν και δεν ορίζεται νομικά στον κανονισμό REACH, το ευρετήριο EK είναι συνδυασμός τριών ανεξάρτητων και νομικά εγκεκριμένων ευρωπαϊκών καταλόγων ουσιών που προέρχονται από τα προηγούμενα κανονιστικά πλαίσια της ΕΕ για τα χημικά προϊόντα: EINECS, ELINCS και κατάλογος NLP (πρώην πολυμερή). Οι καταχωρίσεις στο ευρετήριο EK περιλαμβάνουν μια χημική ονομασία και έναν αριθμό (ονομασία EK και αριθμός EK), έναν αριθμό CAS, μοριακό τύπο (εάν υπάρχει) και περιγραφή (για ορισμένους τύπους ουσιών).</p>
Κοινοποιημένη ουσία	<p>Ουσία για την οποία υποβλήθηκε κοινοποίηση και η οποία μπορεί να διατεθεί στην αγορά σύμφωνα με την οδηγία 67/548/ΕΟΚ.</p>
Κράμα*	<p>Μεταλλικό υλικό, ομοιογενές σε μακροσκοπική κλίμακα, το οποίο απαρτίζεται από δύο ή περισσότερα στοιχεία συνδυασμένα κατά τέτοιον τρόπο ώστε να μην είναι εύκολος ο διαχωρισμός τους με μηχανικά μέσα.</p> <p>Τα κράματα θεωρούνται ειδικά μείγματα.</p>
Κύριο συστατικό	<p>Συστατικό ουσίας το οποίο δεν είναι πρόσθετο ή πρόσμειξη και το οποίο αποτελεί σημαντικό μέρος της ουσίας και, ως εκ τούτου, χρησιμοποιείται για την ονομασία της ουσίας και τον αναλυτικό προσδιορισμό αυτής.</p>
Μείγμα*	<p>Μείγμα ή διάλυμα που αποτελείται από δύο ή περισσότερες ουσίες.</p>

Μη χημικώς τροποποιημένη ουσία*	Ουσία της οποίας η χημική δομή παραμένει αμετάβλητη, ακόμη και εάν έχει υποβληθεί σε χημική διεργασία ή επεξεργασία, ή φυσική ορυκτολογική μεταποίηση, π.χ. για την αφαίρεση των προσμείξεων.
Μονομερές*	Ουσία η οποία μπορεί να σχηματίζει ομοιοπολικούς δεσμούς με αλληλουχία πρόσθετων όμοιων ή ανόμοιων μορίων υπό τις συνθήκες της σχετικής αντίδρασης σχηματισμού πολυμερών που χρησιμοποιείται για τη συγκεκριμένη διαδικασία.
Μονοσυστατική ουσία	Κατά κανόνα, ουσία η οποία, οριζόμενη με βάση τη σύνθεσή της, περιέχει ένα κύριο συστατικό σε συγκέντρωση τουλάχιστον 80% (κατά βάρος).
Ουσία που απαντά στη φύση*	Ουσία που απαντά στη φύση υπό καθαρή μορφή, αμεταποίητη ή μεταποιημένη μόνον με χειροκίνητα μέσα, με μηχανικά βαρυτικά μέσα, με διάλυση στο νερό, με επίπλευση, με εκχύλιση με νερό, με απόσταξη με ατμό ή με θέρμανση μόνον για την αφαίρεση του νερού, ή ουσία που παραλαμβάνεται από τον αέρα με οποιονδήποτε τρόπο.
Ουσία*	Ένα χημικό στοιχείο και οι ενώσεις του σε φυσική κατάσταση ή όπως λαμβάνονται από οποιαδήποτε διεργασία παρασκευής, συμπεριλαμβανομένου κάθε προσθέτου που είναι απαραίτητο για τη διατήρηση της σταθερότητάς του και κάθε πρόσμειξης που προέρχεται από τη χρησιμοποιούμενη διεργασία, αποκλειόμενου κάθε διαλύτη που μπορεί να διαχωρισθεί, χωρίς να επηρεάσει τη σταθερότητα της ουσίας ή να μεταβάλει τη σύνθεσή της.
Παρασκευή*	Παραγωγή ή εκχύλιση ουσιών σε φυσική κατάσταση.
Πολυμερές*	<p>Ουσία η οποία αποτελείται από μόρια χαρακτηριζόμενα από ακολουθία ενός ή περισσότερων τύπων μονομερών μονάδων. Τα μοριακά βάρη των εν λόγω μορίων πρέπει να καλύπτουν κάποιο φάσμα μέσα στο οποίο οι διαφορές του μοριακού βάρους οφείλονται πρωτίστως στη διαφορά του αριθμού των μονομερών μονάδων που τα απαρτίζουν. Ένα πολυμερές περιλαμβάνει τα εξής:</p> <p>(α) μια απλή κατά βάρος πλειονότητα μορίων που περιέχουν τρεις τουλάχιστον μονομερείς μονάδες συνδεδεμένες με ομοιοπολικούς δεσμούς με τουλάχιστον μία άλλη μονομερή μονάδα ή με άλλο αντιδρών</p> <p>(β) λιγότερο από μια απλή κατά βάρος πλειοψηφία μορίων ενός και του αυτού μοριακού βάρους.</p> <p>Στο πλαίσιο του παρόντος ορισμού, ως «μονομερής μονάδα» νοείται η αντιδρώσα μορφή μιας μονομερούς ουσίας ενός πολυμερούς.</p>
Πολυσυστατική ουσία	Κατά κανόνα, ουσία η οποία, οριζόμενη με βάση τη σύνθεσή της, περιέχει περισσότερα του ενός κύρια συστατικά σε συγκέντρωση $\geq 10\%$ (κατά βάρος) και $<80\%$ (κατά βάρος).

Πρόσθετο	Ουσία η οποία έχει προστεθεί με σκοπό τη σταθεροποίηση της ουσίας ⁴ .
Πρόσμειξη	Ανεπιθύμητο συστατικό που υπάρχει σε μια ουσία, όπως αυτή παρασκευάζεται. Μπορεί να προέρχεται από τα αρχικά υλικά ή να είναι αποτέλεσμα δευτερογενών ή ημιτελών αντιδράσεων κατά τη διαδικασία παρασκευής μιας ουσίας. Παρότι υπάρχει μέσα στην τελική ουσία, δεν προστέθηκε σε αυτήν εκούσια.
Συστατικό	Ουσία η οποία έχει προστεθεί με σκοπό τον σχηματισμό μείγματος.
Συστατικό	Οποιοδήποτε επιμέρους είδος το οποίο είναι παρόν σε μια ουσία και το οποίο μπορεί να προσδιοριστεί βάσει της μοναδικής χημικής ταυτότητάς του.
Χρωματογραφικό αποτύπωμα	Αναπαράσταση της σύνθεσης μιας ουσίας βάσει της χαρακτηριστικής κατανομής των συστατικών σε αναλυτικό χρωματογράφημα.

* Ορισμοί σύμφωνα με το άρθρο 3 του κανονισμού REACH.

⁴ Σε άλλους τομείς, ένα πρόσθετο μπορεί να έχει διαφορετικές λειτουργίες, π.χ. ρυθμιστής του pH ή χρωστική ουσία. Εντούτοις, στον κανονισμό REACH και στο παρόν έγγραφο τεχνικής καθοδήγησης το πρόσθετο νοείται ως σταθεροποιητής.

3. Πλαίσιο για τον προσδιορισμό ουσιών δυνάμει των κανονισμών REACH και CLP

Στους κανονισμούς REACH και CLP παρέχεται ο ορισμός μιας ουσίας, στον δε κανονισμό REACH παρατίθενται και οι παράμετροι προσδιορισμού των ουσιών (παράρτημα VI, σημείο 2) που πρέπει να λαμβάνονται υπόψη για τον προσδιορισμό της ουσίας με σκοπό την καταχώριση.

Στην παρούσα ενότητα περιγράφεται ο ορισμός ουσιών στο πλαίσιο των κανονισμών REACH και CLP (ενότητα 3.1), παρέχεται γενική καθοδήγηση σχετικά με τον τρόπο χρήσης του ευρετηρίου ΕΚ που δημιουργήθηκε με βάση από το προγενέστερο κανονιστικό πλαίσιο για τα χημικά προϊόντα (ενότητα 3.2). Επίσης, παρέχονται περισσότερα πληροφοριακά στοιχεία σχετικά με τις απαιτήσεις προσδιορισμού των ουσιών που καθορίζονται στον κανονισμό REACH (ενότητα 3.3).

3.1. Ορισμός ουσιών

Η έννοια της ουσίας ορίζεται στον κανονισμό REACH (άρθρο 3 παράγραφος 1) και στον κανονισμό CLP (άρθρο 2 παράγραφος 7):

«Ουσία» είναι ένα χημικό στοιχείο και οι ενώσεις του σε φυσική κατάσταση ή όπως λαμβάνονται από οποιαδήποτε διεργασία παραγωγής, συμπεριλαμβανομένου κάθε προσθέτου που είναι απαραίτητο για τη διατήρηση της σταθερότητάς της και κάθε πρόσμειξης που προέρχεται από τη χρησιμοποιούμενη διεργασία, αποκλειόμενου κάθε διαλύτη που μπορεί να διαχωριστεί, χωρίς να επηρεάσει τη σταθερότητα της ουσίας ή να μεταβάλει τη σύνθεσή της.

Ο ορισμός της ουσίας στους κανονισμούς REACH και CLP είναι πανομοιότυπος με τον ορισμό της ουσίας που χρησιμοποιήθηκε στην 7η τροποποίηση της οδηγίας για τις επικίνδυνες ουσίες (οδηγία 92/32/ΕΟΚ περί τροποποίησης της οδηγίας 67/548/ΕΟΚ). Και στις δύο περιπτώσεις ο ορισμός ξεπερνά τα όρια της καθαρής χημικής ένωσης που καθορίζεται από μία μόνο μοριακή δομή. Στον ορισμό της ουσίας περιλαμβάνονται διαφορετικά συστατικά όπως οι προσμείξεις.

3.2. Αριθμητικοί αναγνωριστικοί κωδικοί

3.2.1. Ευρετήριο ΕΚ

Υπάρχουν τρία ξεχωριστά ευρετήρια που θεσπίστηκαν από το προγενέστερο κανονιστικό πλαίσιο για τα χημικά προϊόντα. Αυτά είναι το Ευρωπαϊκό ευρετήριο των χημικών ουσιών που κυκλοφορούν στο εμπόριο (EINECS), ο Ευρωπαϊκός κατάλογος των κοινοποιηθεισών ουσιών (ELINCS) και ο κατάλογος Πρώην πολυμερή (NLP).

Οι ουσίες που διατίθεντο στην ευρωπαϊκή αγορά μεταξύ 1ης Ιανουαρίου 1971 και 18ης Σεπτεμβρίου 1981 παρατίθενται στο Ευρωπαϊκό ευρετήριο των χημικών ουσιών που

κυκλοφορούν στο εμπόριο (EINECS)^{5, 6, 7}.

Το εν λόγω ευρετήριο περιλαμβάνει περίπου 100.000 ουσίες που προσδιορίζονται βάσει χημικής ονομασίας (και μιας περιγραφής για ορισμένους τύπους ουσιών), ενός αριθμού CAS και ενός επταψήφιου αριθμού που ονομάζεται αριθμός EINECS. Οι αριθμοί EINECS ξεκινούν πάντα με τα ψηφία 2 ή 3 (2xx-xxx-x, 3xx-xxx-xx). Οι ουσίες που καταγράφονται στο EINECS έχουν υποβληθεί σε διαδικασία επαλήθευσης για την τεκμηρίωση της εγγραφής τους στο ευρετήριο.

Ο ευρωπαϊκός κατάλογος κοινοποιημένων χημικών ουσιών (ELINCS)⁶ καταχωρίζει τις ουσίες που διατέθηκαν στην αγορά μετά τις 18 Σεπτεμβρίου 1981. Το εν λόγω ευρετήριο (κατάλογος) περιλαμβάνει όλες τις ουσίες που κοινοποιήθηκαν έως την 31η Μαΐου 2008 σύμφωνα με την οδηγία 67/548/ΕΟΚ και τις τροποποιήσεις της. Οι εν λόγω ουσίες είναι οι αποκαλούμενες «νέες ουσίες», δεδομένου ότι δεν διατίθεντο στην κοινοτική αγορά έως τις 18 Σεπτεμβρίου 1981. Η Ευρωπαϊκή Επιτροπή εκχώρησε έναν αριθμό ELINCS σε κάθε ουσία κατόπιν εξέτασης από τις αρμόδιες αρχές των κρατών μελών. Σε αντίθεση με το EINECS, ο ELINCS δεν περιλαμβάνει αριθμό CAS στις καταχωρίσεις του αλλά τον αριθμό κοινοποίησης που έχει εκχωρηθεί από την αρμόδια αρχή κράτους μέλους, την εμπορική ονομασία (εάν υπάρχει), την ταξινόμηση και την ονομασία κατά IUPAC για τις ταξινομηθείσες ουσίες. Οι αριθμοί ELINCS είναι επίσης επταψήφιοι που ξεκινούν πάντα με το ψηφίο 4 (4xx-xxx-x).

Τα πολυμερή εξαιρέθηκαν από την καταχώρισή τους στο EINECS και υπήχθησαν σε ειδικούς κανόνες στο πλαίσιο της οδηγίας 67/548/ΕΟΚ^{8, 9}. Ο ορισμός του όρου «πολυμερές» εμπλουτίστηκε περαιτέρω στην 7η τροποποίηση της οδηγίας 67/548/ΕΟΚ (οδηγία 92/32/ΕΟΚ). Ως αποτέλεσμα της εφαρμογής του ορισμού αυτού, ορισμένες ουσίες που θεωρούνταν πολυμερή με βάση τους κανόνες καταχώρισης στον κατάλογο EINECS *δεν θεωρούνταν πλέον πολυμερή* δυνάμει της 7ης τροποποίησης. Δεδομένου ότι όλες οι ουσίες που δεν περιέχονται στο EINECS υπόκεινται σε κοινοποίηση, θεωρητικά θα πρέπει όλες οι ουσίες «Πρώην πολυμερή» (NLP) να έχουν κοινοποιηθεί. Ωστόσο, το Συμβούλιο Υπουργών κατέστησε σαφές ότι οι ουσίες που δεν θεωρούνται πλέον πολυμερή δεν πρέπει να υπόκεινται, αναδρομικά, σε κοινοποίηση. Ζητήθηκε από την Επιτροπή να καταρτίσει κατάλογο με τις ουσίες που δεν θεωρούνται πλέον πολυμερή (κατάλογος NLP). Οι ουσίες προς συμπερίληψη στον εν λόγω κατάλογο ήταν όσες διατίθεντο στην αγορά της ΕΕ μεταξύ 18ης Σεπτεμβρίου 1981 (ημερομηνία έναρξης ισχύος της οδηγίας 79/831/ΕΟΚ, της 6ης τροποποίησης της οδηγίας 67/548/ΕΟΚ) και 31ης Οκτωβρίου 1993 (ημερομηνία έναρξης ισχύος της οδηγίας 92/32/ΕΕΚ, της 7ης τροποποίησης της οδηγίας 67/548/ΕΟΚ) και οι οποίες συμμορφώνονταν προς την απαίτηση να θεωρούνται πολυμερή βάσει των κανόνων καταχώρισης στον EINECS αλλά οι οποίες δεν θεωρούντο πλέον πολυμερή βάσει της 7ης τροποποίησης. Ο κατάλογος NLP δεν είναι

⁵ Το EINECS βασίζεται στο Ευρωπαϊκό βασικό ευρετήριο (**E**uropean **C**ore **I**Nventory-ECOIN) στο οποίο ο κλάδος μπορεί να πραγματοποιεί συμπληρωματική καταχώριση ουσιών (σύμφωνα με τα κριτήρια για την καταχώριση ουσιών στο EINECS). Το ECOIN καταρτίστηκε βάσει συνδυασμού διάφορων καταλόγων χημικών ουσιών οι οποίες θεωρείτο ότι διατίθενται στην ευρωπαϊκή αγορά (π.χ. TSCA). Το EINECS δημοσιεύτηκε στις 15 Ιουνίου 1990 και περιλαμβάνει περισσότερες από 100.000 ουσίες. Κατά τη χρήση του ευρετηρίου, εντοπίστηκε σημαντικός αριθμός σφαλμάτων (σφάλματα εκτύπωσης, π.χ. εσφαλμένη χημική ονομασία, τύπος ή CAS RN). Ως εκ τούτου, δημοσιεύτηκε διορθωτικό την 1η Μαρτίου 2002.

⁶ ECB (2005) Εγχειρίδιο αποφάσεων εφαρμογής της έκτης και έβδομης τροποποίησης της οδηγίας 67/548/ΕΟΚ (οδηγίες 79/831/ΕΟΚ και 92/32/ΕΟΚ), Μη εμπιστευτική έκδοση. EUR 20519 EN. Επικαιροποιημένη έκδοση του Ιουνίου 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 Τομ. 37, σ. 21-33.

⁸ ECB (2003) Κοινοποίηση νέων χημικών ουσιών σύμφωνα με την οδηγία 67/548/ΕΟΚ για την ταξινόμηση, τη συσκευασία και την επισήμανση των επικίνδυνων ουσιών. Κατάλογος «Πρώην πολυμερή». 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 Τομ. 67, σ. 251-261.

εξαντλητικός. Οι ουσίες στον κατάλογο NLP προσδιορίζονται βάσει χημικής ονομασίας, ενός αριθμού CAS και ενός επταψήφιου αριθμού που ονομάζεται αριθμός NLP. Ένας αριθμός NLP ξεκινά πάντα με το ψηφίο 5 (5xx-xxx-x).

Ο συνδυασμός των εν λόγω τριών καταλόγων ουσιών, EINECS, ELINCS και κατάλογος NLP, ονομάζεται ευρετήριο EK. Η Ευρωπαϊκή Επιτροπή εκχωρεί έναν αριθμό EK για κάθε ουσία στο εν λόγω ευρετήριο (για αναλυτικές πληροφορίες σχετικά με τον αριθμό EK ανατρέξτε στο παράρτημα II).

Πληροφορίες σχετικά με τις εν λόγω ουσίες διατίθενται στον δικτυακό τόπο του Ευρωπαϊκού Οργανισμού Χημικών Προϊόντων (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), ο οποίος επίσης διατηρεί και δημοσιεύει ευρετήριο των καταχωρισμένων ουσιών (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Το ευρετήριο EK μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί από τους παρασκευαστές και τους εισαγωγείς ως εργαλείο για την εύρεση του αριθμού EK της οικείας ουσίας.

3.2.2. Αριθμοί καταλόγου

Κατά τη δημιουργία του συστήματος REACH-IT, ο ECHA θεώρησε χρήσιμο να εκχωρήσει αυτόματα έναν αριθμό για τις ουσίες που περιλαμβάνονταν σε όλες τις τεχνικά πλήρεις εισερχόμενες υποβολές (προκαταχωρίσεις, PPORD, αιτήματα διερεύνησης, καταχωρίσεις, κοινοποιήσεις ταξινόμησης και επισήμανσης κ.λπ.) και για τις οποίες δεν είχε εκχωρηθεί αριθμός EK (βλέπε τα κριτήρια εκχώρησης των αριθμών καταλόγου κατωτέρω). Κατ' αυτόν τον τρόπο διευκολύνθηκε τεχνικά η διαχείριση, η περαιτέρω επεξεργασία και ο προσδιορισμός των ουσιών στις εν λόγω υποβολές. Οι επονομαζόμενοι «αριθμοί καταλόγου» έχουν την ίδια αριθμητική μορφή που χρησιμοποιείται για τους αριθμούς EINECS, ELINCS και NLP αλλά ξεκινούν με διαφορετικά ψηφία.

Οι αριθμοί καταλόγου έχουν την κοινή αριθμητική μορφή των καταχωρίσεων στα EINECS, ELINCS και NLP. Η συντριπτική πλειονότητα των αριθμών καταλόγου και ο προσδιορισμός ουσιών που σχετίζεται με αυτούς δεν έχουν ελεγχθεί ποτέ όσον αφορά την ορθότητα και την εγκυρότητά τους, ούτε και για το εάν έχουν τηρηθεί οι συμβάσεις που περιγράφονται στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης.

Πρέπει να επισημανθεί ότι είναι πιθανό να έχουν εκχωρηθεί διαφορετικοί αριθμοί καταλόγου στην ίδια ουσία, σε περίπτωση που για την εν λόγω ουσία χρησιμοποιούνται διαφορετικά αναγνωριστικά (π.χ. ονομασία). Ως εκ τούτου, είναι επίσης πιθανό ένας αριθμός καταλόγου να εκχωρηθεί σε ουσία που έχει καταχωρισθεί στο EINECS, το ELINCS ή το NLP. Αυτό ενδέχεται να συμβεί εάν, κατά την υποβολή στον ECHA μέσω του REACH-IT, χρησιμοποιηθεί ονομασία ουσίας που διαφέρει από τη χρησιμοποιούμενη στο ευρετήριο EK.

Οι αριθμοί καταλόγου ενδέχεται να ξεκινούν, επί παραδείγματι, με τα ψηφία 6, 7, 8 ή 9 (6xx-xxx-x, 7xx-xxx-x, 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

Είναι σημαντικό να επισημανθεί ότι για ορισμένες καταχωρίσεις στον κατάλογο EINECS, η περιγραφή μιας ουσίας είναι σχετικά ευρεία και θα μπορούσε δυνητικά να θεωρηθεί ότι καλύπτει περισσότερες από μία ταυτότητες ουσίας σύμφωνα με το άρθρο 3 παράγραφος 1 του κανονισμού REACH. Σε αυτές τις περιπτώσεις, ο δυνητικός καταχωρίζων καλείται να περιγράψει τη σχετική ουσία ακριβέστερα (π.χ. μέσω της ονομασίας κατά IUPAC και με άλλα διαθέσιμα αναγνωριστικά). Ωστόσο, ο καταχωρίζων πρέπει να αναφέρει σε ποια καταχώριση στο EINECS ανήκει η ουσία. Σε αυτές τις περιπτώσεις, ο Ευρωπαϊκός Οργανισμός Χημικών Προϊόντων είναι αυτός που εξετάζει το εάν πρέπει να εκχωρηθεί αριθμός καταλόγου στην υπό εξέταση ουσία.

3.3. Απαιτήσεις για τον προσδιορισμό ουσιών στο πλαίσιο των κανονισμών REACH και CLP

Στην καταχώριση που απαιτείται βάσει του κανονισμού REACH, πρέπει να υποβάλλονται πληροφορίες σχετικά με τον προσδιορισμό της ουσίας, όπως καθορίζεται στο σημείο 2 του παραρτήματος VI. Οι εν λόγω πληροφορίες πρέπει να είναι κατάλληλες και επαρκείς ώστε να είναι εφικτός ο προσδιορισμός κάθε ουσίας. Εάν δεν είναι τεχνικώς εφικτό ή εάν φαίνεται να μην είναι επιστημονικώς αναγκαίο να δοθούν πληροφορίες για μία ή περισσότερες από τις παραμέτρους προσδιορισμού της ουσίας, τότε πρέπει να δηλώνονται με σαφήνεια οι λόγοι, όπως υποδεικνύεται στη Σημείωση 1 του παραρτήματος VI.

Παρομοίως, όταν απαιτείται κοινοποίηση βάσει του κανονισμού CLP (άρθρο 40 του κανονισμού CLP), η κοινοποίηση πρέπει να περιλαμβάνει πληροφορίες σχετικά με τον προσδιορισμό της ουσίας, όπως καθορίζεται στα σημεία 2.1 έως 2.3.4 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH. Οι εν λόγω πληροφορίες πρέπει να είναι επαρκείς ώστε να είναι εφικτός ο προσδιορισμός κάθε ουσίας. Εάν δεν είναι τεχνικώς εφικτό ή εάν φαίνεται να μην είναι επιστημονικώς αναγκαίο να δοθούν πληροφορίες για μία ή περισσότερες από τις παραμέτρους προσδιορισμού της ουσίας, τότε πρέπει να δηλώνονται με σαφήνεια οι λόγοι, όπως υποδεικνύεται στη Σημείωση 1 του παραρτήματος VI.

Επισκόπηση των παραμέτρων προσδιορισμού ουσιών βάσει του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH παρέχεται στον Πίνακα 3.

Πίνακας 3: Παράμετροι προσδιορισμού ουσιών βάσει του σημείου 2 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH

Παράμετροι προσδιορισμού ουσιών βάσει του σημείου 2 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH	
2.	ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΣ ΤΗΣ ΟΥΣΙΑΣ <i>Για κάθε ουσία, οι πληροφορίες που δίνονται πρέπει να επαρκούν για τον προσδιορισμό της κάθε ουσίας. Εάν δεν είναι τεχνικώς εφικτό ή εάν φαίνεται να μην είναι επιστημονικώς αναγκαίο να δοθούν πληροφορίες για ένα ή περισσότερα από τα στοιχεία που ακολουθούν, δηλώνονται με σαφήνεια οι λόγοι.</i>
2.1	Όνομασία και άλλα προσδιοριστικά στοιχεία κάθε ουσίας
2.1.1	<i>Όνομασία ή ονομασίες κατά την ονοματολογία IUPAC. Εάν δεν υπάρχει/-ουν, άλλες διεθνείς χημικές ονομασίες</i>
2.1.2	<i>Άλλες ονομασίες (κοινή ονομασία, εμπορική ονομασία, σύντμηση)</i>
2.1.3	<i>Αριθμός EK, δηλαδή αριθμός EINECS, ELINCS ή NLP, ή ο αριθμός που έχει αποδοθεί από τον Οργανισμό (εάν υπάρχει και ανάλογα με την περίπτωση)</i>
2.1.4	<i>Όνομασία CAS και αριθμός CAS (εάν υπάρχει)</i>
2.1.5	<i>Άλλος κωδικός ταυτότητας, όπως ο αριθμός τελωνείου (εάν υπάρχει)</i>
2.2	Πληροφορίες σχετικά με τον μοριακό και τον συντακτικό τύπο ή την κρυσταλλική δομή κάθε ουσίας
2.2.1	<i>Μοριακός και συντακτικός τύπος (συμπεριλαμβανομένης της αναπαράστασης σύμφωνα με το σύστημα SMILES και άλλης απεικόνισης, εάν υπάρχει) και περιγραφή της/των κρυσταλλικής/-ών δομής/-ών</i>
2.2.2	<i>Πληροφορίες σχετικά με την οπτική δραστηριότητα και την τυπική αναλογία στερεοϊσομερών (εάν ισχύει και ανάλογα με την περίπτωση)</i>
2.2.3	<i>Μοριακό βάρος ή φάσμα μοριακού βάρους</i>
2.3.	Σύνθεση κάθε ουσίας
2.3.1	<i>Βαθμός καθαρότητας (%), κατά περίπτωση</i>

2.3.2	<p><i>Ονομασίες των συστατικών και των προσμείξεων</i></p> <p><i>Στις περιπτώσεις ουσίας άγνωστης ή ασταθούς σύνθεσης, συμπλόκου προϊόντος αντίδρασης ή βιολογικού υλικού (UVCB):</i></p> <ul style="list-style-type: none"> — ονομασίες των συστατικών που περιέχονται σε συγκέντρωση $\geq 10\%$ — ονομασίες των γνωστών συστατικών που περιέχονται σε συγκέντρωση $< 10\%$ — για συστατικά τα οποία δεν είναι δυνατό να προσδιοριστούν μεμονωμένα, περιγραφή των ομάδων συστατικών με βάση τη χημική φύση τους — περιγραφή της προέλευσης ή της πηγής και της διεργασίας παρασκευής
2.3.3	<p><i>Τυπική συγκέντρωση ή εύρος συγκέντρωσης (σε ποσοστό %) των συστατικών, των ομάδων συστατικών που δεν είναι δυνατό να προσδιοριστούν μεμονωμένα και των προσμείξεων όπως ορίζεται στο σημείο 2.3.2</i></p>
2.3.4	<p><i>Ονομασίες και τυπική συγκέντρωση ή εύρος συγκέντρωσης (σε ποσοστό %) των προσθέτων</i></p>
2.3.5	<p><i>Όλα τα αναγκαία ποιοτικά αναλυτικά δεδομένα που είναι συναφή για τον προσδιορισμό της ουσίας, π.χ. δεδομένα φάσματος υπεριώδους, υπέρυθρου, πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού, μαζών ή δεδομένα περίθλασης</i></p>
2.3.6	<p><i>Όλα τα αναγκαία ποσοτικά αναλυτικά δεδομένα που είναι συναφή για τον προσδιορισμό της ουσίας, π.χ. δεδομένα χρωματογραφίας, ογκομέτρησης, στοιχειακής ανάλυσης ή περίθλασης</i></p>
2.3.7	<p><i>Περιγραφή των αναλυτικών μεθόδων ή των κατάλληλων βιβλιογραφικών παραπομπών που είναι αναγκαίες για τον προσδιορισμό της ουσίας (συμπεριλαμβανομένου του προσδιορισμού και της ποσοτικοποίησης των συστατικών της και, ανάλογα με την περίπτωση, των προσμείξεων και των προσθέτων της). Η περιγραφή περιλαμβάνει τα πειραματικά πρωτόκολλα που ακολουθούνται και τη σχετική ερμηνεία των αποτελεσμάτων που αναφέρονται δυνάμει των σημείων 2.3.1 έως 2.3.6. Οι πληροφορίες αυτές πρέπει να είναι επαρκείς ώστε να επιτρέπουν την αναπαραγωγή των μεθόδων.</i></p>
2.5	<p>Κάθε άλλη διαθέσιμη πληροφορία που είναι συναφής για τον προσδιορισμό της ουσίας</p>

4. Καθοδήγηση για τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία ουσιών στο πλαίσιο των κανονισμών REACH και CLP

4.1. Εισαγωγή

Οι κανόνες προσδιορισμού και ονοματοδοσίας διαφέρουν ανάλογα με τον τύπο της ουσίας. Για πρακτικούς λόγους, το παρόν έγγραφο καθοδήγησης είναι διαρθρωμένο κατά τρόπο ώστε, για κάθε τύπο ουσίας, ο χρήστης κατευθύνεται απευθείας στην ενότητα όπου παρέχεται η κατάλληλη καθοδήγηση. Για αυτόν τον σκοπό, παρέχονται ακολούθως ορισμένες διευκρινήσεις σχετικά με τους διάφορους τύπους ουσιών και, τέλος, παρέχεται ένα διάγραμμα για την εξεύρεση της κατάλληλης ενότητας.

Ο προσδιορισμός ουσιών πρέπει να βασίζεται τουλάχιστον στις παραμέτρους προσδιορισμού ουσιών που περιλαμβάνονται στο σημείο 2 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH (βλ. Πίνακας 3). Ως εκ τούτου, ο προσδιορισμός οποιασδήποτε ουσίας πρέπει να πραγματοποιείται βάσει συνδυασμού των κατάλληλων παραμέτρων προσδιορισμού:

- της ονομασίας κατά IUPAC ή/και άλλης ονομασίας και άλλων προσδιοριστικών στοιχείων, π.χ. αριθμός CAS, αριθμός ΕΚ (παράρτημα VI, σημείο 2.1)
- των μοριακών πληροφοριών και των πληροφοριών σχετικά με τη δομή (παράρτημα VI, σημείο 2.2)
- της χημικής σύνθεσης (παράρτημα VI, σημείο 2.3).

Μια ουσία προσδιορίζεται πλήρως από τη χημική σύνθεσή της, ήτοι τη χημική ταυτότητα και την περιεκτικότητα κάθε συστατικού σε αυτήν. Αν και για τις περισσότερες ουσίες αυτού του είδους ο άμεσος προσδιορισμός μπορεί να είναι πιθανός, για ορισμένες ουσίες δεν είναι εφικτός ή είναι ανεπαρκής για το πεδίο εφαρμογής των κανονισμών REACH και CLP. Σε αυτές τις περιπτώσεις απαιτούνται άλλες ή πρόσθετες πληροφορίες προσδιορισμού της ουσίας.

Ως εκ τούτου, μπορούμε να διακρίνουμε δύο βασικές κατηγορίες ουσιών:

1. «Σαφώς καθορισμένες ουσίες»: Ουσίες με καθορισμένη ποσοτική και ποιοτική σύνθεση οι οποίες μπορούν να προσδιοριστούν επαρκώς με βάση τις παραμέτρους προσδιορισμού του παραρτήματος VI σημείο 2 του κανονισμού REACH.
2. «Ουσίες UVCB»: Ουσίες άγνωστης ή ασταθούς σύνθεσης, προϊόντα πολύπλοκων αντιδράσεων ή βιολογικά υλικά. Οι ουσίες αυτές δεν είναι δυνατόν να προσδιοριστούν επαρκώς μόνο βάσει των ανωτέρω παραμέτρων.

Η αστάθεια της σύνθεσης των σαφώς καθορισμένων ουσιών καθορίζεται βάσει του ανώτερου και του κατώτερου ορίου του εύρους συγκέντρωσης του/των κύριου/ων συστατικού/ών. Σε ό,τι αφορά ουσίες UVCB, η αστάθεια είναι σχετικά μεγάλη ή/και ελάχιστα προβλέψιμη.

Αναγνωρίζεται ότι θα υπάρχουν περιπτώσεις όπου μεταξύ σαφώς καθορισμένων ουσιών (προϊόντα αντίδρασης με πολλά συστατικά, το καθένα εκ των οποίων περιλαμβάνεται σε μεγάλο εύρος συγκέντρωσης) και ουσιών UVCB (προϊόντα αντίδρασης με ασταθή και ελάχιστα προβλέψιμη σύνθεση) τα όρια δεν θα είναι σαφή. Αποτελεί ευθύνη του καταχωρίζοντος να προσδιορίζει μια ουσία με τον καταλληλότερο τρόπο.

Οι κανόνες προσδιορισμού και ονοματοδοσίας διαφέρουν για τις «σαφώς καθορισμένες ουσίες» με ένα κύριο συστατικό και για τις «σαφώς καθορισμένες ουσίες» με περισσότερα από ένα κύρια συστατικά. Σε ό,τι αφορά τους διάφορους τύπους ουσιών που εμπίπτουν στην κατηγορία «UVCB», περιγράφονται διαφορετικοί κανόνες προσδιορισμού και ονοματοδοσίας.

Στους πίνακες

Πίνακας 4 και Πίνακας 5 παρατίθενται τα κύρια αναγνωριστικά για αρκετά παραδείγματα διαφόρων τύπων ουσιών. Τα εν λόγω παραδείγματα έχουν ομαδοποιηθεί κατά τρόπο ώστε οι ομοιότητες και οι διαφορές για τον προσδιορισμό της ουσίας να αναγνωρίζονται εύκολα.

Πίνακας 4 και Πίνακας 5 δεν αντιπροσωπεύουν έναν πλήρη κατάλογο των πιθανών τύπων ουσιών. Η ομαδοποίηση αυτή των ουσιών με κανόνες προσδιορισμού και ονοματοδοσίας δεν πρέπει να εκληφθεί ως επίσημο σύστημα κατηγοριοποίησης των ουσιών, αλλά ως πρακτικό βοήθημα για την ορθή εφαρμογή των συγκεκριμένων κανόνων και για την εξεύρεση των κατάλληλων οδηγιών στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης.

Πίνακας 4: Ομαδοποίηση των κύριων αναγνωριστικών για παραδείγματα που αντιπροσωπεύουν διάφορους τύπους παρόμοιων σαφώς καθορισμένων ουσιών

Κοινά χαρακτηριστικά	Παραδείγματα ή αντιπροσωπευτικές ουσίες	Κύρια αναγνωριστικά
Σαφώς καθορισμένες ουσίες βάσει χημικής σύνθεσης [Ενότητα 4.2.]	Μονοσυστατικές ουσίες, π.χ. - βενζόλιο (95%) - νικέλιο (99%) [Ενότητα 4.2.1]	Χημική σύνθεση: ένα κύριο συστατικό ≥80%: - Χημική ταυτότητα του κύριου συστατικού (χημική ονομασία, αριθμός CAS, αριθμός ΕΚ κ.λπ.) - Τυπική συγκέντρωση και ανώτερο και κατώτερο όριο
	Πολυσυστατικές ουσίες, π.χ. καθορισμένα προϊόντα αντίδρασης όπως Μάζα αντίδρασης του 2-, 3- και 4-χλωροτολουολίου (30% το καθένα) [Ενότητα 4.2.2]	Χημική σύνθεση: μείγμα (μάζα αντίδρασης) κύριων συστατικών, το καθένα εκ των οποίων μεταξύ ≥10 και <80%: - Χημική ταυτότητα κάθε κύριου συστατικού - Τυπικές συγκεντρώσεις και ανώτερο και κατώτερο όριο για κάθε συστατικό και για την ίδια τη μάζα αντίδρασης
	Ουσίες που προσδιορίζονται όχι μόνο από τη χημική σύνθεση, π.χ. Γραφίτης και διαμάντι [Ενότητα 4.2.3]	Χημική σύνθεση ως μονο- ή πολυσυστατική ουσία ΚΑΙ Άλλες φυσικές παράμετροι ή παράμετροι χαρακτηρισμού: π.χ. κρυσταλλομορφολογία, (γεωλογική) σύνθεση σε ανόργανες ύλες κ.λπ.

Πίνακας 5: Ομαδοποίηση των κύριων αναγνωριστικών για παραδείγματα που αντιπροσωπεύουν διάφορους τύπους ουσιών UVCB

Κοινά χαρακτηριστικά	Παραδείγματα ή αντιπροσωπευτικές ουσίες	Κύρια αναγνωριστικά			
		Προέλευση	Διεργασία	Άλλα αναγνωριστικά	
Ουσίες UVCB (Ουσίες άγνωστης ή ασταθούς σύνθεσης, προϊόντα πολύπλοκων αντιδράσεων ή βιολογικά υλικά) [Ενότητα 4.3]	Βιολογικά υλικά (B)	Εκχυλίσματα βιολογικών υλικών, π.χ. φυσικές αρωματικές ύλες, φυσικά έλαια, φυσικές βαφές και χρωστικές ουσίες	- Είδος και οικογένεια φυτού ή ζώου - Μέρος φυτού/ζώου	- Εκχύλιση - Κλασματοποίηση, συγκέντρωση, απομόνωση, καθαρισμός κ.λπ. - <u>Παραγωγή*</u>	- Γνωστή ή γενική σύνθεση - Χρωματογραφικό και άλλα αποτυπώματα - Παραπομπή σε πρότυπα - Χρωματικός δείκτης
		Σύνθετα βιολογικά μακρομόρια, π.χ. ένζυμα, πρωτεΐνες, κλάσματα DNA ή RNA, ορμόνες, αντιβιοτικά			- Πρότυπος δείκτης ενζύμων - Γενετικός κώδικας - Στερεοδιαμόρφωση - Φυσικές ιδιότητες - Λειτουργία/δραστηριότητα - Δομή - Ακολουθία αμινοξέων
	Προϊόντα ζύμωσης αντιβιοτικά, βιοπολυμερή, ένζυμα, βινάσες (προϊόντα ζύμωσης σακχάρων), σοφορολιπίδια, κ.λπ.	- Καλλιεργητικό μέσο - Χρησιμοποιούμενος μικροοργανισμός	- Ζύμωση - Απομόνωση προϊόντων - Στάδια καθαρισμού	- Τύπος προϊόντων: π.χ. αντιβιοτικά, βιοπολυμερή, πρωτεΐνες κ.λπ. - Γνωστή σύνθεση	
Χημικές και ανόργανες ουσίες με ασαφώς καθορισμένη, πολύπλοκη ή ασταθή σύνθεση	Μείγματα αντίδρασης με ελάχιστα προβλέψιμη ή/και ασταθή σύνθεση	Αρχικά υλικά	<u>Τύπος χημικής αντίδρασης</u> , π.χ. εστεροποίηση, αλκυλίωση, υδρογόνωση	- Γνωστή σύνθεση - Χρωματογραφικό και άλλα αποτυπώματα - Παραπομπή σε πρότυπα	
	- Κλάσματα ή αποστάγματα, π.χ. πετρελαϊκές ουσίες - Άργιλος, π.χ. μπεντονίτης - Πίσσεις	- Αργά πετρέλαια - Άνθρακας/τύρφη - Ορυκτά αέρια - Ορυκτά	- Κλασματοποίηση, απόσταξη - <u>Μετατροπή κλασμάτων</u> - Φυσική επεξεργασία	- Εύρη διαχωρισμού - Εύρος μήκους ανθρακικής αλυσίδας - Σχέση	

	(UVC)	Συμπυκνώματα ή τήγματα, π.χ. μεταλλικά ορυκτά ή υπολείμματα διαφόρων διεργασιών τήξης ή μεταλλουργικών διεργασιών, π.χ. σκωρίες	Μεταλλεύματα	<ul style="list-style-type: none"> - Υπολείμματα - Τήξη - Θερμική επεξεργασία - Διάφορες μεταλλουργικές διεργασίες 	<ul style="list-style-type: none"> αρωματικών/αλειφατικών ουσιών - Γνωστή σύνθεση - Πρότυπος δείκτης - Γνωστή ή γενική σύνθεση - Συγκέντρωση μετάλλων
--	-------	---	--------------	--	--

* Οι υπογραμμισμένες διεργασίες υποδεικνύουν σύνθεση νέου μορίου

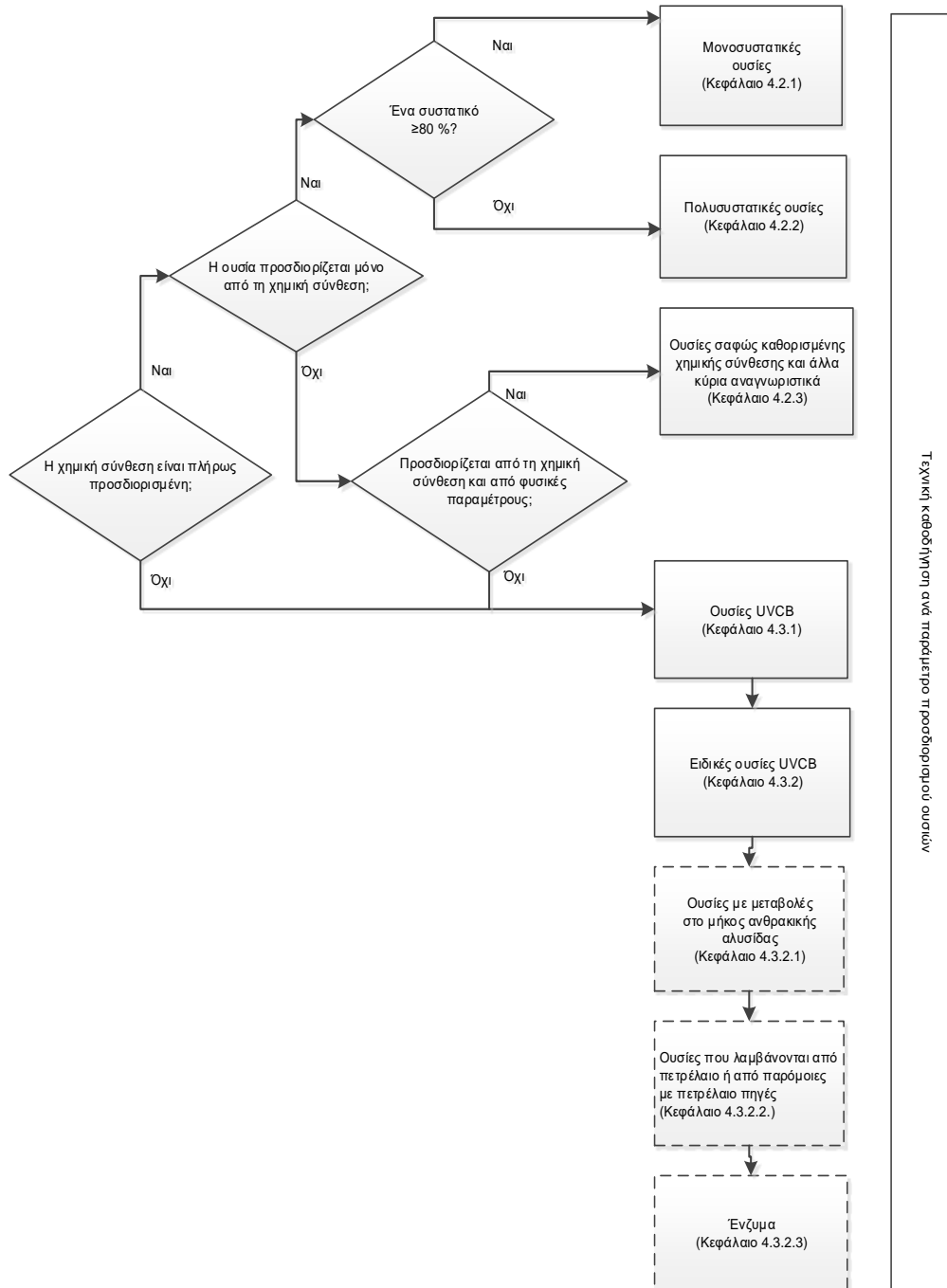
Η παρούσα ενότητα χωρίζεται σε επιμέρους ενότητες οι οποίες περιλαμβάνουν ειδική καθοδήγηση για τον προσδιορισμό διαφόρων τύπων ουσιών. Στην Εικόνα 1 παρέχεται διάγραμμα για την εξεύρεση των κατάλληλων ενοτήτων.

Το διάγραμμα της Εικόνα 1 βασίζεται σε εμπειρικά κριτήρια. Ο καταχωρίζων έχει την ευθύνη να επιλέξει την καταλληλότερη ενότητα και να καταγράψει την ταυτότητα της ουσίας σύμφωνα με τους κανόνες και τα κριτήρια για τον συγκεκριμένο τύπο ουσίας.

Ο βασικός κανόνας είναι ότι οι ουσίες προσδιορίζονται στο μεγαλύτερο δυνατό βαθμό από τη χημική σύνθεση και τον προσδιορισμό των συστατικών. Μόνο σε περίπτωση που αυτό δεν είναι τεχνικώς εφικτό πρέπει να χρησιμοποιούνται άλλα αναγνωριστικά, όπως αυτά καθορίζονται για τους διάφορους τύπους ουσιών UVCB.

Σε περίπτωση που ο καταχωρίζων αποκλίνει από τους κανόνες και τα κριτήρια προσδιορισμού των ουσιών που περιλαμβάνονται στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης, αυτό πρέπει να αιτιολογείται. Κατά τον προσδιορισμό των ουσιών πρέπει να διασφαλίζεται η διαφάνεια, η λογοδοσία και η συνέπεια.

Εικόνα 1: Διάγραμμα για την εξεύρεση των διαφόρων τύπων ουσιών στις ενότητες και στα παραρτήματα του εγγράφου καθοδήγησης



Για τον προσδιορισμό της ουσίας και, ανάλογα με την περίπτωση, για τον προσδιορισμό των προσμειξεων και των πρόσθετων πρέπει να παρέχεται περιγραφή των αναλυτικών μεθόδων ή/και των κατάλληλων βιβλιογραφικών παραπομπών (παράρτημα VI, σημεία 2.3.5, 2.3.6 και 2.3.7 του κανονισμού REACH). Οι πληροφορίες αυτές πρέπει να είναι επαρκείς ώστε να επιτρέπουν την αναπαραγωγή των μεθόδων. Όταν εφαρμόζονται οι αναλυτικές τεχνικές, πρέπει να παρέχονται και τα τυπικά αποτελέσματα.

4.2. Ουσίες σαφώς καθορισμένης σύνθεσης

Οι ουσίες σαφώς καθορισμένης χημικής σύνθεσης ονομάζονται με βάση το κύριο συστατικό/ά. Για ορισμένους τύπους ουσιών η χημική σύνθεση και μόνο δεν επαρκεί για τον χαρακτηρισμό. Σε αυτές τις περιπτώσεις, για τον προσδιορισμό της ουσίας πρέπει να προστίθενται ορισμένες επιπλέον φυσικές παράμετροι που σχετίζονται με τις χημικές δομές.

Κατά κανόνα, ο στόχος πρέπει να είναι η κάλυψη της σύνθεσης σε ποσοστό 100%, ενώ για κάθε συστατικό απαιτείται πλήρης χημικός προσδιορισμός, συμπεριλαμβανομένων των πληροφοριών σχετικά με τον συντακτικό τύπο. Σε ό,τι αφορά ουσίες που προσδιορίζονται βάσει της χημικής σύνθεσής τους, γίνεται διάκριση μεταξύ:

- **Κύριου συστατικού:** συστατικό ουσίας το οποίο δεν είναι πρόσθετο ή πρόσμειξη και το οποίο αποτελεί σημαντικό μέρος της ουσίας και, ως εκ τούτου, χρησιμοποιείται για την ονοματοδοσία της ουσίας και τον αναλυτικό προσδιορισμό αυτής.
- **Πρόσμειξης:** ανεπιθύμητο συστατικό που υπάρχει σε μια ουσία, όπως αυτή παράγεται. Μπορεί να προέρχεται από τα αρχικά υλικά ή να είναι αποτέλεσμα δευτερογενών ή ημιτελών αντιδράσεων κατά τη διαδικασία παραγωγής. Αν και οι προσμείξεις υπάρχουν στην τελική ουσία, δεν προστέθηκαν σε αυτήν σκοπίμως.
- **Πρόσθετου:** ουσία η οποία έχει προστεθεί με σκοπό τη σταθεροποίηση της ουσίας.

Όλα τα συστατικά (εκτός των πρόσθετων) τα οποία δεν είναι κύρια σε μονοσυστατική ή πολυσυστατική ουσία θεωρούνται προσμείξεις. Αν και σε ορισμένους τομείς αποτελεί συνήθη πρακτική η χρήση του όρου «ίχνη», στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης χρησιμοποιείται μόνο ο όρος «προσμείξεις».

Τα διάφορα συστατικά ικανοποιούν διαφορετικές απαιτήσεις προσδιορισμού:

- Τα κύρια συστατικά συνεισφέρουν στην ονοματοδοσία της ουσίας, ενώ κάθε κύριο συστατικό πρέπει να προσδιορίζεται επακριβώς.
- Οι προσμείξεις δεν συνεισφέρουν στην ονοματοδοσία της ουσίας, αλλά κάθε πρόσμειξη πρέπει να προσδιορίζεται επακριβώς.
- Τα πρόσθετα συνεισφέρουν στη σύνθεση της ουσίας (αλλά όχι στην ονοματοδοσία της) και θα πρέπει πάντα να προσδιορίζονται επακριβώς.
- Ο ακριβής προσδιορισμός των κύριων συστατικών, των προσμειξεων και των πρόσθετων πρέπει να συνίσταται σε ονομασία κατά IUPAC, χημική ονομασία, συντακτικό τύπο, αριθμό ΕΚ, αριθμό CAS, εάν υπάρχει.

Για τη διάκριση μεταξύ μονοσυστατικών και πολυσυστατικών ουσιών χρησιμοποιούνται ορισμένες συμβάσεις:

- Μονοσυστατική είναι μια ουσία στην οποία ένα συστατικό είναι παρόν σε συγκέντρωση τουλάχιστον 80% (κατά βάρος) και η οποία περιλαμβάνει έως 20% (κατά βάρος) προσμείξεις.

Μια μονοσυστατική ουσία λαμβάνει την ονομασία της βάσει του ενός κύριου συστατικού.

- Πολυσυστατική είναι μια ουσία που αποτελείται από διάφορα κύρια συστατικά τα οποία υπάρχουν γενικά σε συγκεντρώσεις $\geq 10\%$ και $< 80\%$ (κατά βάρος).

Μια πολυσυστατική ουσία αποκαλείται μάζα αντίδρασης δύο ή περισσότερων κύριων συστατικών.

Οι ανωτέρω αναφερθέντες κανόνες προορίζονται για καθοδηγητική χρήση. Η παρέκκλιση από

τους εν λόγω κανόνες είναι αποδεκτή εφόσον παρέχεται βάσιμη αιτιολόγηση.

Οι προσμείξεις που υπάρχουν σε συγκέντρωση $\geq 1\%$ θα πρέπει να προσδιορίζονται. Ωστόσο, οι προσμείξεις που σχετίζονται με την ταξινόμηση ή/και την αξιολόγηση ABT¹⁰ πρέπει να προσδιορίζονται πάντοτε, ανεξαρτήτως της συγκέντρωσής τους. Κατά κανόνα, οι πληροφορίες σύνθεσης πρέπει να συμπληρώνονται σε ποσοστό 100%.

Πρόσθετα, κατά την έννοια των κανονισμών REACH και CLP, καθώς και κατά την έννοια του παρόντος εγγράφου καθοδήγησης, είναι χημικοί παράγοντες απαραίτητοι για τη διατήρηση της σταθερότητας της ουσίας. Ως εκ τούτου, τα πρόσθετα αποτελούν απαραίτητο συστατικό της ουσίας και λαμβάνονται υπόψη κατά τη διαμόρφωση της σύνθεσης της μάζας. Ωστόσο, πέραν του ορισμού βάσει του κανονισμού REACH και του παρόντος εγγράφου καθοδήγησης, η λέξη «πρόσθετο» χρησιμοποιείται επίσης για σκοπίμως προστεθείσες ουσίες οι οποίες επιτελούν άλλες λειτουργίες, π.χ. ρυθμιστές pH ή χρωστικές ουσίες. Οι εν λόγω σκοπίμως προστιθέμενες ουσίες δεν αποτελούν μέρος της ουσίας στην καθαρή της μορφή και, ως εκ τούτου, δεν λαμβάνονται υπόψη κατά τη διαμόρφωση της σύνθεσης της μάζας.

Τα μείγματα, όπως ορίζονται στους κανονισμούς REACH και CLP, είναι εκούσια μείγματα ουσιών και, συνεπώς, δεν πρέπει να θεωρούνται πολυσυστατικές ουσίες.

Ειδική καθοδήγηση σχετικά με τις μονοσυστατικές και πολυσυστατικές ουσίες περιλαμβάνεται στην ενότητα 4.2.1 και στην ενότητα 4.2.2 αντίστοιχα. Για ουσίες για τις οποίες απαιτούνται πρόσθετες πληροφορίες (π.χ. ορισμένα ορυκτά), καθοδήγηση παρέχεται στην ενότητα 4.2.3.

4.2.1. Μονοσυστατικές ουσίες

Μονοσυστατική είναι η ουσία η οποία, οριζόμενη με βάση την ποσοτική της σύσταση, περιέχει ένα κύριο συστατικό σε συγκέντρωση τουλάχιστον 80% (κατά βάρος).

Σύμβαση ονοματοδοσίας

Μια μονοσυστατική ουσία λαμβάνει το όνομά της βάσει του κύριου συστατικού. Καταρχήν, η ονομασία πρέπει να δίδεται στα αγγλικά σύμφωνα με τους κανόνες ονοματολογίας κατά IUPAC (βλ. παράρτημα I). Επιπροσθέτως μπορούν να δίδονται και άλλοι διεθνώς αποδεκτοί προσδιορισμοί.

Αναγνωριστικά

Μια μονοσυστατική ουσία προσδιορίζεται από τη χημική ονομασία και όλα τα άλλα διαθέσιμα αναγνωριστικά (συμπεριλαμβανομένων του μοριακού και συντακτικού τύπου ή της κρυσταλλικής δομής) του κύριου συστατικού. Θα πρέπει να προσδιορίζεται κάθε πρόσμειξη ή/και πρόσθετο της μονοσυστατικής ουσίας. Πρέπει να παρέχονται η τυπική συγκέντρωση ή το εύρος συγκέντρωσης του κύριου συστατικού, των προσμείξεων ή/και των πρόσθετων. Όλα αυτά τα στοιχεία πρέπει να τεκμηριώνονται με αναλυτικές πληροφορίες.

Παράδειγμα				
Κύριο συστατικό	Περιεκτικότητα (%)	Πρόσμειξη	Περιεκτικότητα (%)	Ταυτότητα ουσίας
μ-ξυλόλιο	91	ο-ξυλόλιο	5	μ-ξυλόλιο
ο-ξυλόλιο	87	μ-ξυλόλιο	10	ο-ξυλόλιο

¹⁰ Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την αξιολόγηση ABT και τα συναφή κριτήρια διατίθενται στην Καθοδήγηση σχετικά με τις απαιτήσεις πληροφοριών και την αξιολόγηση χημικής ασφάλειας, ενότητα R11: Αξιολόγηση ABT.

Συνήθως, το κύριο συστατικό υπάρχει σε συγκέντρωση >80% και πρέπει να προσδιορίζεται πλήρως βάσει όλων των προαναφερθεισών παραμέτρων. Το σύνολο των τυπικών συγκεντρώσεων για το κύριο συστατικό και τις προσμείξεις πρέπει να είναι 100%. Οι προσμείξεις που υπάρχουν σε συγκέντρωση > 1% πρέπει να προσδιορίζονται με την ονομασία και τα αναγνωριστικά τους. Οι προσμείξεις που σχετίζονται με την ταξινόμηση ή/και την αξιολόγηση ABT¹¹ προσδιορίζονται πάντοτε από τα ίδια αναγνωριστικά, ανεξαρτήτως της συγκέντρωσής τους.

Για την ορθή εφαρμογή του κανόνα 80%, οι εκούσια προστιθέμενες ουσίες, όπως ρυθμιστές pH ή χρωστικές ουσίες, δεν περιλαμβάνονται στη σύνθεση της μάζας.

Ο «κανόνας 80%» έχει εφαρμοστεί για την κοινοποίηση νέων ουσιών (οδηγία 67/548/ΕΟΚ) και εφαρμόζεται στον κανονισμό REACH. Ωστόσο, η παρέκκλιση από τον εν λόγω κανόνα 80% πρέπει να αιτιολογείται. Πιθανά παραδείγματα αιτιολογημένης παρέκκλισης είναι τα εξής:

- Εάν το κύριο συστατικό υπάρχει σε συγκέντρωση <80% αλλά μπορεί να καταδειχθεί ότι η ουσία έχει παρόμοιες φυσικοχημικές ιδιότητες και ίδιο προφίλ επικινδυνότητας με άλλες μονοσυστατικές ουσίες με την ίδια ταυτότητα οι οποίες πληρούν τον κανόνα του 80%.
- Το εύρος των συγκεντρώσεων του κύριου συστατικού και των προσμείξεων επικαλύπτει το κριτήριο του 80% και το κύριο συστατικό παρουσιάζει μόνο περιστασιακά συγκέντρωση ≤80%.

Παραδείγματα									
Ουσ.	Κύριο συστατικό	Ανώτερη περιεκτικότητα (%)	Τυπική περιεκτικότητα (%)	Κατώτερη περιεκτικότητα (%)	Πρόσμειξη	Ανώτερη περιεκτικότητα (%)	Τυπική περιεκτικότητα (%)	Κατώτερη περιεκτικότητα (%)	Ταυτότητα ουσίας
1	ο-ξυλόλιο	90	85	65	μ-ξυλόλιο	35	15	10	ο-ξυλόλιο
2	ο-ξυλόλιο μ-ξυλόλιο	90 35	85 15	65 10	π-ξυλόλιο	5	4	1	ο-ξυλόλιο

Λόγω του εύρους συγκέντρωσης του κύριου συστατικού και της πρόσμειξης, οι ουσίες 1 και 2 μπορούν να θεωρηθούν ως πολυσυστατικές ουσίες οι οποίες περιέχουν τα δύο κύρια συστατικά, ο-ξυλόλιο και μ-ξυλόλιο, ή ως μονοσυστατικές. Σε αυτή την περίπτωση πρέπει να θεωρηθούν αμφότερες ως μονοσυστατικές λόγω του ότι το ο-ξυλόλιο περιέχεται τυπικά σε συγκέντρωση >80%.

Αναλυτικές πληροφορίες

Πρέπει να παρέχονται επαρκή ποιοτικά στοιχεία για την επιβεβαίωση της ταυτότητας των συστατικών και των προσμείξεων της μονοσυστατικής ουσίας. Για την επιβεβαίωση της ταυτότητας της ουσίας ενδέχεται να είναι κατάλληλες αρκετές φασματοσκοπικές μέθοδοι, ειδικότερα η φασματοσκοπία υπεριώδους-ορατού (UV/Vis), η φασματοσκοπία υπερύθρου (IR), η φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (NMR) και η φασματοσκοπία μάζας (MS). Όσον αφορά τις ανόργανες ή τις οργανικές ουσίες ή/και τις ουσίες που περιέχουν οργανικά μεταλλικά άλατα που είναι ανιχνεύσιμα/μετρήσιμα στην κρυσταλλική δομή, στις περισσότερες περιπτώσεις είναι προτιμότερη η χρήση φασματοσκοπίας περίθλασης ακτίνων Χ (XRD).

Για την επιβεβαίωση της σύνθεσης της ουσίας πρέπει να παρέχονται ποσοτικές μέθοδοι, επί παραδείγματι χρωματογραφικές τεχνικές όπως η αέριος χρωματογραφία (GC) ή η υγρή χρωματογραφία υψηλής απόδοσης (HPLC), σε συνδυασμό με κάποια τεχνική ανίχνευσης. Όσον αφορά τις ανόργανες ουσίες, καταλληλότερες τεχνικές είναι ενδεχομένως η φασματοσκοπία περίθλασης ακτίνων Χ (XRD), η φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων Χ (XRF), η φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης (AAS), η φασματομετρία οπτικής εκπομπής επαγωγής

¹¹ Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την αξιολόγηση ABT και τα συναφή κριτήρια διατίθενται στην Καθοδήγηση σχετικά με τις απαιτήσεις πληροφοριών και την αξιολόγηση χημικής ασφάλειας, ενότητα R11: Αξιολόγηση ABT.

πλάσματος (ICP-OES) ή η φασματομετρία μάζας σε επαγωγικά συζευγμένο πλάσμα (ICP-MS). Ανάλογα με την περίπτωση, πρέπει να χρησιμοποιούνται και άλλες έγκυρες τεχνικές διαχωρισμού συστατικών.

Η περιγραφή των αναλυτικών μεθόδων πρέπει να περιλαμβάνει τα πειραματικά πρωτόκολλα που ακολουθούνται και την ερμηνεία των αποτελεσμάτων που αναφέρονται.

Οι αναλυτικές μέθοδοι υπόκεινται σε συνεχή εξέλιξη και βελτίωση. Ως εκ τούτου, αποτελεί ευθύνη του καταχωρίζοντος να παρουσιάζει τα κατάλληλα αναλυτικά δεδομένα.

4.2.2. Πολυσυστατικές ουσίες

Πολυσυστατική ουσία είναι μια ουσία, οριζόμενη βάσει της ποσοτικής σύνθεσής της, η οποία περιέχει περισσότερα από ένα κύρια συστατικά σε συγκέντρωση $\geq 10\%$ (κατά βάρος) και $< 80\%$ (κατά βάρος). Μια πολυσυστατική ουσία είναι το αποτέλεσμα διεργασίας παρασκευής¹².

Βάσει του κανονισμού REACH μια ουσία πρέπει να καταχωρίζεται όπως αυτή παράγεται. Εάν μια πολυσυστατική ουσία παρασκευάζεται, αυτή πρέπει να καταχωρίζεται^{13 14}. Η απόφαση, βάσει της οποίας καθορίζεται ο βαθμός στον οποίο τα διαφορετικά στάδια παραγωγής μιας ουσίας καλύπτονται από τη λέξη «παρασκευή», λαμβάνεται κατά περίπτωση. Ο έλεγχος της ουσίας στην καθαρή της μορφή δεν είναι απαραίτητος εάν το προφίλ επικινδυνότητας της ουσίας μπορεί να περιγραφεί επαρκώς βάσει των πληροφοριών για τα επιμέρους συστατικά.

Σύμβαση ονοματοδοσίας

Μια πολυσυστατική ουσία ονομάζεται βάσει της μάζας αντίδρασης των κύριων συστατικών της ουσίας στην καθαρή της μορφή, ήτοι όχι των αρχικών υλικών που ήταν απαραίτητα για την παραγωγή της ουσίας. Η γενική μορφή της ονομασίας είναι η εξής: «Μάζα αντίδρασης των [ονομασίες των κύριων συστατικών]». Συνιστάται οι ονομασίες των συστατικών να παρουσιάζονται κατά αλφαβητική σειρά και να χωρίζονται με τον σύνδεσμο «και». Μόνο τα κύρια συστατικά σε τυπική συγκέντρωση $\geq 10\%$ συνεισφέρουν στην ονομασία. Καταρχήν, οι ονομασίες πρέπει να δίδονται στα αγγλικά σύμφωνα με τους κανόνες ονοματολογίας κατά IUPAC. Επιπροσθέτως μπορούν να δίδονται και άλλοι διεθνώς αποδεκτοί προσδιορισμοί.

Αναγνωριστικά

Μια πολυσυστατική ουσία προσδιορίζεται από τη χημική ονομασία και όλα τα άλλα διαθέσιμα αναγνωριστικά της ουσίας στην καθαρή της μορφή, καθώς και από τη χημική ταυτότητα των συστατικών (συμπεριλαμβανομένων του μοριακού και συντακτικού τύπου, ή της κρυσταλλικής δομής). Θα πρέπει να προσδιορίζεται κάθε πρόσμειξη ή/και πρόσθετο της πολυσυστατικής ουσίας. Πρέπει να παρέχονται η τυπική συγκέντρωση ή το εύρος συγκέντρωσης των συστατικών, των προσμειξεων ή/και των πρόσθετων. Όλα αυτά τα στοιχεία πρέπει να τεκμηριώνονται με αναλυτικές πληροφορίες.

Παράδειγμα				
Κύρια συστατικά	Περιεκτικότητα (%)	Πρόσμειξη	Περιεκτικότητα (%)	Ταυτότητα ουσίας
μ-ξυλόλιο	50	π-ξυλόλιο	5	Μάζα αντίδρασης μ-ξυλόλιου και ο-ξυλόλιου
ο-ξυλόλιο	45			

Στις πολυσυστατικές ουσίες η χημική σύνθεση είναι γνωστή και περισσότερα του ενός κύρια συστατικά σχετίζονται με τον προσδιορισμό της ουσίας. Επιπλέον, η χημική σύνθεση της ουσίας είναι προβλέψιμη, ως τυπικές τιμές και εύρη. Τα κύρια συστατικά πρέπει να προσδιορίζονται πλήρως βάσει όλων των σχετικών παραμέτρων. Το σύνολο των τυπικών συγκεντρώσεων για τα κύρια συστατικά ($\geq 10\%$) και τις προσμειξεις ($< 10\%$) πρέπει να είναι 100%.

¹² Η διαφορά μεταξύ μείγματος και πολυσυστατικής ουσίας είναι ότι το μείγμα λαμβάνεται με την ανάμειξη δύο ή περισσότερων ουσιών χωρίς χημική αντίδραση. Μια πολυσυστατική ουσία είναι το αποτέλεσμα χημικής αντίδρασης.

¹³ Βάσει του κανονισμού REACH μια σειρά ουσιών εξαιρείται από την υποχρέωση καταχώρισης (π.χ. οι ουσίες που παρατίθενται στο παράρτημα IV).

¹⁴ Η εν λόγω προσέγγιση δεν εφαρμόζεται σε σειρά ειδικών ουσιών, όπως τα ορυκτά (για περισσότερες πληροφορίες, βλ. ενότητα 7.5).

Για τον ορθό προσδιορισμό της πολυσυστατικής ουσίας, οι εκούσια προστιθέμενες ουσίες (π.χ. ρυθμιστές pH ή χρωστικές ουσίες) δεν πρέπει να περιλαμβάνονται στη σύνθεση της μάζας.

Οι προσμείξεις που υπάρχουν σε συγκέντρωση $\geq 1\%$ προσδιορίζονται με την ονομασία και όλα τα διαθέσιμα αναγνωριστικά τους. Οι προσμείξεις που σχετίζονται με την ταξινόμηση ή/και την αξιολόγηση ABT προσδιορίζονται πάντοτε από τα ίδια αναγνωριστικά, ανεξαρτήτως της συγκέντρωσής τους.

Παράδειγμα								
Κύριο συστατικό	Ανώτερη περιεκτικότητα (%)	Τυπική περιεκτικότητα (%)	Κατώτερη περιεκτικότητα (%)	Πρόσμειξη	Ανώτερη περιεκτικότητα (%)	Τυπική περιεκτικότητα (%)	Κατώτερη περιεκτικότητα (%)	Ταυτότητα ουσίας
ανιλίνη	90	75	65	φαινανθρένιο	5	4	1	Μάζα αντίδρασης ανιλίνης και ναφθαλίνης
ναφθαλίνη	35	20	10					

Σύμφωνα με τους κανόνες στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης, η εν λόγω ουσία είναι πολυσυστατική. Αν και το εύρος συγκέντρωσης ενός συστατικού είναι $>80\%$, αυτό συμβαίνει μόνο περιστασιακά και η τυπική σύνθεση είναι $<80\%$.

Όταν ένα κύριο συστατικό μιας πολυσυστατικής ουσίας παρουσιάζει συγκέντρωση $\geq 80\%$ ή $<10\%$ (κατά βάρος), η εν λόγω παρέκκλιση πρέπει να αιτιολογείται. Ένα πιθανό παράδειγμα αιτιολογημένης παρέκκλισης είναι το εξής:

- Το συστατικό παρουσιάζει μόνο περιστασιακά συγκέντρωση $\geq 80\%$ ή $<10\%$.

Για παράδειγμα, μια ουσία περιέχει δύο συστατικά, ένα σε συγκέντρωση 85% και ένα άλλο σε συγκέντρωση 10% , ενώ το υπόλοιπο είναι προσμείξεις. Αμφότερα τα συστατικά συνεισφέρουν και είναι απαραίτητα για το επιθυμητό τεχνικό αποτέλεσμα της ουσίας. Σε αυτή την περίπτωση, παρά το ότι ένα συστατικό είναι παρόν σε συγκέντρωση $>80\%$, η ουσία μπορεί να περιγραφεί ως ουσία δύο συστατικών.

Αναλυτικές πληροφορίες

Πρέπει να παρέχονται επαρκή ποιοτικά στοιχεία για την επιβεβαίωση της ταυτότητας των συστατικών και των προσμείξεων μιας πολυσυστατικής ουσίας. Για την επιβεβαίωση της ταυτότητας της ουσίας ενδέχεται να είναι κατάλληλες αρκετές φασματοσκοπικές μέθοδοι, ειδικότερα η φασματοσκοπία υπεριώδους-ορατού (UV/Vis), η φασματοσκοπία υπερύθρου (IR), η φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (NMR) και η φασματοσκοπία μάζας (MS). Όσον αφορά τις ανόργανες ή τις οργανικές ουσίες ή/και τις ουσίες που περιέχουν οργανικά μεταλλικά άλατα που είναι ανιχνεύσιμα/μετρήσιμα στην κρυσταλλική δομή, στις περισσότερες περιπτώσεις είναι προτιμότερη η χρήση φασματοσκοπίας περίθλασης ακτίνων X (XRD).

Για την επιβεβαίωση της σύνθεσης της ουσίας πρέπει να παρέχονται ποσοτικές μέθοδοι, επί παραδείγματι χρωματογραφικές τεχνικές όπως η αέριος χρωματογραφία (GC) ή η υγρή χρωματογραφία υψηλής απόδοσης (HPLC), σε συνδυασμό με κάποια τεχνική ανίχνευσης. Όσον αφορά τις ανόργανες ουσίες, καταλληλότερες τεχνικές είναι ενδεχομένως η φασματοσκοπία περίθλασης ακτίνων X (XRD), η φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων X (XRF), η φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης (AAS), φασματομετρία οπτικής εκπομπής επαγωγής πλάσματος (ICP-OES) ή η φασματομετρία μάζας σε επαγωγικά συζευγμένο πλάσμα (ICP-MS). Ανάλογα με την περίπτωση, πρέπει να χρησιμοποιούνται και άλλες έγκυρες τεχνικές διαχωρισμού συστατικών.

Η περιγραφή των αναλυτικών μεθόδων πρέπει να περιλαμβάνει τα πειραματικά πρωτόκολλα που ακολουθούνται και την ερμηνεία των αποτελεσμάτων που αναφέρονται.

Οι αναλυτικές μέθοδοι υπόκεινται σε συνεχή εξέλιξη και βελτίωση. Ως εκ τούτου, αποτελεί ευθύνη του καταχωρίζοντος να παρουσιάζει τα κατάλληλα αναλυτικά δεδομένα.

Καταχώριση επιμέρους συστατικών πολυσυστατικής ουσίας

Γενικά, η διαδικασία καταγραφής της ταυτότητας των ουσιών για τους σκοπούς της καταχώρισης πρέπει να ακολουθεί την προσέγγιση των πολυσυστατικών ουσιών (ήτοι, καταχώριση της πολυσυστατικής ουσίας). Παρέκκλιση από την εν λόγω προσέγγιση για την καταχώριση επιμέρους συστατικών είναι εφικτή εφόσον αιτιολογείται. Η δυνατότητα παρέκκλισης από την τυπική περίπτωση στο πλαίσιο του προσδιορισμού (και πιθανώς την καταχώριση) ουσιών βάσει των επιμέρους συστατικών τους παρέχεται όταν:

- δεν περιορίζονται οι απαιτήσεις πληροφοριών
- υπάρχουν επαρκή διαθέσιμα δεδομένα ώστε να αιτιολογείται η προσέγγιση της καταχώρισης των επιμέρους συστατικών, ήτοι η προσέγγιση δεν πρέπει, κατά κανόνα, να συνεπάγεται πρόσθετες δοκιμές (σε σπονδυλωτά) σε σύγκριση με την τυπική προσέγγιση
- η καταχώριση των επιμέρους συστατικών έχει ως αποτέλεσμα τη διαμόρφωση αποτελεσματικότερης κατάστασης (ήτοι, την αποφυγή πολυάριθμων καταχωρίσεων ουσιών που αποτελούνται από τα ίδια συστατικά)
- παρέχονται οι πληροφορίες σχετικά με τη σύνθεση των επιμέρους μαζών αντίδρασης.

Δεν πρέπει να γίνεται κατάχρηση της εν λόγω ευελιξίας με σκοπό την αποφυγή των απαιτήσεων δεδομένων. Στην περίπτωση, π.χ., 1.200 τόνων ετησίως πολυσυστατικής ουσίας «(C + D)», με σύνθεση 50% C και 50% D, η εν λόγω προσέγγιση θα έχει ως αποτέλεσμα δύο καταχωρίσεις με τις ακόλουθες πληροφορίες:

Ουσία C

- Ποσότητα 600
- Απαιτήσεις δεδομένων για ουσίες >1.000 τόνους (παράρτημα X)

Ουσία D

- Ποσότητα 600
- Απαιτήσεις δεδομένων για ουσίες >1.000 τόνους (παράρτημα X)

Η εν λόγω προσέγγιση πρέπει να συνδυάζεται με την απαίτηση του κανονισμού REACH περί άθροισης των ποσοτήτων της ίδιας ουσίας ανά νομική οντότητα. Προτείνεται οι απαιτήσεις δεδομένων να καταρτίζονται ως εξής:

- άθροιση όλων των ποσοτήτων των επιμέρους συστατικών (σύμφωνα με τις ποσότητες στην ουσία)
- παραπομπή στην υψηλότερη ποσότητα μιας ουσίας στην οποία περιέχεται το συγκεκριμένο συστατικό

Οι απαιτήσεις πληροφοριών πρέπει να καταρτίζονται βάσει του υψηλότερου αποτελέσματος. Για την αναφορά των ποσοτήτων, πρέπει να χρησιμοποιείται το αποτέλεσμα του αθροίσματος της ποσότητας κάθε επιμέρους συστατικού. Κατωτέρω παρατίθενται απλοποιημένα παραδείγματα που απεικονίζουν την πρακτική εφαρμογή της εν λόγω προσέγγισης:

Παράδειγμα 1

Η πολυσυστατική ουσία «C+D+E» είναι αποτέλεσμα διεργασίας εντός μιας νομικής οντότητας από την οποία προκύπτουν διάφορες ουσίες:

- Ουσία 1: 50% C και 25% D και 25% E, 1.100 τόνοι ετησίως
- Ουσία 2: 50% C και 50% D 500 τόνοι ετησίως

Επίσης, σε αυτή την περίπτωση η αφετηρία είναι το προϊόν αντίδρασης: οι δύο ουσίες πρέπει να καταχωριστούν ως πολυσυστατικές ουσίες. Εάν υιοθετηθεί η προσέγγιση της καταχώρισης των επιμέρους συστατικών¹⁵, θα ισχύουν τα εξής:

Στη συγκεκριμένη την περίπτωση, η αναφορά της ουσίας D θα σήμαινε:

- Ποσότητα: $(25\% * 1100) + (50\% * 500) = 525$ τόνοι ετησίως

Ο καθορισμός των απαιτήσεων πληροφοριών βασίζεται στην αυστηρότερη απαίτηση. Σε αυτήν την περίπτωση: >1.000 τόνοι ετησίως, δεδομένου ότι η συνολική ποσότητα της πολυσυστατικής ουσίας «C+D+E» υπερβαίνει τους 1.000 τόνους ετησίως.

Σημείωση: στο συγκεκριμένο παράδειγμα, οι ουσίες C και E πρέπει να καταχωριστούν αναλόγως.

Παράδειγμα 2

Η πολυσυστατική ουσία «G+H+I» είναι αποτέλεσμα διεργασίας εντός μιας νομικής οντότητας από την οποία προκύπτουν διάφορες ουσίες:

- Ουσία 3: 65% G και 15% H και 20% I, 90 τόνοι ετησίως
- Ουσία 4: 60% G και 40% H, 90 τόνοι ετησίως

Αναφορά της ουσίας G:

- Ποσότητα: $(65\% * 90) + (60\% * 90) = 112,5$ τόνοι ετησίως

Ο καθορισμός των απαιτήσεων πληροφοριών βασίζεται στην αυστηρότερη απαίτηση. Σε αυτήν την περίπτωση: >100 τόνοι ετησίως, δεδομένου ότι η συνολική ποσότητα του συστατικού G υπερβαίνει τους 100 τόνους ετησίως.

Σημείωση: στο συγκεκριμένο παράδειγμα, οι ουσίες H και I πρέπει να καταχωριστούν αναλόγως.

Πέραν της κατάρτισης της απαίτησης πληροφοριών που αναφέρθηκε, ένα άλλο ζήτημα είναι ο αριθμός των νέων μελετών (σε σπονδυλωτά ζώα) που πρέπει να διενεργηθούν. Πριν αποφασίσουν ποια στρατηγική θα ακολουθήσουν, οι δυνητικοί καταχωρίζοντες πρέπει να εξετάσουν το εάν υπάρχουν επαρκείς διαθέσιμες μελέτες (σε σπονδυλωτά ζώα) και εάν η προτεινόμενη ευελιξία θα έχει ως αποτέλεσμα τη διεξαγωγή λιγότερων ή περισσότερων δοκιμών (σε σπονδυλωτά ζώα). Πρέπει να υιοθετηθεί η στρατηγική που έχει ως αποτέλεσμα την αποφυγή διεξαγωγής νέων δοκιμών (σε σπονδυλωτά ζώα).

Σε περίπτωση αμφιβολιών, ο τυπικός τρόπος καταγραφής της ταυτότητας της ουσίας με σκοπό την καταχώριση πρέπει να είναι πάντοτε ο προσδιορισμός της ουσίας όπως αυτή παρασκευάζεται.

4.2.3. Ουσίες σαφώς καθορισμένης χημικής σύνθεσης και άλλα κύρια αναγνωριστικά

Ορισμένες ουσίες (π.χ. ανόργανα ορυκτά) οι οποίες μπορούν να προσδιορίζονται βάσει της χημικής σύνθεσής τους χρειάζεται να προσδιορίζονται περαιτέρω βάσει πρόσθετων αναγνωριστικών ώστε να διαμορφώνεται ένας ολοκληρωμένος τρόπος προσδιορισμού ουσίας. Οι εν λόγω ουσίες μπορούν να είναι μονοσυστατικές ή πολυσυστατικές αλλά, πέραν των παραμέτρων προσδιορισμού ουσιών που περιγράφονται στις προηγούμενες ενότητες, είναι απαραίτητο να προσδιορίζονται και βάσει πρόσθετων κύριων αναγνωριστικών ώστε να καταγράφεται η ταυτότητά τους αναμφίλεκτα.

¹⁵ Το παράδειγμα αποσκοπεί απλώς στο να απεικονίσει τον τρόπο κατάρτισης των απαιτήσεων πληροφοριών και αναφοράς των ποσοτήτων. Δεν εξετάζεται το εάν η προσέγγιση είναι δικαιολογημένη στη συγκεκριμένη περίπτωση.

Παραδείγματα

Για ορισμένα μη μεταλλικά ορυκτά (φυσικής ή ανθρώπινης προέλευσης) με μοναδικές δομές είναι απαραίτητη επίσης η μορφολογία και η ορυκτή σύστασή τους ώστε να επιτυγχάνεται αναμφίλεκτος προσδιορισμός της ουσίας. Παράδειγμα είναι ο καολίνης (CAS 1332-58-7) ο οποίος αποτελείται από καολινίτη, πυριτικό αργιλικόκάλιο, άστριο και χαλαζία.

Η συμμόρφωση προς τις ισχύουσες βάσει του κανονισμού REACH ειδικές υποχρεώσεις για τις ουσίες σε «νανομορφές» προβλέπεται στο *Προσάρτημα για τις νανομορφές το οποίο ισχύει για την Καθοδήγηση σχετικά με την καταχώριση και τον προσδιορισμό ουσιών*¹⁶. Οι παρεχόμενες συμβουλές καλύπτουν ζητήματα σχετικά με τα νανοϋλικά όσον αφορά τον προσδιορισμό και τον χαρακτηρισμό των νανομορφών.

Σύμβαση ονοματοδοσίας

Καταρχήν, πρέπει να τηρείται η ίδια σύμβαση ονοματοδοσίας με αυτήν των μονοσυστατικών (βλ. ενότητα 4.2.1) ή των πολυσυστατικών ουσιών (βλ. ενότητα 4.2.2).

Σε ό,τι αφορά τα συστατικά ανόργανων ορυκτών, μπορούν να χρησιμοποιούνται οι ορυκτολογικές ονομασίες. Για παράδειγμα, ο απατίτης είναι πολυσυστατική ουσία που αποτελείται από ομάδα φωσφορικών ορυκτών, τα οποία αναφέρονται συνήθως ως υδροξυαπατίτης, φθοροαπατίτης και χλωροαπατίτης, λόγω των υψηλών συγκεντρώσεων ιόντων OH⁻, F⁻ ή Cl⁻, αντίστοιχα, στον κρύσταλλο. Ο τύπος του μείγματος των τριών συνηθέστερων ειδών είναι Ca₅(PO₄)₃(OH, F, Cl). Ένα άλλο παράδειγμα είναι ο αραγωνίτης, μία από τις ειδικές κρυσταλλικές δομές του ανθρακικού ασβεστίου.

Αναγνωριστικά

Οι εν λόγω ουσίες προσδιορίζονται και ονοματοδοτούνται σύμφωνα με τους κανόνες για τις μονοσυστατικές (βλ. ενότητα 4.2.1) ή τις πολυσυστατικές ουσίες (βλ. ενότητα 4.2.2). Οι άλλες ειδικές κύριες παράμετροι προσδιορισμού που θα προστεθούν εξαρτώνται από την ουσία. Παραδείγματα άλλων κύριων αναγνωριστικών μπορούν να είναι η στοιχειακή σύνθεση βάσει φασματικών δεδομένων, η κρυσταλλική δομή όπως αποτυπώνεται μέσω φασματοσκοπίας περίθλασης ακτίνων Χ (XRD), οι κορυφές απορρόφησης υπερύθρου, ο δείκτης διόγκωσης, η ικανότητα κατιοανταλλαγής ή άλλες φυσικές και χημικές ιδιότητες.

Σε ό,τι αφορά τα ορυκτά, είναι σημαντικός ο συνδυασμός των αποτελεσμάτων της στοιχειακής σύνθεσης με τα φασματικά δεδομένα για τον προσδιορισμό της ορυκτολογικής σύνθεσης και της κρυσταλλικής δομής. Στη συνέχεια, πραγματοποιείται επαλήθευση βάσει χαρακτηριστικών φυσικοχημικών ιδιοτήτων, όπως η κρυσταλλική δομή (όπως αποτυπώνεται από τη φασματοσκοπία περίθλασης ακτίνων Χ), το σχήμα, η σκληρότητα, η ικανότητα διόγκωσης, η πυκνότητα ή/και το εμβαδόν.

Παραδείγματα ειδικών πρόσθετων κυρίων αναγνωριστικών μπορούν να δοθούν για συγκεκριμένα ορυκτά, δεδομένου ότι τα ορυκτά διαθέτουν χαρακτηριστικές φυσικοχημικές ιδιότητες που επιτρέπουν την ολοκλήρωση του προσδιορισμού τους, π.χ., πολύ χαμηλή σκληρότητα για τάλκη, ικανότητα διόγκωσης για τον μπεντονίτη, σχήματα για τον διατομίτη, πολύ υψηλή πυκνότητα για τον βαρύτη και εμβαδόν (απορρόφηση αζώτου).

¹⁶ Προσάρτημα για τις νανομορφές το οποίο ισχύει για την Καθοδήγηση σχετικά με την καταχώριση και τον προσδιορισμό ουσιών, διατίθεται στην ηλεκτρονική διεύθυνση <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

Αναλυτικές πληροφορίες

Το κύριο κριτήριο είναι ότι πρέπει να παρέχονται όλες οι πληροφορίες που είναι απαραίτητες για την επιβεβαίωση της δομής της ουσίας. Πρέπει να παρέχονται οι ίδιες αναλυτικές πληροφορίες με αυτές των μονοσυστατικών (βλ. ενότητα 4.2.1) ή των πολυσυστατικών ουσιών (βλ. ενότητα 4.2.2).

4.3. Ουσίες UVCB

Οι ουσίες άγνωστης ή ασταθούς σύνθεσης, προϊόντα πολύπλοκων αντιδράσεων ή βιολογικά υλικά^{17, 18, 19}, οι αποκαλούμενες και ουσίες UVCB, δεν μπορούν να προσδιορίζονται επαρκώς βάσει της χημικής τους σύνθεσης διότι:

- ο αριθμός των συστατικών είναι σχετικά μεγάλος ή/και
- η σύνθεση είναι, σε σημαντικό βαθμό, άγνωστη ή/και
- η αστάθεια της σύνθεσης είναι σχετικά μεγάλη ή ελάχιστα προβλέψιμη.

Κατά συνέπεια, οι ουσίες UVCB απαιτούν άλλους τύπους πληροφοριών για τον προσδιορισμό τους, εκτός από όσα είναι γνωστά σχετικά με τη χημική σύνθεσή τους.

Στον Πίνακα 5 καταδεικνύεται ότι τα κύρια αναγνωριστικά για τους διάφορους τύπους ουσιών UVCB σχετίζονται με την προέλευση της ουσίας και τη χρησιμοποιούμενη διεργασία, ή ανήκουν σε ομάδα «άλλων κύριων αναγνωριστικών» (π.χ. «χρωματογραφικό ή άλλα αποτυπώματα»). Ο αριθμός και το είδος των αναγνωριστικών που παρέχονται στον Πίνακα 5 απεικονίζουν την ποικιλία των τύπων και δεν πρέπει να θεωρούνται ως πλήρης επισκόπηση αυτών. Όταν είναι γνωστή η χημική σύνθεση, π.χ., ενός προϊόντος πολύπλοκης αντίδρασης ή ουσίας βιολογικής προέλευσης, η ουσία πρέπει να προσδιορίζεται είτε ως μονοσυστατική είτε ως πολυσυστατική, ανάλογα με την περίπτωση. Η συνέπεια του προσδιορισμού μιας ουσίας ως UVCB είναι ότι κάποια σημαντική αλλαγή της προέλευσης ή της διεργασίας μπορεί να έχει ως αποτέλεσμα την παραγωγή διαφορετικής ουσίας η οποία πρέπει να καταχωριστεί εκ νέου. Εάν ένα μείγμα αντίδρασης προσδιορίζεται ως «πολυσυστατική ουσία», η ουσία μπορεί να παράγεται από διαφορετική πηγή ή/και μέσω διαφορετικών διεργασιών, εφόσον η σύνθεση της τελικής ουσίας παραμένει εντός του καθορισμένου εύρους. Στην περίπτωση αυτή, δεν απαιτείται νέα καταχώριση.

Γενική καθοδήγηση σχετικά με τις ουσίες UVCB διατίθεται στην ενότητα 4.3.1, ενώ ειδική καθοδήγηση σχετικά με ουσίες που παρουσιάζουν μεταβολές στα μήκη ανθρακικής αλυσίδας, ουσίες που λαμβάνονται από πετρέλαιο ή παρόμοιες με το πετρέλαιο πηγές και ένζυμα, όπως συγκεκριμένοι τύποι ουσιών UVCB, διατίθεται στην ενότητα 4.3.2.

4.3.1. Γενική καθοδήγηση σχετικά με τις ουσίες UVCB

Στην παρούσα ενότητα του εγγράφου καθοδήγησης παρέχεται γενική καθοδήγηση σχετικά με τον τρόπο χρήσης ορισμένων κύριων αναγνωριστικών για τον προσδιορισμό των ουσιών UVCB, πέραν των παραμέτρων προσδιορισμού ουσιών που περιλαμβάνονται στο παράρτημα VI (σημείο 2) του κανονισμού REACH.

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

¹⁸ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΠΡΟΣΤΑΣΙΑΣ ΤΟΥ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ ΤΩΝ ΗΠΑ (2005-B) Νόμος περί Ελέγχου των Τοξικών Ουσιών, καταχώριση στο ευρετήριο για συνδυασμούς δύο ή περισσότερων ουσιών: προϊόντα πολύπλοκων αντιδράσεων.

¹⁹ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΠΡΟΣΤΑΣΙΑΣ ΤΟΥ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ ΤΩΝ ΗΠΑ (2005-D) Νόμος περί Ελέγχου των Τοξικών Ουσιών, καταχώριση στο ευρετήριο χημικών ουσιών άγνωστης ή ασταθούς σύνθεσης, προϊόντων πολύπλοκων αντιδράσεων και βιολογικών υλικών: ουσίες UVCB.

Πληροφορίες σχετικά με τη χημική σύνθεση

Οι ουσίες UVCB είτε δεν μπορούν να προσδιοριστούν αποκλειστικά με την ονομασία των συστατικών κατά IUPAC, δεδομένου ότι δεν είναι εφικτός ο προσδιορισμός όλων των συστατικών, ή μπορούν να προσδιοριστούν κατά γενικό και όχι ειδικό τρόπο, λόγω της αστάθειας της ακριβούς σύνθεσης. Λόγω της έλλειψης διαφοροποίησης μεταξύ συστατικών και προσμείξεων, οι όροι «κύρια συστατικά» και «προσμείξεις» δεν πρέπει να χρησιμοποιούνται όταν πρόκειται για ουσίες UVCB.

Παρ' όλα αυτά η χημική σύνθεση και η ταυτότητα των συστατικών πρέπει να παρέχονται, στον βαθμό που είναι γνωστές. Η περιγραφή της σύνθεσης μπορεί συχνά να παρέχεται κατά τρόπο γενικότερο, για παράδειγμα, «γραμμικά λιπαρά οξέα C8-C16» ή «αιθοξυλιωμένες αλκοόλες με αλκοόλες C10-C14 και 4-10 μονάδες αιθοξυλίου». Επιπλέον, οι πληροφορίες σχετικά με τη χημική σύνθεση μπορούν να δίδονται βάσει γνωστών δειγμάτων αναφοράς ή προτύπων ενώ, σε πολλές περιπτώσεις, μπορούν να χρησιμοποιηθούν δείκτες και υφιστάμενοι κωδικοί. Άλλες γενικές πληροφορίες σχετικά με τη σύνθεση μπορεί να είναι τα αποκαλούμενα «αποτυπώματα», π.χ. χρωματογραφικές ή άλλες φασματικές εικόνες που απεικονίζουν ένα χαρακτηριστικό μοτίβο κατανομής κορυφών.

Όσον αφορά τις ουσίες UVCB, όλα τα συστατικά που υπάρχουν σε συγκεντρώσεις $\geq 10\%$ και όλα τα άλλα γνωστά συστατικά που υπάρχουν σε συγκεντρώσεις $< 10\%$ πρέπει να προσδιορίζονται με ονομασία κατά IUPAC στην αγγλική γλώσσα, η τυπική συγκέντρωση και το εύρος συγκέντρωσης.

Επιπλέον, εάν υπάρχει, για κάθε συστατικό πρέπει να παρέχεται το αριθμητικό αναγνωριστικό (αριθμός CAS ή/και ΕΚ ή αριθμός καταλόγου).

Τα συστατικά που δεν είναι δυνατόν να προσδιοριστούν μεμονωμένα πρέπει να περιγράφονται κατά ομάδες με βάση τον χημικό τους χαρακτήρα. Σε αυτήν την περίπτωση, για κάθε ομάδα πρέπει να καθορίζεται τουλάχιστον μια χημική ονομασία, η τυπική συγκέντρωση και το εύρος συγκέντρωσης. Επιπλέον, εάν υπάρχουν, πρέπει να παρέχονται οι μοριακές και συντακτικές πληροφορίες.

Τα συστατικά που σχετίζονται με την ταξινόμηση ή/και την αξιολόγηση ABT²⁰ της ουσίας προσδιορίζονται πάντοτε με βάση τα ίδια αναγνωριστικά στοιχεία, ανεξαρτήτως της συγκέντρωσής τους.

Τα άγνωστα συστατικά που δεν συμβάλλουν στην ταξινόμηση πρέπει να προσδιορίζονται όσο είναι δυνατόν βάσει γενικής περιγραφής του χημικού τους χαρακτήρα. Τα πρόσθετα πρέπει να προσδιορίζονται πλήρως κατά τρόπο παρόμοιο με αυτόν που περιγράφεται για τις σαφώς καθορισμένες ουσίες.

Κύριες παράμετροι προσδιορισμού – ονομασία, προέλευση και διεργασία

Δεδομένου ότι η χημική σύνθεση από μόνη της δεν επαρκεί για τον προσδιορισμό της ουσίας, η ουσία προσδιορίζεται γενικά βάσει της ονομασίας της, της προέλευσης ή της πηγής της και της περιγραφής της διεργασίας παρασκευής της. Άλλες ιδιότητες της ουσίας μπορούν επίσης να αποτελέσουν σημαντικά αναγνωριστικά στοιχεία, είτε ως συναφή γενικά αναγνωριστικά στοιχεία (π.χ. σημείο βρασμού) είτε ως αναγνωριστικά στοιχεία ζωτικής σημασίας για συγκεκριμένες ομάδες ουσιών (π.χ. καταλυτική δραστηριότητα για ένζυμα).

²⁰ Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την αξιολόγηση ABT και τα συναφή κριτήρια διατίθενται στην Καθοδήγηση σχετικά με τις απαιτήσεις πληροφοριών και την αξιολόγηση χημικής ασφάλειας, ενότητα R11: Αξιολόγηση ABT.

1. Σύμβαση ονοματοδοσίας

Γενικά, η ονομασία μιας ουσίας UVCB είναι συνδυασμός της προέλευσης και της διεργασίας με γενική μορφή: πρώτα η προέλευση και μετά η διεργασία/ες.

- Ουσία που παράγεται από βιολογικές πηγές προσδιορίζεται βάσει της ονομασίας του είδους.
- Ουσία που παράγεται από μη βιολογικές πηγές προσδιορίζεται βάσει των αρχικών υλικών.
- Οι διεργασίες προσδιορίζονται βάσει του τύπου της χημικής αντίδρασης, σε περίπτωση που πραγματοποιείται σύνθεση νέων μορίων, ή βάσει του τύπου του σταδίου εξευγενισμού, π.χ. εκχύλιση, κλασματοποίηση, συμπύκνωση ή υπόλειμμα.

Παραδείγματα

Αριθμός ΕΚ	Ονομασία ΕΚ
296-358-2	Λεβάντα, <i>Lavandula hybrida</i> , εκχ., ακετυλιωμένη
307-507-9	Λεβάντα, <i>Lavandula latifolia</i> , εκχ., θειωμένο, άλας παλλαδίου

Σε περίπτωση προϊόντων αντίδρασης, στο ευρετήριο ΕΚ έχουν χρησιμοποιηθεί διαφορετικές μορφές. Για παράδειγμα:

- EINECS: Κύριο αρχικό υλικό, προϊόντα αντίδρασης άλλου αρχικού υλικού/ών
- ELINCS: Προϊόντα αντίδρασης αρχικού υλικού/ών

Παραδείγματα

Αριθμός ΕΚ	Ονομασία ΕΚ
232-341-8	Νιτρώδες οξύ, προϊόντα αντίδρασης με 4-methyl-1,3-benzenediamine hydrochloride
263-151-3	Λιπαρά οξέα, κοκκοκάρυο, προϊόντα αντίδρασης με diethylenetriamine
400-160-5	Προϊόντα αντίδρασης λιπαρών οξέων ταλαιαίου, διαιθανολαμίνης και βορικού οξέως
428-190-4	Προϊόν αντίδρασης: 2,4-diamino-6-[2-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)ethyl]-1,3,5-triazine και κυανουρικό οξύ

Στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης η γενική μορφή της ονομασίας των προϊόντων αντίδρασης είναι «Προϊόντα αντίδρασης [ονομασίες των αρχικών υλικών]». Καταρχήν, οι ονομασίες πρέπει να δίδονται στα αγγλικά σύμφωνα με τους κανόνες ονοματολογίας κατά IUPAC. Επιπροσθέτως μπορούν να δίδονται και άλλοι διεθνώς αποδεκτοί προσδιορισμοί. Συνιστάται η λέξη «αντίδραση» στην ονομασία να αντικατασταθεί με τον συγκεκριμένο τύπο αντίδρασης που περιγράφεται κατά γενικό τρόπο, π.χ. εστεροποίηση ή σχηματισμός αλάτων κ.λπ. (βλ. καθοδήγηση για τις τέσσερις συγκεκριμένες υποκατηγορίες UVCB, κατωτέρω).

2. Προέλευση

Μπορούμε να διακρίνουμε δύο ομάδες προέλευσης:

2.1. Προελεύσεις βιολογικής φύσεως

Οι ουσίες βιολογικής προέλευσης πρέπει να προσδιορίζονται βάσει του γένους, του είδους και της οικογένειας, π.χ. *Pinus cembra*, *Pinaceae* σημαίνει *Pinus* (γένος), *cembra* (είδος), *Pinaceae* (οικογένεια), και του στελέχους ή του γενετικού τύπου, εφόσον συντρέχει περίπτωση. Ανάλογα με την περίπτωση, πρέπει επίσης να παρέχεται ο ιστός ή το τμήμα του οργανισμού που χρησιμοποιείται για την εκχύλιση της ουσίας, π.χ. μυελός των οστών, πάγκρεας, ή στέλεχος, σπόροι ή ρίζες.

Παραδείγματα	
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία ΕΚ
283-294-5	<p>Saccharomyces cerevisiae, εκχ.</p> <p>Περιγραφή ΕΚ</p> <p>Εκχυλίσματα και τα φυσικώς τροποποιημένα παράγωγά τους όπως βάμματα, συμπήγματα, απόλυτα, αιθέρια έλαια, ελαιορητίνες, τερπένια, κλάσματα απαλλαγμένα τερπενίων, αποστάγματα, υπολείμματα κ.λπ., που λαμβάνονται από το <i>Saccharomyces cerevisiae</i>, <i>Saccharomycelaceae</i>.</p>
296-350-9	<p>Arnica mexicana, εκχ.</p> <p>Περιγραφή ΕΚ</p> <p>Εκχυλίσματα και τα φυσικώς τροποποιημένα παράγωγά τους όπως βάμματα, συμπήγματα, απόλυτα, αιθέρια έλαια, ελαιορητίνες, τερπένια, κλάσματα απαλλαγμένα τερπενίων, αποστάγματα, υπολείμματα κ.λπ., που λαμβάνονται από το <i>Arnica mexicana</i>, <i>Compositae</i>.</p>

2.2. Χημικές προελεύσεις ή προελεύσεις από ορυκτά

Σε περίπτωση προϊόντων χημικών αντιδράσεων, τα αρχικά υλικά πρέπει να περιγράφονται βάσει της ονομασίας τους κατά IUPAC στα αγγλικά. Οι προελεύσεις από ορυκτά πρέπει να περιγράφονται με γενικούς όρους, π.χ. φωσφορικά μεταλλεύματα, βωξίτης, πυριτικό αργίλιο, ορυκτά αέρια, άνθρακας, τύρφη.

3. Διεργασία

Οι διεργασίες προσδιορίζονται βάσει του τύπου της χημικής αντίδρασης, σε περίπτωση που πραγματοποιείται σύνθεση νέων μορίων, ή βάσει του τύπου του σταδίου εξευγενισμού, π.χ. εκχύλιση, κλασματοποίηση, συμπύκνωση, ή ως υπόλειμμα επεξεργασίας.

Σε ό,τι αφορά ορισμένες ουσίες, π.χ. χημικά παράγωγα, η διεργασία περιγράφεται ως συνδυασμός εξευγενισμού και σύνθεσης.

3.1 Σύνθεση

Μεταξύ των αρχικών υλικών λαμβάνει χώρα ορισμένη χημική ή βιοχημική αντίδραση με αποτέλεσμα την παραγωγή της ουσίας. Για παράδειγμα, η αντίδραση Grignard, η σουλφωση, ο ενζυματικός διαχωρισμός μέσω πρωτεάσης ή λιπάσης κ.λπ. Πολλές αντιδράσεις παραγωγής ανήκουν επίσης σε αυτόν τον τύπο.

Σε ό,τι αφορά ουσίες που έχουν προκύψει από σύνθεση πρόσφατα, για τις οποίες δεν είναι εφικτή η παροχή της χημικής σύνθεσης, το κύριο αναγνωριστικό είναι τα αρχικά υλικά μαζί με προσδιορισμό της αντίδρασης, ήτοι του τύπου της χημικής αντίδρασης. Ο τύπος της χημικής αντίδρασης υποδεικνύει τα μόρια που αναμένεται να είναι παρόντα στην ουσία. Υπάρχουν αρκετοί τύποι τελικής χημικής αντίδρασης: υδρόλυση, εστεροποίηση, αλκυλίωση, χλωρίωση κ.λπ. Δεδομένου ότι οι τύποι χημικής αντίδρασης παρέχουν γενικές μόνο πληροφορίες σχετικά με τις παραγόμενες ουσίες, για τον πλήρη χαρακτηρισμό και προσδιορισμό της ουσίας σε πολλές περιπτώσεις θα είναι απαραίτητο και το χρωματογραφικό αποτύπωμα.

Παραδείγματα	
Αριθμοί EC	Όνομασία EK
294-801-4	Λινέλαιο, εποξειδωμένο, προϊόντα αντίδρασης με tetraethylenepentamine
401-530-9	Προϊόν αντίδρασης (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzophenone και triethoxysilane) με (προϊόν υδρόλυσης πυριτίου και methyltrimethoxysilane)

3.2 Εξευγενισμός

Ο εξευγενισμός μπορεί να εφαρμοστεί με πολλούς τρόπους σε ουσίες φυσικής προέλευσης ή προέλευσης από ορυκτά, όταν δεν μεταβάλλεται η χημική ταυτότητα των συστατικών, αλλά μεταβάλλεται η συγκέντρωση των συστατικών, π.χ. επεξεργασία εν ψυχρώ φυτικού ιστού και, στη συνέχεια, εκχύλιση με αλκοόλη.

Ο εξευγενισμός μπορεί να προσδιοριστεί περαιτέρω σε διεργασίες όπως η εκχύλιση. Ο προσδιορισμός της ουσίας εξαρτάται από τον τύπο της διεργασίας:

- Σε ό,τι αφορά ουσίες που παράγονται με φυσικές μεθόδους, π.χ. εξευγενισμός ή κλασματοποίηση, προσδιορίζονται το εύρος διαχωρισμού και η παράμετρος του κλάσματος (π.χ.: μοριακό μέγεθος, μήκος ανθρακικής αλυσίδας, σημείο βρασμού, εύρος πτητικότητας κ.λπ.)
- Σε ό,τι αφορά ουσίες που παράγονται μέσω συμπύκνωσης, π.χ. προϊόντα μεταλλουργικών διεργασιών, ιζήματα φυγοκέντρησης, υπολείμματα διήθησης κ.λπ., προσδιορίζεται το στάδιο της συμπύκνωσης μαζί με τη γενική σύνθεση της προκύπτουσας ουσίας σε σύγκριση με το αρχικό υλικό.

Παραδείγματα	
Αριθμός EK	Όνομασία EK
408-250-6	Συμπύκνωμα ενώσεων οργανικού βολφραμίου (προϊόντα αντίδρασης εξαχλωριδίου του βολφραμίου με 2-methylpropan-2-ol, nonylphenol και pentane-2,4-dione)

- Σε ό,τι αφορά τα υπολείμματα μιας συγκεκριμένης αντίδρασης, π.χ. σκωρίες, πίσσες και βαρέα κλάσματα, η διεργασία πρέπει να περιγράφεται μαζί με τη γενική σύνθεση της προκύπτουσας ουσίας.

Παραδείγματα	
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία ΕΚ
283-659-9	Κασσίτερος, υπολείμματα τήξης Περιγραφή ΕΚ Ουσία που προκύπτει από τη χρήση και παραγωγή κασσίτερου και των κραμάτων αυτού που λαμβάνονται από πρωτογενείς και δευτερογενείς πηγές και περιλαμβάνουν ανακυκλωμένα φυτικά ενδιάμεσα προϊόντα. Αποτελείται κυρίως από ενώσεις κασσίτερου και ενδέχεται να περιέχει άλλα υπολειμματικά μη σιδηρούχα μέταλλα και τις ενώσεις τους.
293-693-6	Χονδρό άλεσμα σόγιας, εκχύλιση πρωτεϊνών. Υπόλειμμα Περιγραφή ΕΚ Υποπροϊόν, που περιέχει κυρίως υδρογονάνθρακες και παράγεται μέσω αιθανολικής εκχύλισης της σόγιας από την οποία έχει αφαιρεθεί το έλαιο.

- Σε ό,τι αφορά τα εκχυλίσματα, παρέχονται η μέθοδος εκχύλισης, ο διαλύτης που χρησιμοποιείται για την εκχύλιση και άλλες συναφείς συνθήκες, π.χ. θερμοκρασία/εύρος θερμοκρασίας.
- Σε ό,τι αφορά τη συνδυασμένη διεργασία, πέραν των πληροφοριών σχετικά με την προέλευση, προσδιορίζεται και κάθε στάδιο της διεργασίας (κατά γενικό τρόπο). Η εν λόγω συνδυασμένη διεργασία έχει ιδιαίτερη σημασία στην περίπτωση των χημικών παραγώγων.

Παραδείγματα:

- Ένα φυτό υφίσταται πρώτα εκχύλιση, το εκχύλισμα αποστάζεται και το απεσταγμένο κλάσμα του φυτικού εκχυλίσματος χρησιμοποιείται για τη χημική παραγωγή. Η προκύπτουσα ουσία μπορεί να υποβληθεί σε περαιτέρω καθαρισμό. Το καθαρό προϊόν ενδέχεται τελικά να προσδιορίζεται σαφώς από τη χημική του σύνθεση και να μην υπάρχει ανάγκη προσδιορισμού της ουσίας ως ουσίας UVCB. Εάν το προϊόν πρέπει και πάλι να χαρακτηριστεί ουσία UVCB, η συνδυασμένη διεργασία μπορεί να περιγραφεί ως «καθαρό χημικό παράγωγο απεσταγμένου κλάσματος φυτικού εκχυλίσματος».
- Εάν η περαιτέρω επεξεργασία ενός εκχυλίσματος περιλαμβάνει μόνο φυσική παραγωγή, η σύνθεση θα μεταβληθεί αλλά χωρίς σκόπιμη σύνθεση νέων μορίων. Εντούτοις, η αλλαγή της σύνθεσης έχει ως αποτέλεσμα διαφορετική ουσία, π.χ. απόσταγμα ή ίζημα φυτικού εκχυλίσματος.
- Για την παραγωγή προϊόντων πετρελαίου, συχνά χρησιμοποιούνται συνδυαστικά η χημική παραγωγή και η κλασματοποίηση. Για παράδειγμα, η απόσταξη πετρελαίου η οποία ακολουθείται από διάσπαση παράγει κλάσμα του αρχικού υλικού καθώς και νέα μόρια. Ως εκ τούτου, στη συγκεκριμένη περίπτωση, πρέπει να προσδιορίζονται και οι δύο τύποι διεργασιών ή το απόσταγμα να προσδιορίζεται ως το αρχικό υλικό της διάσπασης. Ειδικότερα, αυτό ισχύει για τα παράγωγα πετρελαίου που προκύπτουν συχνά από συνδυασμό διεργασιών. Εντούτοις, μπορεί να χρησιμοποιηθεί χωριστό ειδικό σύστημα για τον προσδιορισμό των πετρελαϊκών ουσιών (βλ. ενότητα 4.3.2.2).

Δεδομένου ότι ένα χημικό παράγωγο ενός εκχυλίσματος δεν θα περιέχει τα ίδια συστατικά σε σχέση με το εκχύλισμα προέλευσης, πρέπει να θεωρείται διαφορετική ουσία. Αυτός ο κανόνας ενδέχεται να έχει ως συνέπεια την παρέκκλιση του προσδιορισμού βάσει ονομασίας και περιγραφής από την προγενέστερη ονομασία και περιγραφή EINECS. Κατά την περίοδο

κατάρτισης του ευρετηρίου EINECS, τα εκχυλίσματα διαφορετικών διεργασιών, οι διάφοροι διαλύτες, ακόμη και τα φυσικά ή χημικά παράγωγα καλύπτονταν συχνά από μία μόνο καταχώριση. Όμως, βάσει του κανονισμού REACH, οι εν λόγω ουσίες πρέπει να καταχωρίζονται ως χωριστές ουσίες.

4. Άλλες παράμετροι προσδιορισμού ουσιών

Πέραν της χημικής ονομασίας, της προέλευσης και του προσδιορισμού της διεργασίας, μια ουσία UVCB πρέπει να περιλαμβάνει και τυχόν άλλες σχετικές πληροφορίες, όπως απαιτείται βάσει του παραρτήματος VI, σημείο 2 του κανονισμού REACH.

Σε ό,τι αφορά ειδικότερα συγκεκριμένους τύπους ουσιών UVCB, μπορούν να υπάρχουν και άλλες και άλλες συναφείς παράμετροι προσδιορισμού. Μεταξύ των πρόσθετων αναγνωριστικών ενδέχεται να περιλαμβάνονται:

- Γενική περιγραφή της χημικής σύνθεσης
- Χρωματογραφικό αποτύπωμα ή άλλοι τύποι αποτυπώματος
- Υλικό αναφοράς (π.χ. ISO)
- Φυσικοχημικές παράμετροι (π.χ. σημείο βρασμού)
- Αριθμός χρωματικού δείκτη
- Αριθμός AISE.

Ακολουθώς παρέχεται ειδική καθοδήγηση σχετικά με τους κανόνες, τα κριτήρια και τον τρόπο χρήσης των πληροφοριών ονομασίας, προέλευσης και διεργασίας για τον προσδιορισμό των ουσιών UVCB, για διάφορους τύπους προέλευσης και διεργασιών. Στις παραγράφους που ακολουθούν περιγράφονται τέσσερις υποκατηγορίες τύπου ουσιών UVCB ως συνδυασμός βιολογικών ή χημικών/ορυκτών πηγών και διεργασιών (σύνθεση ή εξευγενισμός).

Υποκατηγορία τύπου UVCB 1, όπου η προέλευση της ουσίας είναι βιολογική και η διεργασία είναι η σύνθεση

Οι ουσίες βιολογικής προέλευσης μπορούν να τροποποιηθούν μέσω (βιο)χημικής επεξεργασίας για την παραγωγή συστατικών τα οποία δεν ήταν παρόντα στο αρχικό υλικό, π.χ. χημικά παράγωγα φυτικών εκχυλισμάτων ή προϊόντα ενζυμικής επεξεργασίας των εκχυλισμάτων. Για παράδειγμα, πρωτεΐνες μπορούν να υποστούν υδρόλυση με πρωτεάση για την παραγωγή ολιγοπεπτιδίων, ή η κυτταρίνη από το ξύλο μπορεί να υποστεί υδροξυλίωση για την παραγωγή καρβοξυμεθυλοκυτταρίνης (CMC).

Τα προϊόντα ζύμωσης ενδέχεται να ανήκουν και αυτά στη συγκεκριμένη υποκατηγορία τύπου ουσιών UVCB. Για παράδειγμα, η βινάσση είναι προϊόν ζύμωσης σακχάρων και περιέχει, σε σύγκριση με τη ζάχαρη, πολλά διαφορετικά συστατικά. Όταν τα προϊόντα ζύμωσης υποβάλλονται σε περαιτέρω καθαρισμό, οι ουσίες ενδέχεται τελικώς να καταστούν πλήρως προσδιορίσιμες βάσει της χημικής σύνθεσής τους και δεν πρέπει να προσδιορίζονται πλέον ως ουσίες UVCB.

Τα ένζυμα αποτελούν ειδική ομάδα ουσιών που μπορούν να παραχθούν μέσω εκχύλισης και περαιτέρω εξευγενισμού υλικού από βιολογικής προέλευσης. Αν και η προέλευση και η διεργασία θα μπορούσαν να προσδιοριστούν αναλυτικά, αυτό δεν συνεπάγεται την παραγωγή των συγκεκριμένων πληροφοριών για το ένζυμο. Σε ό,τι αφορά τις εν λόγω ουσίες, χρησιμοποιείται ειδικό σύστημα ταξινόμησης, ονοματοδοσίας και προσδιορισμού (βλ. ενότητα 4.3.2.3).

Για τον προσδιορισμό μιας ουσίας, πρέπει να παρέχεται το τελικό στάδιο επεξεργασίας ή/και τυχόν άλλο στάδιο της επεξεργασίας που είναι σημαντικό για τον προσδιορισμό της.

Η περιγραφή της χημικής διεργασίας είναι γενική περιγραφή του τύπου της διεργασίας (εστεροποίηση, αλκαλική υδρόλυση, αλκυλίωση, χλωρίωση, υποκατάσταση κ.λπ.) μαζί με τις συναφείς συνθήκες διεργασίας.

Η περιγραφή της βιοχημικής διεργασίας μπορεί να είναι μια γενική περιγραφή της καταλυμένης αντίδρασης, μαζί με την ονομασία του ενζύμου που δρα ως καταλύτης της αντίδρασης.

Σε ό,τι αφορά ουσίες που παράγονται μέσω ζύμωσης ή (ιστο-)καλλιέργειες ειδών, πρέπει να παρέχεται το είδος που υφίσταται ζύμωση, ο τύπος και οι γενικές συνθήκες της ζύμωσης (διαλείποντος έργου ή συνεχής, αερόβιος, αναερόβιος, ανοξική, θερμοκρασία, pH κ.λπ.), μαζί με τυχόν περαιτέρω στάδια διεργασίας που εφαρμόζονται με σκοπό την απομόνωση των προϊόντων ζύμωσης, π.χ. φυγοκέντρηση, ιζηματοποίηση, εκχύλιση κ.λπ. Εάν οι ουσίες αυτές υφίστανται περαιτέρω εξευγενισμό, ενδέχεται να παραχθεί κλάσμα, συμπύκνωμα ή υπόλειμμα. Οι εν λόγω περαιτέρω επεξεργασμένες ουσίες προσδιορίζονται μέσω πρόσθετων πληροφοριών περί των περαιτέρω σταδίων της διεργασίας.

Υποκατηγορία τύπου UVCB 2, όπου η προέλευση της ουσίας είναι χημική ή από ορυκτά και η διεργασία είναι η σύνθεση

Οι ουσίες UVCB που λαμβάνονται από χημικές πηγές ή προέρχονται από ορυκτά και οι οποίες παράγονται μέσω διεργασίας στο πλαίσιο της οποίας λαμβάνει χώρα σύνθεση νέων μορίων, είναι «προϊόντα αντίδρασης». Παραδείγματα προϊόντων χημικής αντίδρασης είναι τα προϊόντα εστεροποίησης, αλκυλίωσης ή χλωρίωσης. Οι βιοχημικές αντιδράσεις διά της χρήσης απομονωμένων ενζύμων είναι ειδικού τύπου χημικές αντιδράσεις. Εντούτοις, σε περίπτωση που χρησιμοποιείται πολύπλοκος βιοχημικός τρόπος σύνθεσης με χρήση πλήρων μικροοργανισμών, είναι προτιμότερο η προκύπτουσα ουσία να θεωρείται προϊόν ζύμωσης και να προσδιορίζεται διά της διεργασίας ζύμωσης και του είδους ζύμωσης παρά διά των αρχικών υλικών (βλ. υποκατηγορία τύπου UVCB 4).

Δεν πρέπει κάθε προϊόν αντίδρασης να προσδιορίζεται αυτόματα ως ουσία UVCB. Εάν ένα προϊόν αντίδρασης μπορεί να προσδιορισθεί επαρκώς βάσει της χημικής σύνθεσης (συμπεριλαμβανομένου κάποιου βαθμού μεταβλητότητας), πρέπει να προτιμάται ο προσδιορισμός του ως πολυσυστατικής ουσίας (βλ. ενότητα 4.2.2). Μόνο όταν η σύνθεση του προϊόντος αντίδρασης είναι ανεπαρκώς γνωστή ή ελάχιστα προβλέψιμη πρέπει η ουσία να προσδιορίζεται ως ουσία UVCB («προϊόν αντίδρασης»). Ο προσδιορισμός ενός προϊόντος αντίδρασης βασίζεται στα αρχικά υλικά της αντίδρασης και στη διεργασία (βιο)χημικής αντίδρασης κατά την οποία παράγεται η ουσία.

Παραδείγματα

Αριθμός ΕΚ	Ονομασία EINECS	Αριθμός CAS
294-006-2	Εννεανοδιοϊκό οξύ, προϊόντα αντίδρασης με 2-amino-2-methyl-1-propanol	91672-02-5
294-148-5	Φορμαλδεΰδη, προϊόντα αντίδρασης με διαιθυλενιογλυκόλη και φαινόλη	91673-32-4

Κύριο αναγνωριστικό των προϊόντων αντίδρασης είναι η περιγραφή της διαδικασίας παρασκευής. Σε ό,τι αφορά τον προσδιορισμό ουσιών, παρέχεται το τελικό ή το σημαντικότερο στάδιο της διεργασίας. Η περιγραφή της χημικής διεργασίας είναι γενική περιγραφή του τύπου της διεργασίας (π.χ. εστεροποίηση, αλκαλική υδρόλυση, αλκυλίωση, χλωρίωση, υποκατάσταση κ.λπ.) μαζί με τις συναφείς συνθήκες διεργασίας. Η βιοχημική διεργασία περιγράφεται βάσει του τύπου της αντίδρασης, μαζί με την ονομασία του ενζύμου που δρα ως καταλύτης της αντίδρασης.

Υποκατηγορία τύπου UVCB 3, όπου η προέλευση της ουσίας είναι βιολογική και η διεργασία είναι ο εξευγενισμός

Ουσίες UVCB βιολογικής προέλευσης, οι οποίες προκύπτουν από διεργασία εξευγενισμού κατά την οποία δεν παράγονται σκοπίμως νέα μόρια, μπορούν να είναι π.χ. εκχυλίσματα, κλάσματα εκχυλίσματος, συμπυκνώματα εκχυλίσματος, εκχύλισμα που έχει υποβληθεί σε καθαρισμό ή υπολείμματα διεργασίας ουσιών βιολογικής προέλευσης.

Αφής στιγμής ένα εκχύλισμα υποβληθεί σε περαιτέρω επεξεργασία, η ουσία δεν είναι πλέον ταυτόσημη με το εκχύλισμα αλλά είναι άλλη ουσία που ανήκει σε άλλη υποκατηγορία τύπου ουσιών UVCB, π.χ. κλάσμα ή υπόλειμμα εκχυλίσματος. Οι εν λόγω ουσίες προσδιορίζονται με πρόσθετες παραμέτρους (περαιτέρω) επεξεργασίας. Εάν το εκχύλισμα τροποποιηθεί μέσω χημικών ή βιοχημικών αντιδράσεων, με αποτέλεσμα την παραγωγή νέων μορίων (παράγωγα), ο προσδιορισμός της ουσίας πραγματοποιείται με χρήση των σχετικών οδηγιών υποκατηγορίας τύπου ουσιών UVCB 2 ή σύμφωνα με την ενότητα 4.2 για σαφώς καθορισμένη ουσία.

Η διαφοροποίηση των εκχυλισμάτων που έχουν υποστεί περαιτέρω επεξεργασία ενδέχεται να έχει ως αποτέλεσμα η νέα ονομασία και η περιγραφή να διαφέρουν από τις αντίστοιχες στο ευρετήριο EINECS. Κατά την περίοδο κατάρτισης του ευρετηρίου, δεν πραγματοποιήθηκε αυτού του είδους η διαφοροποίηση και ενδέχεται όλοι οι τύποι των εκχυλισμάτων με διαφορετικούς διαλύτες και στάδια περαιτέρω επεξεργασίας να έχουν καλυφθεί βάσει μίας μόνο καταχώρισης.

Το πρώτο κύριο αναγνωριστικό για αυτήν την υποκατηγορία τύπου ουσίας UVCB είναι η οικογένεια, το γένος και το είδος του οργανισμού από τον οποίο προέρχεται η ουσία. Ανάλογα με την περίπτωση, πρέπει να παρέχεται ο ιστός ή το τμήμα του οργανισμού που χρησιμοποιείται για την εκχύλιση της ουσίας, π.χ. μυελός των οστών, πάγκρεας, ή στέλεχος, σπόροι ή ρίζες. Σε ό,τι αφορά ουσίες μικροβιολογικής προέλευσης, προσδιορίζεται το στέλεχος και ο γενετικός τύπος του είδους.

Εάν η ουσία UVCB παράγεται από διαφορετικό είδος, θα θεωρείται διαφορετική ουσία, ακόμη και αν η χημική σύνθεση είναι παρόμοια.

Παραδείγματα

Αριθμός ΕΚ	Ονομασία EINECS
290-977-1	Εκχύλισμα οξειδωμένου αιματόξυλου (<i>Haematoxylon campechianum</i>) Περιγραφή ΕΚ Η εν λόγω ουσία προσδιορίζεται στον χρωματικό δείκτη με τον αριθμό C.I. 75290 οξειδωμένο.
282-014-9	Παγκρεατικά εκχυλίσματα, αποπρωτεϊνωμένα

Το δεύτερο κύριο αναγνωριστικό είναι η επεξεργασία της ουσίας, π.χ. η διεργασία εκχύλισης, η κλασματοποίηση, η διεργασία καθαρισμού ή συμπύκνωσης ή η διεργασία που επηρεάζει τη σύνθεση του υπολείμματος. Ως εκ τούτου, ο εξευγενισμός των εκχυλισμάτων με διαφορετικές διεργασίες, π.χ. χρήση διαφορετικών διαλυτών ή διαφορετικών σταδίων καθαρισμού, θα έχει ως αποτέλεσμα διαφορετικές ουσίες.

Όσο περισσότερα στάδια εφαρμόζονται για τον εξευγενισμό, τόσο πιο εφικτός θα καθίσταται ο προσδιορισμός της ουσίας βάσει της χημικής της σύνθεσης. Σε αυτή την περίπτωση, τα διαφορετικά είδη προέλευσης ή οι διαφορετικές τροποποιήσεις των διεργασιών δεν έχουν αυτομάτως ως αποτέλεσμα τον σχηματισμό διαφορετικής ουσίας.

Μια κύρια παράμετρος προσδιορισμού για ουσίες βιολογικής προέλευσης είναι η περιγραφή των συναφών διεργασιών. Σε ό,τι αφορά εκχυλίσματα, η διεργασία εκχύλισης περιγράφεται με όλες τις λεπτομέρειες που αφορούν την ταυτότητα της ουσίας. Προσδιορίζεται τουλάχιστον ο χρησιμοποιούμενος διαλύτης.

Όταν για την παρασκευή της ουσίας χρησιμοποιούνται περαιτέρω στάδια επεξεργασίας, όπως κλασματοποίηση ή συμπύκνωση, περιγράφεται ο συνδυασμός των συναφών σταδίων, π.χ. ο συνδυασμός εκχύλισης και κλασματοποίησης, συμπεριλαμβανομένων των ευρών διαχωρισμού.

Υποκατηγορία τύπου UVCB 4, όπου η προέλευση της ουσίας είναι χημική ή από ορυκτά και η διεργασία είναι ο εξευγενισμός

Ουσίες μη βιολογικής προέλευσης, ήτοι ουσίες που είναι ή προέρχονται από ορυκτά, μεταλλεύματα, άνθρακα, φυσικό αέριο και αργό πετρέλαιο ή άλλες πρώτες ύλες για τη χημική βιομηχανία, και οι οποίες προκύπτουν από την επεξεργασία χωρίς σκόπιμες χημικές αντιδράσεις, μπορούν να είναι (καθαρά) κλάσματα, συμπυκνώματα ή υπολείμματα των εν λόγω διεργασιών.

Ο άνθρακας και το αργό πετρέλαιο χρησιμοποιούνται σε διεργασίες απόσταξης ή αεριοποίησης για την παραγωγή ευρέος φάσματος ουσιών, π.χ. πετρελαϊκές ουσίες και καύσιμα αέρια κ.λπ., καθώς και υπολειμμάτων όπως πίσσες και σκωρίες. Πολύ συχνά, ένα απεσταγμένο ή με άλλο τρόπο κλασματοποιημένο προϊόν υφίσταται άμεσα επεξεργασία, συμπεριλαμβανομένων των χημικών αντιδράσεων. Σε τέτοιες περιπτώσεις, ο προσδιορισμός ουσίας πραγματοποιείται βάσει των οδηγιών που παρέχονται για την υποκατηγορία τύπου ουσιών UVCB 2, δεδομένου ότι η διεργασία είναι σημαντικότερη από ό,τι η προέλευση.

Σε ό,τι αφορά πετρελαϊκές ουσίες χρησιμοποιείται ειδικό σύστημα προσδιορισμού (βλ. ενότητα 4.3.2.2). Στις ουσίες που καλύπτονται από το συγκεκριμένο σύστημα περιλαμβάνονται κλάσματα και προϊόντα χημικών αντιδράσεων.

Άλλες ουσίες της υποκατηγορίας τύπου ουσιών UVCB 4 μπορούν να είναι μεταλλεύματα, συμπυκνώματα μεταλλευμάτων και σκωρίες που περιέχουν ποικίλες ποσότητες μετάλλων τα οποία μπορούν να εξαχθούν μέσω μεταλλουργικής επεξεργασίας.

Ορυκτά όπως ο μπεντονίτης ή το ανθρακικό ασβέστιο μπορούν να υποβληθούν σε επεξεργασία μέσω π.χ. διάλυσης σε οξέα ή/και χημικής ιζηματοποίησης ή εντός στηλών ιοντοανταλλαγής. Όταν η χημική σύνθεση είναι πλήρως προσδιορισμένη, τα ορυκτά πρέπει να προσδιορίζονται σύμφωνα με τις οδηγίες που παρέχονται στο κατάλληλο τμήμα της ενότητας 4.2. Εάν τα ορυκτά υφίστανται επεξεργασία μόνο με μηχανικές μεθόδους, π.χ. άλεση, κοσκίνισμα, φυγοκέντρηση, επίπλευση κ.λπ., θεωρείται ότι παραμένουν ίδια με τα ορυκτά που εξορύσσονται. Ορυκτά που παράγονται μέσω διαδικασίας παρασκευής μπορούν, για λόγους προσδιορισμού²¹, να θεωρούνται ίδια με τα αντίστοιχα ορυκτά που απαντούν στη φύση, υπό την προϋπόθεση ότι η σύνθεση είναι παρόμοια και το προφίλ τοξικότητας όμοιο.

Μια κύρια παράμετρος προσδιορισμού για ουσίες μη βιολογικής προέλευσης είναι η περιγραφή του συναφούς σταδίου/ων επεξεργασίας.

Σε ό,τι αφορά κλάσματα, η διεργασία κλασματοποίησης περιγράφεται με τις παραμέτρους και το εύρος διαχωρισμού για το απομονωμένο κλάσμα, σε συνδυασμό με την περιγραφή των προηγούμενων σταδίων επεξεργασίας, ανάλογα με την περίπτωση.

Σε ό,τι αφορά το στάδιο συμπύκνωσης, παρέχεται ο τύπος της διεργασίας, π.χ. εξάτμιση, ιζηματοποίηση κ.λπ., καθώς και ο λόγος μεταξύ της εναρκτήριας συμπύκνωσης και της τελικής συμπύκνωσης των κύριων συστατικών, πέραν των πληροφοριών σχετικά με το προηγούμενο

²¹ Η χρήση της ίδιας προσέγγισης για τον προσδιορισμό ορυκτών που απαντούν στη φύση και ορυκτών που παράγονται με χημικό τρόπο δεν σημαίνει απαραίτητα ότι οι νομικές απαιτήσεις (π.χ. εξαίρεση από την υποχρέωση καταχώρισης) είναι οι ίδιες.

στάδιο/α της επεξεργασίας.

Μια κύρια παράμετρος προσδιορισμού των υπολειμμάτων μη βιολογικής προέλευσης είναι η περιγραφή της διεργασίας από την οποία προέρχεται το υπόλειμμα. Η διεργασία μπορεί να είναι οποιαδήποτε φυσική αντίδραση που παράγει υπολείμματα, π.χ. διεργασία καθαρισμού, κλασματοποίησης, συμπύκνωσης.

Αναλυτικές πληροφορίες

Οι ουσίες UVCB περιλαμβάνουν σημαντικά διαφοροποιημένους τύπους ουσιών, οι οποίοι διαφέρουν μεταξύ τους βάσει παραμέτρων όπως η προέλευση και η διεργασία παρασκευής. Ως εκ τούτου, θα πρέπει να υποβάλλονται κατά περίπτωση κατάλληλες αναλυτικές μέθοδοι για την παροχή πληροφοριών σχετικά με τη σύνθεση των ουσιών UVCB. Επιπλέον, οι πληροφορίες σχετικά με τη χρήση των εν λόγω μεθόδων υπόκεινται σε συνεχή εξέλιξη και βελτίωση. Συνεπώς, αποτελεί ευθύνη του καταχωρίζοντος να παρουσιάζει τα κατάλληλα αναλυτικά δεδομένα, προκειμένου παράσχει τις βέλτιστες δυνατές πληροφορίες ώστε να καταστεί εφικτός ο προσδιορισμός της ουσίας.

Για τον χαρακτηρισμό ουσιών UVCB μπορούν να χρησιμοποιηθούν πολλές ποιοτικές μέθοδοι, μεταξύ άλλων, για παράδειγμα, η φασματοσκοπία υπεριώδους ορατού (UV/Vis), η φασματοσκοπία υπερύθρου, η φασματομετρία μάζας, η φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού, η φασματοσκοπία περιθλασης ακτίνων Χ.

Πρέπει να παρέχονται ποσοτικά δεδομένα, όπως δεδομένα χρωματογραφημάτων ή περιθλασης, τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως αποτύπωση για τον χαρακτηρισμό της σύνθεσης της ουσίας.

Η περιγραφή των αναλυτικών μεθόδων πρέπει να περιλαμβάνει τα πειραματικά πρωτόκολλα που ακολουθούνται και την ερμηνεία των αποτελεσμάτων που αναφέρονται.

4.3.2. Ειδικό τύπο ουσιών UVCB

Στο παρόν τμήμα παρέχεται καθοδήγηση για ειδικές ομάδες ουσιών UVCB: ουσίες που παρουσιάζουν μεταβολές στο μήκος της ανθρακικής αλυσίδας (4.3.2.1), ουσίες που λαμβάνονται από πετρέλαιο και παρόμοιες με πετρέλαιο πηγές (4.3.2.2) και ένζυμα (4.3.2.3).

4.3.2.1 Ουσίες που παρουσιάζουν μεταβολές στα μήκη ανθρακικής αλυσίδας

Η εν λόγω ομάδα ουσιών UVCB αφορά αλκυλικές ουσίες μακράς αλυσίδας με μεταβλητότητα του μήκους ανθρακικής αλυσίδας, π.χ. παραφίνες και ολεφίνες. Οι εν λόγω ουσίες παράγονται είτε από φυσικά λιπαρά ή έλαια είτε συνθετικά. Τα φυσικά λιπαρά προέρχονται είτε από φυτά είτε από ζώα. Οι ουσίες με μακρά ανθρακική αλυσίδα που παράγονται από φυτά έχουν συνήθως μήκη αλυσίδας μόνο άρτιων αριθμών, ενώ οι ουσίες με μακρά ανθρακική αλυσίδα ζωικής προέλευσης περιέχουν και (ορισμένα) μήκη αλυσίδας περιττών αριθμών. Οι ουσίες με μακρά ανθρακική αλυσίδα που παράγονται με συνθετικό τρόπο μπορούν να περιέχουν όλο το εύρος ανθρακικών αλυσίδων, άρτιων και περιττών αριθμών.

Αναγνωριστικά και σύμβαση ονοματοδοσίας

Η ομάδα περιλαμβάνει ουσίες των οποίων τα επιμέρους συστατικά έχουν ένα κοινό δομικό χαρακτηριστικό: μία ή περισσότερες αλκυλικές ομάδες μακράς αλυσίδας συχνά με μία λειτουργική ομάδα προσδεσμένη. Τα συστατικά διαφέρουν μεταξύ τους όσον αφορά ένα ή περισσότερα από τα ακόλουθα χαρακτηριστικά ομάδας αλκυλικής αλυσίδας:

- Μήκος ανθρακικής αλυσίδας (αριθμός ανθράκων)
- Κορεσμός

- ο Δομή (γραμμική ή διακλαδισμένη)
- ο Θέση της λειτουργικής ομάδας

Η χημική σύνθεση των συστατικών μπορεί να περιγραφεί επαρκώς και να ονομαστεί συστηματικά με χρήση των ακολουθούν τριών περιγραφικών παραμέτρων:

- ο την **περιγραφική παράμετρο αλκυλικών ομάδων**, η οποία περιγράφει τον αριθμό των ατόμων άνθρακα στο μήκος ανθρακικής αλυσίδας της αλκυλικής ομάδας/ων.
- ο την **περιγραφική παράμετρο λειτουργικότητας**, η οποία προσδιορίζει τη λειτουργική ομάδα της ουσίας, π.χ. αμίνη, αμμώνιο, καρβοξυλικό οξύ.
- ο την **περιγραφική παράμετρο αλάτων**, το κατιόν/ανιόν οποιουδήποτε άλατος, π.χ. νατρίου (Na^+), ανθρακικού (CO_3^{2-}), χλωριδίου (Cl^-).

Περιγραφική παράμετρος αλκυλικών ομάδων

- ο Γενικά, η περιγραφική παράμετρος αλκυλικών ομάδων C_{x-y} αφορά κορεσμένες, ευθείες αλκυλικές αλυσίδες που περιλαμβάνουν όλα τα μήκη αλυσίδας από x έως y , π.χ. το C_{8-12} αντιστοιχεί στα C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} και C_{12} .
- ο Πρέπει να υποδεικνύεται το εάν η περιγραφική παράμετρος αλκυλικών ομάδων αναφέρεται σε αλκυλικές αλυσίδες αριθμημένες μόνο με άρτιους ή μόνο με περιττούς αριθμούς, π.χ. C_{8-12} (άρτια αριθμημένη)
- ο Πρέπει να υποδεικνύεται το εάν η περιγραφική παράμετρος αλκυλικών ομάδων αναφέρεται (επίσης) σε διακλαδισμένες αλκυλικές αλυσίδες, π.χ. C_{8-12} (διακλαδισμένη) ή C_{8-12} (γραμμική και διακλαδισμένη)
- ο Πρέπει να υποδεικνύεται το εάν η περιγραφική παράμετρος αλκυλικών ομάδων αναφέρεται (επίσης) σε ακόρεστες αλκυλικές αλυσίδες, π.χ. C_{12-22} (C_{18} ακόρεστη)
- ο Η περιορισμένου εύρους κατανομή μηκών αλκυλικών αλυσίδων δεν καλύπτει μια ευρύτερη κατανομή και αντιστρόφως, π.χ. το C_{10-14} δεν αντιστοιχεί στο C_{8-18}
- ο Η περιγραφική παράμετρος αλκυλικών αλυσίδων μπορεί επίσης να αναφέρεται στην προέλευση των αλκυλικών αλυσίδων, π.χ. κοκκοκάρυο ή στέαρ. Ωστόσο, η κατανομή μηκών ανθρακικής αλυσίδας πρέπει να αντιστοιχεί σε αυτήν της πηγής.

Το ανωτέρω περιγραφέν σύστημα πρέπει να χρησιμοποιείται για την περιγραφή ουσιών που παρουσιάζουν μεταβολές στα μήκη ανθρακικής αλυσίδας. Δεν είναι κατάλληλο για σαφώς καθορισμένες ουσίες, οι οποίες μπορούν να προσδιοριστούν μέσω της χημικής τους δομής.

Οι πληροφορίες σχετικά με την περιγραφική παράμετρο αλκυλικών αλυσίδων, την περιγραφική παράμετρο λειτουργικότητας και την περιγραφική παράμετρο αλάτων αποτελούν τη βάση για την ονομασία αυτού του τύπου ουσίας UVCB. Επιπλέον, πληροφορίες σχετικά με την προέλευση και τη διεργασία ενδέχεται να είναι χρήσιμες για τον ακριβέστερο προσδιορισμό της ουσίας.

Παραδείγματα

Περιγραφικές παράμετροι

Ονομασία

Περιγραφική παράμετρος αλκυλικών ομάδων

μήκη αλκυλικών αλυσίδων C_{10-18}

λιπαρά οξέα (C_{10-18}) άλατα καδμίου

Περιγραφική παράμετρος λειτουργικότητας

λιπαρά οξέα (καρβοξυλικό οξύ)

Περιγραφική παράμετρος αλάτων

άλατα καδμίου

Περιγραφική παράμετρος αλκυλικών ομάδων	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl-dimethyl	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl-
Περιγραφική παράμετρος λειτουργικότητας	αμμώνιο	dimethylammonium chloride
Περιγραφική παράμετρος αλάτων	χλωρίδιο	
Περιγραφική παράμετρος αλκυλικών ομάδων	trimethyl tallow-alkyl	trimethyl-tallowalkyl-
Περιγραφική παράμετρος λειτουργικότητας	αμμώνιο	ammonium chloride
Περιγραφική παράμετρος αλάτων	χλωρίδιο	

4.3.2.2 Ουσίες που λαμβάνονται από πετρέλαιο και παρόμοιες με το πετρέλαιο πηγές

Ουσίες που λαμβάνονται από πετρέλαιο (πετρελαϊκές ουσίες) ή παρόμοιες με το πετρέλαιο πηγές (π.χ. άνθρακας) είναι ουσίες ιδιαίτερα πολύπλοκης και ασταθούς ή μερικώς ασαφούς σύνθεσης. Στην παρούσα ενότητα οι πετρελαϊκές ουσίες χρησιμοποιούνται με σκοπό να καταδειχθεί ο τρόπος προσδιορισμού του συγκεκριμένου τύπου ουσίας UVCB. Η ίδια προσέγγιση θα μπορούσε να εφαρμοστεί και σε άλλες ουσίες που λαμβάνονται από παρόμοιες με το πετρέλαιο πηγές όπως ο άνθρακας.

Τα αρχικά υλικά που χρησιμοποιούνται στη βιομηχανία διύλισης πετρελαίου μπορούν να είναι το αργό πετρέλαιο ή οποιαδήποτε ροή διύλισης που προκύπτει από μία ή περισσότερες διεργασίες. Η σύνθεση των τελικών προϊόντων εξαρτάται από το αργό πετρέλαιο που χρησιμοποιείται για την παρασκευή (δεδομένου ότι η σύνθεση του αργού πετρελαίου ποικίλλει ανάλογα με τον τόπο προέλευσης) και τις επακόλουθες διεργασίες διύλισης. Ως εκ τούτου, η σύνθεση των πετρελαϊκών ουσιών παρουσιάζει φυσική και ανεξάρτητη από τις διεργασίες μεταβλητότητα ¹⁷.

1. Σύμβαση ονοματοδοσίας

Σε ό,τι αφορά τον προσδιορισμό πετρελαϊκών ουσιών, συνιστάται η ονομασία να δίδεται σύμφωνα με καθιερωμένο σύστημα ονοματολογίας²². Η εν λόγω ονομασία περιλαμβάνει συνήθως τη διεργασία διύλισης, την προέλευση της ροής και τη γενική σύνθεση ή τα χαρακτηριστικά. Εάν η ουσία περιέχει >5 % (κατά βάρος) αρωματικών υδρογονανθράκων συμπυκνωμένων 4- έως 6-μελών δακτυλίων, η εν λόγω πληροφορία πρέπει να περιλαμβάνεται στην περιγραφή. Σε ό,τι αφορά τις πετρελαϊκές ουσίες με αριθμό EINECS, πρέπει να χρησιμοποιείται η ονομασία που περιλαμβάνεται στο ευρετήριο ΕΚ.

2. Αναγνωριστικά

Οι όροι και οι ορισμοί για τον προσδιορισμό πετρελαϊκών ουσιών περιλαμβάνουν γενικά την προέλευση της ροής, τη διεργασία διύλισης, τη γενική σύνθεση, τον αριθμό ατόμων άνθρακα, το εύρος των σημείων βρασμού ή άλλα κατάλληλα φυσικά χαρακτηριστικά, καθώς και τον

²² ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΠΡΟΣΤΑΣΙΑΣ ΤΟΥ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ ΤΩΝ ΗΠΑ (US EPA) (1978) TSCA PL 94-469 Κατάλογος υποψήφιων χημικών ουσιών, παράρτημα Ι. Γενικοί όροι για τις ροές διεργασίας διύλισης πετρελαίου. US EPA, Υπηρεσία τοξικών ουσιών, Washington DC 20460.

κυρίαρχο τύπο υδρογονανθράκων²².

Πρέπει να παρέχονται οι παράμετροι προσδιορισμού που παρατίθενται στο παράρτημα VI, σημείο 2 του κανονισμού REACH. Είναι γεγονός ότι οι πετρελαϊκές ουσίες παρασκευάζονται βάσει μάλλον προδιαγραφών απόδοσης παρά βάσει προδιαγραφών σύνθεσης. Ως εκ τούτου, για τον όσο το δυνατόν σαφέστερο προσδιορισμό της πετρελαϊκής ουσίας, χαρακτηριστικά όπως η ονομασία, το εύρος μηκών ανθρακικής αλυσίδας, το σημείο βρασμού, το ιξώδες, οι τιμές διαχωρισμού και άλλες φυσικές ιδιότητες είναι γενικά πιο χρήσιμα από ό,τι οι πληροφορίες σχετικά με τη σύνθεση.

Αν και η χημική σύνθεση δεν είναι το πρωταρχικό αναγνωριστικό για ουσίες UVCB, παρέχονται όλα τα κύρια συστατικά με συγκέντρωση $\geq 10\%$ και τα γνωστά συστατικά με συγκέντρωση $< 10\%$ και περιγράφεται η σύνθεση με γενικούς όρους, π.χ. φάσμα μοριακού βάρους, αλειφατικοί ή αρωματικοί υδρογονάνθρακες, ο βαθμός υδρογόνωσης και άλλες απαραίτητες πληροφορίες. Οι ομάδες συστατικών που δεν είναι δυνατόν να προσδιοριστούν μεμονωμένα θα πρέπει επίσης να περιγραφούν με βάση τις ίδιες παραμέτρους. Επιπλέον, οποιοδήποτε άλλο συστατικό σε χαμηλότερη συγκέντρωση που επηρεάζει την ταξινόμηση επικινδυνότητας προσδιορίζεται βάσει της ονομασίας και της τυπικής συγκέντρωσης.

4.3.2.3 Ένζυμα

Τα ένζυμα παράγονται συνήθως μέσω ζύμωσης μικροοργανισμών, αλλά περιστασιακά και από φυτά ή ζώα. Το υγρό συμπύκνωμα ενζύμου που προκύπτει από τη ζύμωση ή την εκχύλιση και τα επακόλουθα στάδια καθαρισμού περιέχει, εκτός από νερό, την ενεργό ενζυμική πρωτεΐνη και άλλα συστατικά στα οποία περιλαμβάνονται υπολείμματα από τη ζύμωση, ήτοι πρωτεΐνες, πεπτίδια, αμινοξέα, υδατάνθρακες, λιπίδια και ανόργανα άλατα.

Ως η ουσία προς προσδιορισμό πρέπει να θεωρούνται η ενζυμική πρωτεΐνη μαζί με τα άλλα συστατικά που προκύπτουν από τη διεργασία ζύμωσης ή εκχύλισης, αλλά εξαιρουμένης τυχόν ποσότητας νερού, η οποία μπορεί να διαχωριστεί χωρίς να επηρεαστεί η σταθερότητα της ενζυμικής πρωτεΐνης ή να μεταβληθεί η σύνθεσή της.

Η ενζυμική ουσία περιέχει τυπικά 10-80% (κατά βάρος) της ενζυμικής πρωτεΐνης. Τα άλλα συστατικά ποικίλλουν σε ό,τι αφορά το ποσοστό και εξαρτώνται από τον χρησιμοποιούμενο οργανισμό παραγωγής, το μέσο ζύμωσης και τους όρους διεξαγωγής της διεργασίας ζύμωσης καθώς και από τον εφαρμοζόμενο περαιτέρω καθαρισμό, αλλά η σύνθεση θα εμπίπτει τυπικά εντός των φασμάτων που παρατίθενται στον ακόλουθο πίνακα.

Ενεργός ενζυμική πρωτεΐνη	10-80%
Άλλες πρωτεΐνες + πεπτίδια και αμινοξέα	5-55%
Υδατάνθρακες	3-40 %
Λιπίδια	0-5 %
Ανόργανα άλατα	1-45 %
Σύνολο	100%

Η ενζυμική ουσία πρέπει να θεωρείται ως «ουσία UVCB» λόγω της αστάθειάς της και της μερικώς άγνωστης σύνθεσής της. Η ενζυμική πρωτεΐνη πρέπει να θεωρείται ως συστατικό της ουσίας UVCB. Τα ένζυμα που έχουν υποβληθεί σε υψηλού βαθμού καθαρισμό μπορούν να προσδιορίζονται ως ουσίες σαφώς καθορισμένης σύνθεσης (μονοσυστατικές ή πολυσυστατικές) και πρέπει να προσδιορίζονται αναλόγως.

Στο EINECS, το κύριο αναγνωριστικό για τα ένζυμα είναι η καταλυτική δραστηριότητα. Τα ένζυμα παρατίθενται ως γενικές καταχωρίσεις χωρίς περαιτέρω χαρακτηριστικά ή με συγκεκριμένα χαρακτηριστικά που υποδεικνύουν τον οργανισμό ή το υπόστρωμα προέλευσης.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία EINECS	Αριθμός CAS
278-547-1	Πρωτεΐνάση, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Πρωτεΐνάση, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Ελαστάση (πάγκρεας χοίρου)	39445-21-1
262-402-4	Μαννανάση	60748-69-8

Μια μελέτη για τα ένζυμα που ανέθεσε η Ευρωπαϊκή Επιτροπή αφορούσε τον προσδιορισμό των ενζύμων σύμφωνα με το διεθνές σύστημα ονοματολογίας ενζύμων, το IUBMB (Διεθνής Ένωση Βιοχημείας και Μοριακής Βιολογίας)²³. Στο παρόν έγγραφο καθοδήγησης τηρείται η εν λόγω προσέγγιση και θα παράσχει τη δυνατότητα συστηματικότερου, αναλυτικότερου και πιο περιεκτικού προσδιορισμού των ενζύμων σε σύγκριση με το EINECS.

1. Σύμβαση ονοματοδοσίας

Τα ένζυμα λαμβάνουν τις ονομασίες τους σύμφωνα με τις συμβάσεις της ονοματολογίας κατά IUBMB.

Το σύστημα ταξινόμησης IUBMB παρέχει έναν μοναδικό τετραψήφιο αριθμό για κάθε τύπο ενζύμου και καταλυτική λειτουργία (π.χ. 3.2.1.1 για την α -αμυλάση)²⁴. Κάθε αριθμός μπορεί να περιλαμβάνει ένζυμα μεταβλητής ακολουθίας και προέλευσης αμινοξέων αλλά η λειτουργία του ενζύμου είναι η ίδια. Η ονομασία και ο αριθμός από την ονοματολογία IUBMB πρέπει να χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό των ουσιών. Βάσει της ονοματολογίας κατά IUBMB τα ένζυμα ταξινομούνται σε έξι κύριες ομάδες:

- 1. Οξειδοοξειδοκτάσες
- 2. Τρανσφεράσες
- 3. Υδρολάσες
- 4. Λυάσες
- 5. Ισομεράσες
- 6. Λιγάσες

²³ UBA (2000) Umweltbundesamt Αυστρία. Συλλογή πληροφοριών σχετικά με τα ένζυμα. Τελική έκθεση. Συνεργασία μεταξύ του Ομοσπονδιακού Οργανισμού Περιβάλλοντος της Αυστρίας και του Διαπανεπιστημιακού Κέντρου Ερευνών για την Τεχνολογία, την Εργασία και τον Πολιτισμό (IFF/IFZ). Σύμβαση αριθ. B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

²⁴ Οι όροι «αριθμός ΕΚ» (\equiv αριθμός Επιτροπής για τα ένζυμα) και «αριθμός IUBMB» χρησιμοποιούνται συχνά ως συνώνυμα. Για την αποφυγή παρανοήσεων, συνιστάται η χρήση του όρου «αριθμός IUBMB» για τον τετραψήφιο κωδικό από το IUBMB.

Στο ακόλουθο παράδειγμα απεικονίζεται καταχώριση σύμφωνα με την ονοματολογία κατά IUBMB:

EK 3.4.22.33

Αποδεκτή ονομασία: βρωμελαΐνη φρούτων

Αντίδραση: Υδρόλυση πρωτεϊνών με ευρεία ειδικότητα για πεπτιδικούς δεσμούς. Το Bz-Phe-Val-Arg[†]-NHMeC είναι ένα καλό συνθετικό υπόστρωμα, αλλά δεν υφίσταται δράση στο Z-Arg-Arg-NHMeC (πρβλ. ρίζα βρωμελαΐνης)

Άλλες ονομασίες: βρωμελαΐνη χυμού, ananase, bromelase, bromelin, extranase, pinase, ένζυμο ανανά, traumanase, βρωμελαΐνη φρούτων FA2

Παρατηρήσεις: Από το φυτό του ανανά, *Ananas comosus*. Αναστέλλεται σε ελάχιστο βαθμό από τη συστατίνη κοτόπουλου. Από το σχετικό φυτό *Bromelia pinguin* λαμβάνεται μια άλλη ενδοπεπτιδάση κυστεΐνης, με παρόμοια δράση σε μικρομοριακά υποστρώματα, η *pinguinain* (πρώην αριθμός EK 3.4.99.18), *Bromeliapinguin*, αλλά η οποία διαφέρει από τη βρωμελαΐνη φρούτων ως προς το ότι αναστέλλεται από τη συστατίνη κοτόπουλου [4]²⁵. Στην οικογένεια πεπτιδασών C1²⁶ (οικογένεια papain). Πρώην αριθμός EK 3.4.22.5 και συμπεριλαμβάνεται στον αριθμό EK 3.4.22.4, αριθμός μητρώου CAS: 9001-00-7

Σύνδεσμος σε άλλες βάσεις δεδομένων:

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

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

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

Γενικές παραπομπές:

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]

Παραδείγματα ταξινόμησης ενζύμων σύμφωνα με το σύστημα IUBMB

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

Οι πρωτεάσες αριθμούνται σύμφωνα με τα ακόλουθα κριτήρια:

3. **Υδρολάσες**

3.4 **Δρουν σε πεπτιδικούς δεσμούς (πεπτιδάσες), με υποκλάσεις:**

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

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

3.4.1	α-Amino-Acyl-Peptide Hydrolases (τώρα στον αριθμό EK 3.4.11)
3.4.2	Peptidyl-Amino-Acid Hydrolases (τώρα στον αριθμό EK 3.4.17)
3.4.3	Dipeptide Hydrolases (τώρα στον αριθμό EK 3.4.13)
3.4.4	Peptidyl Peptide Hydrolases (επαναταξινομήθηκε τώρα στον αριθμό EK 3.4)
3.4.11	Αμινοπεπτιδάσες
3.4.12	Peptidylamino-Acid Hydrolases ή Acylamino-Acid Hydrolases (επαναταξινομήθηκε τώρα στον αριθμό 3.4)
3.4.13	Διπεπτιδάσες
3.4.14	Dipeptidyl-peptidases και tripeptidyl-peptidases
3.4.15	Peptidyl-dipeptidases
3.4.16	Serine-type carboxypeptidases
3.4.17	Metallo-carboxypeptidases
3.4.18	Cysteine-type carboxypeptidases
3.4.19	Omega peptidases
3.4.21	Ενδοπεπτιδάσες σερίνης
	Επιπλέον, προσδιορίζονται συγκεκριμένα ένζυμα:
3.4.21.1	χυμοτρυψίνη
3.4.21.2	χυμοτρυψίνη C
3.4.21.3	metridin
3.4.21.4	τρυψίνη
3.4.21.5	θρομβίνη
3.4.21.6	παράγοντας πήξης Χα
3.4.21.7	πλασμίνη
3.4.21.8	καλύπτεται τώρα υπό τον αριθμό EK 3.4.21.34 και τον αριθμό EK 3.4.21.35
3.4.21.9	εντεροπεπτιδάση
3.4.21.10	ακροσίνη

3.4.21.11	καλύπτεται τώρα υπό τον αριθμό EK 3.4.21.36 και τον αριθμό EK 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-Lytic endopeptidase
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Ενδοπεπτιδάσες άγνωστου καταλυτικού μηχανισμού

Παραδείγματα από το EINECS με προσθήκη του αριθμού IUBMB

Αριθμός EK	Ονομασία EINECS	Αριθμός CAS	του αριθμού IUBMB
278-547-1	Πρωτεΐνάση, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Σουμπιλισίνη	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Σελουλάση	9012-54-8	3.2.1.4

2. Αναγνωριστικά

Οι ενζυμικές ουσίες προσδιορίζονται βάσει της πρωτεΐνης που περιέχουν (ονοματολογία IUBMB) και των άλλων συστατικών που προκύπτουν από τη ζύμωση. Πέραν της πρωτεΐνης του ενζύμου, η συγκέντρωση κάθε συγκεκριμένου συστατικού συνήθως δεν υπερβαίνει το 1%. Εάν οι ταυτότητες των εν λόγω συγκεκριμένων συστατικών δεν είναι γνωστές, μπορούν να υποδειχθούν υπό τύπο ομάδων (ήτοι, πρωτεΐνες, πεπτίδια, αμινοξέα, υδατάνθρακες, λιπίδια και ανόργανα άλατα). Παρ' όλα αυτά, τα μεμονωμένα συστατικά πρέπει να αναφέρονται εάν είναι γνωστές οι ταυτότητές τους ή εάν η συγκέντρωσή τους ισούται ή υπερβαίνει το 10% ή εάν είναι σημαντικά για την ταξινόμηση και επισήμανση ή/και την αξιολόγηση ABT²⁷.

Πρωτεΐνες ένζυμα

Οι πρωτεΐνες ένζυμα στο συμπύκνωμα πρέπει να προσδιορίζονται βάσει:

- ο του αριθμού IUBMB
- ο των ονομασιών βάσει του IUBMB (συστημική ονομασία, ονομασίες ενζύμου, συνώνυμα)
- ο Παρατηρήσεις που παρέχονται βάσει του IUBMB
- ο της αντίδρασης και του τύπου αντίδρασης
- ο του αριθμού και της ονομασίας EK, ανάλογα με την περίπτωση
- ο του αριθμού και της ονομασίας CAS, εάν υπάρχουν

²⁷ Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την αξιολόγηση ABT και τα συναφή κριτήρια διατίθενται στην Καθοδήγηση σχετικά με τις απαιτήσεις πληροφοριών και την αξιολόγηση χημικής ασφάλειας, ενότητα R11: Αξιολόγηση ABT.

Η αντίδραση που προκαλεί το ένζυμο πρέπει να προσδιορίζεται. Η εν λόγω αντίδραση καθορίζεται από το IUBMB.

Παράδειγμα

.άλφα.-αμυλάση: Πολυσακχαρίτης που περιέχει .άλφα.-(1-4)-συνδεδεμένες μονάδες γλυκόζης + H₂O = μαλτοολιγοσακχαρίτες, ενδοϋδρόλυση των 1,4-.άλφα.-d-γλυκοζιδικών δεσμών σε πολυσακχαρίτες που περιέχουν τρεις ή περισσότερες 1,4-.άλφα.-συνδεδεμένες μονάδες d-γλυκόζης.

Σύμφωνα με την ενζυμική κλάση, εκχωρείται τύπος αντίδρασης, ο οποίος μπορεί να είναι οξείδωση, αναγωγή, απόσπαση, προσθήκη ή ονομασία αντίδρασης.

Παράδειγμα

.άλφα.-αμυλάση: υδρόλυση δεσμού O-glycosyl (ενδοϋδρόλυση).

Συστατικά διαφορετικά από την πρωτεΐνη ένζυμο

Όλα τα συστατικά με συγκέντρωση $\geq 10\%$ (κατά βάρος) ή όσα είναι σημαντικά για την ταξινόμηση και επισήμανση ή/και την αξιολόγηση ABT²⁸ πρέπει να προσδιορίζονται. Η ταυτότητα των συστατικών η συγκέντρωση των οποίων είναι μικρότερη από 10% μπορεί να υποδεικνύεται ως χημική ομάδα. Πρέπει να παρέχεται η τυπική συγκέντρωση ή τα εύρη συγκέντρωσης, ήτοι:

- (Γλυκο)πρωτεΐνες
- Πεπτίδια και αμινοξέα
- Υδατάνθρακες
- Λιπίδια
- Ανόργανο υλικό (π.χ. χλωριούχο νάτριο ή άλλα ανόργανα άλατα)

Εάν δεν είναι εφικτός ο επαρκής προσδιορισμός των υπόλοιπων συστατικών ενός συμπυκνώματος ενζύμου, πρέπει να παρέχεται η ονομασία του οργανισμού από τον οποίο παράγεται (γένος και στέλεχος ή γενετικός τύπος, ανάλογα με την περίπτωση), όπως και για τις άλλες ουσίες UVCB βιολογικής προέλευσης.

Εάν υπάρχουν, μπορούν να παρέχονται πρόσθετες παράμετροι, π.χ. λειτουργικές παράμετροι (ήτοι, βέλτιστες τιμές pH ή θερμοκρασίας), κινητικές παράμετροι (ήτοι, ειδική δραστηριότητα ή σταθερά K_{κατ.}), υποκατάστατα, υποστρώματα, προϊόντα και συμπαράγοντες.

²⁸ Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την αξιολόγηση ABT και τα σχετικά όρια συγκέντρωσης διατίθενται στο σημείο 3.2 του εγγράφου τεχνικής καθοδήγησης για την αξιολόγηση χημικής ασφάλειας του RIP.

5. Κριτήρια ελέγχου του εάν οι ουσίες είναι ίδιες

Στο πλαίσιο του ελέγχου του εάν μπορούν ή όχι να θεωρούνται ίδιες οι ουσίες από διαφορετικούς παρασκευαστές/εισαγωγείς, πρέπει να τηρούνται ορισμένοι κανόνες. Οι κανόνες αυτοί οι οποίοι εφαρμόστηκαν για την κατάρτιση του EINECS, πρέπει να θεωρούνται ως η κοινή βάση για τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία μιας ουσίας και, ως εκ τούτου για την εξεύρεση ενός δυνητικού συν-καταχωρίζοντος της συγκεκριμένης ουσίας^{5, 6, 16, 29, 30}. Ουσίες, ωστόσο, οι οποίες δεν θεωρούνται ίδιες μπορούν να θεωρηθούν ως δομικά σχετιζόμενες κατόπιν γνωμοδότησης εμπειρογνώμονα. Ομοίως, η κοινοχρησία δεδομένων μπορεί να είναι εφικτή για τις εν λόγω ουσίες, εφόσον αιτιολογείται επιστημονικά. Εντούτοις, αυτό δεν αποτελεί θέμα του παρόντος εγγράφου καθοδήγησης αλλά της *Καθοδήγησης σχετικά με την κοινοχρησία δεδομένων*.

- Πρέπει να εφαρμόζεται ο κανόνας «≥80%» για τις μονοσυστατικές ουσίες και ο ορισμός των πολυσυστατικών ουσιών.

Δεν γίνεται καμία διαφοροποίηση μεταξύ τεχνικών ή αναλυτικών διαβαθμίσεων ή διαβαθμίσεων καθαρότητας των ουσιών. Αυτό σημαίνει ότι η «ίδια» ουσία ενδέχεται να έχει διαφορετικό προφίλ καθαρότητας/προσμειξεων ανάλογα με τη διαβάθμισή της. Εντούτοις, οι σαφώς καθορισμένες ουσίες πρέπει να περιέχουν το ίδιο κύριο συστατικό/ά, ενώ οι μόνες προσμείξεις που επιτρέπονται είναι όσες προκύπτουν από τη διεργασία παραγωγής (για περισσότερες πληροφορίες, ανατρέξτε στην ενότητα 4.2) και τα πρόσθετα που είναι απαραίτητα για τη σταθεροποίηση της ουσίας.

- Για τους σκοπούς της καταχώρισης οι ένυδρες και άνυδρες μορφές των ενώσεων θεωρούνται ως η ίδια ουσία

Παραδείγματα			
Όνομασία και τύπος	Αριθμός CAS	Αριθμός ΕΚ	Κανόνας
Θειικός χαλκός (Cu · H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Θειικό οξύ χαλκός(2+) άλας (1:1), πενταένυδρος (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Η εν λόγω ουσία καλύπτεται από καταχώριση της άνυδρης μορφής της (αριθμός ΕΚ: 231-847-6)

Οι ένυδρες και οι άνυδρες μορφές έχουν διαφορετικές χημικές ονομασίες και διαφορετικούς αριθμούς CAS.

- Τα οξέα ή οι βάσεις και τα άλατά τους θεωρούνται διαφορετικές ουσίες.

²⁹ Vollmer et al. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Tom. 65, σ. 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.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
201-186-8	Υπεροξικό οξύ $C_2H_4O_3$	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια, για παράδειγμα, με το άλας νατρίου της (EINECS 220-624-9)
220-624-9	Γλυκολικό νάτριο $C_2H_4O_3 \cdot Na$	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια με το αντίστοιχο οξύ της (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-χλωροανιλίνη C_6H_6ClN	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια, για παράδειγμα, με την 2-chloroaniline hydrobromide (1:1) ($C_6H_6ClN \cdot HBr$)

- Τα μεμονωμένα άλατα (π.χ. νάτριο ή κάλιο) θεωρούνται διαφορετικές ουσίες.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
208-534-8	Βενζοϊκό νάτριο $C_7H_5O_2 \cdot Na$	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια, για παράδειγμα, με το άλας καλίου (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Βενζοϊκό κάλιο $C_7H_5O_2 \cdot K$	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια, για παράδειγμα, με το άλας νατρίου (EINECS 208-534-8)

- Διακλαδισμένες ή ευθείες αλκυλικές αλυσίδες θεωρούνται διαφορετικές ουσίες.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
295-083-5	Φωσφορικό οξύ, διπεντυλεστέρας διακλαδισμένος και ευθύς	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια με τις μεμονωμένες ουσίες: φωσφορικό οξύ, διπεντυλεστέρας, διακλαδισμένος ή φωσφορικό οξύ, διπεντυλεστέρας, ευθύς

- Οι διακλαδισμένες ομάδες αναφέρονται ως τέτοιες στην ονομασία. Οι ουσίες που περιέχουν αλκυλικές ομάδες χωρίς άλλες πληροφορίες καλύπτουν μόνο τις μη διακλαδισμένες ευθείες αλυσίδες, εκτός εάν ορίζεται διαφορετικά.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
306-791-1	Λιπαρά οξέα, C12-16	Μόνο ουσίες με ευθείες και μη διακλαδισμένες αλκυλικές ομάδες θεωρούνται ίδιες
279-420-3	Αλκοόλες, C12-14	
288-454-8	Αμίνες, C12-18-alkylmethyl	

- Ουσίες με αλκυλικές ομάδες για τις οποίες χρησιμοποιούνται πρόσθετοι όροι όπως iso, neo, διακλαδισμένη κ.λπ., δεν θεωρούνται ίδιες με τις ουσίες χωρίς τον συγκεκριμένο προσδιορισμό.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
266-944-2	Γλυκερίδια, C ₁₂₋₁₈ Η εν λόγω ουσία προσδιορίζεται από την ονομασία της βάσει του SDA: C12-C18 trialkyl glyceride και του αριθμού αναφοράς SDA: 16-001-00	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια με την ουσία C ₁₂₋₁₈ -iso με κορεσμένες αλκυλικές αλυσίδες η οποία διακλαδίζεται σε οποιαδήποτε θέση

- Εάν δεν υπάρχει σαφής προσδιορισμός, οι αλκυλικές αλυσίδες στα οξέα ή στις αλκοόλες κ.λπ. θεωρούνται ότι αντιπροσωπεύουν μόνο τις κορεσμένες αλυσίδες. Οι ακόρεστες αλυσίδες προσδιορίζονται ως τέτοιες και θεωρούνται διαφορετικές ουσίες.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
200-313-4	Στεατικό οξύ, καθαρό C18H36O2	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια με το καθαρό ελαϊκό οξύ, C18H34O2 (EINECS 204-007-1)

- Ουσίες με χειρόμορφα κέντρα

Μια ουσία με ένα στερεόκέντρο μπορεί να υπάρχει σε μορφή εναντιομερών. Σε περίπτωση απουσίας ενδείξεων περί του αντιθέτου, θεωρείται ότι η ουσία είναι ισοδύναμο (ρακεμικό) μείγμα των δύο μορφών.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
201-154-3	2-chloropropan-1-ol	Τα επιμέρους εναντιομερή (R)-2-chloropropan-1-ol και (S)-2-chloropropan-1-ol δεν θεωρούνται ισοδύναμα με την εν λόγω καταχώριση

Τα ρακεμικά μείγματα θεωρούνται πολυσυστατικές ουσίες. Όταν μια ουσία έχει εμπλουτιστεί με μια απλή εναντιομερική μορφή, εφαρμόζονται οι κανόνες που ισχύουν για τις μονοσυστατικές και τις πολυσυστατικές ουσίες, ήτοι η ουσία είναι μονοσυστατική ή πολυσυστατική ανάλογα με το εύρος συγκέντρωσης των ισομερών.

Οι ουσίες με πολλαπλά στερεόκεντρα μπορούν να υπάρχουν σε μορφές 2ⁿ (όπου n είναι ο αριθμός των στερεόκεντρων). Οι εν λόγω διαφορετικές μορφές μπορούν να έχουν διαφορετικές φυσικοχημικές, τοξικολογικές ή/και οικοτοξικολογικές ιδιότητες μεταξύ τους. Πρέπει να θεωρούνται διαφορετικές ουσίες.

- Ανόργανοι καταλύτες

Οι ανόργανοι καταλύτες θεωρούνται μείγματα. Για λόγους προσδιορισμού, τα συστατικά μέταλλα ή οι μεταλλικές ενώσεις πρέπει να προσδιορίζονται ως επιμέρους ουσίες (χωρίς προσδιορισμό χρήσης).

Παραδείγματα		
	Ονομασία	Κανόνας
	Καταλύτης οξειδίου του κοβαλτίου-οξειδίου του αργιλίου	Πρέπει να προσδιορίζεται χωριστά ως: - Οξείδιο του κοβαλτίου II - Οξείδιο του κοβαλτίου III - Οξείδιο του αργιλίου - Οξείδιο κοβαλτίου αργιλίου

- Τα συμπυκνώματα ενζύμων με τον ίδιο αριθμό IUBMB μπορούν να θεωρούνται ίδια ουσία, παρά τη χρήση διαφορετικού οργανισμού παραγωγής τους, υπό την προϋπόθεση ότι οι επικίνδυνες ιδιότητες δεν διαφέρουν σημαντικά και συνεπάγονται την ίδια ταξινόμηση.

Πολυσυστατικές ουσίες

Η οδηγία 67/548/ΕΟΚ ρύθμιζε τη διάθεση των ουσιών στην αγορά. Ο τρόπος παραγωγής της ουσίας δεν λαμβανόταν υπόψη. Ως εκ τούτου, μια πολυσυστατική ουσία που διατίθεντο στην αγορά καλυπτόταν από το EINECS, εάν όλα τα επιμέρους συστατικά περιλαμβάνονταν στο EINECS, π.χ. το μείγμα ισομερών διφθοροβενζολίου καλυπτόταν από τις καταχωρίσεις EINECS 1,2-διφθοροβενζόλιο (206-680-7), 1,3-διφθοροβενζόλιο (206-746-5) και 1,4-διφθοροβενζόλιο (208-742-9), αν και το ίδιο το μείγμα ισομερών δεν περιλαμβάνόταν στο EINECS.

Αντίθετα, βάσει του κανονισμού REACH απαιτείται η καταχώριση της παρασκευασμένης ουσίας. Η απόφαση βάσει της οποίας καθορίζεται ο βαθμός στον οποίο τα διαφορετικά στάδια παραγωγής μιας ουσίας καλύπτονται από τη λέξη «παρασκευή» λαμβάνεται κατά περίπτωση (π.χ. διαφορετικά στάδια καθαρισμού ή απόσταξης). Εάν παράγεται πολυσυστατική ουσία, αυτή πρέπει να καταχωρίζεται (εκτός εάν καλύπτεται από καταχώριση των επιμέρους συστατικών, βλ. ενότητα 4.2.2.4), π.χ. εφόσον παράγεται το μείγμα ισομερών διφθοροβενζολίου πρέπει να καταχωριστεί το «διφθοροβενζόλιο» ως μείγμα ισομερών. Εντούτοις, σε ό,τι αφορά πολυσυστατικές ουσίες, ο έλεγχος της ουσίας στην καθαρή της μορφή δεν είναι απαραίτητος, εάν το προφίλ επικινδυνότητας της ουσίας μπορεί να περιγραφεί επαρκώς βάσει των πληροφοριών για τα επιμέρους συστατικά. Εάν τα επιμέρους ισομερή 1,2-διφθοροβενζόλιο, 1,3-διφθοροβενζόλιο και 1,4-διφθοροβενζόλιο παράγονται και αναμιγνύονται μεταγενέστερα, πρέπει να καταχωρίζονται και το μείγμα ισομερών θα θεωρείται ως μείγμα.

Πολυσυστατική ουσία με κύρια συστατικά A, B και C δεν θεωρείται ίδια με πολυσυστατική ουσία με κύρια συστατικά A και B ή ως μάζα αντίδρασης των A, B, C και D.

- Μια πολυσυστατική ουσία δεν θεωρείται ισοδύναμη με ουσία με ένα υποσύνολο μόνο των επιμέρους συστατικών.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
207-205-6	2,5-διφθοροτολουόλιο	Οι εν λόγω δύο ουσίες δεν θεωρούνται ίδιες με το μείγμα ισομερών διφθοροτολουολίου διότι αποτελούν υποσύνολο μόνο όλων των δυνατών ισομερών.
207-211-9	2,4-διφθοροτολουόλιο	

- Η καταχώριση πολυσυστατικής ουσίας δεν καλύπτει τα επιμέρους συστατικά.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
208-747-6	1,2-διβρωμοαιθυλένιο	Η εν λόγω ουσία περιγράφει μείγμα cis- και trans-ισομερών. Οι επιμέρους ουσίες (1Z)-1,2-Dibromoethene και (1E)-1,2-Dibromoethene δεν καλύπτονται από την καταχώριση του μείγματος ισομερών.

Ουσίες UVCB

- Ουσία UVCB με περιορισμένη κατανομή συστατικών δεν θεωρείται ισοδύναμη με ουσία UVCB με ευρύτερη κατανομή και αντιστρόφως.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
288-450-6	Amines, C12-18-alkyl, acetates	Οι ουσίες «amines, C12-14-alkyl, acetates» ή «amines, C12-20-alkyl, acetates» ή «amines, dodecyl (C12-alkyl), acetates» ή ουσίες με αλκυλικές αλυσίδες άρτιων αριθμών μόνο δεν θεωρούνται ισοδύναμες με την εν λόγω ουσία

- Ουσία η οποία χαρακτηρίζεται από είδος/γένος δεν θεωρείται ίδια με ουσία που έχει απομονωθεί από άλλο είδος/γένος.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
296-286-1	Γλυκερίδια, ηλιανθέλαιο δι-	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια με την ουσία Γλυκερίδια, σόγια δι- (EINECS: 271-386-8) ούτε με την Γλυκερίδια, στέαρ δι- (EINECS: 271-388-9).
232-401-3	Λινέλαιο, εποξειδωμένο	Η εν λόγω ουσία δεν θεωρείται ίδια με το λινέλαιο, οξειδωμένο (EINECS: 272-038-8) ούτε με το λινέλαιο, κατεργασμένο με μηλεϊνικό οξύ (EINECS: 268-897-3), ούτε με το κικινέλαιο, εποξειδωμένο (δεν περιλαμβάνεται στο EINECS:

- Καθαρό εκχύλισμα ή συμπύκνωμα θεωρείται διαφορετική ουσία από το εκχύλισμα.

Παραδείγματα		
Αριθμός ΕΚ	Ονομασία	Κανόνας
232-299-0	Κραμβέλαιο Εκχυλίσματα και φυσικώς τροποποιημένα παράγωγά τους. Αποτελείται κυρίως από τα γλυκερίδια του ερουκικού, λινελαϊκού και ελαϊκού οξέος. (<i>Brassica napus</i> , <i>Cruciferae</i>)	Η ουσία «(Z)-Docos-13-enoic acid (ερουκικό οξύ)» είναι συστατικό της ουσίας «κραμβέλαιο». Το ερουκικό οξύ δεν θεωρείται ίδια ουσία με το κραμβέλαιο, δεδομένου ότι απομονώνεται ως καθαρή ουσία από το κραμβέλαιο. Το ερουκικό οξύ έχει τη δική του καταχώριση EINECS (204-011-3). Απομονωμένο μείγμα παλμιτικού οξέος, ελαϊκού οξέος, λινελαϊκού οξέος, λινολενικού οξέος, ερουκικού οξέος και εικοσενοϊκού οξέος δεν θεωρείται ίδια ουσία με το κραμβέλαιο, δεδομένου ότι τα εν λόγω συστατικά δεν αντιπροσωπεύουν το σύνολο του ελαίου.

6. Η ταυτότητα ουσίας στο πλαίσιο της διαδικασίας διερεύνησης

Καθοδήγηση σχετικά με τον τρόπο προσδιορισμού και ονομασίας των ουσιών παρέχεται στην ενότητα 4 του παρόντος εγγράφου καθοδήγησης. Οι οδηγίες αυτές πρέπει να τηρούνται ώστε να προσδιορίζεται το εάν κάποιες ουσίες θα μπορούσαν να θεωρηθούν ίδιες για τους σκοπούς των κανονισμών REACH και CLP. Το ζήτημα αυτό αναλύεται περαιτέρω ακολούθως στο πλαίσιο της διερεύνησης των ουσιών.

Σύμφωνα με το άρθρο 4, οποιοσδήποτε παρασκευαστής ή εισαγωγέας μπορεί, έχοντας την πλήρη ευθύνη συμμόρφωσης προς την υποχρέωσή του βάσει του κανονισμού REACH, να διορίζει τρίτο ως αντιπρόσωπο για όλες τις διαδικασίες που περιλαμβάνονται στον τίτλο III και οι οποίες συνεπάγονται συζητήσεις με άλλους παρασκευαστές ή εισαγωγείς.

Για όλες τις ουσίες ο δυνητικός καταχωρίζων πρέπει να υποβάλλει, πριν από την καταχώριση, αίτημα διερεύνησης στον Οργανισμό σχετικά με το εάν έχει ήδη υποβληθεί καταχώριση για την ίδια ουσία (άρθρο 26 του κανονισμού REACH). Στο εν λόγω αίτημα διερεύνησης περιλαμβάνονται:

- η ταυτότητα του δυνητικού καταχωρίζοντος, όπως ορίζεται στο σημείο 1 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH, πλην των εγκαταστάσεων χρήσης
- η ταυτότητα της ουσίας, όπως ορίζεται στο σημείο 2 του παραρτήματος VI του κανονισμού REACH
- οι απαιτήσεις πληροφοριών για την εκπόνηση νέων μελετών από τον δυνητικό καταχωρίζοντα σχετικά με δοκιμές σε σπονδυλωτά ζώα
- οι απαιτήσεις πληροφοριών για την εκπόνηση άλλων νέων μελετών από τον δυνητικό καταχωρίζοντα.

Ο δυνητικός καταχωρίζων πρέπει να παρέχει την ταυτότητα και την ονομασία της ουσίας σύμφωνα με τους κανόνες που ορίζονται στην ενότητα 4 του παρόντος εγγράφου καθοδήγησης.

Ο Οργανισμός ελέγχει το εάν η ίδια ουσία έχει καταχωριστεί προγενέστερα. Αυτό πραγματοποιείται επίσης σύμφωνα με τους κανόνες που ορίζονται στην ενότητα 4 του παρόντος εγγράφου καθοδήγησης. Το αποτέλεσμα κοινοποιείται στον δυνητικό καταχωρίζοντα και ενημερώνονται τυχόν προγενέστεροι ή άλλοι δυνητικοί καταχωρίζοντες.

Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με τη διαδικασία διερεύνησης διατίθενται στην *Καθοδήγηση σχετικά με την κοινοχρησία δεδομένων* και στην ειδική ιστοσελίδα του ECHA:

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

7. Παραδείγματα

Τα παραδείγματα που παρατίθενται στις ακόλουθες σελίδες αποσκοπούν απλώς στο να απεικονίσουν τον τρόπο με τον οποίο ο χρήστης μπορεί να χρησιμοποιήσει το παρόν έγγραφο καθοδήγησης. Δεν αναφέρονται σε πραγματική περίπτωση επιτέλεσης των καθηκόντων που απορρέουν από τον κανονισμό REACH.

Περιλαμβάνονται τα ακόλουθα παραδείγματα:

- Το «υπεροξειδιανθρακικό διαιθύλιο» αποτελεί παράδειγμα μονοσυστατικής ουσίας η οποία περιέχει διαλύτη που δρα και ως σταθεροποιητής (βλ. ενότητα 7.1)
- Η «ζολιμιδίνη» αποτελεί παράδειγμα ουσίας η οποία θα μπορούσε να προσδιοριστεί ως μονοσυστατική ή πολυσυστατική ουσία (βλ. ενότητα 7.2)
- Ένα «μείγμα ισομερών» που σχηματίστηκε κατά την αντίδραση παρασκευής περιλαμβάνεται ως παράδειγμα πολυσυστατικής ουσίας (βλ. ενότητα 7.3). Η εν λόγω ουσία καλυπτόταν κατά το παρελθόν από της καταχωρίσεις των επιμέρους ισομερών στο EINECS
- Η «αρωματική ουσία AH» αποτελεί παράδειγμα ουσίας που παράγεται σε διαφορετικές ποιότητες και η οποία μπορεί να περιγραφεί βάσει μάζας αντίδρασης πέντε συστατικών με εύρη συγκέντρωσης (ενότητα 7.4). Αποτελεί επίσης παράδειγμα αιτιολογημένης παρέκκλισης από τα όρια του 80% και του 10%
- Τα μη μεταλλικά «ορυκτά», συμπεριλαμβανομένου του μοντμοριλονίτη ο οποίος αποτελεί παράδειγμα σαφώς καθορισμένης ουσίας, για τα οποία απαιτείται πρόσθετος φυσικός χαρακτηρισμός, περιλαμβάνονται στην ενότητα 7.5
- Ένα «αιθέριο έλαιο λεβάντας» αποτελεί παράδειγμα ουσίας UVCB που λαμβάνεται από τα φυτά (ενότητα 7.6)
- Το «έλαιο χρυσάνθεμου και τα απομονωμένα ισομερή αυτού» αποτελούν παράδειγμα ουσίας UVCB βιολογικής προέλευσης η οποία υποβάλλεται σε περαιτέρω επεξεργασία (ενότητα 7.7)
- Η ουσία «Phenol, isopropylated, phosphate» αποτελεί παράδειγμα ασταθούς ουσίας UVCB η οποία δεν μπορεί να οριστεί πλήρως (ενότητα 7.8)
- Οι «τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου» αποτελούν παραδείγματα ουσιών που παρουσιάζουν μεταβλητότητα στο μήκος της ανθρακικής αλυσίδας (ενότητα 7.9)
- Δύο παραδείγματα «πετρελαϊκών ουσιών», μια ροή ανάμιξης βενζίνης και πετρελαίων εσωτερικής καύσης, περιλαμβάνονται στην ενότητα 7.10
- Δύο παραδείγματα σχετικά με τον τρόπο προσδιορισμού των ενζύμων «λακάση» και «αμυλάση» παρέχονται στην ενότητα 7.11.

7.1. Υπεροξειδιανθρακικό διαιθύλιο

Η ουσία «υπεροξειδιανθρακικό διαιθύλιο» (EK 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) παράγεται ως διάλυμα 18% σε ισοδωδεκάνιο (EK 250-816-8, CAS 31807-55-3). Το ισοδωδεκάνιο δρα επίσης ως σταθεροποιητής των εκρηκτικών ιδιοτήτων. Η υψηλότερη δυνατή συγκέντρωση που εξασφαλίζει τον ασφαλή χειρισμό της ουσίας είναι διάλυμα 27%.

Πώς πρέπει να προσδιοριστεί και να ονομαστεί η ανωτέρω περιγραφείσα ουσία με σκοπό την καταχώριση;

Σύμφωνα με τον ορισμό της ουσίας στον κανονισμό REACH, οι διαλύτες οι οποίοι μπορούν να διαχωριστούν χωρίς να επηρεαστεί η σταθερότητα της ουσίας, ούτε να μεταβληθεί η σύνθεσή της, πρέπει να εξαιρούνται. Όπως και στην ανωτέρω περίπτωση, το ισοδωδεκάνιο, το οποίο δρα επίσης ως σταθεροποιητής και δεν μπορεί να διαχωριστεί πλήρως λόγω των εκρηκτικών ιδιοτήτων της ουσίας, πρέπει να θεωρείται πρόσθετο και όχι μόνο διαλύτης. Εντούτοις, η ουσία πρέπει να συνεχίσει να θεωρείται μονοσυστατική. Ως εκ τούτου, η ουσία πρέπει να καταχωριστεί ως το διάλυμα με τη χαμηλότερη συγκέντρωση ισοδωδεκανίου που εξασφαλίζει τον ασφαλή χειρισμό:

Υπεροξυδιανθρακικό διαιθύλιο (ανώτερο όριο συγκέντρωσης: 27%). Το ισοδωδεκάνιο πρέπει να αναφέρεται στα «Πρόσθετα» και πρέπει να προσδιορίζεται η λειτουργία σταθεροποίησης.

7.2. ΖΟΛΙΜΙΔΙΝΗ

Το παρασκευασθέν μεθανολικό διάλυμα περιέχει «ζολιμιδίνη» (EC 214-947-4, CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) και «ιμιδαζόλη» (EC 206-019-2, CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Μετά την απομάκρυνση του διαλύτη «μεθανόλη» και τη βελτιστοποίηση της διαδικασίας παρασκευής, η ουσία έχει εύρος καθαρότητας 74-86% ζολιμιδίνης και 4-12% ιμιδαζόλης.

Πώς πρέπει να προσδιοριστεί και να ονομαστεί η ανωτέρω περιγραφείσα ουσία με σκοπό την καταχώριση;

Σύμφωνα με τον ορισμό της ουσίας στον κανονισμό REACH, οι διαλύτες οι οποίοι μπορούν να διαχωριστούν χωρίς να επηρεαστεί η σταθερότητα της ουσίας, ούτε να μεταβληθεί η σύνθεσή της, πρέπει να εξαιρούνται. Όπως και στην ανωτέρω περίπτωση, η μεθανόλη μπορεί να διαχωριστεί χωρίς δυσκολία και η ουσία άνευ διαλύτη πρέπει να καταχωριστεί.

Γενικά, μια ουσία θεωρείται μονοσυστατική εάν ένα κύριο συστατικό είναι παρόν σε συγκέντρωση $\geq 80\%$. Μια ουσία θεωρείται πολυσυστατική εάν περισσότερα του ενός κύρια συστατικά είναι παρόντα σε συγκέντρωση $\geq 10\%$ και $< 80\%$. Το ανωτέρω παράδειγμα αποτελεί οριακή περίπτωση, δεδομένου ότι σημειώνεται υπέρβαση των τιμών κατωφλίου. Ως εκ τούτου, η ουσία θα μπορούσε να θεωρηθεί μονοσυστατική «ζολιμιδίνη» ή ως πολυσυστατική ουσία, μάζα αντίδρασης της «ζολιμιδίνης» και της «ιμιδαζόλης».

Σε αυτού του είδους την οριακή περίπτωση, για να προσδιοριστεί ο καλύτερος τρόπος περιγραφής της ουσίας μπορεί να χρησιμοποιηθεί η τυπική συγκέντρωση των κύριων συστατικών της ως εξής:

- (1) Εάν η τυπική συγκέντρωση της ζολιμιδίνης είναι 77% και της ιμιδαζόλης 11%, τότε συνιστάται η ουσία να θεωρείται μάζα αντίδρασης της ζολιμιδίνης και της ιμιδαζόλης
- (2) Εάν η τυπική συγκέντρωση της ζολιμιδίνης είναι 85% και της ιμιδαζόλης 5%, τότε συνιστάται η ουσία να θεωρείται μονοσυστατική ουσία «ζολιμιδίνη».

7.3. Μείγμα ισομερών

Η υπό εξέταση ουσία είναι μείγμα (μάζα αντίδρασης) δύο ισομερών που σχηματίστηκαν κατά την αντίδραση παρασκευής. Τα επιμέρους ισομερή αναφέρθηκαν για συμπερίληψη στο EINECS. Η οδηγία 67/548/EOK ρύθμιζε τη διάθεση των ουσιών στην αγορά. Δεδομένου ότι δεν αποδιδόταν βαρύνουσα σημασία στον τρόπο παραγωγής της ουσίας, το μείγμα καλυπτόταν από τις καταχωρίσεις των δύο επιμέρους ισομερών στο EINECS. Βάσει του κανονισμού REACH απαιτείται η καταχώριση των παρασκευασμένων ουσιών. Η απόφαση, βάσει της οποίας καθορίζεται ο βαθμός στον οποίο τα διαφορετικά στάδια παραγωγής μιας ουσίας καλύπτονται από τη λέξη «παρασκευή», λαμβάνεται κατά περίπτωση. Εάν το μείγμα ισομερών είναι καταχωρισμένο ως πολυσυστατική ουσία (βάσει των οδηγιών της ενότητας 4.2.2), δεν υπάρχει ανάγκη να υποβληθεί σε δοκιμή η ουσία στην καθαρή της μορφή, εφόσον το προφίλ επικινδυνότητας της ουσίας μπορεί να περιγραφεί επαρκώς βάσει των πληροφοριών των επιμέρους συστατικών.

1. Ονομασία και άλλα αναγνωριστικά

Παραδείγματα	
Ονομασία κατά IUPAC ή άλλη διεθνής χημική ονομασία (της ουσίας)	Μάζα αντίδρασης 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol και 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
Άλλες ονομασίες (της ουσίας)	2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol Μάζα αντίδρασης αιθανόλης, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- και νερού Ένωση ισομερών αιθανόλης, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- (9CI)
Αριθμός ΕΚ (της ουσίας) Ονομασία ΕΚ Περιγραφή ΕΚ	Δεν υπάρχει κανένας αριθμός ΕΚ για την ουσία, επειδή το μείγμα ισομερών δεν αναφέρθηκε στο EINECS. Εντούτοις, η ουσία καλυπτόταν από τις καταχωρίσεις των συστατικών στο EINECS (279-502-9, 279-501-3).
Αριθμός CAS (της ουσίας) Ονομασία CAS	δεν διατίθεται δεν διατίθεται
Αριθμός ΕΚ (συστατικό Α) Ονομασία ΕΚ Περιγραφή ΕΚ	279-502-9 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
Αριθμός ΕΚ (συστατικό Β) Ονομασία ΕΚ Περιγραφή ΕΚ	279-501-3 2,2'-[[[(2,2'-[[[(5-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη) /
Αριθμός CAS (συστατικό Α) Ονομασία CAS	80584-89-0 2,2'-[[[(4-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη
Αριθμός CAS (συστατικό Β) Ονομασία CAS	80584-88-9 2,2'-[[[(5-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)
Άλλος κωδικός ταυτότητας Αναφορά	Αριθμός ENCS 5-5917

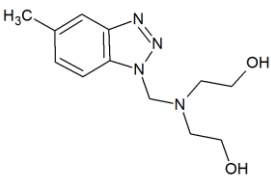
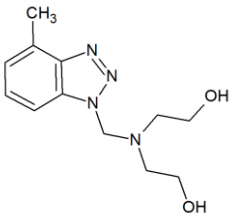
2. Πληροφορίες σύνθεσης – κύρια συστατικά

Κύρια συστατικά						
	Όνομασία κατά IUPAC	Αριθμός CAS	Αριθμός ΕΚ	Μορ. τύπος Μέθοδος Hill	Τυπική συγκ. (% κατά βάρος)	Εύρος συγκ. (% κατά βάρος)
A	2,2'-[[[(4-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)]	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
B	2,2'-[[[(5-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)]	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

Κύρια συστατικά	
Άλλες ονομασίες	
A	2,2'-[[[(4-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)]
B	2,2'-[[[(5-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)]

Κύρια συστατικά		
	Όνομασία ΕΚ	Περιγραφή ΕΚ
A	2,2'-[[[(4-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)]	/
B	2,2'-[[[(5-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)]	/

Κύρια συστατικά		
	Όνομασία CAS	Αριθμός CAS
A	2,2'-[[[(4-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)]	80584-89-0
B	2,2'-[[[(5-μεθυλ-1H-βενζοτρίαζολ-1-υλο)μεθυλ]ιμινο]δισ(αιθανόλη)]	80584-88-9

Κύρια συστατικά			
	Μοριακός τύπος Μέθοδος CAS	Συντακτικός τύπος	Κωδικός SMILES
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Κύρια συστατικά		
	Μοριακό βάρος [g/mol-1]	Φάσμα μοριακού βάρους
A	250	/
B	250	/

7.4. Αρωματική ουσία AH

Η αρωματική ουσία AH αποτελείται από gamma (iso-alpha) methyl ionone και τα ισομερή της. Παράγεται σε τρεις διαφορετικές ποιότητες (ποιότητα A, B και C) οι οποίες διαφέρουν ως προς αναλογία των ισομερών.

Στον ακόλουθο πίνακα παρέχεται επισκόπηση της σύνθεσης των διαφορετικών ποιοτήτων.

Σύνθεση των διαφορετικών ποιοτήτων της αρωματικής ουσίας AH				
Εύρος συγκέντρωσης [%]	Ποιότητα A	Ποιότητα B	Ποιότητα C	Συνολικό εύρος
gamma (iso-alpha) methyl ionone	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (iso-beta) methyl ionone	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alpha n-methyl ionone	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma n-methyl ionone	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
beta n-methyl ionone	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15	0,5-15
pseudo methyl ionones	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Υπάρχουν διάφορες επιλογές για τον προσδιορισμό της ουσίας:

- Η ποιότητα A περιέχει τουλάχιστον 80% του ισομερούς gamma (iso-alpha) methyl ionone και, ως εκ τούτου, θα μπορούσε να θεωρηθεί ως μονοσυστατική ουσία με βάση το ισομερές gamma (iso-alpha) methyl ionone και με τα υπόλοιπα ισομερή ως προσμείξεις.
- Οι ποιότητες B και C περιέχουν λιγότερο από 80% του ισομερούς gamma (iso-alpha) methyl ionone και $\geq 10\%$ των υπόλοιπων ισομερών. Ως εκ τούτου, θα μπορούσαν να θεωρηθούν ως πολυσυστατικές ουσίες:
 - Ποιότητα B: ως μάζα αντίδρασης των gamma(iso-alpha) methyl ionone (65-75%) και alpha-n methyl ionone (10-20%), με τα άλλα ισομερή ως προσμείξεις.
 - Ποιότητα C: ως μάζα αντίδρασης των gamma(iso-alpha) methyl ionone (50-60%) και alpha-n methyl ionone (20-30%), με τα άλλα ισομερή ως προσμείξεις.

Η σύνθεση είναι ασταθής και ενίοτε ένα ισομερές είναι παρόν σε συγκέντρωση $\geq 10\%$ (συνεπώς, ονομάζεται κανονικά κύριο συστατικό) και ορισμένες φορές $< 10\%$ (συνεπώς, ονομάζεται κανονικά πρόσμειξη).

Η ξεχωριστή καταχώριση των διαφορετικών ποιοτήτων θα μπορούσε να είναι αποδεκτή αλλά αυτό θα συνεπαγόταν τρεις καταχωρίσεις. Εντούτοις, ενδέχεται να είναι αιτιολογημένη η σύγκριση των δεδομένων.

Υπάρχουν και οι ακόλουθες εναλλακτικές λύσεις:

- Μία καταχώριση ως μονοσυστατική ουσία με δύο υποκατηγορίες ποιότητας. Σε αυτή την περίπτωση οι υποκατηγορίες ποιότητας αποκλίνουν από τον κανόνα του 80% (βλ. ενότητα 4.2.1).

- Μία καταχώριση ως καθορισμένη μάζα αντίδρασης 5 ισομερών (πολυσυστατική ουσία). Σε αυτή την περίπτωση, ορισμένα ισομερή (κύρια συστατικά) αποκλίνουν από το όριο του 10% βάσει του οποίου διακρίνονται τα κύρια συστατικά από τις προσμείξεις (βλ. ενότητα 4.2.2).
- Μία καταχώριση ως καθορισμένη μάζα αντίδρασης όπου η αστάθεια της σύνθεσης καλύπτεται από το πλήρες εύρος κάθε ισομερούς.

Ίσως είναι σημαντικό να εξεταστεί το εάν:

- Οι τρεις ποιότητες έχουν τις ίδιες ή πολύ παρόμοιες φυσικοχημικές ιδιότητες
- Οι τρεις ποιότητες έχουν παρόμοια χρήση και σενάρια έκθεσης
- Όλες οι ποιότητες έχουν την ίδια ταξινόμηση και επισήμανση επικινδυνότητας, το δε περιεχόμενο των δελτίων δεδομένων ασφαλείας και των εκθέσεων ασφαλείας είναι ταυτόσημα
- Τα διαθέσιμα δεδομένα δοκιμών (και μελλοντικών δοκιμών) καλύπτουν την αστάθεια των τριών ποιτήτων.

Σε αυτό το παράδειγμα περιγράφεται ο προσδιορισμός της ουσίας ως μιας καθορισμένης μάζας αντίδρασης 5 ισομερών (πολυσυστατική ουσία). Λόγω της παρέκκλισης από τον κανόνα του 80% (βλ. ενότητα 4.2.1) και το όριο του 10% (ορισμός πολυσυστατικής ουσίας, βλ. ενότητα 4.2.2), η αιτιολόγηση είναι απαραίτητη. Δεδομένου ότι κάθε ποιότητα παράγεται καθαυτή, πρέπει να προσδιορίζεται στον φάκελο καταχώρισης η σύνθεση καθεμιάς από τις τρεις ποιότητες. Εντούτοις, υπό συνθήκες επίσημης καταχώρισης μπορεί να χρειαστούν τουλάχιστον δύο καταχωρίσεις: (1) Gamma (iso-alpha) methyl ionone και (2) Μάζα αντίδρασης gamma (iso-alpha) methyl ionone και alpha-n-methyl ionone.

Προσδιορισμός ουσίας

Η αρωματική ουσία AH παράγεται σε τρεις διαφορετικές ποιότητες (A, B και C) με την ίδια ποιοτική αλλά διαφορετική ποσοτική σύνθεση. Και οι τρεις ποιότητες περιγράφονται σε έναν φάκελο καταχώρισης για πολυσυστατική ουσία. Αν και αυτό υποδηλώνει ότι ο ορισμός δεν εφαρμόζεται αυστηρά, η καταχώριση ως μία πολυσυστατική ουσία είναι αιτιολογημένη δεδομένου ότι 1) τα διαθέσιμα δεδομένα δοκιμών καλύπτουν την αστάθεια των τριών ποιτήτων, 2) οι τρεις ποιότητες έχουν πολύ παρόμοιες φυσικοχημικές ιδιότητες, 3) όλες οι ποιότητες έχουν την ίδια ταξινόμηση και επισήμανση επικινδυνότητας (ως εκ τούτου, τα δελτία δεδομένων ασφαλείας είναι ταυτόσημα) και 4) οι τρεις ποιότητες έχουν παρόμοια χρήση και σενάρια έκθεσης (ως εκ τούτου, παρόμοιες εκθέσεις χημικής ασφάλειας).

1. Ονομασία και άλλα αναγνωριστικά

Ονομασία κατά IUPAC ή άλλη διεθνής χημική ονομασία	Μάζα αντίδρασης 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-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
--	---

Άλλες ονομασίες	Methyl Ionone Gamma Quality A Methyl Ionone Gamma Quality B Methyl Ionone Gamma Quality C
Αριθμός ΕΚ	δεν διατίθεται
Ονομασία ΕΚ	/
Περιγραφή ΕΚ	/
Αριθμός CAS	δεν διατίθεται
Ονομασία CAS	/

2. Πληροφορίες σύνθεσης – κύρια συστατικά

Θεωρητικά, ενδέχεται να υπάρχουν και άλλα εναντιομερή. Ωστόσο, αναλύθηκαν τα ακόλουθα ισομερή:

Κύρια συστατικά						
	Ονομασία κατά IUPAC	Αριθμός CAS	Αριθμός ΕΚ	Μορ. τύπος Μέθοδος Hill	Ελάχ. συγκ. (% κατά βάρος)	Μέγ. συγκ. (% κατά βάρος)
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	127-51-5	204-846-3	C14H22O	50	85
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	79-89-0	201-231-1	C14H22O	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	C14H22O	3	30
Δ	1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one	δεν διατίθεται	δεν διατίθεται	C14H22O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

Κύρια συστατικά	
Άλλες ονομασίες	
A	alpha-iso-methyl ionone, gamma methyl ionone
B	beta-iso-methyl ionone, delta methyl ionone
C	alpha-n-methyl ionone
Δ	gamma-n-methyl ionone
E	beta-n-methyl ionone

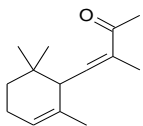
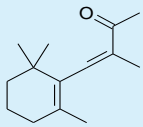
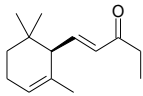
Κύρια συστατικά		
	Ονομασία ΕΚ	Περιγραφή ΕΚ
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
Δ	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/

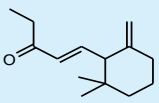
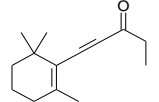
Κύρια συστατικά		
	Ονομασία CAS	Αριθμός CAS
A	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	127-51-5
B	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	79-89-0
C	1-Penten-3-one, 1-[(1R)-2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl]-, (1E)-	127-42-4
Δ	δεν διατίθεται	δεν διατίθεται
E	1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	127-43-5

Κύρια συστατικά

Άλλος κωδικός ταυτότητας		Αναφορά
A	2714 07.036	FEMA Ευρετήριο αρωματικών υλών της ΕΕ
B	07.041	Ευρετήριο αρωματικών υλών της ΕΕ
C	2711 07.009	FEMA Ευρετήριο αρωματικών υλών της ΕΕ
Δ	δεν διατίθεται	δεν διατίθεται
E	2712 07.010	FEMA Ευρετήριο αρωματικών υλών της ΕΕ

Κύρια συστατικά

	Μοριακός τύπος Μέθοδος CAS	Συντακτικός τύπος	Κωδικός SMILES
A	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
B	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
C	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>

Δ	C ₁₄ H ₂₂ O		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC
Ε	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

Κύρια συστατικά

	Μοριακό βάρος / g mol ⁻¹	Φάσμα μοριακού βάρους
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
Δ	206,33	/
Ε	206,33	/

3. Πληροφορίες σύνθεσης – προσμείξεις και πρόσθετα

Προσμείξεις

	Όνομασία κατά IUPAC	Αριθμός CAS	Αριθμός ΕΚ	Μορ. τύπος	Τυπική συγκ. (% κατά βάρος)	Εύρος συγκ. (% κατά βάρος)
F						
αριθμός μη προσδιορισμένων προσμειξεων: συνολική συγκέντρωση μη προσδιορισμένων προσμειξεων:				11 (pseudo methyl ionones) 0,5–3% (κατά βάρος)		

Πρόσθετα						
	Όνομασία κατά IUPAC	Αριθμός CAS	Αριθμός ΕΚ	Μορ. τύπος	Τυπική συγκ. (% κατά βάρος)	Εύρος συγκ. (% κατά βάρος)
Z	Butylated Hydroxytoluene (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05-0,15

4. Πληροφορίες σχετικά με τις διαφορετικές ποιότητες

Κατωτέρω παρατίθενται τα εύρη των πέντε κύριων συστατικών στις τρεις διαφορετικές ποιότητες:

Εύρος συγκέντρωσης [%]	Ποιότητα Α	Ποιότητα Β	Ποιότητα C
gamma (iso-alpha) methyl ionone	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (iso-beta) methyl ionone	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alpha n-methyl ionone	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-methyl ionone	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4
beta n-methyl ionone	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo methyl ionones	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Ορυκτά

Ένα ορυκτό ορίζεται ως συνδυασμός ανόργανων συστατικών όπως αυτά βρίσκονται στον φλοιό της γης, με ένα χαρακτηριστικό σύνολο χημικών συνθέσεων, κρυσταλλικών μορφών (από υψηλής κρυσταλλικότητας έως άμορφες) και φυσικοχημικών ιδιοτήτων.

Τα ορυκτά εξαιρούνται από την υποχρέωση καταχώρισης, εφόσον πληρούν τον ορισμό ουσίας η οποία απαντά στη φύση (άρθρο 3 παράγραφος 39 του κανονισμού REACH) και εφόσον δεν έχουν τροποποιηθεί χημικά (άρθρο 3 παράγραφος 40 του κανονισμού REACH). Αυτό ισχύει για ορυκτά των οποίων η χημική δομή παραμένει αμετάβλητη, ακόμη και εάν έχει υποβληθεί σε χημική διαδικασία ή επεξεργασία, ή φυσική ορυκτολογική μεταποίηση, π.χ. για την αφαίρεση των προσμειξεων.

Ενώ ορισμένα ορυκτά μπορούν να περιγραφούν αποκλειστικά βάσει της χημικής σύνθεσής τους (βλ. ενότητες 4.2.1 και 4.2.2 για τις μονοσυστατικές και τις πολυσυστατικές ουσίες), όσον αφορά άλλα ορυκτά, η χημική σύνθεση δεν επαρκεί από μόνη της για τον ανεπιφύλακτο προσδιορισμό των εν λόγω ουσιών (βλ. ενότητα 4.2.3).

Σε αντίθεση με άλλες μονοσυστατικές ή πολυσυστατικές ουσίες, ο προσδιορισμός πολλών ορυκτών πρέπει να βασίζεται στη χημική σύνθεση *και* στην εσωτερική δομή (π.χ. όπως αυτά προκύπτουν μέσω της φασματοσκοπίας περίθλασης ακτίνων Χ), διότι τα δύο αυτά στοιχεία μαζί αντιπροσωπεύουν την ουσία του ορυκτού και καθορίζουν τις φυσικοχημικές ιδιότητές του.

Σε ό,τι αφορά άλλες πολυσυστατικές ουσίες, ο αριθμός CAS του ορυκτού χρησιμοποιείται ως μέρος του προσδιορισμού (ήτοι, ο συνδυασμός ανόργανων συστατικών). Οι αριθμοί CAS των ανόργανων συστατικών (όπως ορίζονται από τη συστηματική ορυκτολογία) χρησιμοποιούνται για την περιγραφή των διαφορετικών συστατικών. Εάν παραχθεί ένα επιμέρους ανόργανο συστατικό (μια μονοσυστατική ουσία), ο αριθμός CAS της ουσίας αυτής πρέπει να χρησιμοποιηθεί για τον προσδιορισμό της. Για παράδειγμα:

- Το ορυκτό καολίνης (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) αποτελείται βασικά από πρωτογενείς και δευτερογενείς καολινίτες (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7) οι οποίοι είναι ένυδρος αργιλοπυριτικός πηλός.

Σε περίπτωση εφαρμογής διαδικασίας εξευγενισμού του καολίνης για την παραγωγή επιμέρους συστατικού καολίνης, π.χ. καολινίτες, τότε ο αριθμός CAS/EINECS για την ουσία θα είναι EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Το ορυκτό μπεντονίτης (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) το οποίο περιγράφεται στο EINECS ως «Κολλοειδής πηλός. Αποτελείται κυρίως από μοντμοριλονίτη», ήτοι περιέχει σε υψηλό ποσοστό το ανόργανο συστατικό του μοντμοριλονίτη (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) αλλά όχι μόνο.

Σε περίπτωση παραγωγής καθαρού μοντμοριλονίτη (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), τότε ο αριθμός CAS που θα χρησιμοποιηθεί για τον προσδιορισμό της ουσίας είναι αυτός του μοντμοριλονίτη.

Πρέπει να τονιστεί ότι ο μπεντονίτης (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) και ο μοντμοριλονίτης (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) δεν θεωρούνται ίδια ουσία.

Συμπερασματικά, ένα ορυκτό ονομάζεται γενικά βάσει συνδυασμού των ανόργανων συστατικών του. Μπορεί να θεωρηθεί μονοσυστατική ή πολυσυστατική ουσία (γενική καθοδήγηση στις ενότητες 4.2.1 και 4.2.2). Ορισμένα ορυκτά δεν μπορούν να περιγραφούν αποκλειστικά βάσει της χημικής σύνθεσής τους για τον επαρκή προσδιορισμό τους, αλλά απαιτείται πρόσθετος φυσικός χαρακτηρισμός ή οι παράμετροι επεξεργασίας (βλ. ενότητα 4.2.3). Στον ακόλουθο πίνακα παρέχονται ορισμένα παραδείγματα.

Παραδείγματα ορυκτών

Όνομασία	CAS	EINECS	Πρόσθετη περιγραφή
Χριστοβαλίτης	14464-46-1	238-455-4	O_2Si (κρυσταλλικό σύστημα: κυβική/τετραγωνική συμμετρία)
Χαλαζίας	14808-60-7	238-878-4	O_2Si (κρυσταλλικό σύστημα: τριγωνική/εξαγωνική συμμετρία)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Γνωστό και ως διατομίτης, Kieselgur και Celite Περιγραφή: Μαλακό πυριτικό στερεό που αποτελείται από σκελετούς μικρών προϊστορικών υδρόβιων φυτών. Περιέχει κυρίως πυρίτιο.
Δολομίτης	16389-88-1	240-440-2	$CH_2O_3 \cdot 1/2Ca \cdot 1/2Mg$
Ορυκτά ομάδας Feldspar	68476-25-5	270-666-7	Ανόργανη ουσία η οποία είναι προϊόν αντίδρασης πύρωσης υψηλής θερμοκρασίας κατά την οποία οξειδίο του αργιλίου, οξειδίο του βαρίου, οξειδίο του ασβεστίου, οξειδίο του μαγνησίου, οξειδίο του πυριτίου και οξειδίο του στροντίου σε ποικίλες ποσότητες υφίστανται ομοιογενής και ιοντική αλληλοδιάχυση για να σχηματίσουν κρυσταλλική μήτρα.
Τάλκης	14807-96-6	238-877-9	$Mg_3H_2(SiO_3)_4$
Βερμικουλίτης	1318-00-9	-	$(Mg_{0,33}[Mg_{2-3}(Al_{0-1}Fe_{0-1})_{0-1}](Si_{2,33-3,33}Al_{0,67-1,67})(OH)_2O_{10} \cdot 4H_2O)$

Αναλυτικές πληροφορίες που απαιτούνται για τα ορυκτά

Στοιχειακή σύνθεση	Η χημική σύνθεση παρέχει συνολική επισκόπηση της σύνθεσης του ορυκτού ανεξαρτήτως του αριθμού των συστατικών και των αναλογιών τους στο ορυκτό. Συμβατικά η χημική σύνθεση εκφράζεται σε οξείδια.
Φασματικά δεδομένα (XRD ή ισοδύναμο)	Η φασματοσκοπία XRD ή άλλες τεχνικές μπορούν να προσδιορίσουν τα ορυκτά βάσει της κρυσταλλογραφικής δομής τους. Τα χαρακτηριστικά δεδομένα XRD ή τα κατάλληλα εναλλακτικά δεδομένα που προσδιορίζουν το ορυκτό πρέπει να παρέχονται μαζί με σύντομη περιγραφή της αναλυτικής μεθόδου ή της βιβλιογραφικής παραπομπής.
Τυπικές φυσικοχημικές ιδιότητες	Τα ορυκτά έχουν χαρακτηριστικές φυσικοχημικές ιδιότητες που επιτρέπουν την ολοκλήρωση του προσδιορισμού τους, π.χ. <ul style="list-style-type: none">- Πολύ χαμηλή σκληρότητα- Ικανότητα διόγκωσης- Σχήματα διατομίτη (οπτικό μικροσκόπιο)- Πολύ υψηλή πυκνότητα- Εμβαδόν (απορρόφηση αζώτου)

7.6. Αιθέριο έλαιο του *Lavandin grosso*

Τα αιθέρια έλαια είναι ουσίες που λαμβάνονται από τα φυτά. Ως εκ τούτου, τα αιθέρια έλαια μπορούν επίσης να χαρακτηριστούν ως ουσίες βοτανικής προέλευσης.

Γενικά, οι ουσίες βοτανικής προέλευσης είναι σύνθετες φυσικές ουσίες που λαμβάνονται από φυτό ή από τα μέρη αυτού μέσω επεξεργασίας όπως εκχύλιση, απόσταξη, συμπίεση, κλασματοποίηση, καθαρισμός, συμπύκνωση ή ζύμωση. Η σύνθεση των εν λόγω ουσιών ποικίλλει ανάλογα με το γένος, το είδος, τις συνθήκες ανάπτυξης και την περίοδο συγκομιδής των φυτών καθώς και τις εφαρμοζόμενες τεχνικές επεξεργασίας.

Τα αιθέρια έλαια μπορούν να προσδιοριστούν βάσει των κύριων συστατικών τους, όπως είναι η πρακτική για τις πολυσυστατικές ουσίες. Εντούτοις, τα αιθέρια έλαια μπορεί να αποτελούνται από αρκετές εκατοντάδες συστατικών, τα οποία μπορεί να ποικίλλουν σε σημαντικό βαθμό, κάτι το οποίο εξαρτάται από πολλούς παράγοντες (π.χ. γένος, είδος, συνθήκες ανάπτυξης, περίοδος συγκομιδής, χρησιμοποιούμενες διαδικασίες). Ως εκ τούτου, η περιγραφή των κύριων συστατικών συχνά δεν επαρκεί για την περιγραφή των εν λόγω ουσιών UVCB. Τα αιθέρια έλαια πρέπει να περιγράφονται βάσει του φυτού προέλευσης και της διαδικασίας επεξεργασίας, όπως περιγράφεται στην ενότητα 4.3.1 (με χρήση της υποκατηγορίας τύπου ουσιών UVCB 3).

Σε πολλές περιπτώσεις υπάρχουν στον κλάδο διαθέσιμα πρότυπα για τα αιθέρια έλαια (για πολλά αιθέρια έλαια υπάρχουν επίσης πρότυπα κατά ISO). Επιπροσθέτως, μπορούν να δίδονται πληροφορίες σχετικά με τα πρότυπα. Ωστόσο, ο προσδιορισμός της ουσίας πρέπει να βασίζεται στην ουσία όπως αυτή παρασκευάζεται.

Στο παράδειγμα κατωτέρω περιγράφεται το «αιθέριο έλαιο του *Lavandin grosso*» για το οποίο υπάρχει ένα πρότυπο κατά ISO (ISO 8902-1999).

1. Ονομασίες και άλλα αναγνωριστικά

Πρόελευση

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

Διεργασία

Περιγραφή των διεργασιών (βιο)χημικής αντίδρασης που χρησιμοποιούνται για την παρασκευή της ουσίας:

Απόσταξη των ανθών του *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) με υδρατμούς και επακόλουθος διαχωρισμός του νερού από το αιθέριο έλαιο.
Ο επακόλουθος διαχωρισμός είναι μια αυθόρμητη, φυσική διεργασία η οποία κανονικά λαμβάνει χώρα σε φιάλη διαχωρισμού (στην αποκαλούμενη «φλωρεντιανή φιάλη») επιτρέποντας την εύκολη απομόνωση του διαχωρισμένου ελαίου. Η θερμοκρασία σε αυτό το στάδιο της διεργασίας απόσταξης είναι περίπου 40°C.

Ονομασία

Ονομασία κατά IUPAC ή άλλη διεθνής χημική ονομασία	Αιθέριο έλαιο του <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
Αριθμός ΕΚ Ονομασία ΕΚ Περιγραφή ΕΚ	297-385-2 Λεβάντα, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , εκχ. Εκχυλίσματα και τα φυσικώς τροποποιημένα παράγωγά τους όπως βάμματα, συμπήγματα, απόλυτα, αιθέρια έλαια, ελαιορητίνες, τερπένια, κλάσματα απαλλαγμένα τερπενίων, αποστάγματα, υπολείμματα κ.λπ., που λαμβάνονται από το <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³¹ .
Αριθμός CAS Ονομασία CAS	93455-97-1 Λεβάντα, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , εκχ.

³¹ Τα «Labiatae» και «Lamiaceae» είναι συνώνυμα.

2. Πληροφορίες σύνθεσης – γνωστά συστατικά

Γνωστά συστατικά					
	Χημική ονομασία ΕΚ CAS IUPAC Άλλο	Αριθμός ΕΚ CAS	Μορ. τύπος Μέθοδος Hill	Τυπική συγκ. % (κατά βάρος)	Εύρος συγκ. % (κατά βάρος)
A	ΕΚ Οξικό λιναλύλιο CAS 1,6-Octadien-3-ol, 3,7- dimethyl-, acetate IUPAC 3,7-Dimethyl octa-1,6-dien- 3-yl acetate	ΕΚ 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
B	ΕΚ Λιναλοόλη CAS 1,6-octadien-3-ol, 3,7- dimethyl- IUPAC 3,7-Dimethyl octa-1,6-diene- 3-ol	ΕΚ 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24 – 35
C	ΕΚ Βορνανόνη-2 CAS Bicyclo[2.2.1] heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- IUPAC 1,7,7- Trimethylbicyclo[2.2.1]-2- heptanone Άλλο Καμφορά	ΕΚ 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
Δ	ΕΚ Κινεόλη CAS 2-oxabicyclo [2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- IUPAC 1,3,3-Trimethyl-2- oxabicyclo[2.2.2]octane Άλλο 1,8-κινεόλη	ΕΚ 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7

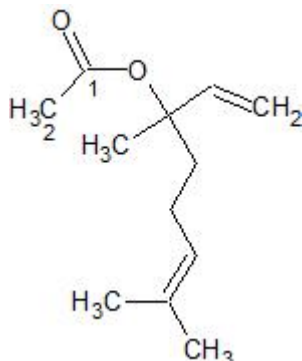
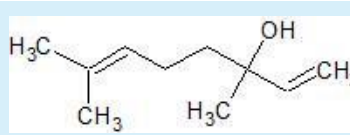
E	<p>EK P-menth-1-en-4-ol</p> <p>CAS 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-</p> <p>IUPAC 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol</p> <p>Άλλο terpinene-4-ol</p>	<p>EK 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5-5
F	<p>EK 2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetate</p> <p>CAS 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate</p> <p>IUPAC 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol</p> <p>Άλλο (±)-Lavandulol acetate</p>	<p>EK 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5-3
Z	<p>EK 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>Άλλο borneol</p>	<p>EK 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5-3
H	<p>EK Καρυοφυλλένιο</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>Άλλο trans-beta-caryophyllene</p>	<p>EK 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1 - 2,5

I	<p>EK (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>Άλλο trans-beta-farnesene</p>	<p>EK 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2 - 2
J	<p>EK (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>Άλλο Λιμονένιο</p>	<p>EK 227-813-5</p> <p>CAS 5989-27-5</p>	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5 - 1,5
K	<p>EK 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>Άλλο cis-beta-ocimene</p>	<p>EK 237-641-2</p> <p>CAS 13877-91-3</p>	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5 - 1,5

Γνωστά συστατικά ≥10%

Γνωστά συστατικά		
	Ονομασία ΕΚ	Περιγραφή ΕΚ
A	Οξικό λιναλύλιο C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	Λιναλοόλη C ₁₀ H ₁₈ O	

Γνωστά συστατικά		
	Όνομασία CAS	Σχετικοί αριθμοί CAS
A	Οξικό λιναλύλιο C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	Λιναλοόλη C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Γνωστά συστατικά			
	Μοριακός τύπος Μέθοδος CAS	Συντακτικός τύπος	Κωδικός SMILES
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Γνωστά συστατικά		
	Μοριακό βάρος	Φάσμα μοριακού βάρους
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Έλαιο χρυσάνθεμου και τα απομονωμένα ισομερή αυτού

Μια επιχείρηση παράγει έλαιο χρυσάνθεμου το οποίο εκχυλίζεται μέσω σύνθλιψης ανθών και φύλλων του φυτού *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae με διαλύτη που περιέχει μείγμα νερού/αιθανόλης (1:10). Μετά την εκχύλιση ο διαλύτης αφαιρείται και το «καθαρό» εκχύλισμα εξευγενίζεται μέσω περαιτέρω σταδίων για να προκύψει το τελικό έλαιο χρυσάνθεμου.

Επιπλέον, από το εκχύλισμα απομονώνονται δύο ισομερή ως μάζα αντίδρασης:

Ιασμολίνη I

(2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-κυκλοπροπανοκαρβοξυλικού οξέος, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-yl ester, (1R,3R)-, αριθμός CAS 4466-14-2), και

Ιασμολίνη II

(3-[(1E)-3-methoxy-2-methyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-dimethyl-κυκλοπροπανοκαρβοξυλικού οξέος, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-ylester, (1R,3R)-, αριθμός CAS 1172-63-0

Επιπλέον, η επιχείρηση αποφάσισε να συνθέσει επίσης την ισομερική μάζα αντίδρασης της ιασμολίνης I και II.

Η επιχείρηση θέτει τα ακόλουθα ερωτήματα:

1. Πώς πρέπει να προσδιοριστεί το έλαιο χρυσάνθεμου με σκοπό την καταχώριση;
2. Καλύπτεται η μάζα αντίδρασης των απομονωμένων ισομερών ιασμολίνη I και II από την καταχώριση του ελαίου;
3. Μπορεί το συντεθειμένο μείγμα των δύο ισομερών να θεωρηθεί ίδιο με το μείγμα των ισομερών που απομονώθηκαν από το έλαιο χρυσάνθεμου;

1. Πώς πρέπει να προσδιοριστεί το έλαιο χρυσάνθεμου με σκοπό την καταχώριση;

Το έλαιο χρυσάνθεμου θεωρείται ουσία UVCB η οποία δεν είναι εφικτό να προσδιοριστεί επαρκώς βάσει της χημικής της σύνθεσης (για αναλυτική καθοδήγηση, ανατρέξτε στην ενότητα 4.3). Είναι απαραίτητη η χρήση και άλλων παραμέτρων προσδιορισμού, όπως η προέλευση και η διεργασία. Το έλαιο χρυσάνθεμου είναι βιολογική ουσία και πρέπει να προσδιορίζεται βάσει του είδους και του μέρους του οργανισμού από το οποίο λαμβάνεται, καθώς και βάσει της διεργασίας εξευγενισμού (εκχύλιση με διαλύτη). Η χημική σύνθεση και η ταυτότητα των συστατικών πρέπει, παρά ταύτα, να παρέχονται, στον βαθμό που είναι γνωστές.

Οι ακόλουθες πληροφορίες θεωρούνται απαραίτητες για τον επαρκή προσδιορισμό της ουσίας:

Ονομασία της ουσίας	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i>, Compositae, αιθέριο έλαιο το οποίο λαμβάνεται μέσω σύνθλιψης ανθών και φύλλων και κατόπιν εκχύλισης με νερό:αιθανόλη (1:10)
Προέλευση	
Γένος, είδος, υποείδος	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae

Μέρος του φυτού που χρησιμοποιείται για το αιθέριο έλαιο	Άνθη και φύλλα			
Διεργασία				
Μέθοδος παρασκευής	Σύνθλιψη και κατόπιν εκχύλιση			
Διαλύτης που χρησιμοποιείται για την εκχύλιση	Νερό:αιθανόλη (1:10)			
Πληροφορίες σύνθεσης – γνωστά συστατικά σε συγκέντρωση % (κατά βάρος)				
Όνομασία συστατικού	Αριθ. ΕΚ	Αριθ. CAS	Ελάχ. %	Μέγ. %
Πυρεθρίνη I: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-chrysanthemate	204-455-8	121-21-1	30	38
Πυρεθρίνη II: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
Κινερίνη 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
Κινερίνη 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
Ιασμολίνη 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	δεν υπάρχει	4466-14-2	4	10

Ιασμολίνη II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1a [S*(Z)],3β (E)]]- 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	δεν υπάρχει	1172-63-0	4	10
Επιπλέον, η ουσία περιέχει έως 40 συστατικά κάτω του 1%.				

Μπορεί επίσης να εξεταστεί το ενδεχόμενο προσδιορισμού της ουσίας ως σαφώς καθορισμένης πολυσυστατικής ουσίας με έξι κύρια συστατικά (μάζα αντίδρασης πυρεθρίνης I, πυρεθρίνης II, κινερίνης I, κινερίνης II, ιασμολίνης I και ιασμολίνης II).

Η ουσία θα θεωρηθεί ως «ουσία η οποία απαντά στη φύση» εάν η διαδικασία παρασκευής είναι μόνο η «σύνθλιψη» και θα εξαιρεθεί από την υποχρέωση καταχώρισης, εκτός εάν πληρούνται τα κριτήρια ταξινόμησής της ως επικίνδυνης σύμφωνα με την οδηγία 67/548/ΕΟΚ.

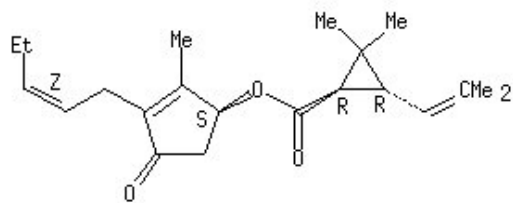
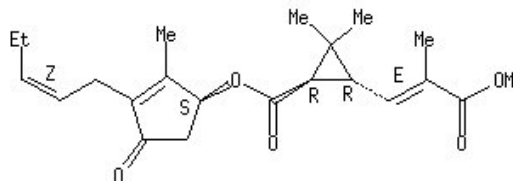
2. Καλύπτεται η μάζα αντίδρασης των απομονωμένων ισομερών ιασμολίνη I και II από την καταχώριση του ελαίου;

Η μάζα αντίδρασης των απομονωμένων ισομερών ιασμολίνη I και II δεν καλύπτεται από την καταχώριση του «έλαιο *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae», δεδομένου ότι το επιμέρους συστατικό/ά δεν καλύπτονται από το σύνολο της ουσίας UVCB και αντιστρόφως. Η μάζα αντίδρασης της ιασμολίνης I και II θεωρείται διαφορετική ουσία.

Η μάζα αντίδρασης της ιασμολίνης I και ιασμολίνης II μπορεί να θεωρηθεί πολυσυστατική ουσία (για αναλυτική καθοδήγηση, ανατρέξτε στην ενότητα 4.2.3) με δύο κύρια συστατικά.

Οι ακόλουθες πληροφορίες θεωρούνται απαραίτητες για τον επαρκή προσδιορισμό της ουσίας:

Όνομασία κατά IUPAC της ουσίας	Μάζα αντίδρασης (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1a [S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) και (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1a [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)			
Άλλη ονομασία	Μάζα αντίδρασης της ιασμολίνης I και της ιασμολίνης II			
Καθαρότητα της ουσίας	95–98% (κατά βάρος)			
Πληροφορίες σύνθεσης – κύρια συστατικά σε συγκέντρωση % (κατά βάρος)				
Όνομασία συστατικού	Αριθ. ΕΚ	Αριθ. CAS	Ελάχ. %	Μέγ. %

<p>Ιασμολίνη I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1a[S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate</p>	<p>δεν υπάρχει</p>	<p>4466-14-2</p>	<p>40</p>	<p>60</p>
<p>Μοριακός τύπος Συντακτικός τύπος Μοριακό βάρος</p>		 <p>C₂₂H₃₀O₅ M = 374 g/mol</p>		
<p>Ιασμολίνη II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-en-1-yl) [1R-[1a[S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate</p> <p>Μοριακός τύπος Συντακτικός τύπος Μοριακό βάρος</p>	<p>δεν υπάρχει</p>	<p>1172-63-0</p>  <p>C₂₁H₃₀O₃ M = 330 g/mol</p>	<p>35</p>	<p>65</p>

3. Μπορεί το συντεθειμένο μείγμα των δύο ισομερών (μάζα αντίδρασης) να θεωρηθεί ίδιο με το μείγμα των ισομερών που απομονώθηκαν από το έλαιο χρυσάνθεμου;

Σε ό,τι αφορά σαφώς καθορισμένες χημικά ουσίες, οι οποίες περιγράφονται επαρκώς από τα συστατικά τους, δεν είναι βαρύνουσας σημασίας το εάν η ουσία έχει απομονωθεί από εκχύλισμα ή έχει συντεθεί μέσω χημικής διεργασίας. Ως εκ τούτου, η συντεθειμένη μάζα αντίδρασης της ιασμολίνης I και της ιασμολίνης II μπορεί να θεωρηθεί ίδια με το μείγμα ισομερών που έχει απομονωθεί από το χρυσάνθεμο, ακόμη και αν παράγεται μέσω διαφορετικών διαδικασιών παρασκευής, υπό την προϋπόθεση ότι η καθαρότητα του μείγματος και το εύρος συγκέντρωσης των κύριων συστατικών είναι ίδια.

4. Συμπέρασμα

Προσδιορίζονται δύο ουσίες:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, αιθέριο έλαιο το οποίο λαμβάνεται μέσω σύνθλιψης ανθών και φύλλων και κατόπιν εκχύλισης με νερό:αιθανόλη (1:10)
2. Μάζα αντίδρασης των ισομερών ιασμολίνη I και ιασμολίνη II, ανεξαρτήτως της διαδικασίας παρασκευής της ουσίας.

Εάν οι ανωτέρω ουσίες χρησιμοποιηθούν *μόνο* σε φυτοπροστατευτικά και βιοκτόνα προϊόντα, θα θεωρηθούν ως καταχωρισμένες βάσει του κανονισμού REACH (άρθρο15).

7.8. Phenol, isopropylated, phosphate

Η ουσία Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) είναι ουσία UVCB στην οποία η μεταβλητότητα της οντότητας «isopropylated» δεν μπορεί να οριστεί πλήρως.

1. Ονομασία και άλλα αναγνωριστικά

Ονομασία κατά IUPAC ή άλλη διεθνής χημική ονομασία	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)
Άλλες ονομασίες	Phenol, isopropylated, phosphate Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (βάσει σχέσης προπυλενίου/φαινόλης 1:1 mol)
Αριθμός ΕΚ Ονομασία ΕΚ Περιγραφή ΕΚ	273-066-3 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) /
Αριθμός CAS Ονομασία CAS	68937-41-7 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)

2. Πληροφορίες σύνθεσης – κύρια συστατικά

Κύρια συστατικά					
Ονομασία κατά IUPAC	Αριθμός CAS	Αριθμός ΕΚ	Μορ. τύπος Μέθοδος Hill	Τυπική συγκ. (% κατά βάρος)	Εύρος συγκ. (% κατά βάρος)
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Μη καθορισμένο		

Κύρια συστατικά	
Όνομασία ΕΚ	Περιγραφή ΕΚ
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	/
Όνομασία CAS	Αριθμός CAS
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7

7.9. Τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου

Μια επιχείρηση συνθέτει τις ακόλουθες ουσίες:

Ουσία Α

Τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, di-C10-18-alkyldimethyl, chlorides

Αριθμός ΕΚ 294-392-2

Αριθμός CAS 91721-91-4

Κατανομή μηκών ανθρακικής αλυσίδας:

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 %

Ουσία Β

Τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, dicoco alkyldimethyl, chlorides

Αριθμός ΕΚ 263-087-6

Αριθμός CAS 61789-77-3

Η επιχείρηση δεν γνωρίζει την ακριβή σύνθεση της εν λόγω ουσίας.

Ουσία C

Didodecyldimethylammonium bromide

Ουσία D

Didodecyldimethylammonium chloride

Ουσία E

Η ουσία E παρασκευάζεται ως μάζα αντίδρασης του Didodecyldimethylammonium bromide και του Didodecyldimethylammonium chloride (μάζα αντίδρασης των ουσιών C και D)

Ουσία F

Τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimethylammonium, chlorides

Αριθμός EK 268-072-8

Αριθμός CAS68002-59-5

Κατανομή μηκών ανθρακικής αλυσίδας:

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

Ουσία G

Τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, di-C₄₋₂₂-alkyldimethyl, chlorides

Κατανομή μηκών ανθρακικής αλυσίδας (η μονή απόστροφος υποδεικνύει έναν διπλό δεσμό, η διπλή απόστροφος υποδεικνύει έναν τριπλό δεσμό):

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

Μέχρι στιγμής, η επιχείρηση χρησιμοποιεί μία μόνο ουσία B (τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, dicoco alkyldimethyl chlorides, αριθμός EK 263-087-6 και αριθμός CAS 61789-77-3) για την ονομασία, διότι αυτή αντιστοιχεί καλύτερα σε όλες τις ουσίες (ουσία A έως G). Η επιχείρηση θα ήθελε να γνωρίζει εάν είναι εφικτό να καλυφθούν όλες οι ουσίες (A έως G) υπό μία καταχώριση της ουσίας B.

1. Γενικές παρατηρήσεις

Οι υδατάνθρακες (παραφίνες, ολεφίνες) που παράγονται από λιπαρά και έλαια ή συνθετικά υποκατάστατα προσδιορίζονται βάσει της κατανομής της ανθρακικής αλυσίδας τους ή της προέλευσής τους (περιγραφική παράμετρος αλκυλικών αλυσίδων), βάσει λειτουργικής ομάδας (περιγραφική παράμετρος λειτουργικότητας), π.χ. αμμώνιο, και βάσει του ανιόντος/κατιόντος (περιγραφική παράμετρος αλάτων), π.χ. χλωρίδιο. Η κατανομή ανθρακικής αλυσίδας, π.χ. C₈₋₁₈, αναφέρεται σε

κορεσμένα

γραμμική (μη διακλαδισμένα)

συμπεριλαμβανομένων όλων των αριθμών άνθρακα (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈), όπου η περιορισμένη κατανομή δεν καλύπτει την ευρύτερη κατανομή και αντιστρόφως.

Διαφορετικά, θα έπρεπε να υποδεικνύεται ως εξής:

ακόρεστη (C₁₆ ακόρεστη)

διακλαδισμένα (C₁₀ διακλαδισμένα)

άρτια αριθμημένα (C₁₂₋₁₈ άρτια αριθμημένα)

Οι ανθρακικές αλυσίδες που περιγράφονται βάσει της προέλευσης πρέπει να περιλαμβάνουν την κατανομή βάσει της προέλευσης, π.χ. αλκυλαμίνες στέατος:

Οι αλκυλαμίνες στέατος είναι κατά 99% πρωτοταγείς αμίνες ευθείας ανθρακικής αλυσίδας με την ακόλουθη κατανομή μηκών ανθρακικής αλυσίδας (Ullmann, 1985) [η μονή απόστροφος υποδεικνύει ένα διπλό δεσμό, η διπλή απόστροφος υποδεικνύει ένα τριπλό δεσμό]:

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

2. Τρόπος προσδιορισμού των ουσιών με σκοπό την καταχώριση

Κάθε ουσία συγκρίνεται με την ουσία Β (η οποία χρησιμοποιήθηκε μέχρι στιγμής για την ονοματοδοσία) ώστε να διαπιστωθεί ένα οι δύο ουσίες μπορούν να θεωρηθούν ίδιες.

Σύγκριση ουσιών Α και Β

Για το «κοκκοκάρυο» της ουσίας Β μπορεί να προσδιοριστεί η ακόλουθη κατανομή μηκών ανθρακικής αλυσίδας (Ullmann, 1985) [η μονή απόστροφος υποδεικνύει ένα διπλό δεσμό, η διπλή απόστροφος υποδεικνύει ένα τριπλό δεσμό]:

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

Ως εκ τούτου, η κατανομή των μηκών αλυσίδας της ουσίας Α αποκλίνει από την κατανομή των μηκών ανθρακικής αλυσίδας του «κοκκοκαρύου» της ουσίας Β. Δεδομένου ότι η ποιοτική και ποσοτική σύνθεση των δύο ουσιών αποκλίνει σε σημαντικό βαθμό, δεν μπορούν να θεωρηθούν ίδιες.

Σύγκριση ουσιών Β και C

Η ονομασία «τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, dicoco alkylidimethyl, chlorides» της ουσίας Β περιγράφει μείγμα συστατικών με διαφορετικά μήκη ανθρακικών αλυσίδων (C₆ έως C₁₈ άρτια αριθμημένων, ευθέων, κορεσμένων και ακόρεστων), ενώ η ουσία C περιγράφει μόνο ένα συστατικό με ένα μήκος καθορισμένης και κορεσμένης ανθρακικής αλυσίδας (C₁₂) με ένα διαφορετικό ανιόν (βρωμίδιο). Ως εκ τούτου, η ουσία C δεν μπορεί να θεωρηθεί ίδια με την ουσία Β.

Σύγκριση ουσιών Β και D

Η ονομασία «τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, dicoco alkylidimethyl, chlorides» της ουσίας Β περιγράφει μείγμα συστατικών με διαφορετικά μήκη ανθρακικών αλυσίδων (C₆ έως C₁₈ άρτια αριθμημένων, ευθέων, κορεσμένων και ακόρεστων), ενώ η ουσία D περιγράφει ένα συστατικό με μήκος καθορισμένης και κορεσμένης ανθρακικής αλυσίδας (C₁₂) και με το ίδιο ανιόν (χλωρίδιο). Οι ουσίες Β και D έχουν διαφορετικές ονομασίες και δεν μπορούν να θεωρηθούν ίδιες, δεδομένου ότι ένα επιμέρους συστατικό δεν καλύπτεται από μείγμα που περιέχει ένα ορισμένο συστατικό και αντιστρόφως.

Σύγκριση ουσιών Β και E

Η ουσία E είναι μείγμα των ουσιών C και D. Αμφότερες οι ουσίες έχουν μήκος κορεσμένης αλυσίδας C₁₂ αλλά διαφορετικά ανιόντα (βρωμίδιο και χλωρίδιο). Η ονομασία «τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, dicoco alkylidimethyl, chlorides» της ουσίας Β περιγράφει μείγμα συστατικών με διαφορετικά μήκη ανθρακικών αλυσίδων (C₆ έως C₁₈ άρτια αριθμημένων, ευθέων, κορεσμένων και ακόρεστων) και το χλωρίδιο ως ανιόν. Εντούτοις, η ουσία E περιγράφεται μόνο βάσει του μήκους ανθρακικής αλυσίδας C₁₂, με το βρωμίδιο ως πρόσθετο ανιόν. Ως εκ τούτου, οι ουσίες Β και E δεν μπορούν να θεωρηθούν ίδιες. Κατά συνέπεια, είναι απαραίτητη χωριστή καταχώριση της ουσίας E.

Σύγκριση ουσιών B και F

Η ονομασία «τεταρτοταγείς ενώσεις του αμμωνίου, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimethylammonium, chlorides» της ουσίας F είναι μείγμα συστατικών με διαφορετικά μήκη ανθρακικών αλυσίδων (C₁₄ έως C₁₈ άρτια και περιττά αριθμημένων, ευθέων και κορεσμένων). Η ουσία F διαφέρει από την ουσία B σε ό,τι αφορά τη σύνθεση και το εύρος κατανομής των ανθρακικών αλυσίδων. Η ουσία F έχει περιορισμένη κατανομή μηκών ανθρακικής αλυσίδας, ενώ διαθέτει, επίσης, τις ανθρακικές αλυσίδες C₁₅- και C₁₇-. Ως εκ τούτου, οι ουσίες B και F δεν μπορούν να θεωρηθούν ίδιες.

Σύγκριση ουσιών B και G

Οι ουσίες B και G φαίνεται να είναι παρόμοιες δεδομένου ότι η κατανομή ανθρακικών αλυσίδων τους παρουσιάζει σχεδόν το ίδιο εύρος. Εντούτοις, η ουσία G περιλαμβάνει επίσης τα μήκη ανθρακικής αλυσίδας C₄, C₂₀ και C₂₂. Η κατανομή μηκών ανθρακικής αλυσίδας της ουσίας G είναι μεγαλύτερου εύρους σε σύγκριση με αυτήν της ουσίας B. Ως εκ τούτου, οι ουσίες B και G δεν μπορούν να θεωρηθούν ίδιες.

3. Συμπέρασμα

Οι υδρογονάνθρακες (παραφίνες, ολεφίνες) μπορούν να θεωρηθούν ίδιες μόνο όταν και οι τρεις περιγραφικές παράμετροι είναι ίδιες (αλκυλικές αλυσίδες, λειτουργικότητα και άλατα).

Στο ανωτέρω παράδειγμα, οι περιγραφικές παράμετροι είναι πάντοτε διαφορετικές μεταξύ τους. Ως εκ τούτου, οι ουσίες δεν μπορούν να καλυφθούν από μία καταχώριση της ουσίας B.

7.10. Πετρελαϊκές ουσίες

Βάσει της καθοδήγησης για συγκεκριμένες ουσίες UVCB στην ενότητα 4.3.2, παρατίθενται δύο παραδείγματα.

7.10.1. Ροή ανάμιξης βενζίνης (C4-C12)

1. Ονομασία και άλλα αναγνωριστικά

Ονομασία

Ονομασία κατά IUPAC ή άλλη διεθνής χημική ονομασία	Νάφθα (πετρελαίου), καταλυτικά αναμορφωμένη
---	---

Προέλευση

Προσδιορισμός ή περιγραφή της προέλευσης της ροής	Αργό πετρέλαιο
--	----------------

Διεργασία

Περιγραφή διεργασίας διύλισης	Διεργασία καταλυτικής αναμόρφωσης
Εύρος ατόμων άνθρακα	C4-C12
Εύρος ή τιμή διαχωρισμού σημείων βρασμού	30 °C έως 220 °C
Άλλες φυσικές ιδιότητες, π.χ. ιξώδες	κάτω των 7 mm ² /s στους 40 °C (ιξώδες)
Αριθμός ΕΚ Αριθμός CAS Ονομασία ΕΚ/Ονομασία CAS Περιγραφή ΕΚ/Περιγραφή CAS	273-271-8 68955-35-1 Νάφθα (πετρελαίου), καταλυτικά αναμορφωμένη Πολύπλοκος συνδυασμός υδρογονανθράκων που παράγεται με την απόσταξη προϊόντων μέσω διεργασίας καταλυτικής αναμόρφωσης. Συνίσταται από υδρογονάνθρακες με αριθμό ατόμων άνθρακα κυρίως στην περιοχή από C4 έως και C12 και με περιοχή σημείων βρασμού από 30 °C έως 220 °C (90°F έως 430°F) περίπου. Περιέχει σχετικά μεγάλη αναλογία αρωματικών και διακλαδισμένης αλυσίδας υδρογονανθράκων. Αυτή η ροή μπορεί να περιέχει 10% κατ' όγκο ή περισσότερο βενζόλιο.

2. Πληροφορίες σύνθεσης

Γνωστά συστατικά			
Ονομασία κατά IUPAC	Αριθμός CAS	Αριθμός ΕΚ	Εύρος συγκ. (% κατά βάρος)
Βενζόλιο	71-43-2	200-753-7	1-10
Τολουόλιο	108-88-3	203-625-9	20-25
Ξυλόλιο	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Ακάθαρτα πετρέλαια (πετρελαίου)

1. Ονομασία και άλλα αναγνωριστικά

Ονομασία κατά IUPAC ή άλλη διεθνής χημική ονομασία	Ακάθαρτα πετρέλαια (πετρελαίου), βαρέα ατμοσφαιρικής απόσταξης
---	--

Προέλευση

Προσδιορισμός ή περιγραφή της προέλευσης της ροής	Αργό πετρέλαιο
--	----------------

Διεργασία

Περιγραφή διεργασίας διύλισης	Ατμοσφαιρική απόσταξη
Εύρος ατόμων άνθρακα	C7–C35
Εύρος ή τιμή διαχωρισμού σημείων βρασμού	121 °C έως 510 °C
Άλλες φυσικές ιδιότητες, π.χ. ιξώδες	20 mm ² /s στους 40 °C (ιξώδες)
Αριθμός ΕΚ Αριθμός CAS Ονομασία ΕΚ/Ονομασία CAS Περιγραφή ΕΚ/Περιγραφή CAS	272-184-2 68783-08-4 Ακάθαρτα πετρέλαια (πετρελαίου), βαρέα ατμοσφαιρικής απόσταξης Πολύπλοκος συνδυασμός υδρογονανθράκων που λαμβάνεται με την απόσταξη αργού πετρελαίου. Συνίσταται από υδρογονάνθρακες με αριθμό ατόμων άνθρακα κυρίως στην περιοχή από C7 έως C35 και με περιοχή σημείων βρασμού από 121 °C έως 510 °C (250°F έως 950°F) περίπου.

2. Χημική σύνθεση

Δεν υπάρχουν διαθέσιμες πληροφορίες.

7.11. Ένζυμα

Βάσει της καθοδήγησης για συγκεκριμένες ουσίες UVCB στην ενότητα 4.3.2.3 αναφέρονται δύο παραδείγματα συμπυκνωμάτων ενζύμων: σουμπτιλίσινη (προσδιορίζεται βάσει της ονοματολογίας IUBMB + άλλων συστατικών) και α-αμυλάση (προσδιορίζεται βάσει της ονοματολογίας IUBMB + οργανισμού παραγωγής)

7.11.1. Σουμπτιλίσινη

Πρωτεΐνη ένζυμο	Σουμπτιλίσινη
του αριθμού IUBMB	3.4.21.62
Ονομασίες που παρέχονται βάσει του IUBMB (Συστημική ονομασία, ονομασία ενζύμου, συνώνυμα)	Σουμπτιλίσινη, alcalase, alcalase 0.6L, alcalase 2.5L, ALK-enzyme, bacillopeptidase A, bacillopeptidase B, Bacillus subtilis alkaline proteinase biopraser, biopraser AL 15, biopraser APL 30, colistinase, (βλ. επίσης παρατηρήσεις), subtilisin J, subtilisin S41, subtilisin Sendai, subtilisin GX, subtilisin E κλπ.
Παρατηρήσεις που παρέχονται βάσει του IUBMB	Η σουμπτιλίσινη είναι μια ενδοπεπτιδάση σερίνης, τυπικό παράδειγμα της οικογένειας πεπτιδάσων S8 . Δεν περιέχει υπολείμματα κυστεΐνης (αν και αυτά βρίσκονται σε ομόλογα ένζυμα). Παραλλαγές του είδους είναι η σουμπτιλίσινη BPN' (επίσης σουμπτιλίσινη B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse, Nagarse proteinase, subtilisin Novo, bacterial proteinase Novo) και η σουμπτιλίσινη Carlsberg (σουμπτιλίσινη A, subtilopeptidase A, alcalase Novo). Αντιστοιχούσε κατά το παρελθόν στον αριθμό EK 3.4.4.16 και πλέον συμπεριλήφθηκε στον αριθμό EK 3.4.21.14. Παρόμοια ένζυμα παράγονται από ποικίλα στελέχη του <i>Bacillus subtilis</i> και άλλα είδη <i>Bacillus</i> [1,3]
Αντίδραση	Υδρόλυση πρωτεϊνών με ευρεία ειδικότητα για πεπτιδικούς δεσμούς και προτίμηση για μεγάλο υπόλειμμα χωρίς φορτίο στο P1. Υδρολύει πεπτίδια αμιδίων
Τύπος αντίδρασης	Υδρολάσες Δρουν επί πεπτιδικών δεσμών (πεπτιδάσες) Ενδοπεπτιδάσες σερίνης

Αριθμός ΕΚ	232-752-2
Ονομασία ΕΚ	Σουμπτιλίσίνη
Αριθμός CAS	9014-01-1
Ονομασία CAS	Σουμπτιλίσίνη
Συγκέντρωση πρωτεΐνης ενζύμου	26 %
Άλλα συστατικά	
Άλλες πρωτεΐνες, πεπτίδια και αμινοξέα	39 %
Υδατάνθρακες	11 %
Λιπίδια	1 %
Ανόργανα άλατα	23 %
Πρόσθετες παράμετροι	
Υποστρώματα και προϊόντα	πρωτεΐνες ή ολιγοπεπτίδια, νερό πεπτίδια

7.11.2. α-αμυλάση

Πρωτεΐνη ένζυμο	α-αμυλάση
του αριθμού IUBMB	3.2.1.1
Ονομασίες που παρέχονται βάσει του IUBMB (Συστημική ονομασία, ονομασία ενζύμου, συνώνυμα)	1,4-α-D-glucan glucanohydrolase, glycogenase, α-αμυλάση, alpha-amylase, endoamylase, Taka-amylase A

Παρατηρήσεις που παρέχονται βάσει του IUBMB	Δρα επί του αμύλου, του γλυκογόνου και των σχετικών πολυσακχαριτών και ολιγοσακχαριτών κατά τυχαίο τρόπο. Στη μορφή α-απελευθερώνονται αναγωγικές ομάδες. Ο όρος «α» σχετίζεται με την αρχική μορφή ανωμερούς της ελεύθερης ομάδας σακχάρων που απελευθερώνεται και όχι με τη μορφή του δεσμού που υδρολύεται.
Αντίδραση	Ενδοϋδρόλυση γλυκοζιδικών δεσμών 1,4- α-D-σε πολυσακχαρίτες που περιέχουν τρεις ή περισσότερες μονάδες D-γλυκόζης με δεσμούς 1,4- α-
Τύπος αντίδρασης	υδρολάσες, γλυκοσιδάσες γλυκοσιδάσες, ήτοι ένζυμα που υδρολύουν τις γλυκοσιδικές ενώσεις O- και S-
Αριθμός ΕΚ	232-565-6
Ονομασία ΕΚ	Αμυλάση, α-
Αριθμός CAS	9000-90-2
Σχετικοί αριθμοί CAS	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (όλα διαγράφηκαν)
Ονομασία CAS	Αμυλάση, α-
Συγκέντρωση πρωτεΐνης ενζύμου	37 %
Άλλα συστατικά	
Άλλες πρωτεΐνες, πεπτίδια και αμινοξέα	30 %
Υδατάνθρακες	19 %
Ανόργανα άλατα	14 %

Πρόσθετες παράμετροι

Υποστρώματα και προϊόντα

άμυλο, γλυκογόνο, νερό,
πολυσακχαρίτης, ολιγοσακχαρίτης

Παράρτημα Ι - Υλικά υποστήριξης

Το παρόν παράρτημα περιλαμβάνει κατάλογο δικτυακών τόπων, βάσεων δεδομένων και εγχειριδίων τα οποία μπορούν να είναι χρήσιμα για την εξεύρεση των κατάλληλων ονομασιών κατά IUPAC, CAS και ΕΚ, αριθμών CAS και ΕΚ, μοριακών και συντακτικών τύπων, συμπεριλαμβανομένης της αναπαράστασης σύμφωνα με το σύστημα SMILES, καθώς και άλλων παραμέτρων που απαιτούνται για τον προσδιορισμό της ουσίας. Δεν έχουν συμπεριληφθεί εμπορικές βάσεις δεδομένων και εμπορικά μέσα καθοδήγησης.

Γενικά		
Παράμετρος ταυτότητας ουσίας	Προέλευση	Περιγραφή προέλευσης
Υπουργείο Υγείας και Ανθρωπίνων Υπηρεσιών ΗΠΑ	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Σύνολο βάσεων δεδομένων και εργαλείων που βοηθούν τους χρήστες να πραγματοποιούν αναζήτηση χημικών πληροφοριών
Perkin Elmer Informatics	https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	Δωρεάν βάση δεδομένων που παρέχει χημικές δομές, φυσικές ιδιότητες και υπερσυνδέσμους προς σχετικές πληροφορίες
BIOVIA Experiment Knowledge Base (ΕΚΒ)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Χημικό λογισμικό, Accord Alphabetical Product Listing

Ονομασία και άλλα αναγνωριστικά		
Παράμετρος ταυτότητας ουσίας	Προέλευση	Περιγραφή προέλευσης
Ονομασία κατά IUPAC	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	Επίσημος δικτυακός τόπος της IUPAC
	https://iupac.qmul.ac.uk/	Χημική ονοματολογία και συστάσεις της IUPAC (υπό την αρμοδιότητα της IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Κύριες εκδόσεις ονοματολογίας κατά IUPAC, αναμένεται επικαιροποίηση το 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Κύριες εκδόσεις ονοματολογίας κατά IUPAC, αναμένεται επικαιροποίηση το 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Κύριες εκδόσεις ονοματολογίας κατά IUPAC, αναμένεται επικαιροποίηση τον Ιούλιο του 2005.
Ονομασία κατά IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Κύριες εκδόσεις ονοματολογίας κατά IUPAC
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Εισαγωγικός τόμος που καλύπτει όλους τους τύπους ενώσεων
Ονομασία κατά IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Εμπορικό ηλεκτρονικό πρόγραμμα ονοματοδοσίας το οποίο μπορεί να είναι ιδιαίτερα χρήσιμο για την ονοματοδοσία δομών μέτριας πολυπλοκότητας. Επίσης, διατίθεται ελεύθερο λογισμικό για μικρομόρια (συνιστάται από την IUPAC)

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Ονοματολογία οργανικής χημείας της IUPAC (συνιστάται από την IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Πλήρης κατάλογος των εγκεκριμένων κοινών και ημισυστηματικών ονομασιών ριζών των οργανικών ενώσεων
	http://www.chemexper.com/	Στόχος του χημικού καταλόγου ChemExper είναι η δημιουργία μιας κοινής και ελεύθερα προσβάσιμης βάσης δεδομένων χημικών προϊόντων στο διαδίκτυο. Η εν λόγω βάση δεδομένων περιλαμβάνει χημικά προϊόντα με τα φυσικά τους χαρακτηριστικά. Ο καθένας μπορεί να υποβάλλει χημικές πληροφορίες και να ανακτά πληροφορίες χρησιμοποιώντας ένα πρόγραμμα περιήγησης του διαδικτύου
Ονοματολογία IUBMB	https://iubmb.qmul.ac.uk/	Βάση δεδομένων βιοχημικής ονοματολογίας της IUBMB (υπό την αρμοδιότητα της IUBMB)
Άλλες ονομασίες	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Γενικές ονομασίες χρωματικού δείκτη, διεθνής χρωματικός δείκτης, τέταρτη ηλεκτρονική έκδοση
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (Διεθνής ονοματολογία συστατικών καλλυντικών προϊόντων), επίσημος δικτυακός τόπος του Συμβουλίου προϊόντων ατομικής περιποίησης
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	ΕΡΑ ΗΠΑ Ουσίες που περιέχουν μεταβαλλόμενα μήκη ανθρακικής αλυσίδας (εύρη αλκυλικών αλυσίδων με χρήση της σημειογραφίας CX-Y)
Άλλα αναγνωριστικά	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	Κανόνες σήμανσης CE, επίσημος δικτυακός τόπος της ευρωπαϊκής σήμανσης CE

Αριθμός ΕΚ	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	Ευρετήριο ΕΚ: αναζήτηση στα EINECS, ELINCS, NLP και στο παράρτημα I της οδηγίας 67/548/ΕΟΚ
Αριθμός CAS	http://www.cas.org	Επίσημος δικτυακός τόπος της υπηρεσίας μητρώου CAS
	http://www.chemistry.org	Επίσημος δικτυακός τόπος της Αμερικανικής Χημικής Εταιρείας

Μοριακός και συντακτικός τύπος

Παράμετρος ταυτότητας ουσίας	Προέλευση	Περιγραφή προέλευσης
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html	Δωρεάν μηχανή παραγωγής αρχείων δομής SMILES
Μοριακό βάρος και SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsSketch, ελεύθερο λογισμικό (διατίθεται και σε εμπορική έκδοση)
Διάφορες φυσικοχημικές παράμετροι	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface	Το EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ είναι μια σειρά μοντέλων εκτίμησης των φυσικών/χημικών ιδιοτήτων και της τύχης των ουσιών στο περιβάλλον με βάση τα Windows® την οποία ανέπτυξε ο οργανισμός «Office of Pollution Prevention Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC)» του EPA.
Πρόσθετη υποστήριξη για συγκεκριμένες ουσίες	Ερωτήσεις και απαντήσεις - ECHA Υποστήριξη ανά κλάδο για τον προσδιορισμό ουσιών - ECHA	Στον δικτυακό τόπο του ECHA και στις Ερωτήσεις και απαντήσεις παρέχεται υποστήριξη όσον αφορά τις προσεγγίσεις σχετικά με την ονοματοδοσία και τον χαρακτηρισμό για συγκεκριμένες ουσίες

Παράρτημα ΙΙ – Τεχνική καθοδήγηση ανά παράμετρο προσδιορισμού ουσιών

Οι πληροφορίες που περιλαμβάνονται στο παρόν παράρτημα απευθύνονται στους χρήστες του εγγράφου καθοδήγησης οι οποίοι δεν είναι εξοικειωμένοι με τους τεχνικούς κανόνες της ονοματολογίας, τη χρήση των διαφόρων αριθμών καταχώρισης και τους κανόνες σημειογραφίας για τις μοριακές και συντακτικές πληροφορίες, τα φασματικά δεδομένα κ.λπ.

Στο παρόν παράρτημα παρέχονται γενικά εισαγωγικά στοιχεία μέσω της σύνοψης των κύριων αρχών και καθοδήγηση του χρήστη προς τις αρχικές πηγές για πλήρη ενημέρωση.

Η παρούσα επισκόπηση αποτελεί απλοποιημένη έκδοση για τον επαγγελματία χρήστη, η οποία δεν είναι πλήρης ούτε επαρκώς αναλυτική. Δεν πρέπει σε καμία περίπτωση να θεωρηθεί ισοδύναμη με την επίσημη πηγή.

1 Ονομασία/ες στην ονοματολογία IUPAC- ή άλλη διεθνή ονοματολογία

Για τους σκοπούς της καταχώρισης, παρέχεται η αγγλική ονομασία κατά IUPAC ή άλλη σαφώς καθορισμένη και διεθνώς αποδεκτή ονομασία της ουσίας.

Μια ονομασία IUPAC βασίζεται στη διεθνή πρότυπη χημική ονοματολογία που έχει καθοριστεί από τον διεθνή οργανισμό IUPAC, ήτοι τη Διεθνή Ένωση Καθαρής και Εφαρμοσμένης Χημείας (για τις συναφείς παραπομπές, ανατρέξτε στο παράρτημα 1). Η ονοματολογία κατά IUPAC είναι ένας συστηματικός τρόπος ονοματοδοσίας του χημικών ουσιών, τόσο των οργανικών όσο και των ανόργανων. Στο πλαίσιο της ονοματολογίας κατά IUPAC, γίνεται χρήση προθημάτων, επιθημάτων και επενθημάτων με σκοπό την περιγραφή του τύπου και των θέσεων των λειτουργικών ομάδων στην ουσία.

penta-1,3-dien-1-ol, σε αυτό το παράδειγμα:

το πρόθημα είναι **penta-1,3-**

το επένθημα είναι **-di** και

το επίθημα είναι **-ol**

en- είναι η βάση της ονομασίας, ήτοι η ρίζα της ονομασίας.

Το εν λόγω σύνολο κανόνων αναπτύχθηκε στη διάρκεια αρκετών ετών και τροποποιείται συνεχώς ώστε να προσαρμόζεται στα νέα στοιχεία της μοριακής ποικιλομορφίας και στις πιθανές αντιφάσεις ή συγχύσεις που έχουν εντοπιστεί. Οι κανόνες που έχουν καθοριστεί από την IUPAC μπορούν να χρησιμοποιούνται μόνο για σαφώς καθορισμένες ουσίες.

Ακολουθώς παρατίθενται γενικά στοιχεία καθοδήγησης σχετικά με τη δομή μιας ονομασίας κατά IUPAC. Για αναλυτική υποστήριξη, συμβουλευθείτε τις οδηγίες που παρέχονται στην ενότητα 4 του εγγράφου καθοδήγησης.

1.1 Οργανική ουσία

Στάδιο 1 Προσδιορίστε τον αριθμό των ατόμων C (άνθρακα) στη μεγαλύτερου μήκους συνεχή αλυσίδα ατόμων άνθρακα. Αυτός ο αριθμός καθορίζει το πρόθημα, ήτοι το πρώτο μέρος της ονομασίας ρίζας:

Αριθμός ατόμων άνθρακα	Ρίζα
1	meth-
2	eth-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	oct-
N

Στάδιο 2 Προσδιορίστε τον κορεσμό της αλυσίδας. Ο κορεσμός της αλυσίδας καθορίζει το επίθημα, ήτοι το δεύτερο μέρος, της ονομασίας ρίζας:

Κορεσμός	Δεσμοί	Επίθημα
Ακόρεστη	Διπλός Τριπλός	-ene -yn
Κορεσμένη	-	-ane

Σε περίπτωση πολλαπλών διπλών ή τριπλών δεσμών, ο αριθμός των δεσμών υποδεικνύεται μέσω των «mono», «di», «tri», κ.λπ. πριν από το επίθημα:

Πεντένιο με 2 διπλούς δεσμούς: πενταδιένιο

Στάδιο 3 Συνδυάστε το πρόθημα, το επίθημα και τις προσθήκες στη ρίζα

Σημείωση: Σε ό,τι αφορά τη ρίζα, μπορούν να χρησιμοποιούνται τόσο κοινές όσο και ημι-συστηματικές ονομασίες εγκεκριμένες από την IUPAC:

Βενζόλιο, τολουόλιο κ.λπ.

Στάδιο 4 Χρησιμοποιήστε τον πίνακα κατωτέρω:

- Προσδιορίστε τους υποκαταστάτες ή/και τις λειτουργικές ομάδες: ανθρακικές ή μη ανθρακικές ομάδες οι οποίες είναι συνδεδεμένες στην αλυσίδα ατόμων άνθρακα που προσδιορίστηκε στην ενέργεια 1
- Προσδιορίστε τη σειρά προτεραιότητας των υποκαταστατών ή/και των λειτουργικών ομάδων

- Προσθέστε το επίθημα για την πρώτη ομάδα υποκαταστατών/λειτουργική ομάδα και τυχόν επακόλουθες ομάδες κατά σειρά προτεραιότητας
- Προσθέστε το πρόθημα για τους υπόλοιπους υποκαταστάτες και τις λειτουργικές ομάδες κατά αλφαβητική σειρά.

Προτεραιότητα	Ομάδα	Τύπος	Επίθημα	Πρόθημα
1	Καρβοξυλικό οξύ	R-COOH	-oic acid	Carboxy
2	Εστέρας	R-CO-O-R	-oate	-
3	Αμίδιο	R-CONH ₂	-amide	Carbamoyl
4	Κυανίδιο	R-CN	-nitrile	Cyano
5	Αλδεΐδη	R-CHO	-al	Oxo
6	Κετόνη	R-CO-R	-one	Oxo
7	Αλκοόλη	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Θειόλη	R-SH	-thiol	Sulfanyl
9	Αμίνη	R-NH ₂	-amine	Amino

1.2 Ανόργανη ουσία

1.2.1 Ονοματοδοσία απλών ανόργανων ουσιών

Η ονοματοδοσία των ανόργανων ουσιών βασίζεται σε ένα σύνολο κανόνων (κόκκινο βιβλίο IUPAC, βλ. παραπομπή στην ενότητα 7.1) εκ των οποίων οι κυριότεροι παρουσιάζονται κατωτέρω:

- 1 Τα ανιόντα ενός ατόμου ονομάζονται με επίθημα *-ide*:

Το O²⁻ είναι οξειδίο

- 2 Οι απλές ιοντικές ενώσεις είναι ονομασίες όπου το κατιόν ακολουθείται από το ανιόν. Σε ό,τι αφορά κατιόντα με φορτία >1, τα φορτία γράφονται με χρήση λατινικής αριθμησης εντός παρενθέσεων αμέσως μετά την ονομασία του στοιχείου:

Το Cu²⁺ είναι χαλκός(II)

- 3 Οι ένυδρες ενώσεις ονοματοδοτούνται βάσει της ιοντικής ένωσης ακολουθούμενης από αριθμητικό πρόθημα και τον όρο *-hydrate*. Τα αριθμητικά προθήματα είναι τα *mono-*, *di-*, *tri-*, *tetra-*, *penta-*, *hexa-*, *hepta-*, *octa-*, *nona-*, *deca-*:

Το CuSO₄ · 5H₂O είναι «θεικός χαλκός(II) πενταένυδρος»

Σημείωση: για τους σκοπούς της καταχώρισης, οι ένυδρες ενώσεις και, ανάλογα με την περίπτωση, η άνυδρη μορφή ενός συγκεκριμένου μεταλλικού άλατος θεωρούνται «ίδιες ουσίες».

- 4 Οι ανόργανες μοριακές ενώσεις ονοματοδοτούνται βάσει ενός προθήματος (βλ. ένυδρες ενώσεις) πριν από κάθε στοιχείο. Το περισσότερο ηλεκτροαρνητικό στοιχείο γράφεται τελευταίο, με το επίθημα *-ide*:

Το CO₂ είναι διοξείδιο του άνθρακα και το CCl₄ είναι τετραχλωρίδιο του άνθρακα.

5 Τα οξέα ονοματοδοτούνται βάσει του ανιόντος που σχηματίζεται όταν το οξύ διαλύεται σε νερό. Υπάρχουν διάφορες περιπτώσεις:

Εάν, όταν διαλυθεί σε νερό, το οξύ διίσταται σε ανιόν με την ονομασία «x»-ίδιο, το οξύ ονομάζεται υδρο-«x»-ικό οξύ:

το υδροχλωρικό οξύ σχηματίζει ένα ανιόν χλωριδίου.

Εάν, όταν διαλυθεί σε νερό, το οξύ διίσταται σε ανιόν με την ονομασία «x»-ate, το οξύ ονομάζεται «x»-ικό οξύ:

το χλωρικό οξύ διίσταται σε χλωρικά ανιόντα στο νερό.

Εάν, όταν διαλυθεί σε νερό, το οξύ διίσταται σε ανιόν με την ονομασία υπό μορφή «x»-ite, το οξύ ονομάζεται «x»-ούχο οξύ:

το χλωριούχο οξύ διίσταται σε χλωριούχα ανιόντα.

1.2.2 Ονομασία ορυκτολογικών φάσεων

Οι σύνθετες ορυκτολογικές φάσεις περιλαμβάνουν γενικά τρία ή περισσότερα στοιχεία σε συνδυασμό. Τα περισσότερα από τα παρόντα στοιχεία συνδυάζονται με οξυγόνο και, για λόγους απλοποίησης του προσδιορισμού, οι ορυκτολόγοι θεωρούν συνήθως ότι οι σύνθετες ενώσεις αποτελούνται από οξειδία, ορισμένα εκ των οποίων είναι βασικού και άλλα όξινου χαρακτήρα. Για παράδειγμα, στην περίπτωση των πυριτικών αλάτων έχει καταστεί συνήθης η αναπαράστασή τους είτε ως άθροισμα αριθμού οξειδίων ή ως αλάτων πυριτικού οξέος ή ως αργιλιοπυριτικών οξέων. Αντίστοιχα, το ορθοπυριτικό ασβέστιο μπορεί να αναπαρασταθεί ως $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$, ένας συνδυασμός χωριστών οξειδίων ή ως Ca_2SiO_4 ή ως άλας ασβεστίου του ορθοπυριτικού οξέος H_4SiO_4 . Το ίδιο ισχύει και για άλλα σύνθετα ορυκτά οξειδία – ονοματοδοτούνται βάσει ενός προθήματος πριν από κάθε οξείδιο (π.χ. $\text{Ca}_3\text{SiO}_5 = \text{Tricalcium silicate} = 3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$). Σε ορισμένους βιομηχανικούς κλάδους έχει εφαρμοστεί περαιτέρω απλοποίηση με σκοπό τη συντόμηση των τύπων των ενώσεων. Για παράδειγμα, στην περίπτωση του κλίνκερ σκυροδέματος Portland, το $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ (calcium orthosilicate ή dicalcium silicate) έχει συντομευτεί σε C_2S , όπου $\text{C} = \text{CaO}$ και $\text{S} = \text{SiO}_2$. Συνιστάται η παραπομπή σε πρότυπα ορυκτολογικά κείμενα ή κείμενα του κλάδου, σε περίπτωση ονοματοδοσίας ή προσδιορισμού σύνθετων ορυκτολογικών φάσεων.

1.3 Φυσικά προϊόντα και σχετικά στοιχεία

Σε ό,τι αφορά τα φυσικά προϊόντα, η IUPAC έχει αναπτύξει διάφορους κανόνες για τη συστηματική ονοματοδοσία. Εν συντομία, αυτό σημαίνει ότι για τις ουσίες που εξαγονται από φυσική πηγή, η ονομασία βασίζεται, ει δυνατόν, στην ονομασία της οικογένειας, του γένους ή του είδους του οργανισμού από τον οποίο ελήφθη η ουσία:

Σε περίπτωση υποθετικής πρωτεΐνης που λαμβάνεται από το *Hypothecalia Exemplare*, οι ονομασίες βασίζονται στο «hypothecalia» ή/και στο «exemplare», για παράδειγμα «Horse Exemplare»

Ει δυνατόν, η ονομασία πρέπει να αντικατοπτρίζει τη γνωστή ή την πιθανή κατανομή του φυσικού προϊόντος. Ανάλογα με την περίπτωση, η τάξη ή η σειρά μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν ως βάση για την ονομασία μιας ουσίας που υπάρχει σε σειρά συναφών οικογενειών. Η ονομασία φυσικών προϊόντων άγνωστης δομής δεν πρέπει να περιλαμβάνει κανένα από τα προθήματα, επιθήματα ή/και επενθήματα που χρησιμοποιούνται στην

οργανική ονοματολογία:

Προϊόν συμπύκνωσης του Horse exemplare, Valarine το οποίο προστέθηκε στο N-terminus

Πολλές ουσίες που απαντούν στη φύση ανήκουν σε σαφώς καθορισμένες δομικές τάξεις, η καθεμία από τις οποίες μπορεί να χαρακτηρίζεται από ένα σύνολο γονεϊκών δομών οι οποίες σχετίζονται στενά μεταξύ τους, δηλαδή η καθεμία μπορεί να εξαχθεί από μια θεμελιώδη δομή. Η συστηματική ονομασία των εν λόγω ουσιών που απαντούν στη φύση και των παραγώγων τους μπορεί να βασίζεται στην ονομασία μιας κατάλληλης θεμελιώδους γονεϊκής δομής:

Γνωστές γονεϊκές δομές είναι τα αλκαλοειδή, τα στεροειδή, τα τερπενοειδή και οι βιταμίνες

Μια θεμελιώδης γονεϊκή δομή πρέπει να αντικατοπτρίζει τον βασικό σκελετό που είναι κοινός για τις περισσότερες ουσίες στη συγκεκριμένη τάξη. Οι ουσίες που απαντούν στη φύση ή τα παράγωγά τους ονοματοδοτούνται βάσει της γονεϊκής δομής, με την προσθήκη προθημάτων, επιθημάτων ή επενθημάτων τα οποία δηλώνουν:

- τροποποιήσεις στη σκελετική δομή
- αντικατάσταση σκελετικών ατόμων
- αλλαγές στην κατάσταση της υδρογόνωσης, η οποία υποδηλώνεται από την ονομασία της γονεϊκής δομής
- άτομα ή ομάδες που υποκαθιστούν τα άτομα υδρογόνου της γονεϊκής δομής
- μορφές οι οποίες δεν υποδηλώνονται ήδη από την ονομασία της γονεϊκής δομής ούτε έχουν μεταβληθεί σε σχέση με τις υποδηλούμενες

Η χλωριούχος θειαμίνη είναι επίσης γνωστή ως βιταμίνη Β₁

Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με τη συστηματική ονοματοδοσία των φυσικών προϊόντων και των σχετικών ουσιών, απευθυνθείτε στην IUPAC (βλ. παράρτημα 1).

1.4 Δεν είναι εφικτή η παραγωγή ονομασίας κατά IUPAC

Εάν δεν είναι εφικτή η παραγωγή μιας ονομασίας κατά IUPAC για ορισμένες ουσίες, μπορεί να χρησιμοποιηθεί άλλη διεθνώς αναγνωρισμένη ονοματολογία ειδικά για τις συγκεκριμένες ουσίες, όπως:

- Ορυκτά και μεταλλεύματα, ορυκτολογικές ονομασίες
- Πετρελαϊκές ουσίες
- Γενικές ονομασίες χρωματικού δείκτη³
- Πρόσθετα πετρελαίου
- INCI (Διεθνής Ονοματολογία των Συστατικών των Καλλυντικών Προϊόντων)⁴
- Ονομασίες για επιφανειοδραστικές ουσίες της SDA (Ένωση προϊόντων σαπουνιού και απορρυπαντικών)⁵
- κ.λπ.

2 Άλλες ονομασίες

Όλες οι σχετικές ονομασίες ή/και τα δημόσια αναγνωριστικά –σε όλες τις γλώσσες– υπό τα οποία διατίθεται μια ουσία στην αγορά της ΕΕ τώρα ή στο μέλλον (π.χ. εμπορικές ονομασίες), είναι χρήσιμο να συμπεριλαμβάνονται στην καταχώριση στο πλαίσιο του κανονισμού REACH. Σε αυτά τα αναγνωριστικά περιλαμβάνονται εμπορικές ονομασίες, συνώνυμα, αρκτικόλεξα κ.λπ.

- <http://www.colour-index.com>, Διεθνής χρωματικός δείκτης, τέταρτη ηλεκτρονική έκδοση
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, επίσημος δικτυακός τόπος του Συμβουλίου προϊόντων ατομικής περιποίησης
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, επίσημος δικτυακός τόπος του Αμερικανικού Ινστιτούτου καθαρισμού (ACI).

3 Αριθμός EK από τα EINECS, ELINCS ή NLP (ευρετήριο EK)

Ο αριθμός EK, δηλαδή ο αριθμός EINECS, ELINCS ή NLP, είναι ο επίσημος αριθμός της ουσίας εντός της Ευρωπαϊκής Ένωσης. Μπορείτε να βρείτε τον αριθμό EK από τις επίσημες δημοσιεύσεις των EINECS, ELINCS και NLP και του Ευρωπαϊκού Οργανισμού Χημικών Προϊόντων.

Ο αριθμός EK περιλαμβάνει 7 ψηφία στη μορφή Χ₁Χ₂Χ₃-Χ₄Χ₅Χ₆-Χ₇. Το πρώτο ψηφίο ορίζεται από τον κατάλογο στον οποίο ανήκει η ουσία:

Κατάλογος	Πρώτο ψηφίο του αριθμού EK
EINECS	2 ή 3
ELINCS	4
NLP	5

4 Ονομασία CAS και αριθμός CAS

Η υπηρεσία Chemical Abstracts Service (CAS), τμήμα της Αμερικανικής Χημικής Εταιρείας (ACS), αποδίδει μια ονομασία και έναν αριθμό CAS σε κάθε χημική ουσία η οποία καταχωρίζεται στη βάση δεδομένων του μητρώου CAS. Οι ονομασίες και οι αριθμοί αποδίδονται κατά σειρά διαδοχής στις μοναδικές ουσίες που εντοπίζουν οι επιστήμονες του μητρώου CAS. Κάθε ουσία που καταχωρίζεται στην υπηρεσία Chemical Abstracts Service διαθέτει ονομασία σύμφωνα με την ονοματολογία CAS, την οποία η ACS υιοθετεί κατόπιν συστάσεων της επιτροπής ονοματολογίας της ACS (βλ. παραπομπές στο παράρτημα 1).

4.1 Ονομασία CAS

Η ονομασία CAS είναι η ονομασία που δίδεται από την υπηρεσία Chemical Abstract Service και είναι διαφορετική από την ονομασία κατά IUPAC. Η ονοματολογία CAS βασίζεται σε περιορισμένο αριθμό κριτηρίων τα οποία δεν επαρκούν πάντοτε για την παραγωγή της ονομασίας μιας ουσίας. Ως εκ τούτου, γενικά, συνιστάται η επικοινωνία με την υπηρεσία Chemical Abstract Service για τη λήψη της ορθής ονομασίας CAS.

Εν συντομία, οι βασικοί κανόνες της ονοματολογίας είναι οι εξής:

- Ένα «κύριο» μέρος της ουσίας επιλέγεται ως επικεφαλίδα
- Οι υποκαταστάτες παρατίθενται μετά την επικεφαλίδα, στην οποία γίνεται παραπομπή κατ' αντίστροφη σειρά
- Σε περίπτωση που υπάρχουν περισσότεροι υποκαταστάτες, παρατίθενται κατά αλφαβητική σειρά (συμπεριλαμβανομένων των προθημάτων):

το ο-Xylen-3-ol είναι βενζόλιο, 1,2-dimethyl, 3-hydroxy,

4.2 Αριθμός CAS

Οι αριθμοί CAS μπορούν ληφθούν από την υπηρεσία Chemical Abstract Service.

Ο αριθμός CAS αποτελείται από τουλάχιστον πέντε ψηφία τα οποία χωρίζονται με παύλες σε τρία μέρη. Το δεύτερο μέρος αποτελείται πάντα από 2 ψηφία, ενώ το τρίτο μέρος από 1 ψηφίο.

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

Σε ό,τι αφορά τον έλεγχο του αριθμού CAS, υπάρχει το «άθροισμα ελέγχου»:

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

Ο αριθμός CAS είναι ορθός εάν είναι ίσος με το άθροισμα ελέγχου.

5 Άλλοι κωδικοί ταυτότητας

Μπορούν επίσης να παρέχονται και άλλοι διεθνώς αναγνωρισμένοι κωδικοί ταυτότητας όπως:

- Αριθμός τελωνείου
- Αριθμός ΟΗΕ
- Αριθμός χρωματικού δείκτη
- Αριθμός χρωστικής ουσίας

6 Μοριακός τύπος, συντακτικός τύπος και SMILES

6.1 Μοριακός τύπος

Ένας μοριακός τύπος προσδιορίζει κάθε τύπο στοιχείου βάσει του χημικού συμβόλου του, ενώ προσδιορίζει και τον αριθμό των ατόμων κάθε τέτοιου στοιχείου σε ένα διακριτό μόριο της ουσίας.

Οι μοριακοί τύποι πρέπει να παρέχονται σύμφωνα με το (παραδοσιακό) σύστημα Hill και, επιπλέον, σύμφωνα με το σύστημα CAS, σε περίπτωση που αυτός διαφέρει από τον τύπο του συστήματος Hill.

Για την εφαρμογή της μεθόδου Hill μπορούν να εκτελεστούν οι ακόλουθες ενέργειες:

1. Προσδιορισμός των στοιχείων και παράθεση των χημικών συμβόλων
2. Διευθέτηση των στοιχείων στη σωστή σειρά:

- a. Ουσίες που περιέχουν άνθρακα:

Κάθε στοιχείο αναφέρεται βάσει του χημικού συμβόλου του, με την ακόλουθη σειρά:

- (1) Άνθρακας·
- (2) Υδρογόνο·
- (3) Άλλα σύμβολα στοιχείων κατά αλφαβητική σειρά:

Πεντάνιο: C5H12

Πεντένιο: C5H10

Πεντανόλη: C5H12O

b. Ουσίες που δεν περιέχουν άνθρακα:

Κάθε στοιχείο παρέχεται κατά αλφαβητική σειρά:

Υδροχλωρικό οξύ: ClH

3. Για κάθε στοιχείο, όταν ο αριθμός των ατόμων είναι >1, παρέχεται ο αριθμός των ατόμων με τη μορφή δείκτη στα χημικά σύμβολα

4. Προσθέστε πληροφορίες που δεν σχετίζονται με τη βασική δομή στο τέλος του μοριακού τύπου, χωρίζοντάς τις με μια τελεία ή κόμμα:

To sodium benzoate είναι C7H6O2, άλας νατρίου

To copper sulphate dihydrate είναι CuO4S.2H2O

Σε περίπτωση που δεν είναι εφικτή η εφαρμογή της μεθόδου Hill για συγκεκριμένη ουσία, ο μοριακός τύπος πρέπει να παρέχεται με διαφορετικό τρόπο, για παράδειγμα, ως εμπειρικός τύπος, ως απλή περιγραφή των ατόμων και της αναλογίας των διαθέσιμων ατόμων, ή ως ο τύπος που παρέχει η υπηρεσία Chemical Abstract Service (βλ. ενότητα 4 του εγγράφου καθοδήγησης).

6.2 Συντακτικός τύπος και περιγραφή της κρυσταλλικής δομής

Ένας συντακτικός τύπος είναι η οπτικοποίηση της διάταξης των μορίων στην ουσία και των μεταξύ τους σχέσεων. Ο συντακτικός τύπος πρέπει να υποδεικνύει τη θέση των ατόμων, των ιόντων ή των ομάδων, καθώς και τη φύση των μεταξύ τους δεσμών. Σε αυτό περιλαμβάνεται και ο ισομερισμός, ήτοι cis/trans, χειρομορφία, εναντιομερή κ.λπ.

Ο συντακτικός τύπος μπορεί να παρέχεται σε διάφορες μορφές: υπό μορφή μοριακού τύπου ή/και υπό μορφή συντακτικού διαγράμματος.

Συντακτικός τύπος υπό μορφή μοριακού τύπου

1. Γράψτε όλα τα στοιχεία βάσει ομάδων και κατά σειρά εμφάνισης:

n-pentane: CH3CH2CH2CH2CH3

2. Κάθε συστατικό γράφεται εντός παρενθέσεων, αμέσως μετά το άτομο με το οποίο συνδέεται:

2-methylbutane: CH3CH(CH2)CH2CH3

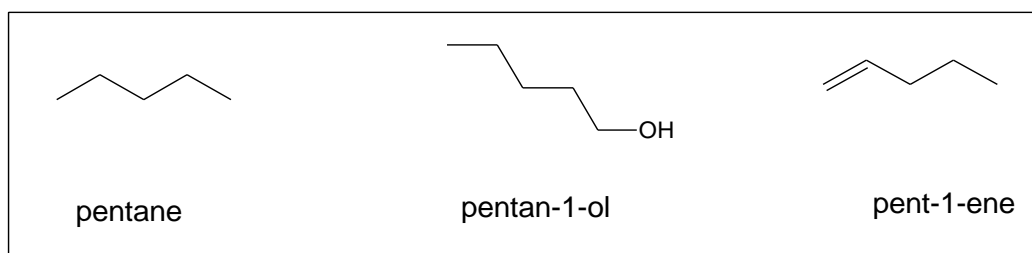
3. Σε περίπτωση διπλών ή τριπλών δεσμών, υποδείξτε τους μεταξύ των ομάδων των στοιχείων που επηρεάζονται:

pent-1-ene: CH2=CHCH2CH2CH3

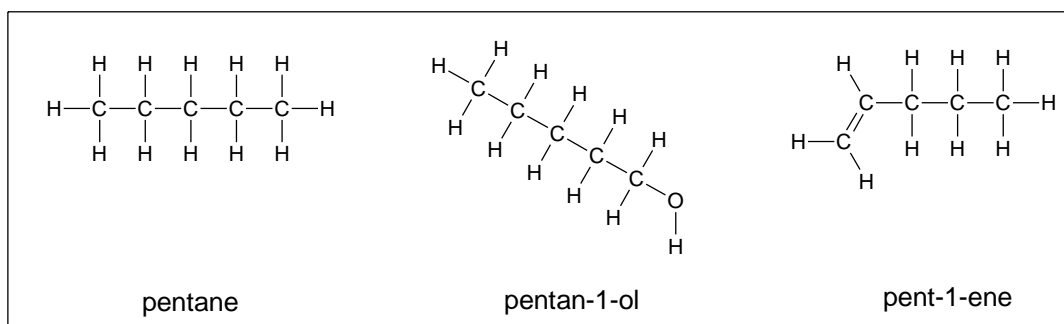
Συντακτικός τύπος υπό μορφή συντακτικού διαγράμματος

Σε ό,τι αφορά το συντακτικό διάγραμμα, τα στοιχεία και οι μεταξύ τους δεσμοί οπτικοποιούνται σε δισδιάστατη ή τρισδιάστατη εικόνα. Υπάρχουν ποικίλες μέθοδοι:

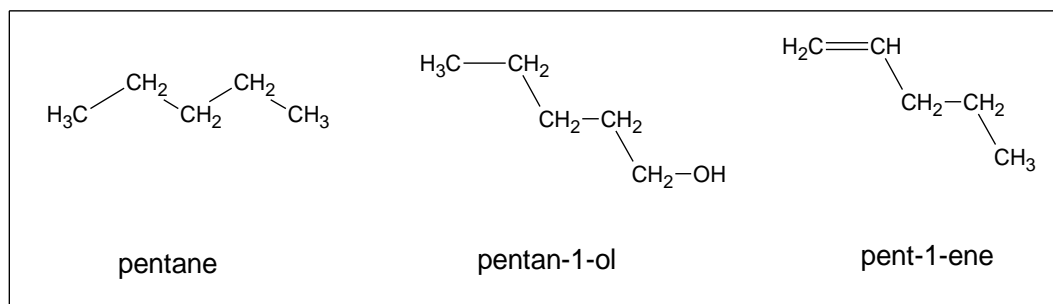
1. Εμφάνιση όλων των στοιχείων χωρίς άνθρακα και του υδρογόνου που είναι δεσμευμένο σε στοιχεία χωρίς άνθρακα.



2. Εμφάνιση όλων των στοιχείων βάσει ονομασίας



3. Εμφάνιση του άνθρακα και του υδρογόνου ως ομάδες (π.χ. CH₃), όλων των στοιχείων χωρίς άνθρακα και όλων των υδρογόνων που δεν είναι δεσμευμένα σε άνθρακα.

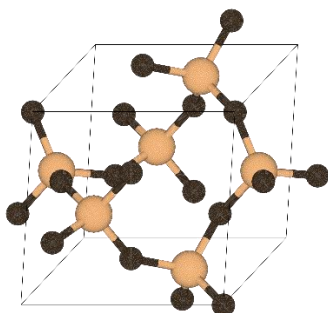


- Συντακτικός τύπος υπό μορφή μοριακού τύπου:

1. Παρέχετε τον μοριακό τύπο:

SiO₂

2. Παρέχετε την κρυσταλλική δομή της ουσίας



3. Παρέχετε την ορυκτολογική ή/και την κρυσταλλογραφική ονομασία με βάση το κρυσταλλικό σύστημα³² και την κρυσταλλική κλάση:

*α-χαλαζίας [β-χαλαζίας] / **κρυσταλλικό σύστημα:** τριγωνικό - εξαγωνικό, **κρυσταλλική κλάση:** τριγωνική-τραπεζοεδρική 3 2*

6.3 Αναπαράσταση σύμφωνα με το σύστημα SMILES

Το SMILES είναι το ακρωνύμιο του «Simplified Molecular Input Line Entry Specification».³³ Είναι ένα σύστημα χημικής αναπαράστασης που χρησιμοποιείται για την αναπαράσταση μιας μοριακής δομής μέσω γραμμικής συμβολοσειράς. Βάσει του τυπικού συστήματος SMILES, η ονομασία ενός μορίου είναι συνώνυμη με τη δομή του: απεικονίζει εμμέσως μια διδιάστατη εικόνα της μοριακής δομής. Δεδομένου ότι μια διδιάστατη χημική δομή μπορεί να σχεδιαστεί με διάφορους τρόπους, υπάρχουν αρκετές ορθές αναπαραστάσεις σύμφωνα με το σύστημα SMILES για ένα μόριο. Η βάση του συστήματος SMILES είναι η αναπαράσταση του μοντέλου σθένους ενός μορίου. Ως εκ τούτου, η περιγραφή μορίων τα οποία δεν μπορούν να αναπαρασταθούν μέσω μοντέλου σθένους δεν θεωρείται κατάλληλη.

Οι αναπαραστάσεις SMILES περιλαμβάνουν άτομα, τα οποία προσδιορίζονται βάσει συμβόλων στοιχείων, δεσμών, παρενθέσεων που χρησιμοποιούνται για να υποδείξουν τη διακλάδωση, καθώς και βάσει αριθμών που χρησιμοποιούνται για τις κυκλικές δομές. Μια αναπαράσταση SMILES αντιπροσωπεύει μια μοριακή δομή με τη μορφή γραφήματος με προαιρετικές ενδείξεις χειρομορφίας. Αναπαράσταση SMILES η οποία περιγράφει τη δομή μόνο από την άποψη των δεσμών και των ατόμων ονομάζεται γενική αναπαράσταση SMILES.

Εν συντομία, η αναπαράσταση SMILES βασίζεται σε αρκετούς βασικούς κανόνες:

1. Τα άτομα αναπαρίστανται από τα ατομικά τους σύμβολα
2. Κάθε άτομο, εκτός του υδρογόνου, προσδιορίζεται ανεξάρτητα
 - α. Τα στοιχεία στο «οργανικό υποσύνολο» B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br και I γράφονται χωρίς παρενθέσεις και χωρίς το δεσμευμένο H, εφόσον ο αριθμός των ατόμων H συμμορφώνεται προς το κατώτερο κανονικό σθένος/η με σαφείς δεσμούς:

³² Κυβικό/τετραγωνικό/ορθορομβικό/ρομβοεδρικό (ή τριγωνικό)/εξαγωνικό/τρικλινές/μονοκλινές

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.

Στοιχείο στο «οργανικό υποσύνολο»	«Κατώτερο κανονικό σθένος/η»
B	3
C	4
N	3 και 5
O	2
P	3 και 5
S	2, 4 και 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

β. Τα στοιχεία στο «οργανικό υποσύνολο» γράφονται εντός παρενθέσεων, εφόσον ο αριθμός των ατόμων Η δεν συμμορφώνεται προς το κατώτερο κανονικό σθένος:

Το κατιόν αμμωνίου είναι NH₄⁺

γ. Άλλα στοιχεία πέραν αυτών που περιλαμβάνονται στο «οργανικό υποσύνολο» γράφονται εντός παρενθέσεων, μαζί με τυχόν δεσμευμένο υδρογόνο.

3. Τα αλειφατικά άτομα γράφονται υπό μορφή εκθέτη, ενώ τα αρωματικά άτομα γράφονται υπό μορφή δείκτη:

το βενζόλιο είναι c1ccccc1 και το κυκλοεξάνιο είναι C1CCCCC1

4. Το υδρογόνο περιλαμβάνεται μόνο στις ακόλουθες περιπτώσεις:

- α. Φορτισμένο υδρογόνο, ήτοι ένα πρωτόνιο, [H⁺]
- β. Υδρογόνο συνδεδεμένο με άλλο υδρογόνο, ήτοι μοριακό υδρογόνο, [H][H]
- γ. Υδρογόνο συνδεδεμένο με άλλο άτομο, π.χ. γέφυρες υδρογόνου
- δ. Ισοτοπικοί προσδιορισμοί υδρογόνων, π.χ. δευτέριο ([²H])
- ε. Εάν το υδρογόνο είναι δεσμευμένο σε χειρόμορφο άτομο.

5. Κατωτέρω παρουσιάζονται οι τέσσερις βασικοί δεσμοί:

Τύπος δεσμού	Αναπαράσταση σύμφωνα με το σύστημα SMILES
Μονός	- (δεν χρειάζεται αναπαράσταση)
Διπλός	=
Τριπλός	#
Αρωματικός	Γραμματοσειρά υπό μορφή δείκτη

6. Οι υποκαταστάτες εμφανίζονται εντός παρενθέσεων και αμέσως μετά εμφανίζονται τα άτομα με τα οποία είναι συνδεδεμένοι:

το 2-methylbutane είναι CC(C)CC

- α. Οι υποκαταστάτες εμφανίζονται πάντοτε αμέσως μετά τα συναφή άτομα, δεν μπορούν να ακολουθούν σύμβολο διπλού ή τριπλού δεσμού:

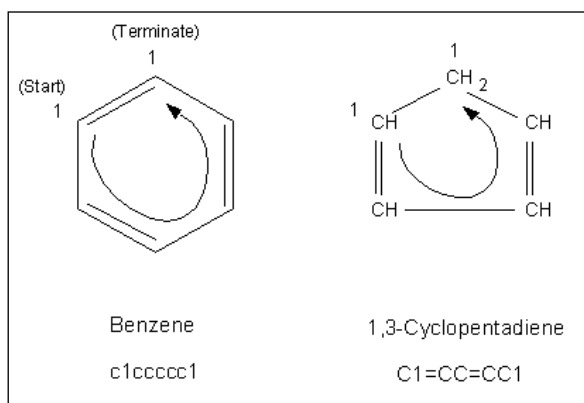
Το πεντανοϊκό οξύ είναι CCCCC(=O)O

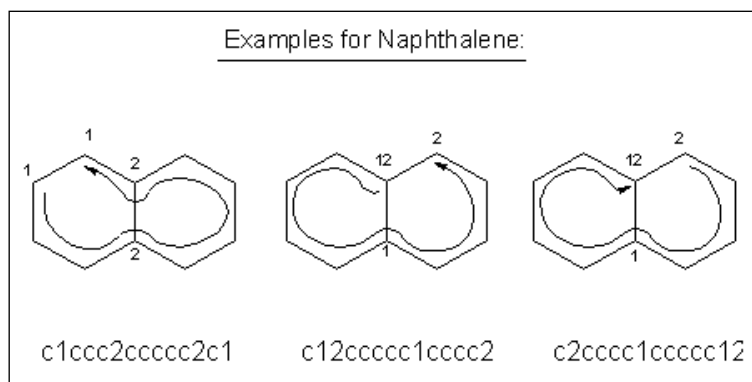
- β. Επιτρέπονται υποκαταστάτες εντός υποκαταστατών:

Το 2-(1-methylethyl)butane είναι CC(C(C)C)CC

7. Σε ό,τι αφορά κυκλικές δομές, οι αριθμοί 1 έως και 9 χρησιμοποιούνται για να υποδείξουν το αρχικό και το τελικό άτομο του κύκλου.

- α. Ο ίδιος αριθμός χρησιμοποιείται για να υποδείξει το αρχικό και το τελικό άτομο για κάθε δακτύλιο. Το αρχικό και το τελικό άτομο πρέπει να είναι συνδεδεμένα μεταξύ τους.
- β. Οι αριθμοί γράφονται αμέσως μετά από τα άτομα που χρησιμοποιούνται για να υποδειχθεί η αρχική και η τελική θέση.
- γ. Ένα αρχικό ή τελικό άτομο μπορεί να συσχετιστεί με δύο διαδοχικούς αριθμούς.





8. Οι αποσυνδεδεμένες ενώσεις υποδεικνύονται ως μεμονωμένες δομές ή ιόντα και χωρίζονται με τελεία («.»). Τα παρακείμενα άτομα που χωρίζονται με τελεία («.») δεν δεσμεύονται απευθείας μεταξύ τους, π.χ. δέσμευση Van der Waals:

το aminopropene hydrochloride είναι C=CC(N).HCl

9. Η μορφή των ισομερών προσδιορίζεται με τους χαρακτήρες «\» και «/». Τα εν λόγω σύμβολα υποδεικνύουν τη θετική κατεύθυνση μεταξύ δύο ισομερικών δεσμών. (cis = «/ \», trans = «/ /»). Το σύστημα SMILES χρησιμοποιεί την τοπική χειρομορφία και, ως εκ τούτου, η χειρομορφία πρέπει να προσδιορίζεται πλήρως:

το cis-1,2-dibromoethene είναι Br/C=C\Br

το trans-1,2-dibromoethene είναι Br/C=C/Br

10. Τα εναντιομερή ή η χειρομορφία προσδιορίζονται με το σύμβολο «@». Το σύμβολο «@» υποδεικνύει ότι τα επόμενα γειτονικά στοιχεία του χειρόμορφου ατόμου παρατίθενται αριστερόστροφα. Εάν χρησιμοποιείται το σύμβολο «@@», τα άτομα παρατίθενται δεξιόστροφα. Το χειρόμορφο άτομο και το σύμβολο «@» εμφανίζονται εντός παρενθέσεων:

το 2-chloro-2-hydroxypropanoic acid με

προσδιορισμένη χειρομορφία C[C@](Cl)(O)C(=O)O

11. Οι ισοτοπικοί προσδιορισμοί υποδεικνύονται μέσω της τοποθέτησης, πριν από το ατομικό σύμβολο, ενός αριθμού ισοδύναμου με τη συναφή ατομική μάζα. Μια ατομική μάζα μπορεί να προσδιοριστεί μόνο εντός παρενθέσεων:

ο άνθρακας-13 είναι [13C] και το οξυγόνο-18 είναι [18O]

Για τον προσδιορισμό της αναπαράστασης σύμφωνα με το σύστημα SMILES, διατίθενται διάφορα εργαλεία (μηχανές παραγωγής αρχείων δομής SMILES) (βλ. παράρτημα 1).

7 Πληροφορίες σχετικά με την οπτική δραστηριότητα

Η οπτική δραστηριότητα είναι η ικανότητα των ασύμμετρων ουσιών να περιστρέφουν τον προσανατολισμό του επίπεδα πολωμένου φωτός. Αυτού του είδους οι ουσίες, και τα κατοπτρικά είδωλά τους, είναι γνωστές ως εναντιομερή και έχουν ένα ή περισσότερα χειρόμορφα κέντρα. Αν και διαφέρουν όσον αφορά τη γεωμετρική διάταξή τους, τα εναντιομερή διαθέτουν ταυτόσημες χημικές και φυσικές ιδιότητες. Δεδομένου ότι κάθε τύπος εναντιομερούς επηρεάζει με διαφορετικό τρόπο το πολωμένο φως, η οπτική δραστηριότητα μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον προσδιορισμό του είδους του εναντιομερούς που υπάρχει σε ένα δείγμα και, ως εκ τούτου, και της καθαρότητας της ουσίας. Το μέγεθος της περιστροφής αποτελεί εγγενή ιδιότητα του μορίου.

Τα εναντιομερή έχουν πάντοτε αντίθετες περιστροφές: πολώνουν το φως στον ίδιο βαθμό, αλλά σε αντίθετες κατευθύνσεις. Η οπτική δραστηριότητα ενός μείγματος εναντιομερών αποτελεί, ως εκ τούτου, ένδειξη της αναλογίας μεταξύ των δύο εναντιομερών. Ένα μείγμα εναντιομερών 50-50 έχει οπτική δραστηριότητα 0.

Η παρατηρούμενη περιστροφή εξαρτάται από τη συγκέντρωση, το μήκος του σωλήνα δείγματος, τη θερμοκρασία και το μήκος κύματος της πηγής φωτός.

Ως εκ τούτου, η οπτική δραστηριότητα είναι η καθοριστική παράμετρος για τον προσδιορισμό μιας ασύμμετρης ουσίας, ενώ είναι η μόνη παράμετρος με την οποία μπορεί να γίνει διάκριση μεταξύ της ουσίας και του κατοπτρικού ειδώλου της. Συνεπώς, ανάλογα με την περίπτωση, η οπτική δραστηριότητα της ουσίας πρέπει να παρέχεται.

Το πρότυπο για την οπτική δραστηριότητα ονομάζεται ειδική στρέψη. Η ειδική στρέψη ορίζεται ως η παρατηρούμενη περιστροφή του φωτός στα 5896 angstrom, με μήκος διαδρομής 1 dm και σε συγκέντρωση δείγματος 1 g/ml. Η ειδική στρέψη είναι η παρατηρούμενη στρέψη διαιρούμενη διά του μήκους διαδρομής (dm) επί τη συγκέντρωση (g/ml).

Η οπτική δραστηριότητα μπορεί να μετρηθεί με διάφορες μεθόδους. Οι συνηθέστερες είναι οι εξής:

- Οπτική περιστροφή, κατά την οποία μετράται η περιστροφή του επιπέδου πόλωσης μιας ακτίνας φωτός που διέρχεται μέσα από το δείγμα,
- Κυκλικός διχρωσμός, κατά τον οποίο μετράται σε ένα δείγμα η απορρόφηση του δεξιόστροφα και αριστερόστροφα πολωμένου φωτός.

Εάν η ουσία περιστρέφει το φως προς τα δεξιά (δεξιόστροφα) ονομάζεται δεξιόστροφη και δηλώνεται με την ένδειξη +. Εάν η ουσία περιστρέφει το φως προς τα αριστερά (αριστερόστροφα) ονομάζεται αριστερόστροφη και δηλώνεται με την ένδειξη -.

8 Μοριακό βάρος ή φάσμα μοριακού βάρους

Το μοριακό βάρος είναι το βάρος ενός μορίου μιας ουσίας εκπεφρασμένο σε μονάδες ατομικής μάζας (amu) ή ως γραμμομοριακή μάζα (g/mole). Το μοριακό βάρος μπορεί να υπολογισθεί από τον μοριακό τύπο της ουσίας: είναι το άθροισμα των ατομικών βαρών των ατόμων που απαρτίζουν το μόριο. Όσον αφορά τα μόρια, όπως ορισμένες πρωτεΐνες ή ασαφή μείγματα αντίδρασης, για τα οποία δεν είναι εφικτός ο προσδιορισμός ενός μοναδικού μοριακού βάρους, μπορεί να παρέχεται φάσμα μοριακού βάρους.

Για τον προσδιορισμό του μοριακού βάρους των ουσιών μπορούν να χρησιμοποιηθούν διάφορες μέθοδοι:

- Για τον προσδιορισμό των μοριακών βαρών αέριων ουσιών μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο νόμος του Avogadro, ο οποίος ορίζει ότι υπό δεδομένες συνθήκες θερμοκρασίας και πίεσης δεδομένος όγκος οποιουδήποτε αερίου περιέχει συγκεκριμένο αριθμό μορίων του αερίου.

$$PV = nRT = NkT$$

n = αριθμός γραμμομορίων

R = παγκόσμια σταθερά αερίων = 8,3145 J/mol K

N = αριθμός μορίων

k = σταθερά Boltzmann = 1,38066 x 10⁻²³ J/K = 8,617385 x 10⁻⁵ eV/K

$$k = R/NA$$

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

- Σε ό,τι αφορά υγρές και στερεές ουσίες, το μοριακό βάρος μπορεί να καθοριστεί μέσω του προσδιορισμού των επιπτώσεων τους στο σημείο τήξης, το σημείο βρασμού, την πίεση ατμού ή την οσμωτική πίεση κάποιου διαλύτη
- Φασματοσκοπία μάζας, μια ιδιαίτερα ακριβής μέθοδος μέτρησης
- Σε ό,τι αφορά μόρια σύνθετων ουσιών με υψηλά μοριακά βάρη, όπως πρωτεΐνες ή ιοί, τα μοριακά βάρη μπορούν να προσδιοριστούν μέσω μέτρησης, για παράδειγμα, του ποσοστού ιζηματοποίησης στο πλαίσιο υπερφυγοκέντρωσης ή φωτομετρίας σκέδασης φωτός
- Διατίθενται αρκετά εργαλεία τα οποία μπορούν να υπολογίσουν το μοριακό βάρος βάσει συντακτικού διαγράμματος ή μοριακού τύπου της ουσίας (βλ. παράρτημα 1).

9 Σύνθεση ουσίας

Η σύνθεση κάθε ουσίας αναφέρεται ως συνδυασμός των κύριων συστατικών, των πρόσθετων και των προσμείξεων, σύμφωνα με τους κανόνες και τα κριτήρια που περιγράφονται στην ενότητα 4 του εγγράφου καθοδήγησης.

Κάθε συστατικό, πρόσθετο ή πρόσμειξη πρέπει να προσδιορίζεται κατάλληλα βάσει:

- Ονομασίας (ονομασία κατά IUPAC ή, εάν υπάρχει, άλλη διεθνώς αποδεκτή ονομασία)
- Αριθμού CAS (εάν υπάρχει)
- Αριθμού EK (εάν υπάρχει).
- Όλων των άλλων διαθέσιμων αναγνωριστικών

Για κάθε συστατικό, ομάδα συστατικών, πρόσθετο ή πρόσμειξη, πρέπει να παρέχεται (κατά προτίμηση κατά βάρος ή κατ' όγκο) η τυπική συγκέντρωση σε ποσοστό % στις εμπορικές παρτίδες, όπου είναι εφικτό. Οι παρεχόμενες τιμές πρέπει να έχουν άθροισμα 100%. Τα ανώτερα και κατώτερα όρια συγκέντρωσης, όπως είναι το εύρος στην εμπορική ουσία, πρέπει να παρέχονται σε κάθε περίπτωση.

10 Φασματικά δεδομένα

Τα φασματικά δεδομένα χρειάζονται για την επιβεβαίωση της παρεχόμενης δομής μονοσυστατικής ουσίας ή για να επιβεβαιωθεί ότι ένα μείγμα αντίδρασης δεν είναι παρασκεύασμα. Για τα φάσματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν διάφορες μέθοδοι (φάσμα υπεριώδους, υπερύθρου, πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού ή μαζών). Δεν είναι όλες οι μέθοδοι κατάλληλες για όλους τους τύπους ουσιών. Όπου είναι εφικτό, το έγγραφο καθοδήγησης παρέχει οδηγίες σχετικά με τα κατάλληλα φάσματα που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τους διάφορους τύπους ουσιών (ECB, 2004, ECB, 2005).

Για αρκετές από τις γνωστές μεθόδους, οι πληροφορίες που ακολουθούν πρέπει να υποδεικνύονται στο ίδιο το φάσμα ή σε παραρτήματα:

Φάσμα υπεριώδους-ορατού (UV-VIS)

- Η ταυτότητα της ουσίας
- Ο διαλύτης και η συγκέντρωση
- Εύρος

- Η θέση (και οι τιμές έψιλον) των κύριων κορυφών
- Επίδραση του οξέος
- Επίδραση αλκαλίων.

Φάσμα φασματοσκοπίας υπερύθρου (IR)

- Η ταυτότητα της ουσίας
- Μέσο
- Εύρος
- Αποτελέσματα (υποδεικνύουν τις κύριες κορυφές που είναι σημαντικές για τον προσδιορισμό, π.χ. ερμηνεία της περιοχής αποτυπώματος).

Φάσμα φασματοσκοπίας πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (NMR)

- Η ταυτότητα της ουσίας
- Πυρήνας και συχνότητα
- Διαλύτης
- Εσωτερική ή εξωτερική παραπομπή, ανάλογα με την περίπτωση
- Αποτελέσματα (υποδεικνύουν τα σήματα που είναι σημαντικά για τον προσδιορισμό της ουσίας και τα σήματα που αντιστοιχούν στον διαλύτη και στις προσμείξεις)
- Σε ό,τι αφορά τα φάσματα ^1H NMR, πρέπει να παρέχεται η καμπύλη ολοκλήρωσης
- Η ένταση των ασθενών κορυφών NMR πρέπει να αυξάνεται κατακόρυφα και τα σύνθετα μοτίβα να επεκτείνονται.

Φάσμα φασματοσκοπίας μαζών (MS)

- Η ταυτότητα της ουσίας
- Επιταχυνόμενη τάση
- Μέθοδος φόρτωσης (απευθείας εισαγωγή, μέσω GC κ.λπ.)
- Λειτουργία ιοντισμού (πρόσπτωση ηλεκτρονίων, χημικός ιοντισμός, εκρόφηση πεδίου κ.λπ.)
- Το μοριακό ιόν (M)
- Σημαντικά κλάσματα για τον προσδιορισμό της ουσίας
- Τιμές ή αντιστοιχίσεις M/z των κορυφών οι οποίες είναι σημαντικές για τον προσδιορισμό της δομής
- Τα σύνθετα μοτίβα πρέπει να επεκταθούν.

Φασματοσκοπία περίθλασης ακτίνων X (XRD)

- Η ταυτότητα της ουσίας
- Η τάση,
- η ένταση ηλεκτρικού ρεύματος,
- η πηγή ακτίνων X και κάθε βιβλιογραφική παραπομπή η οποία επιτρέπει τον προσδιορισμό της κρυσταλλικής φάσης/των κρυσταλλικών φάσεων που υπάρχουν στην ουσία

Σε περίπτωση που χρησιμοποιείται η μέθοδος XRD για τον προσδιορισμό και την ποσοτικοποίηση των κρυσταλλικών ή άμορφων φάσεων στην ουσία, ισχύουν, τουλάχιστον, οι ακόλουθες απαιτήσεις:

- Περιγραφή των μεθόδων βελτίωσης και των εσωτερικών προτύπων που χρησιμοποιούνται

- Ο λόγος ενεργειακής αποδοτικότητας που αντανakλά τη ρύθμιση μεταξύ του μοντελοποιημένου προτύπου/προτύπου αναφοράς της περιθλασης
- Το μοντέλο μέτρησης καθώς και η κλίμακα μέτρησης της ενεργειακής αποδοτικότητας (π.χ. 0-1 ή 0-100)

Μπορούν να χρησιμοποιηθούν και άλλες επιστημονικά αναγνωρισμένες μέθοδοι, σε περίπτωση που τα φασματικά δεδομένα επιβεβαιώσουν τον προσδιορισμό της ουσίας, π.χ. την εσωτερική δομή.

Οι ακόλουθες γενικές απαιτήσεις είναι απαραίτητες για τη σαφή κατανόηση ή/και την ερμηνεία των φασμάτων:

- Περιγράψετε την προετοιμασία του δείγματος
- Αποδίδετε προσοχή στα σημαντικά μήκη κύματος ή σε άλλα δεδομένα, όπως αρμόζει
- Παρέχετε επιπλέον πληροφορίες, π.χ. φάσματα αρχικών υλικών
- Παρέχετε τον χρησιμοποιηθέντα διαλύτη ή/και άλλες αναγκαίες πληροφορίες όπως υποδεικνύεται ανωτέρω για ορισμένες μεθόδους
- Παρέχετε καθαρά αντίγραφα (αντί των πρωτοτύπων) με τις κλίμακες δεόντως επισημασμένες
- Παρέχετε πληροφορίες σχετικά με τις χρησιμοποιηθείσες συγκεντρώσεις της ουσίας
- Βεβαιωθείτε ότι οι πλέον έντονες κορυφές που σχετίζονται με την ουσία προσεγγίζουν την ένδειξη της πλήρους κλίμακας.

11 Υγρή χρωματογραφία υψηλής απόδοσης, αέριος χρωματογραφία

Ανάλογα με τον τύπο της ουσίας, πρέπει να παρέχεται χρωματογράφημα με σκοπό την επιβεβαίωση της σύνθεσής της. Για παράδειγμα, το κατάλληλο χρωματογράφημα θα επιβεβαιώσει την ύπαρξη προσμείξεων, πρόσθετων και συστατικών ενός μείγματος αντίδρασης. Οι δύο γνωστότερες μέθοδοι διαχωρισμού και προσδιορισμού μειγμάτων είναι η αέριος χρωματογραφία (GC) και η υγρή χρωματογραφία υψηλής απόδοσης (HPLC). Οι δύο μέθοδοι βασίζονται στην αλληλεπίδραση μιας κινητής με μια ακίνητη φάση, με αποτέλεσμα τον διαχωρισμό των συστατικών ενός μείγματος.

Σε ό,τι αφορά τα χρωματογραφήματα GC/HPLC, οι ακόλουθες πληροφορίες πρέπει να υποδεικνύονται στο ίδιο το χρωματογράφημα ή σε παραρτήματα (ECB, 2004, ECB, 2005):

HPLC

- Η ταυτότητα της ουσίας
- Ιδιότητες στηλών, όπως διάμετρος, περίβλημα, μήκος
- Θερμοκρασία και, εάν συντρέχει περίπτωση, εύρος θερμοκρασίας
- Σύνθεση της κινητής φάσης και, εάν συντρέχει περίπτωση, το εύρος
- Εύρος συγκέντρωσης της ουσίας
- Μέθοδος οπτικοποίησης, π.χ. UV-VIS
- Αποτελέσματα (υποδεικνύουν τις κύριες κορυφές που είναι σημαντικές για τον προσδιορισμό της ουσίας).

GC

- Η ταυτότητα της ουσίας
- Ιδιότητες στηλών, όπως διάμετρος, περίβλημα, μήκος
- Θερμοκρασία και, εάν συντρέχει περίπτωση, εύρος θερμοκρασίας
- Θερμοκρασία έγχυσης
- Αέριο φορέας και πίεση αερίου φορέα
- Εύρος συγκέντρωσης της ουσίας
- Μέθοδος οπτικοποίησης, π.χ. MS
- Προσδιορισμός κορυφών

- Αποτελέσματα (υποδεικνύουν τις κύριες κορυφές που είναι σημαντικές για τον προσδιορισμό της ουσίας).

12 Περιγραφή των αναλυτικών μεθόδων

Βάσει του *παραρτήματος VI* του κανονισμού REACH απαιτείται από τον καταχωρίζοντα να περιγράψει τις αναλυτικές μεθόδους ή/και να παρέχει τις βιβλιογραφικές παραπομπές για τις μεθόδους που χρησιμοποιήθηκαν για τον προσδιορισμό της ουσίας και, ανάλογα με την περίπτωση, για τον προσδιορισμό των προσμείξεων και των πρόσθετων. Οι πληροφορίες αυτές πρέπει να είναι επαρκείς ώστε να επιτρέπουν την αναπαραγωγή των μεθόδων.

Παράρτημα III - Προσδιορισμός ουσίας και κοινή υποβολή δεδομένων

Το κύριο μέρος της παρούσας καθοδήγησης περιγράφει τις γενικές αρχές που πρέπει να τηρούν οι δυνητικοί καταχωρίζοντες όταν προσδιορίζουν τις συγκεκριμένες ουσίες που πρόκειται να καταχωρίσει η νομική τους οντότητα. Το παρόν παράρτημα παρέχει πρακτική καθοδήγηση προς τους δυνητικούς καταχωρίζοντες σχετικά με τον τρόπο εφαρμογής των αρχών που διέπουν τον προσδιορισμό ουσίας όταν καθορίζουν από κοινού την ταυτότητα και το πεδίο εφαρμογής της ουσίας για την από κοινού καταχώρισή της σύμφωνα με την αρχή «μία ουσία, μία καταχώριση» (OSOR) του κανονισμού REACH. Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με τις εν γένει υποχρεώσεις κοινής υποβολής και τη διαδικασία κοινοχρησίας δεδομένων παρέχονται στην Καθοδήγηση σχετικά με την κοινοχρησία δεδομένων, η οποία διατίθεται στην ηλεκτρονική διεύθυνση <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>. Εννοείται ότι οι ίδιες αρχές για τον προσδιορισμό ουσίας που παρέχονται στη βασική καθοδήγηση ισχύουν, ανάλογα με τον τύπο της ουσίας, για την ταυτότητα της ίδιας ουσίας την οποία αφορά η κοινή καταχώριση.

Πράγματι, το πρώτο εδάφιο του άρθρου 11 παράγραφος 1 και το πρώτο εδάφιο του άρθρου 19 παράγραφος 1 του κανονισμού REACH επιβάλλουν την απαίτηση της «κοινής υποβολής δεδομένων από πολλούς καταχωρίζοντες». Ειδικότερα, οι εν λόγω διατάξεις ορίζουν ότι «[Ό]ταν μια ουσία πρόκειται να παραχθεί στην Κοινότητα από έναν ή περισσότερους παρασκευαστές ή/και να εισαχθεί από έναν ή περισσότερους εισαγωγείς», οι πληροφορίες σχετικά με τις ιδιότητες και την ταξινόμηση της ουσίας «υποβάλλονται για πρώτη φορά από έναν καταχωρούντα που ενεργεί με τη συμφωνία του άλλου συναινούντος καταχωρούντος ή των άλλων συναινούντων καταχωρούντων («κύριος καταχωρών»)».

Ο εκτελεστικός κανονισμός (ΕΕ) 2016/9 της Επιτροπής για την από κοινού υποβολή δεδομένων και την κοινοχρησία δεδομένων επιβεβαιώνει και ενοποιεί την υποχρέωση των πολλών καταχωριζόντων την ίδια ταυτότητα ουσίας να υποβάλλουν από κοινού συγκεκριμένες πληροφορίες. Σε πρακτικό επίπεδο, η από κοινού υποβολή πληροφοριών απαιτεί από τα ενδιαφερόμενα μέρη να συμφωνήσουν τα όρια και το πεδίο εφαρμογής της ταυτότητας της ουσίας. Πρόκειται για το γνωστό ως προφίλ ταυτότητας ουσίας (SIP). Το προφίλ ταυτότητας ουσίας αναμένεται να καθορίζει τα όρια της ουσίας τα οποία συμφωνήθηκαν από τους καταχωρίζοντες για να καλυφθούν από τα δεδομένα που υποβάλλονται από κοινού. Αφορά επίσης τους καταχωρίζοντες οι οποίοι ενδεχομένως αποσύρθηκαν και, αντ' αυτού, υπέβαλαν χωριστά τις πληροφορίες τους.

Συνεπώς, η συμφωνία σχετικά με το πεδίο εφαρμογής της ταυτότητας ουσίας που καλύπτεται από την καταχώριση αποτελεί προαπαιτούμενο για την από κοινού υποβολή. Η διαφάνεια σχετικά με το πεδίο εφαρμογής αυτής της ενιαίας ταυτότητας ουσίας και τα δεδομένα στα οποία αναφέρεται αποτελεί ζωτικής σημασίας παράμετρο της εφαρμογής. Ως εκ τούτου, το πεδίο εφαρμογής της ουσίας ή το προφίλ ταυτότητας ουσίας πρέπει να αναφέρεται με σαφήνεια στον φάκελο του κυρίου καταχωρίζοντος εκ μέρους όλων των άλλων καταχωριζόντων, ενώ όλοι οι καταχωρίζοντες αναφέρουν χωριστά τις οικείες πληροφορίες σύνθεσης.

Ένα απλό ενδεικτικό παράδειγμα σχετικά με τον τρόπο καθορισμού του προφίλ ταυτότητας ουσίας για χημικά προϊόντα που παρασκευάζονται/εισάγονται στην ΕΕ από μεμονωμένους καταχωρίζοντες παρουσιάζεται σχηματικά στην

Εικόνα 2 κατωτέρω. Το εν λόγω παράδειγμα παρουσιάζει τον τρόπο προσδιορισμού της ουσίας που πρόκειται να καταχωριστεί, τη συγκέντρωση των διάφορων συνθέσεων, την παραγωγή των δεδομένων και, τέλος, την υποβολή τους στον μορφότυπο του IUCLID σε φάκελο καταχώρισης. Το παράδειγμα αφορά μια απλή, σαφώς καθορισμένη μονοσυστατική ουσία. Όσον αφορά τις πιο σύνθετες ουσίες, η διαδικασία καθορισμού του προφίλ

ταυτότητας ουσίας ενδέχεται να περιλαμβάνει επαναλήψεις των σταδίων 3 έως 5 που παρουσιάζονται στην εικόνα.

Στο πλαίσιο των συζητήσεων μεταξύ των δυνητικών καταχωριζόντων, η τεκμηρίωση του προφίλ ταυτότητας ουσίας μπορεί να έχει τη μορφή, για παράδειγμα, εγγράφου Word ή φύλλου Excel, στο οποίο καταγράφονται οι πληροφορίες που έχουν συμφωνηθεί και το οποίο τίθεται στη διάθεση όλων των μελών και των δυνητικών μελών. Ορισμένες ενώσεις του κλάδου θέτουν στη διάθεση των ενδιαφερομένων υποδείγματα για την τεκμηρίωση του προφίλ ταυτότητας ουσίας τα οποία έχουν χρησιμοποιηθεί από πολλούς καταχωρίζοντες (π.χ. το υπόδειγμα του CEFIC³⁴). Άλλοι έχουν απλώς τεκμηριώσει τις σχετικές πληροφορίες σε ένα έγγραφο Word ή στην ιστοσελίδα της κοινοπραξίας που δημιουργήθηκε για την καταχώριση της ουσίας.

2. Καθορισμός της ταυτότητας και του πεδίου εφαρμογής της ουσίας που ανταποκρίνεται στα δεδομένα που υποβλήθηκαν για την καταχώριση

Τα βήματα που πρέπει να κάνουν οι πολλοί δυνητικοί καταχωρίζοντες για τον καθορισμό της ταυτότητας ουσίας κατά τρόπο που θα ανταποκρίνεται στα δεδομένα που υποβάλλουν από κοινού παρουσιάζονται σχηματικά στο παράδειγμα που παρέχεται στην

Εικόνα 2 (βήματα 1 έως 4) για απλές και σαφώς καθορισμένες ουσίες.

Κάθε μεμονωμένος δυνητικός καταχωρίζων προσδιορίζει τις υποχρεώσεις του σε σχέση με το προϊόν που παρασκευάζει/εισάγει βάσει του ορισμού της έννοιας της ουσίας στο άρθρο 3 παράγραφος 1 και σύμφωνα με τις αρχές για τον προσδιορισμό της ουσίας που περιέχονται στο κύριο μέρος της παρούσας καθοδήγησης (βήματα 1 και 2 της

Εικόνα 2).

Κάθε δυνητικός καταχωρίζων μπορεί στη συνέχεια να ελέγξει εάν άλλοι δυνητικοί καταχωρίζοντες έχουν καταλήξει στην ίδια «ονομασία & άλλα αναγνωριστικά» (βήμα 3). Από αυτήν την αφετηρία οι δυνητικοί καταχωρίζοντες μπορούν από κοινού να εφαρμόσουν τις αρχές του κύριου μέρους της παρούσας καθοδήγησης για να προσδιορίσουν τα όρια της ταυτότητας της ουσίας σύμφωνα με τα δεδομένα που υποβάλλουν από κοινού, ήτοι το προφίλ ταυτότητας ουσίας (βήμα 4).

Το προφίλ ταυτότητας ουσίας περιγράφει με γενικό τρόπο το πεδίο εφαρμογής της ουσίας με βάση τις πληροφορίες σύνθεσής της (συμπεριλαμβανομένων τυχόν άλλων παραμέτρων όπως η μορφολογία, π.χ. η φυσική μορφή, το σχήμα), την ονομασία της και άλλα αναγνωριστικά με τα οποία σχετίζονται η ταξινόμηση και τα από κοινού υποβληθέντα δεδομένα επικινδυνότητας. Ο προσδιορισμός του προφίλ ταυτότητας ουσίας δεν πρέπει να ακολουθεί υπερβολικά συντηρητική προσέγγιση με στόχο την αποφυγή του αποκλεισμού των ανταγωνιστών από την κοινή υποβολή.

Το προφίλ ταυτότητας ουσίας καθιερώνει ένα εγγενή δεσμό μεταξύ της ταυτότητας ουσίας και των δεδομένων επικινδυνότητας που πρόκειται να υποβληθούν από κοινού. Εάν η κατάρτιση του προφίλ ταυτότητας ουσίας γίνει αρκετά νωρίς, μπορεί να διευκολύνει το στάδιο της παραγωγής/συλλογής των πληροφοριών στο πλαίσιο της διαδικασίας εκπλήρωσης των υποχρεώσεων καταχώρισης (οι οποίες περιγράφονται στην Καθοδήγηση

³⁴ Το προφίλ ταυτότητας ουσίας περιγράφηκε αρχικά στο έγγραφο του CEFIC με τίτλο «Guidance for Lead Registrants (Καθοδήγηση για τους κύριους καταχωρίζοντες)», το οποίο είναι διαθέσιμο στην ηλεκτρονική διεύθυνση <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Παραδείγματα προφίλ ταυτότητας ουσίας τα οποία καταρτίστηκαν από καταχωρίζοντες που χρησιμοποίησαν το εν λόγω υπόδειγμα διατίθενται, π.χ., στον δικτυακό τόπο του REACH <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

σχετικά με τις απαιτήσεις πληροφοριών και την αξιολόγηση χημικής ασφάλειας· βήμα 5 της Εικόνα 2 κατωτέρω) προκειμένου να διασφαλιστεί ότι τα δεδομένα που παράγονται ή συλλέγονται καλύπτουν πλήρως την ταυτότητα ουσίας.

Όπως περιγράφεται στα σημεία 4.2.3 και 4.3 της βασικής καθοδήγησης, για τις πιο πολύπλοκες ουσίες οι δυνητικοί καταχωρίζοντες κατά κανόνα χρησιμοποιούν πρόσθετες παραμέτρους ή/και περιγραφικές παραμέτρους για τις πληροφορίες σύνθεσης (π.χ. περιγραφή της πηγής/διεργασίας) στα βήματα 1-3, όσες δε παράμετροι συμφωνηθούν μπορούν εν συνεχεία να συμπεριληφθούν στο προφίλ ταυτότητας ουσίας (βήμα 4). Ενίοτε, ο δεσμός μεταξύ των ορίων της ταυτότητας ουσίας και των δεδομένων επικινδυνότητας που υποβάλλονται από κοινού ενδέχεται να αποσαφηνιστεί πλήρως μόνο μετά την ολοκλήρωση της συλλογής μέρους ή του συνόλου των διαθέσιμων δεδομένων επικινδυνότητας. Ενδέχεται να υπάρξουν επαναλήψεις μεταξύ των βημάτων 3 έως 5, εφόσον κριθούν αναγκαίες, ανάλογα με την πολυπλοκότητα της ταυτότητας ουσίας και τα δεδομένα που συνελέγησαν στο βήμα 5, π.χ. όταν συγκεκριμένες συνθέσεις περιλαμβάνουν συστατικά που συνεπάγονται ταξινόμηση και επισήμανση ή/και αξιολόγηση ABT. Το προφίλ ταυτότητας ουσίας ενδέχεται να περιλαμβάνει περισσότερα από ένα προφίλ σύνθεσης προκειμένου να περιγράψει επαρκώς τα όρια της ταυτότητας ουσίας.

Το προφίλ ταυτότητας ουσίας πρέπει να παρέχει γενικές πληροφορίες που καθιστούν εφικτό τον προσδιορισμό των ορίων της ταυτότητας ουσίας σύμφωνα με τα από κοινού υποβληθέντα δεδομένα:

- ονομασία της ουσίας
- άλλα αναγνωριστικά (π.χ. CAS, EK, μοριακές και συντακτικές πληροφορίες, περιγραφή κατά περίπτωση) που καλύπτονται από όλους τους καταχωρίζοντες της συγκεκριμένης ταυτότητας ουσίας
- πληροφορίες σύνθεσης:
 - οι ταυτότητες των συστατικών που σχετίζονται με την ταυτότητα ουσίας και τα αντίστοιχα εύρη συγκέντρωσης,
 - ο γενικός κατάλογος των ταυτοτήτων των συστατικών που σχετίζονται με την ταυτότητα ουσίας (και τα αντίστοιχα εύρη συγκέντρωσης, εφόσον συντρέχει περίπτωση),
 - ο γενικός κατάλογος των πρόσθετων παραμέτρων που σχετίζονται με τον τύπο της ουσίας (π.χ. περιγραφικές παράμετροι που αφορούν την πηγή και τη διεργασία για ορισμένες ουσίες UCVB).

Είναι σημαντικό οι παράμετροι που προσδιορίζουν τα όρια της ταυτότητας ουσίας η οποία καλύπτεται από την από κοινού υποβολή να συμφωνούνται από όλους τους από κοινού καταχωρίζοντες και να τεκμηριώνονται σαφώς στο προφίλ ταυτότητας ουσίας. Κατά συνέπεια, ενδέχεται να καταστεί αναγκαία η τροποποίηση του προφίλ ταυτότητας ουσίας ή η επέκτασή του κατόπιν αιτήματος οιοδήποτε νέου δυνητικού καταχωρίζοντος, εάν οι υπόλοιποι καταχωρίζοντες συμφωνήσουν ότι μέρος ή το σύνολο των δεδομένων που υποβλήθηκαν από κοινού είναι επίσης συναφές για την ουσία που παρασκευάζεται ή εισάγεται από τον εν λόγω καταχωρίζοντα.

Το προφίλ ταυτότητας ουσίας δεν πρέπει να έχει ως αποτέλεσμα την κοινοχρησία εμπιστευτικών επιχειρηματικών πληροφοριών μεταξύ των καταχωριζόντων ή τη γνωστοποίηση τέτοιων πληροφοριών σε τρίτους από την από κοινού υποβολή. Σε περίπτωση που η κοινοχρησία δυνητικώς εμπιστευτικών πληροφοριών από τους από κοινού καταχωρίζοντες καταστεί αναγκαία προκειμένου να προσδιοριστεί σαφώς το προφίλ ταυτότητας ουσίας, οι από κοινού καταχωρίζοντες μπορούν να εξετάσουν το ενδεχόμενο να χρησιμοποιήσουν θεματοφύλακα, όπως περιγράφεται στην Καθοδήγηση για την κοινοχρησία δεδομένων.

3. Πρακτική καθοδήγηση σχετικά με την τεκμηρίωση του προφίλ ταυτότητας ουσίας

Στη βασική καθοδήγηση περιγράφονται οι γενικές αρχές για τον προσδιορισμό ουσιών που ισχύουν για τις σαφώς καθορισμένες ουσίες και τις ουσίες UVCB. Ακολουθεί πρακτική καθοδήγηση σχετικά με την από κοινού εφαρμογή των εν λόγω αρχών. Η βασική καθοδήγηση προβλέπει τη δυνατότητα παρεκκλίσεων από τις γενικές αρχές. Προκειμένου να γίνουν δεκτές οι εν λόγω παρεκκλίσεις, οι καταχωρίζοντες πρέπει να είναι σε θέση να αποδείξουν τον εγγενή δεσμό μεταξύ της ταυτότητας ουσίας και των δεδομένων επικινδυνότητας που υποβλήθηκαν από κοινού.

3.1 Σαφώς καθορισμένες ουσίες

Όσον αφορά τις σαφώς καθορισμένες ουσίες, η αρχή $\geq 80\%$ (κατά βάρος) για τον προσδιορισμό των μονοσυστατικών ουσιών και η αρχή $< 80\%$, $\geq 10\%$ για τον προσδιορισμό των πολυσυστατικών ουσιών πρέπει να τηρούνται κατά τον προσδιορισμό του/των κύριου/ων συστατικού/ών, καθώς και του εύρους συγκέντρωσης και των προσμείξεων. Ο κανόνας αυτός εφαρμόζεται για κάθε μεμονωμένο καταχωρίζοντα και για όλους τους από κοινού καταχωρίζοντες κατά τον προσδιορισμό του προφίλ ταυτότητας ουσίας. Ειδικότερα, στο προφίλ ταυτότητας ουσίας πρέπει να αναφέρονται τα προφίλ προσμείξεων που συμφωνούνται. Όταν το προφίλ ταυτότητας ουσίας περιλαμβάνει συγκεκριμένες προσμείξεις που αναμένεται να έχουν αντίκτυπο στην ταξινόμηση και επισήμανση ή/και την αξιολόγηση ABT, οι καταχωρίζοντες τους οποίους αφορούν αυτές οι προσμείξεις πρέπει να τις λάβουν υπόψη κατά το στάδιο συλλογής των δεδομένων (βήμα 5). Οι σχετικές πληροφορίες που αναφέρονται στα παραρτήματα VII-XI μπορούν να υποβάλλονται από κοινού ή χωριστά σύμφωνα με το άρθρο 11 παράγραφος 3 του κανονισμού REACH (οι αποκαλούμενες επιλογές απόσυρσης). Οι τιμές συγκέντρωσης που πρόκειται να αναφερθούν πρέπει να λαμβάνουν υπόψη το εύρος συγκέντρωσης κατά την από κοινού υποβολή.

Όσον αφορά ουσίες για τις οποίες απαιτείται να λαμβάνονται υπόψη πρόσθετες παράμετροι προκειμένου να καταγραφεί η ταυτότητά τους αναμφίλεκτα, κάθε καταχωρίζων πρέπει να τηρεί τις αρχές που περιγράφονται στην ενότητα 4.2.3 του κύριου μέρους της παρούσας καθοδήγησης. Θα πρέπει να εξετάζεται κατά πόσον η μεταβλητότητα των εν λόγω παραμέτρων συνεπάγεται την προσαρμογή, εφόσον κριθεί αναγκαία, της ταξινόμησης ή των από κοινού υποβληθέντων δεδομένων επικινδυνότητας. Παρόμοιοι προβληματισμοί πρέπει να λαμβάνονται υπόψη για τον προσδιορισμό του προφίλ ταυτότητας ουσίας σε σχέση με την από κοινού υποβολή. Για παράδειγμα, ενδέχεται να κριθεί αναγκαίο να συμπεριληφθούν στο προφίλ ταυτότητας της ουσίας παράμετροι (π.χ. η φυσική μορφή ή/και μορφολογικές παράμετροι όπως το πορώδες, το μέγεθος των σωματιδίων, το σχήμα των σωματιδίων) οι οποίες ενδέχεται να επηρεάζουν ιδιότητες που σχετίζονται με τον προσδιορισμό του προφίλ επικινδυνότητας (π.χ. διαλυτότητα, αντιδραστικότητα, τοξικότητα διά της εισπνοής, κ.λπ.). Σε μια τέτοια περίπτωση, το γενικό εύρος των εν λόγω παραμέτρων που καλύπτεται από το προφίλ ταυτότητας ουσίας πρέπει να παρέχεται με τη δέουσα διαφάνεια (π.χ. το εύρος μεγέθους των σωματιδίων που εφαρμόζεται από όλους τους καταχωρίζοντες, κατάλογος του/των σχήματος/ων και κατάλογος της χημείας της επιφάνειας εκάστου εξ αυτών). Κατ' αυτόν τον τρόπο διασφαλίζεται η πληρότητα των δεδομένων επικινδυνότητας που υποβάλλονται από κοινού σε σχέση με το προφίλ ταυτότητας ουσίας.

Παρομοίως, διαφορές στην κρυσταλλική φάση ανόργανων χημικών προϊόντων ενδέχεται να συνεπάγονται διαφορετικούς προβληματισμούς για το προφίλ επικινδυνότητας σε σχέση με τις εν λόγω φάσεις (π.χ. χαλαζίας, χριστοβαλίτης, άμορφη πυριτία). Λαμβάνοντας υπόψη τις πιθανές διαφορές των ιδιοτήτων στις διάφορες φάσεις, οι δυνητικοί καταχωρίζοντες των εν λόγω ουσιών οφείλουν να προβούν σε στάθμιση μεταξύ μιας ενδεχόμενης από κοινού

υποβολής που θα καλύπτει όλες τις φάσεις, συμπεριλαμβανομένων των δεδομένων επικινδυνότητας που σχετίζονται με αυτές, ή της υποβολής διαφορετικών από κοινού καταχωρίσεων για τις διάφορες φάσεις (π.χ. διαφορετικές ταυτότητες ουσίας). Σε αμφότερες τις περιπτώσεις, οι φάσεις που καλύπτονται πρέπει να αναφέρονται στο προφίλ ταυτότητας ουσίας και τα δεδομένα που αναφέρονται στα παραρτήματα VII-XI πρέπει να αφορούν όλες τις φάσεις που καλύπτονται από την καταχώριση, ώστε να διασφαλίζεται ότι τα δεδομένα καλύπτουν πλήρως το προφίλ ταυτότητας ουσίας.

Πρέπει να επισημαίνεται ότι οι συνθέσεις ενδέχεται να έχουν διαφορετικά προφίλ προσμειξεων ή/και επικινδυνότητας, καθώς και ότι οι διαφορές αυτές δεν σημαίνουν κατ' ανάγκην ότι οι εν λόγω συνθέσεις δεν είναι δυνατόν να καταχωρισθούν στην ίδια καταχώριση.

3.2 Ουσίες UVCB

Ο προσδιορισμός της ταυτότητας ουσιών UVCB ενδέχεται να αποτελέσει μεγαλύτερη πρόκληση και, ως εκ τούτου, η διαφανής τεκμηρίωση συμβάλλει σημαντικά στην επίτευξη συμφωνίας σχετικά με την ταυτότητα της ουσίας που θα αποτελέσει αντικείμενο κοινής υποβολής. Κάθε δυνητικός καταχωρίζων οφείλει να λάβει υπόψη τις συμβουλές που παρέχονται στο κύριο μέρος της παρούσας καθοδήγησης σε ατομικό επίπεδο και, στη συνέχεια, να εφαρμόσει τις ίδιες αρχές σε συλλογικό επίπεδο. Επισημαίνεται ότι η συγκέντρωση των επιμέρους ευρών συγκέντρωσης στο προφίλ ταυτότητας ουσίας θα μπορούσε να οδηγήσει σε ένα προφίλ με μεγάλο εύρος συγκέντρωσης, ενδεχομένως σε τέτοιο βαθμό ώστε να μην είναι δυνατό να θεωρηθεί ότι πρόκειται για μία ουσία.

Όπως επισημαίνεται στη βασική καθοδήγηση, η βάση για τον προσδιορισμό της ταυτότητας ορισμένων ουσιών UVCB είναι η προέλευση και η διεργασία που χρησιμοποιούνται στην παρασκευή τους και όχι απευθείας οι ταυτότητες και το εύρος συγκέντρωσης των συστατικών τους. Στις περιπτώσεις αυτές, ως υποκατάστατα για τις ταυτότητες του συστατικού και το αντίστοιχο εύρος συγκέντρωσής τους χρησιμοποιούνται άλλες περιγραφικές παράμετροι. Οι δυνητικοί καταχωρίζοντες μπορούν να περιγράψουν τη διεργασία παρασκευής με γνώμονα τον βαθμό στον οποίο η προέλευση και η διεργασία είναι απαραίτητες για τον προσδιορισμό της ουσίας. Η περιγραφή μπορεί να περιλαμβάνει οποιεσδήποτε πρόσθετες παραμέτρους/χαρακτηριστικά γνωρίσματα που οι καταχωρίζοντες κρίνουν ως σημαντικά για την ταυτότητα της ουσίας (βλ. για παράδειγμα Πίνακας 5 στη βασική καθοδήγηση). Για τον σκοπό της από κοινού καταχώρισης, οι περιγραφές κοινοποιούνται αποκλειστικά στον βαθμό που αυτό κρίνεται αναγκαίο για την επίτευξη συμφωνίας σχετικά με το πεδίο εφαρμογής της ταυτότητας ουσίας UVCB για την καταχώριση. Οι δυνητικοί καταχωρίζοντες μπορούν να τηρούν τις αρχές που περιγράφονται στη βασική καθοδήγηση τόσο μεμονωμένα όσο και, στη συνέχεια, από κοινού. Ως εκ τούτου, το προφίλ ταυτότητας ουσίας καταλήγει σε γενική αναφορά των παραμέτρων της προέλευσης και της διεργασίας ώστε να καλύπτει πλήρως τις συνθέσεις των μεμονωμένων καταχωριζόντων. Αυτό απεικονίζεται σχηματικά στην Εικόνα 3.

Όσον αφορά ουσίες που προσδιορίζονται βάσει της προέλευσης και της διεργασίας, σύμφωνα με τη βασική καθοδήγηση κάθε σημαντική αλλαγή της προέλευσης ή της διεργασίας μπορεί να έχει ως αποτέλεσμα την παραγωγή διαφορετικής ταυτότητας ουσίας, η οποία πρέπει να καταχωριστεί χωριστά. Παρεκκλίσεις από αυτήν την αρχή θα είχαν την έννοια ότι οι καταχωρίζοντες μπορούν να αποδείξουν ότι κάθε συνδυασμός προέλευσης/διεργασίας παράγει συνθέσεις που μπορούν να συμπεριληφθούν στην ίδια από κοινού καταχώριση. Ήσσονος σημασίας παραλλαγές στα βασικά υλικά και τις διεργασίες ή/και τις συνθήκες διεργασίας μπορούν να ληφθούν υπόψη κατά την κατάρτιση του προφίλ ταυτότητας ουσίας. Οι καταχωρίζοντες πρέπει να συμφωνήσουν ότι κάθε συνδυασμός προέλευσης/διεργασίας παράγει συνθέσεις οι οποίες είναι παρόμοιες σε τέτοιο βαθμό ώστε να θεωρηθεί σημαντική η κάλυψή τους υπό ενιαία ταυτότητα ουσίας και να διασφαλίζουν

ότι τα δεδομένα επικινδυνότητας είναι κατάλληλα για το σύνολο των αποκλίσεων του προφίλ ταυτότητας ουσίας. Ειδικότερα, οι καταχωρίζοντες πρέπει να είναι σε θέση να αιτιολογήσουν ότι το σύνολο των υποβληθέντων δεδομένων επικινδυνότητας είναι σημαντικό για όλες τις εν λόγω συνθέσεις ή ότι προσαρμόζεται, κατά περίπτωση, με πληροφορίες που υποβάλλονται μεμονωμένα για συγκεκριμένες συνθέσεις βάσει του άρθρου 11 παράγραφος 3 του κανονισμού REACH (επιλογή απόσυρσης).

Προκειμένου να καταδειχθεί η σημασία του συνόλου δεδομένων για κάθε συνδυασμό προέλευσης/διεργασίας, οι εν λόγω συνδυασμοί πρέπει να τεκμηριώνονται με τη δέουσα διαφάνεια στο προφίλ ταυτότητας ουσίας για λόγους τεκμηρίωσης των κριτηρίων συμπερίληψης/αποκλεισμού που εφαρμόζονται για τους υφιστάμενους και τους μελλοντικούς από κοινού καταχωρίζοντες.

Όσον αφορά άλλους τύπους ουσιών UVCB (βλ. ενότητα 4.3.2 της βασικής καθοδήγησης), οι δυνητικοί καταχωρίζοντες μπορούν να χρησιμοποιούν, κατά περίπτωση, έναν συνδυασμό σχετικών με τη σύνθεση και πρόσθετων περιγραφικών παραμέτρων. Για παράδειγμα, για ορισμένα ελαιοχημικά προϊόντα, η σύνθεση είναι ασταθής λόγω της αστάθειας του εύρους κατανομής του μήκους των συστατικών αλκυλικών αλυσίδων, το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως πρόσθετη περιγραφική παράμετρος στον προσδιορισμό. Η προσέγγιση που εφαρμόζει το ΦΑΠΟ (Φόρουμ ανταλλαγής πληροφοριών για τις ουσίες) χρήζει διαφανούς τεκμηρίωσης στο οικείο προφίλ ταυτότητας ουσίας.

3.3 Προφίλ ταυτότητας ουσίας

Όλοι οι καταχωρίζοντες που υποβάλλουν πληροφορίες από κοινού οφείλουν να συμφωνήσουν επί των αναγκαίων παραμέτρων για τον προσδιορισμό της ουσίας τους και να τις τεκμηριώσουν με τη δέουσα διαφάνεια στο αντίστοιχο προφίλ ταυτότητας ουσίας. Οι παρεκκλίσεις και αποκλίσεις από τις τυπικές αρχές που διέπουν τον από κοινού προσδιορισμό της ταυτότητας ουσίας χρήζουν διαφανούς τεκμηρίωσης. Δεδομένου ότι το προφίλ ταυτότητας ουσίας τεκμηριώνει τα κριτήρια συμπερίληψης/αποκλεισμού, το ΦΑΠΟ πρέπει να διασφαλίζει ότι η εφαρμογή τους είναι διαφανής και ότι η συλλογή/παραγωγή των δεδομένων που αναφέρονται στα παραρτήματα VII-XI καλύπτει αποδεδειγμένα όλα τα συμφωνημένα προφίλ σύνθεσης.

Όταν οι δυνητικοί καταχωρίζοντες μεμονωμένα συμπεριλαμβάνουν σταθεροποιητικά πρόσθετα στο πλαίσιο του άρθρου 3 παράγραφος 1 στο οικείο προφίλ ταυτότητας, οι ταυτότητες και το εύρος συγκέντρωσης πρέπει να συμφωνούνται και να αναφέρονται με τη δέουσα διαφάνεια στο προφίλ ταυτότητας ουσίας.

Στο στάδιο συλλογής δεδομένων πρέπει να λαμβάνεται υπόψη η σημασία του/των υλικού/ών δοκιμής που χρησιμοποιείται/ούνται για την παραγωγή/συλλογή δεδομένων στο πλαίσιο εκπλήρωσης των απαιτήσεων σχετικά με τις πληροφορίες που υποβάλλονται βάσει των παραρτημάτων VII-XI. Το σκεπτικό των συμπερασμάτων σχετικά με την αντιπροσωπευτικότητά τους για τις συνθέσεις που καλύπτονται από το προφίλ ταυτότητας ουσίας πρέπει να τεκμηριώνεται και να συμπεριλαμβάνεται στον τεχνικό φάκελο. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό για πολύπλοκες ταυτότητες ουσίας που καλύπτουν ευρέα προφίλ σύνθεσης.

Οι δυνητικοί καταχωρίζοντες μπορούν να ορίζουν κατά τη συλλογή των δεδομένων ότι το προφίλ ταυτότητας ουσίας τους είναι υπερβολικά ευρύ και δεν είναι κατάλληλο για τον σκοπό της από κοινού υποβολής πληροφοριών επικινδυνότητας που θα είναι αντιπροσωπευτικές της σχετικής ταυτότητας ουσίας. Σε μια τέτοια περίπτωση, οι δυνητικοί καταχωρίζοντες μπορούν να αποφασίζουν να διαχωρίζουν το προφίλ ταυτότητας ουσίας

του ΦΑΠΟ προκειμένου να διευθετούν χωριστά δύο ή περισσότερες ουσίες³⁵. Ως εκ τούτου, κάθε ουσία θα έχει το δικό της προφίλ ταυτότητας ουσίας, η δε από κοινού υποβολή των πληροφοριών επικινδυνότητάς της πρέπει να είναι συγκεκριμένα αντιπροσωπευτική της εν λόγω ταυτότητας ουσίας. Οι λόγοι για τους οποίους συγκεκριμένη πληροφορία επικινδυνότητας δεν υπήρξε αντιπροσωπευτική για συγκεκριμένες παραμέτρους της ταυτότητας ουσίας θα πρέπει να τεκμηριώνονται με τη δέουσα διαφάνεια στο προφίλ ταυτότητας ουσίας για κάθε χωριστή καταχώριση. Οι αντίστοιχοι δυνητικοί καταχωρίζοντες μπορούν επίσης να ορίζουν στο στάδιο αυτό ότι τα προφίλ σύνθεσης χρήζουν περαιτέρω βελτίωσης βάσει των συστατικών ή/και των προσμείξεων που συνεπάγονται ταξινόμηση και επισήμανση, αξιολόγηση ABT, κ.λπ.

Οι δυνητικοί καταχωρίζοντες που προτίθενται να ενεργήσουν από κοινού με άλλους δυνητικούς καταχωρίζοντες, οι οποίοι έχουν ήδη καταλήξει σε συμφωνία σχετικά με κάποιο προφίλ ταυτότητας ουσίας αλλά δεν έχουν ακόμη υποβάλει την αίτηση καταχώρισης, θα πρέπει να εξετάζουν κατά πόσον οι πληροφορίες σχετικά με τη δική τους ταυτότητα ουσίας κείνται εντός των ορίων του προφίλ ταυτότητας ουσίας. Σε αντίθετη περίπτωση, οι δυνητικοί καταχωρίζοντες θα πρέπει να συζητούν και να συμφωνούν με τους άλλους δυνητικούς καταχωρίζοντες κατά πόσον είναι αναγκαία είτε η επέκταση του πεδίου εφαρμογής του προφίλ προκειμένου να συμπεριληφθούν τα νέα μέλη είτε η επίτευξη συμφωνίας ως προς το ότι οι πληροφορίες των άλλων δυνητικών καταχωριζόντων κείνται εκτός του πεδίου εφαρμογής του προφίλ ταυτότητας ουσίας.

Απαιτείται προσαρμογή του προφίλ ταυτότητας ουσίας εάν η προς καταχώριση ουσία από τον δυνητικό καταχωρίζοντα έχει συγκεκριμένες παραμέτρους ταυτότητας ουσίας που ενδέχεται να αλλοιώνουν την αντιπροσωπευτικότητα των από κοινού υποβληθεισών πληροφοριών επικινδυνότητας και, ως εκ τούτου, χρήζει ειδικής αιτιολόγησης (π.χ. κάποια συγκεκριμένη πρόσμειξη, διαφορετική αναλογία σύνθεσης, διαφορετική φάση, διαφορετικό μέγεθος σωματιδίων, κ.λπ.). Για λόγους διασφάλισης της διαφάνειας, η παράμετρος αυτή θα πρέπει να προσδιορίζεται στο προφίλ ταυτότητας ουσίας.

Σε μεμονωμένες περιπτώσεις οι δυνητικοί και οι υφιστάμενοι καταχωρίζοντες μπορούν να συμφωνήσουν ότι τα από κοινού υποβληθέντα δεδομένα επικινδυνότητας στερούνται πλήρως αντιπροσωπευτικότητας σε σχέση με την ουσία του δυνητικού καταχωρίζοντος λόγω παρέκκλισης των παραμέτρων της ταυτότητας ουσίας οι οποίες υπερβαίνουν τα όρια του συμφωνημένου προφίλ ταυτότητας ουσίας. Στην περίπτωση αυτή, ο δυνητικός καταχωρίζων πρέπει να υποβάλει χωριστή αίτηση καταχώρισης είτε από κοινού με τους άλλους καταχωρίζοντες την ταυτότητα ουσίας που περιλαμβάνει αυτήν την παράμετρο, είτε μεμονωμένα εφόσον δεν υπάρχουν άλλοι καταχωρίζοντες για την ίδια ταυτότητα ουσίας.

4. Υποβολή του προφίλ ταυτότητας ουσίας στον φάκελο καταχώρισης

Μόλις οι δυνητικοί καταχωρίζοντες συλλέξουν/παράγουν για την ουσία τους όλα τα δεδομένα που προβλέπονται στα παραρτήματα VII-XI (βήμα 5 στην

Εικόνα 2), το σύνολο των δεδομένων είναι έτοιμο να προστεθεί, σε μορφότυπο IUCLID, σε φακέλους προς υποβολή στον Οργανισμό (βήμα 6 στην

Εικόνα 2). Προκειμένου να υποβληθεί το προφίλ ταυτότητας ουσίας σε μορφότυπο IUCLID, η ονομασία και τα άλλα αναγνωριστικά, οι πληροφορίες σύνθεσης και οι άλλες

³⁵ Οι προβληματισμοί σχετικά με τον ρόλο που διαδραματίζει το EINECS στην κατάρτιση της ταυτότητας ουσίας βάσει του κανονισμού REACH, εκτίθενται στο έγγραφο της CARACAL που συμφωνήθηκε στο πλαίσιο της 4ης συνεδρίασης των αρμόδιων αρχών για τους κανονισμούς REACH και CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 «Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)».

σχετικοί παράμετροι αναφέρονται στα σημεία 1.1 και 1.2 του IUCLID.

Προφίλ ταυτότητας ουσίας	Υποβολή σε μορφότυπο του IUCLID
ονομασία και άλλα αναγνωριστικά	Σημείο 1.1 όλων των φακέλων
πληροφορίες σύνθεσης και άλλες σχετικές παράμετροι	Σημείο 1.2 του φακέλου του κύριου καταχωρίζοντος

Η ονομασία του προφίλ ταυτότητας ουσίας και τα άλλα αναγνωριστικά αναφέρονται στο σημείο 1.1 όλων των φακέλων. Ο κύριος καταχωρίζων αναφέρει τις πληροφορίες σύνθεσης του προφίλ ταυτότητας ουσίας και τις άλλες σχετικές παραμέτρους στο σημείο 1.2 του φακέλου υπό τη μορφή «οριακής σύνθεσης της ουσίας»³⁶. Ο κύριος καταχωρίζων πρέπει επίσης να υποβάλει όλα τα σχετικά δεδομένα που αναφέρονται στα παραρτήματα VII-XI, στα σημεία 4-14 (σε περίπτωση έλλειψης αιτιολογημένων επιλογών απόσυρσης για μία ή περισσότερες απαιτήσεις υποβολής πληροφοριών) εκ μέρους όλων των καταχωριζόντων.

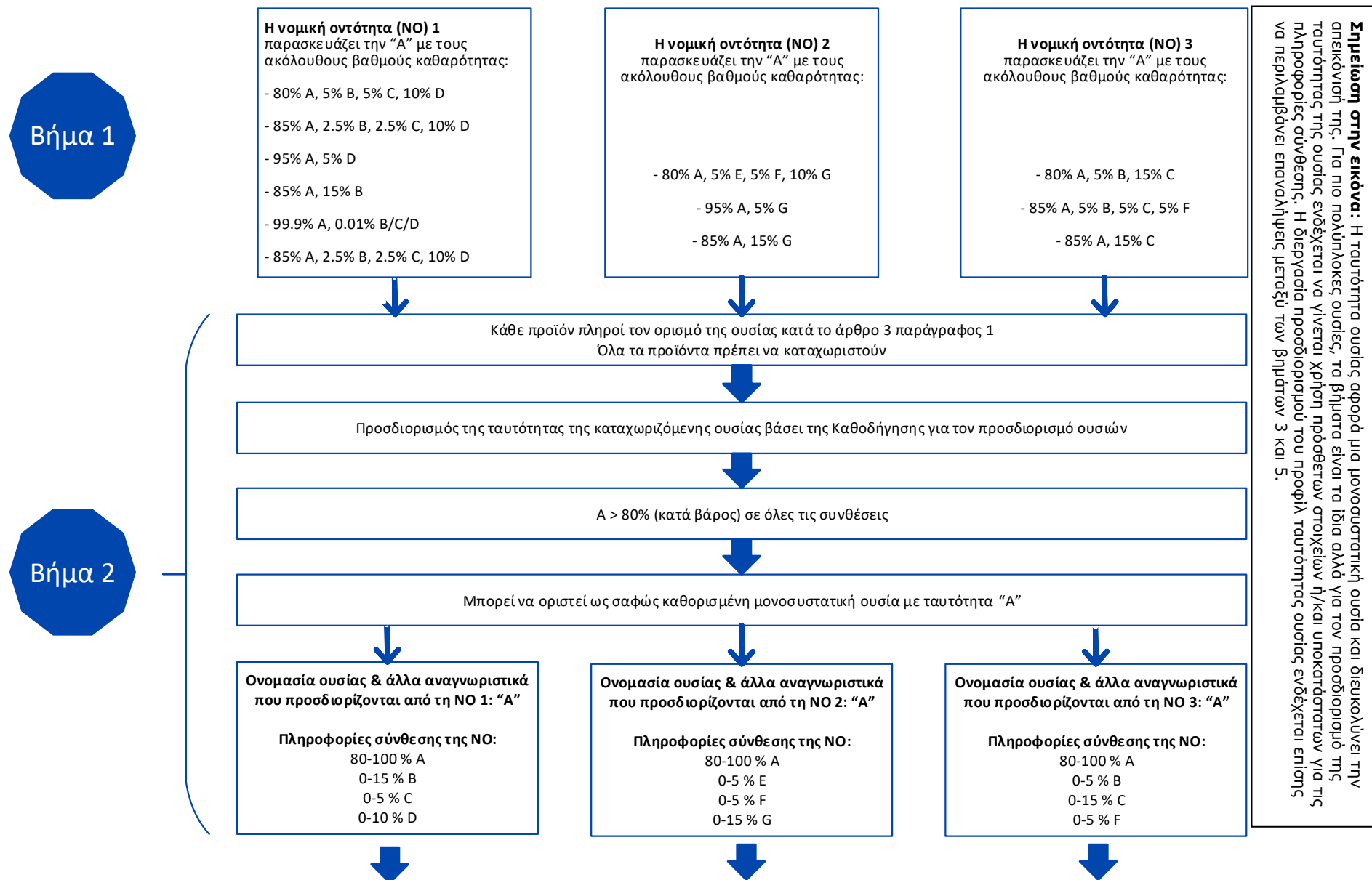
Κάθε καταχωρίζων (συμπεριλαμβανομένου του κύριου καταχωρίζοντος) αναφέρει στο σημείο 1.2 του φακέλου του τις πληροφορίες σύνθεσης της συγκεκριμένης ουσίας που παρασκευάζει ή εισάγει η νομική οντότητά του. Αυτό σημαίνει ότι ο κύριος καταχωρίζων αναφέρει τις πληροφορίες σύνθεσης του προφίλ ταυτότητας ουσίας και τις πληροφορίες σύνθεσης της νομικής οντότητάς του στο σημείο 1.2 του φακέλου του, ενώ όλοι οι άλλοι καταχωρίζοντες αναφέρουν τις δικές τους συγκεκριμένες πληροφορίες σύνθεσης. Κάθε συνήθης καταχώριση πρέπει να περιλαμβάνει επίσης τις σχετικές αναλυτικές πληροφορίες στο σημείο 1.4 του IUCLID.

Κάθε καταχωρίζων πρέπει να αποδεικνύει ότι οι πληροφορίες σύνθεσης των συγκεκριμένων ουσιών που παρασκευάζει ή εισάγει καλύπτονται από το προφίλ ταυτότητας ουσίας όπως αναφέρεται στην «οριακή σύνθεση» και, συνεπώς, καλύπτονται από τα δεδομένα που αναφέρονται στα παραρτήματα VII-XI και υποβάλλονται στον φάκελο του κύριου καταχωρίζοντος (σε περίπτωση έλλειψης αιτιολογημένων επιλογών απόσυρσης).

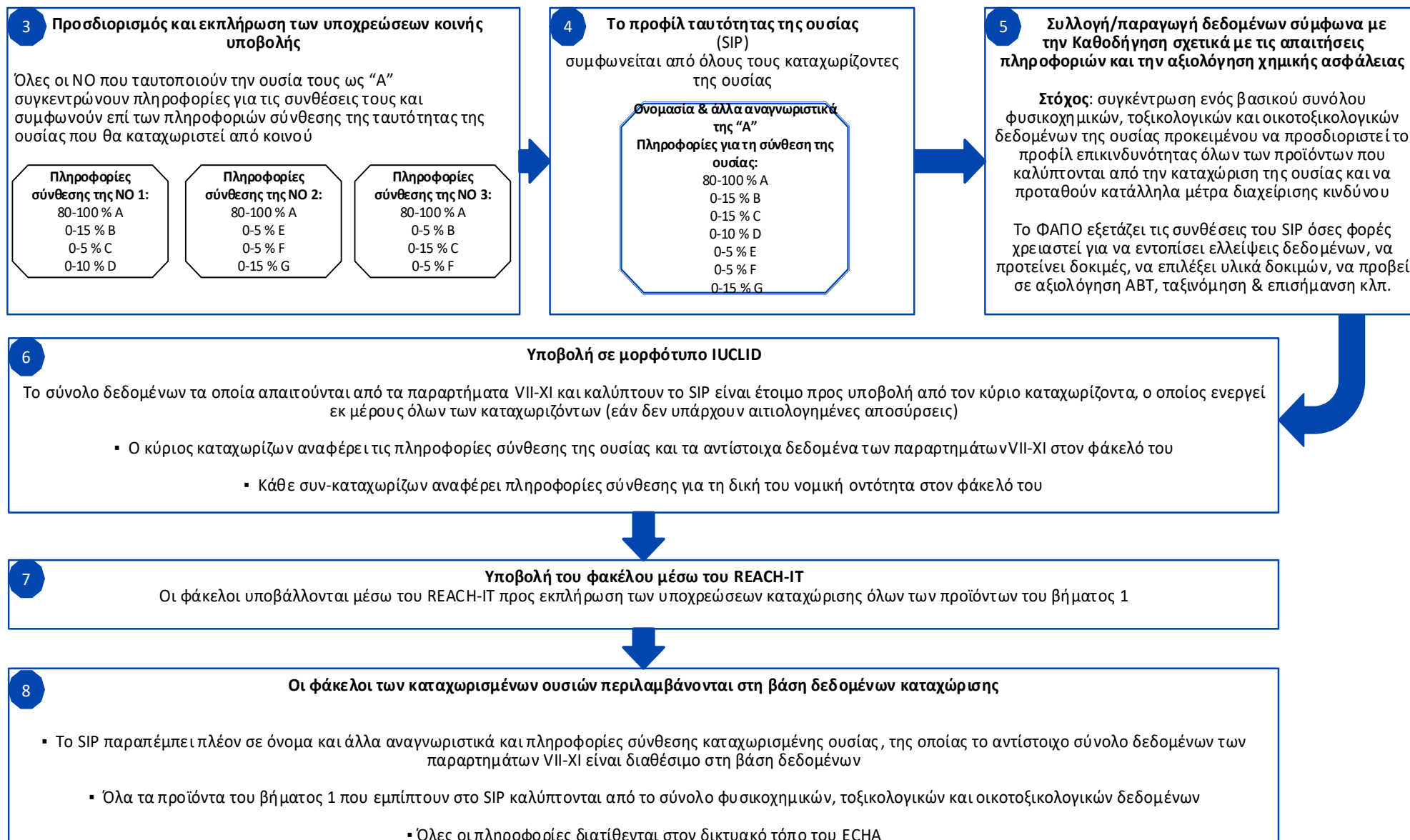
Τεχνικές οδηγίες σχετικά με τον τρόπο αναφοράς των πληροφοριών σύνθεσης στον μορφότυπο του IUCLID διατίθενται στα εγχειρίδια του IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

Εικόνα 2 (επόμενη σελίδα): Σχηματική επισκόπηση των βημάτων που πρέπει να πραγματοποιούν οι δυνητικοί καταχωρίζοντες από το στάδιο του προσδιορισμού των οικείων υποχρεώσεων καταχώρισης (1) έως το στάδιο του προσδιορισμού του προφίλ ταυτότητας της ουσίας τους για την καταχώριση της μοναδικής ταυτότητας ουσίας τους (4) και, εντέλει, την υποβολή των αιτήσεων καταχώρισης στο πλαίσιο της επίσημης εκπλήρωσης των υποχρεώσεων καταχώρισης των ουσιών τους (8).

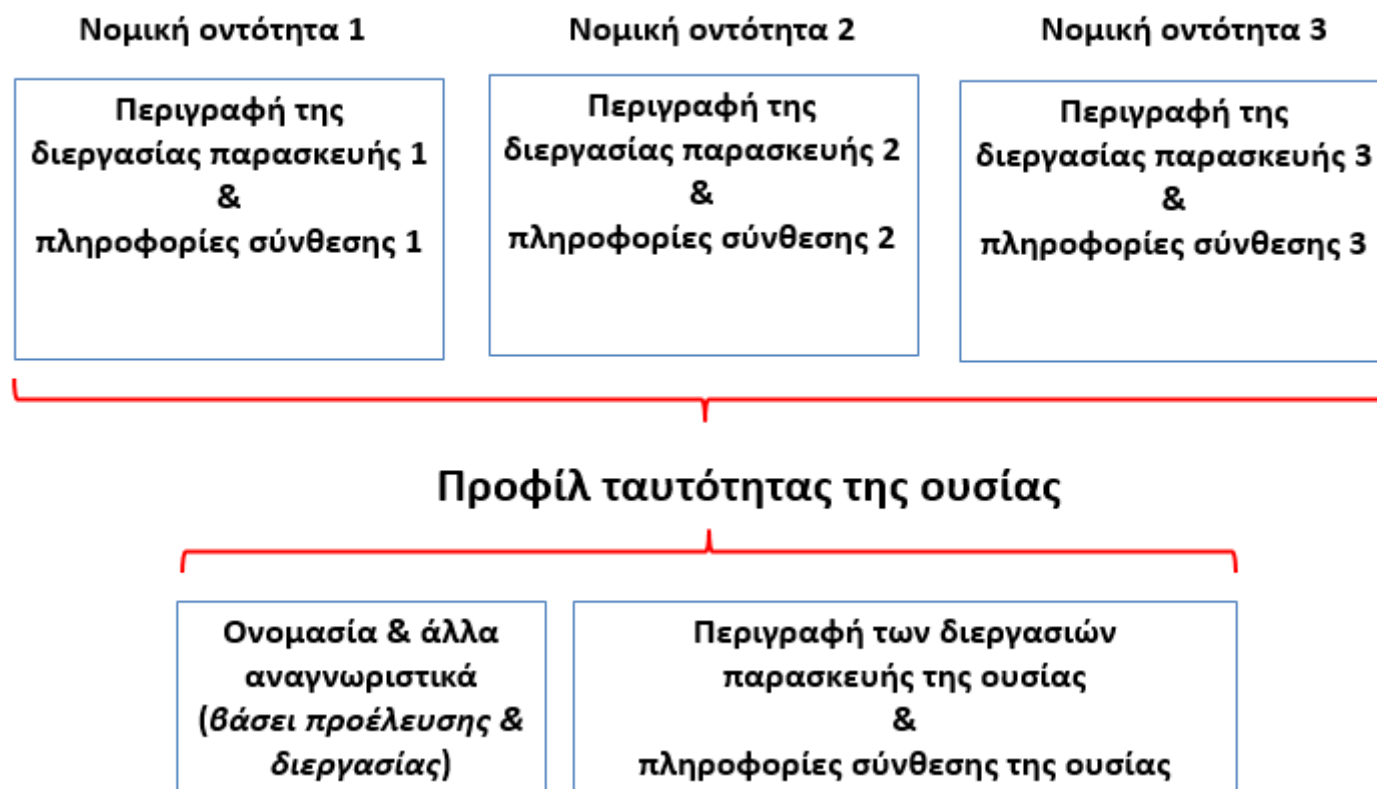
³⁶ Οδηγίες σχετικά με την υποβολή της «οριακής σύνθεσης της ουσίας» παρέχονται στο εγχειρίδιο «Κατάρτιση φακέλων καταχώρισης και PPORD», το οποίο διατίθεται στην ηλεκτρονική διεύθυνση <http://echa.europa.eu/manuals>.



Βήμα 2



Εικόνα 3: Σχηματική επεξήγηση της κατάρτισης του προφίλ ταυτότητας ουσίας (βήμα 4 στην εικόνα 2) για ουσία UVCB το οποίο προσδιορίζεται με βάση τις περιγραφικές παραμέτρους της προέλευσης και της διεργασίας από τη μεμονωμένη νομική οντότητα.



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟΣ ΟΡΓΑΝΙΣΜΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ
P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://ECHA.EUROPA.EU)