ECHA
EUROPEAN CHEMICALS AGENCY

RICHTSNOER

Richtsnoer voor identificatie en naamgeving van stoffen volgens REACH en CLP

juni 2016
versie 1.4

JURIDISCHE MEDEDELING

Dit document is bedoeld om de gebruiker te helpen bij het voldoen aan zijn verplichtingen in het kader van de REACH- en CLP-verordeningen. Er zij evenwel op gewezen dat de tekst van de REACH- en de CLP-verordening de enige authentieke juridische referentie is en dat de informatie in dit document geen juridisch advies vormt. Het gebruik van de informatie valt uitsluitend onder de verantwoordelijkheid van de gebruiker. Het Europees Agentschap voor chemische stoffen aanvaardt geen aansprakelijkheid in verband met het eventuele gebruik van de in dit document opgenomen informatie.

Richtsnoer voor identificatie en naamgeving van stoffen volgens REACH en CLP

Referentie: ECHA-16-G-01-NL
ISBN: 978-92-9247-742-4
Uitgavedatum: juni 2016
Taal: NL

© Europees Agentschap voor chemische stoffen, 2016

Als u opmerkingen hebt met betrekking tot dit document, kunt u deze toesturen (onder vermelding van de referentie van het document, de publicatiedatum, het hoofdstuk en/of de pagina van het document waarop uw opmerking betrekking heeft) met behulp van het feedbackformulier voor richtsnoeren. Het feedbackformulier is toegankelijk via de ECHA-website of rechtstreeks via de volgende link:

https://comments.echa.europa.eu/comments_cms/FeedbackGuidance.aspx

Verklaring van afwijzing van aansprakelijkheid: Dit is een werkvertaling van een document dat oorspronkelijk in het Engels werd gepubliceerd en dat op de ECHA-website beschikbaar is.

Europees Agentschap voor chemische stoffen

Postadres: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finland

Bezoekadres: Annankatu 18, Helsinki, Finland

VOORWOORD

Dit document beschrijft de naamgeving en identificatie van stoffen volgens REACH en CLP. Het maakt deel uit van een reeks begeleidingsdocumenten die bedoeld zijn om alle belanghebbenden te helpen met de voorbereiding om hun verplichtingen op grond van de REACH- en de CLP-verordening na te komen. Deze documenten bevatten gedetailleerde richtsnoeren voor een aantal belangrijke REACH- en CLP-procedures en voor een aantal specifieke wetenschappelijke en/of technische methoden waar het bedrijfsleven of de overheid gebruik van moet maken in het kader van REACH en CLP.

De richtsnoeren zijn tot stand gekomen in het kader van de REACH-uitvoeringsprojecten (REACH Implementation Projects, RIP's) onder leiding van de diensten van de Europese Commissie en in overleg met alle betrokkenen: de lidstaten, de industrie en niet-gouvernementele organisaties. Deze richtsnoeren kunnen worden geraadpleegd via de website van het Europees Agentschap voor chemische stoffen (http://echa.europa.eu/nl/guidance-documents/guidance-on-reach). De overige begeleidingsdocumenten zullen op deze website worden gepubliceerd zodra ze zijn afgerond of bijgewerkt.

Documentgeschiedenis

Versie	Opmerkingen	Datum
Versie 1	Eerste uitgave	juni 2007
Versie 1.1	Rectificatie van: - Het toevoegen van verwijzing naar de CLP-verordening (Verordening (EG) nr. 1272/2008 van 16 december 2008) aan de titel en de titels van hoofdstukken. - Het toevoegen van aanvullende tekst om het toepassingsgebied van het richtsnoer te verduidelijken. Het verwijderen van overtollige tekst in het hele document. - Het opnemen in de hele tekst waar nodig van verwijzingen naar de CLP-verordening. - Het wijzigen van de term 'TGD' in 'richtsnoer' in het hele document. - Het wijzigen van de term 'preparaat' in 'mengsel' in het hele document. - Het wijzigen van de term 'punt' in 'paragraaf' in het hele document. - Het wijzigen van de term 'preregistratie' in '(late) preregistratie' in het hele document. - Het invoegen van de afkortingen AAS en CLP en het verwijderen van RIP en TGD. - Het wijzigen van de beschrijvingen van legering, EG-inventaris en IUCLID. Het introduceren van de definities van EG-nummer, lijstnummer, mengsel en aangemelde stof. Het verwijderen van de definitie van 'preparaat'. - Het herzien van paragraaf 3.2 om de inhoud te verduidelijken. - Het herzien van paragraaf 3.3 om de inhoud te verduidelijken met betrekking tot de CLP-verplichtingen.	november 2011 (uitsluitend beschikbaar in het Engels)

	- Het veranderen van paragraaf 4.2.2.1 om de manier om de bestanddelen weer te geven van concentratiepercentage in alfabetische volgorde, zodat de relatieve samenstelling niet kan worden afgeleid uit de lijstvolgorde. - Het wijzigen van de term 'rooster' in 'kristal' in paragraaf 4.2.3.1. - Het herzien van paragraaf 4.3.1.2.3 om de inhoud te verduidelijken. - Het opnemen in paragraaf 5 van verwijzingen naar de Handleidingen voor het indienen van gegevens deel 18 – 'De stofidentiteit opgeven in IUCLID 5 voor registratie op grond van REACH'. - Het herzien van paragraaf 5 om de inhoud te verduidelijken. - Het wijzigen van de beschrijving van preregistratie in (late) preregistratie in paragraaf 6. - Het bijwerken van verbroken hyperlinks in aanhangsel 1. - Het verwijderen van paragraaf 4.3 van bijlage 2 omdat de inhoud te vinden is op de desbetreffende website.	
Versie 1.2	Rectificatie De definitie van "geleidelijk geïntegreerde stof" is in overeenstemming gebracht met de definitie in Verordening (EG) nr. 1907/2006, zoals ingevoerd bij Verordening (EG) nr. 1354/2007 van de Raad en de rectificatie in PB L 36, 5.2.2009, blz. 84 (1907/2006). Wij wijzen u erop dat de wijzigingen in de versies 1.1 en 1.2 voor alle andere talen dan het Engels geconsolideerd zijn in een enkele versie, te weten versie 1.2.	maart 2012
Versie 1.3	Rectificatie Twee ontbrekende structuurformules werden in hoofdstuk 7.6 ingevoegd.	februari 2014
Versie 1.4	Rectificatie van: - Het herindelen van het document in	juni 2016

	overeenstemming met de nieuwe huisstijl. - Het verwijderen van hoofdstuk 8 waarin technische instructies staan beschreven die gebaseerd zijn op een verouderde versie van IUCLID. - Het verwijderen van verwijzingen naar hoofdstuk 8 en Handleidingen voor het indienen van gegevens, en het toevoegen van verwijzingen naar nieuwe handleidingen van ECHA. - Het verwijderen van aanhangsel III en het verplaatsen van de informatie naar de tabel met de documentgeschiedenis. - Het herstellen van verbroken links naar websites en het corrigeren van redactionele fouten.	

Inhoudsopgave

1. Algemeen 10
1.1. Doelstellingen 10
1.2. Toepassingsgebied 11
1.3. Structuur van het richtsnoer 11
2. Definities en afkortingen 13
2.1. Afkortingen 13
2.2. Definities 16
3. Raamwerk voor stofidentificatie in REACH en CLP 20
3.1. Definitie van stof 20
3.2. EG-inventaris 21
3.2.1. De rol van de EG-inventaris bij de inwerkingtreding van REACH 22
3.2.2. De lijstnummers na de inwerkingtreding van REACH 22
3.3. Vereisten voor stofidentificatie in REACH en CLP 23
4. Richtsnoer voor stofidentificatie en naamgeving in REACH en CLP 26
4.1. Inleiding 26
4.2. stoffen met een duidelijk gedefinieerde samenstelling 32
4.2.1. Stoffen met één bestanddeel 33
4.2.2. Stoffen met meerdere bestanddelen 35
4.2.3. Stoffen met gedefinieerde chemische samenstelling en andere hoofdidentificaties 38
4.3. UVCB-stoffen 40
4.3.1. Algemene begeleiding voor UVCB-stoffen 40
4.3.2. Specifieke typen UVCB-stoffen 50
5. Criteria om te controleren of stoffen identiek zijn 58
6. Stofidentiteit binnen (LATE) preregistratie en informatieverzoek 65
6.1. (LATE) preregistratie 65
6.2. Informatieverzoek 65
7. Voorbeelden 66
7.1. Di-ethylperoxydicarBonaat 66
7.2. ZOLIMIDINE 67
7.3. Mengsel van isomeren 67
7.4. Geurstof AH 71
7.5. Mineralen 78
7.6. Etherische olie van Lavandin grosso 81
7.7. Chrysantenolie en daaruit geïsoleerde isomeren 87

7.8. Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat 91
7.9. Quaternaire ammoniumverbindingen 93
7.10. Petroleumstoffen 97
7.10.1. Benzinemengstroom (C4-C12) 97
7.10.2. Gasoliën (petroleum) 99
7.11. Enzymen 99
7.11.1. Subtilisine 100
7.11.2. α-Amylase 101
Aanhangsel I - Begeleidingsinstrumenten 103
Aanhangsel II – Technisch richtsnoer per stofidentificatieparameter 107

Tabellen

Tabel 2.1: Afkortingen 14
Tabel 2.2 Definities 17
Tabel 3.1: Parameters voor stofidentificatie in punt 2 van bijlage VI van REACH 25
Tabel 4.1: Groepering van belangrijkste identificaties voor voorbeelden die verschillende typen duidelijk gedefinieerde vergelijkbare stoffen vertegenwoordigen 27
Tabel 4.2 :Groepering van voornaamste identificaties voor voorbeelden die verschillende typen UVCB-stoffen vertegenwoordigen 28
Figuur 4.1: Hulpmiddel voor het vinden van subparagrafen en aanhangsels voor passende begeleiding met betrekking tot verschillende typen stoffen 31
Voorbeelden van mineralen 80

1. Algemeen

Door de REACH-verordening (Verordening (EG) nr. 1907/2006) is een stelsel voor de registratie, beoordeling, autorisatie en beperking van chemische stoffen in het leven geroepen en is het Europees Agentschap voor chemische stoffen (ECHA) opgericht om deze verordening ten uitvoer te leggen.[1]

De CLP-verordening (Verordening (EG) nr. 1272/2008) is de nieuwe Europese verordening betreffende de indeling, etikettering en verpakking van stoffen en mengsels.[2] De wetgeving introduceert in de hele EU een nieuw systeem voor de indeling en etikettering van chemische stoffen, dat is gebaseerd op het mondiale geharmoniseerde systeem van de Verenigde Naties (UN GHS).

De REACH-verordening is gericht op stoffen. Om ervoor te zorgen dat de REACH-procedures correct verlopen, is correcte en ondubbelzinnige identificatie van stoffen essentieel. Dit richtsnoer over de identificatie en naamgeving van stoffen is bedoeld om de industrie, de lidstaten en het Europees Agentschap voor chemische stoffen te ondersteunen.

Dit richtsnoer is gebaseerd op de ervaringen met stofidentificatie binnen de vorige wetgeving inzake chemische stoffen (Richtlijn 67/548/EEG en Richtlijn 98/8/EG). De huidige praktijken met betrekking tot stofidentiteit volgens de REACH-verordening en de Verordening betreffende de indeling, etikettering en verpakking van stoffen en mengsels (CLP) vormen echter de basis voor de verfijning van dit richtsnoer. Daarnaast is er, waar gepast, ook rekening gehouden met benaderingen uit andere regelingen met betrekking tot chemische stoffen buiten de Europese Unie.

Er is begeleiding op maat voor verschillende typen stoffen opgenomen.

Dit richtsnoer moet worden toegepast voor de identificatie en naamgeving van stoffen waarop de REACH- en de CLP-verordening van toepassing zijn.

1.1. Doelstellingen

De doelstelling van dit richtsnoer is fabrikanten en importeurs begeleiden bij het vastleggen en melden van de identiteit van een stof in de context van REACH en CLP. Het richtsnoer begeleidt ook bij de naamgeving van de stof, een cruciaal element van de stofidentificatie. Ook bevat het leidraden om te bepalen of stoffen als identiek kunnen worden gezin in de context van REACH en CLP. Het identificeren van identieke stoffen is belangrijk voor het proces van (late) preregistratie van geleidelijk geïntegreerde stoffen, voor het inwinnen van informatie, voor gezamenlijk gebruik van gegevens, voor gezamenlijke indiening van gegevens, voor kennisgeving ten behoeve van de inventaris van indelingen en etiketteringen en voor de harmonisatie van indeling en etikettering.

De identificatie van stoffen moet bij voorkeur worden uitgevoerd door deskundigen uit de industrie. Voor die partijen binnen de industrie die weinig expertise hebben op het gebied van stofidentificatie is er extra begeleiding voor de identificatieparameters opgenomen als

---

[1] Verordening (EG) nr. 1907/2006 van het Europees Parlement en de Raad van 18 december 2006 inzake de registratie en beoordeling van en de autorisatie en beperkingen ten aanzien van chemische stoffen (REACH), tot oprichting van een Europees Agentschap voor chemische stoffen, houdende wijziging van Richtlijn 1999/45/EG en houdende intrekking van Verordening (EEG) nr. 793/93 van de Raad en Verordening (EG) nr. 1488/94 van de Commissie alsmede Richtlijn 76/769/EEG van de Raad en de Richtlijnen 91/155/EEG, 93/67/EEG, 93/105/EG en 2000/21/EG van de Commissie ("REACH").

[2] Verordening (EG) nr. 1272/2008 van het Europees Parlement en de Raad van 16 december 2008 betreffende de indeling, etikettering en verpakking van stoffen en mengsels tot wijziging en intrekking van de Richtlijnen 67/548/EEG en 1999/45/EG en tot wijziging van Verordening (EG) nr. 1907/2006 (Voor de EER relevante tekst) ("CLP").

aanhangsel bij dit richtsnoer.

Daarnaast geeft dit richtsnoer een aantal links naar relevante hulpmiddelen ter ondersteuning van de karakterisering en voor het controleren van de chemische identiteit van een stof.

Gedetailleerdere instructies voor het in IUCLID invoeren van informatie over de stofidentiteit, in de context van verschillende procedures volgens REACH en CLP, worden verstrekt in de handleidingen van ECHA die u kunt vinden op de website http://echa.europa.eu/manuals.

1.2. Toepassingsgebied

Volgens artikel 1 van REACH is de verordening van toepassing op de vervaardiging, het in de handel brengen en het gebruik van stoffen als zodanig of in mengsels of voorwerpen. Mengsels en voorwerpen als zodanig worden niet gereguleerd door REACH.

In overeenstemming met artikel 10 van REACH moet voor een registratie de stofidentiteit worden vermeld volgens de parameters die zijn gespecificeerd in punt 2 van bijlage VI van REACH (zie **tabel 3.1**). Soortgelijke parameters (zoals gespecificeerd in de punten 2.1 tot en met 2.3.4 van bijlage VI van REACH) zijn vereist voor het vermelden van de stofidentiteit ten behoeve van de kennisgeving in overeenstemming met artikel 40, lid 1 van CLP. Dit richtsnoer is gericht op correcte identificatie van stoffen die onder de wettelijke definitie van een stof in REACH en CLP vallen en geeft begeleiding bij de stofidentificatieparameters van punt 2 van bijlage VI van REACH. De verstrekte informatie over de stofidentiteit moet voldoende zijn om elke stof te identificeren. Een of meer van de stofidentificatieparameters kunnen worden weggelaten als het technisch niet mogelijk is of uit wetenschappelijk oogpunt niet noodzakelijk lijkt om de verzochte informatie te verstrekken. De redenen voor dergelijke weglatingen moeten duidelijk worden vermeld en moeten gebaseerd zijn op een wetenschappelijke motivering.

De aanpak voor het identificeren van een stof is afhankelijk van het type stof. De gebruiker van dit richtsnoer wordt daarom voor verschillende typen stoffen naar specifieke hoofdstukken verwezen.

De EG-inventarissen die worden gebruikt in het kader van Richtlijn 67/548/EEG (Einecs, Elincs en de NLP-lijst) zijn belangrijke hulpmiddelen voor de stofidentificatie. Meer informatie over de rol van deze inventarissen binnen REACH is te vinden in paragraaf 3.2.

Stoffen die binnen het toepassingsgebied van REACH en CLP (en daarmee ook binnen het toepassingsgebied van dit richtsnoer) vallen, zijn doorgaans het resultaat van chemische reacties die deel uitmaken van de vervaardiging van de stof en kunnen meerdere afzonderlijke bestanddelen bevatten. Tot de stoffen, zoals gedefinieerd in REACH en CLP, behoren ook stoffen die chemisch zijn afgeleid van of geïsoleerd uit in de natuur voorkomende materialen, die kunnen bestaan uit een enkel element of molecule (bijv. zuivere metalen of bepaalde mineralen) of verschillende bestanddelen (bijv. etherische oliën, mattes die worden gevormd als sulfide-ertsen worden gesmolten). Stoffen die onder ander communautaire wetgeving vallen zijn echter in een aantal gevallen vrijgesteld van registratie volgens REACH (zie artikel 2 van REACH). Ook stoffen die zijn vermeld in bijlage IV van REACH en stoffen die voldoen aan bepaalde criteria die zijn gespecificeerd in bijlage V van REACH zijn vrijgesteld van registratie. Hierbij moet worden opgemerkt dat een stof die is vrijgesteld van registratie niet noodzakelijkerwijs ook is vrijgesteld van andere titels van de REACH-verordening of van de vereisten van de CLP-verordening.

1.3. Structuur van het richtsnoer

Achtergrondinformatie, zoals de doelstellingen en het toepassingsgebied van dit richtsnoer, zijn te vinden in hoofdstuk 1 en de gebruikte afkortingen en definities in hoofdstuk 2.

Relevante informatie over het raamwerk voor stofidentificatie in REACH, bijvoorbeeld stofdefinitie en informatie-eisen in de wetstekst, is te vinden in hoofdstuk 3.

De praktische richtsnoeren met betrekking tot stofidentificatie en naamgeving vindt u in hoofdstuk 4.

- Paragraaf 4.1 beschrijft het onderscheid tussen 'duidelijk gedefinieerde' en 'gebrekkig gedefinieerde' stoffen en binnen deze twee hoofdgroepen kunnen verschillende stoftypen worden onderscheiden met hun eigen specifieke begeleiding voor stofidentificatie. Er is een diagram weergegeven om de gebruiker de weg te wijzen naar de juiste subparagraaf met begeleiding voor de identificatie van het specifieke type stof.

- In de daarop volgende paragrafen wordt specifieke begeleiding gegeven voor elk stoftype, in de vorm van een set regels met uitleg en voorbeelden.

Hoofdstuk 5 geeft begeleiding om na te gaan of stoffen als identiek mogen worden gezien. Begeleiding met betrekking tot stofidentiteit binnen de procedures voor (late) preregistratie en het inwinnen van informatie is te vinden in hoofdstuk 6.

Verder zijn in hoofdstuk 7 enkele gedetailleerde voorbeelden uitgewerkt aan de hand van de praktische richtsnoeren van hoofdstuk 4.

Aanhangsel I geeft een aantal links naar relevante hulpmiddelen ter ondersteuning van de karakterisering en voor het controleren van de chemische identiteit van een stof.

Aanhangsel II levert meer achtergrondinformatie over de individuele parameters voor stofidentificatie die worden gebruikt bij de stofidentificatieprocedure, zoals de nomenclatuurregels, EG-nummers en CAS-nummers, notaties van de molecuulformule en structuurformule en analytische methoden.

2. Definities en afkortingen

2.1. Afkortingen

De belangrijkste afkortingen die in dit richtsnoer worden gebruikt, zijn weergegeven en uitgelegd in **tabel 2.1**.

Tabel 2.1: Afkortingen

Afkorting	Betekenis
AAS	Atoomabsorptiespectroscopie
AISE	International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products (internationale associatie voor zeep-, reinigings- en onderhoudsproducten)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Verordening (EG) nr. 1272/2008 betreffende de indeling, etikettering en verpakking van stoffen en mengsels
EC	Europese Commissie
Einecs	European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances; Europese inventaris van bestaande chemische handelsstoffen
Elincs	European List of Notified Chemical Substances; Europese lijst van stoffen waarvan kennisgeving is gedaan
ENCS	Existing and New Chemical Substances (bestaande en nieuwe chemische stoffen) (Japan)
ESIS	European chemical Substances Information System; Europees informatiesysteem voor chemische stoffen
EU	Europese Unie
GC	Gaschromatografie
GHS	Globally Harmonised System; mondiaal geharmoniseerd systeem
HPLC	High performance liquid chromatography; hogedrukvloeistofchromatografie
InChI	IUPAC International Chemical Identifier (internationale chemische identificatie IUPAC)
INCI	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients (internationale nomenclatuur van cosmetica-ingrediënten)
IR	Infrarood
ISO	Internationale Organisatie voor Standaardisatie
IUBMB	International Union of Biochemistry and Molecular Biology (internationale unie voor biochemie en moleculaire biologie)
IUCLID	International Uniform ChemicaL Information Database (Internationale databank voor uniforme informatie over chemische stoffen)
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry; Internationale Unie voor zuivere en toegepaste scheikunde
MS	Massaspectroscopie

NLP	Niet langer polymeer
NMR	Nucleaire magnetische resonantie
ppm	Parts per million; deeltjes per miljoen
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals; registratie en beoordeling van en autorisatie en beperkingen ten aanzien van chemische stoffen
SIEF	Substance Information Exchange Forum; informatie-uitwisselingsforum voor stoffen
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification
TSCA	Toxic Substances Control Act (Verenigde Staten)
UV/VIS	Ultra violet/visible (ultraviolet zichtbaar)
UVCB	Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials; stof met een onbekende of variabele samenstelling, complexe reactieproducten en biologische materialen
w/w	Weight by weight; gewichtspercent
XRD	X-Ray Diffraction; röntgendiffractie
XRF	X-Ray Fluorescence; röntgenfluorescentie

2.2. Definities

De belangrijkste definities die in dit richtsnoer worden gebruikt, zijn weergegeven en toegelicht in **tabel 2.2**.

Bij deze definities is rekening gehouden met de definities die zijn gebruikt in de REACH- en de CLP-verordening. Daarom zijn sommige termen anders gedefinieerd dan we gewend waren op grond van Richtlijn 67/548/EEG.

Tabel 2.2 Definities

Term	Definitie
Aangemelde stof	Een stof waarvan kennisgeving is gedaan en die in de handel kan worden gebracht overeenkomstig Richtlijn 67/548/EEG.
Additief	Een stof die met opzet is toegevoegd om de stof te stabiliseren[3].
Bestanddeel	Elke aanwezigheid in een stof die kan worden gekarakteriseerd door zijn unieke chemische identiteit.
Chromatografische vingerafdruk	Weergave van de samenstelling van een stof op basis van de kenmerkende verdeling van de bestanddelen in een analytisch chromatogram.
Component	Stof die met opzet wordt toegevoegd om een mengsel te vormen.
EG-inventaris	Hoewel niet wettelijk gedefinieerd in de REACH-verordening, is de EG-inventaris een combinatie van drie onafhankelijke en wettelijke goedgekeurde Europese lijsten van stoffen van eerdere regelgevingskaders voor chemische stoffen van de EU: Einecs, Elincs en de NLP-lijst (niet langer polymeren). De vermeldingen in de EG-inventaris bestaan uit een chemische naam en een nummer (EG-naam en EG-nummer), een CAS-nummer, molecuulformule (indien beschikbaar) en beschrijving (voor bepaalde typen stoffen).
EG-nummer	Het EG-nummer is de numerieke identificatie voor stoffen in de EG-inventaris.

[3] In andere situaties kan een additief ook andere functies hebben, bijv. zuurteregelaar of kleurstof. In de REACH-verordening en in dit richtsnoer is een additief echter een stabilisator.

Term	Definitie
Geleidelijk geïntegreerde stof*	Een stof die ten minste aan een van de volgende criteria voldoet: (a) de stof is opgenomen in de Europese inventaris van bestaande chemische handelsstoffen (Einecs); (b) b) de stof is vervaardigd in de Gemeenschap, of in de landen die op 1 januari 1995, 1 mei 2004, 1 januari 2007 of 1 juli 2013 tot de Europese Unie zijn toegetreden, maar niet door de fabrikant of de importeur ten minste eenmaal in de handel gebracht in de 15 jaar vóór de inwerkingtreding van deze verordening, mits dit door de fabrikant of importeur met schriftelijke bewijsstukken kan worden gestaafd; (c) c) de stof is in de Gemeenschap, of in de landen die op 1 januari 1995, 1 mei 2004, 1 januari 2007 of 1 juli 2013 tot de Europese Unie zijn toegetreden, in de handel gebracht door de fabrikant of importeur vóór de inwerkingtreding van deze verordening en zij werd beschouwd als een stof waarvan kennisgeving was gedaan overeenkomstig het eerste streepje van artikel 8, lid 1, van Richtlijn 67/548/EEG, in de versie van artikel 8, lid 1, die voortvloeit uit de wijziging aangebracht bij Richtlijn 79/831/EEG, maar de stof voldoet niet aan de definitie van een polymeer zoals bepaald in de onderhavige verordening, mits dit door de fabrikant of importeur met schriftelijke bewijsstukken kan worden gestaafd, waaronder bewijsstukken waaruit blijkt dat de stof door enige fabrikant of importeur in de handel is gebracht tussen 18 september 1981 en 31 oktober 1993 (laatste dag inbegrepen).
Hoofdbestanddeel	Een bestanddeel in een stof, niet zijnde een additief of een onzuiverheid, dat een significant deel vormt van die stof en derhalve wordt gebruikt bij de naamgeving van de stof en gedetailleerde stofidentificatie.
IUCLID	Internationale databank voor uniforme informatie over chemische stoffen. IUCLID is een databank en beheerssysteem voor de administratie van gegevens over chemische stoffen.
Lijstnummer	Automatisch door REACH-IT toegekend nummer. Van toepassing op alle binnenkomende geldige indieningen (bijv. preregistraties, PPORD, informatieverzoeken, registraties, kennisgevingen van indeling en etikettering). Een lijstnummer heeft geen wettelijke relevantie en wordt alleen gebruikt als een technische identificatie voor het beheren van indieningen binnen ECHA.
Mengsel*	Een mengsel of oplossing bestaande uit twee of meer stoffen.
Metaallegering*	Een macroscopisch homogeen metaal dat bestaat uit twee of meer chemische elementen die dusdanig met elkaar zijn verbonden dat zij niet vlot via mechanische middelen kunnen worden gescheiden. Metaallegeringen worden als speciale mengsels gezien.
Monomeer*	Een stof die covalente bindingen kan vormen door herhaalde koppeling van soortgelijke of ongelijke moleculen onder de voorwaarden van de voor dat proces gebruikte polymerisatiereactie.

Term	Definitie
Niet chemisch gewijzigde stof*	Stof waarvan de chemische structuur ongewijzigd blijft ook al heeft hij een chemisch proces, een chemische behandeling of een fysische mineralogische transformatie ondergaan, bijvoorbeeld ter verwijdering van onzuiverheden.
Niet-geleidelijk geïntegreerde stof	Een stof waarvoor registratie vereist is en waarvoor geen gebruik mag worden gemaakt van de overgangsregeling die REACH mogelijk maakt voor geleidelijk geïntegreerde stoffen.
Onzuiverheid	Een onbedoeld bestanddeel dat aanwezig is in een stof zoals die is vervaardigd. Dit kan afkomstig zijn uit de uitgangsmaterialen of het resultaat zijn van secundaire of onvolledige reacties tijdens het vervaardigingsprocedé. Hoewel het aanwezig is in de uiteindelijke stof, is het niet opzettelijk toegevoegd.
Polymeer*	Een stof die bestaat uit moleculen die worden gekenmerkt door een opeenvolging van een of meer soorten monomeereenheden. Die moleculen moeten over een reeks molecuulgewichten verdeeld zijn, waarbij de verschillen in molecuulgewicht in de eerste plaats het gevolg zijn van verschillen in het aantal monomeereenheden. Een polymeer bevat het volgende: (a) een gewichtsmeerderheid van moleculen die bestaan uit ten minste drie monomeereenheden die op covalente wijze aan ten minste een andere monomeereenheid of andere reactieve stof zijn gebonden; (b) minder dan een gewichtsmeerderheid aan moleculen van hetzelfde molecuulgewicht. In deze definitie betekent "monomeereenheid" de gereageerde vorm van een monomeer in een polymeer.
Stof die in de natuur voorkomt*	Van nature voorkomende stof als zodanig, onbewerkt of enkel bewerkt met de hand, met mechanische hulpmiddelen of met behulp van de zwaartekracht; door oplossing in water, door extractie met water, door stoomdistillatie, door flotatie of door verhitting uitsluitend om water te onttrekken, of die met enig hulpmiddel aan de lucht wordt onttrokken.
Stof met één bestanddeel	In de regel een stof, gedefinieerd op basis van zijn samenstelling, waarvan één hoofdbestanddeel ten minste 80 procent uitmaakt (w/w).
Stof met meerdere bestanddelen	In de regel een stof, gedefinieerd op basis van zijn samenstelling, waarin meer dan één hoofdbestanddeel aanwezig is in een concentratie van ☐10% (w/w) en < 80% (w/w).
Stof*	Een chemisch element en de verbindingen ervan, zoals zij voorkomen in natuurlijke toestand of bij de vervaardiging ontstaan, met inbegrip van alle additieven die nodig zijn voor het behoud van de stabiliteit ervan en alle onzuiverheden ten gevolge van het toegepaste procedé, doch met uitzondering van elk oplosmiddel dat kan worden afgescheiden zonder dat de stabiliteit van de stof wordt aangetast of de samenstelling ervan wordt gewijzigd.

Term	Definitie
Tussenproduct*	Een stof die vervaardigd wordt voor en verbruikt wordt in of gebruikt wordt voor een chemische reactie, om omgezet te worden in een andere stof (hierna *synthese* genoemd): (a) niet-geïsoleerd tussenproduct: een tussenproduct dat tijdens de synthese niet opzettelijk wordt verwijderd (behalve voor bemonstering) uit de apparatuur waarin de synthese plaatsvindt. Deze apparatuur omvat het reactievat, de bijbehorende apparatuur en alle apparatuur waar de stof of stoffen tijdens een continue stroming of een batchprocedé doorheen gaan alsook het buizenstelsel voor de overbrenging van het ene vat naar het andere ten behoeve van de volgende reactiestap, maar omvat niet de tanks of andere vaten waarin de stof of stoffen na de vervaardiging worden bewaard; (b) locatiegebonden geïsoleerd tussenproduct: een tussenproduct dat niet aan de criteria van een niet-geïsoleerd tussenproduct voldoet en dat wordt vervaardigd op de locatie waar een of meer andere stoffen uit dat tussenproduct worden gesynthetiseerd, door een of meer rechtspersonen; (c) vervoerd geïsoleerd tussenproduct: een tussenproduct dat niet aan de criteria van een niet-geïsoleerd tussenproduct voldoet en dat wordt vervoerd tussen of wordt geleverd aan andere locaties.
Vervaardiging*	Productie of extractie van stoffen in natuurlijke toestand.
Voorwerp*	Een object waaraan tijdens de productie een speciale vorm, oppervlak of patroon wordt gegeven waardoor zijn functie in hogere mate wordt bepaald dan door zijn chemische samenstelling.

* Definities volgens artikel 3 van REACH.

3. Raamwerk voor stofidentificatie in REACH en CLP

REACH en CLP bevatten een definitie van een stof en REACH vermeldt de parameters voor stofidentificatie (bijlage VI, punt 2) die moeten worden opgenomen om een stof te identificeren ten behoeve van registratie.

In dit hoofdstuk wordt de definitie van stof in REACH en CLP beschreven (paragraaf 3.1), een algemene leidraad gegeven voor het gebruik van de EG-inventaris van het eerdere regelgevingskader voor chemische stoffen (paragraaf 3.2) en meer achtergrondinformatie gegeven over de eisen voor stofidentificatie die zijn gespecificeerd in REACH (paragraaf 3.3).

3.1. Definitie van stof

Een stof is in REACH (artikel 3, lid 1) en in CLP (artikel 2, lid 7) als volgt gedefinieerd:

Een stof is een chemisch element en de verbindingen ervan, zoals zij voorkomen in natuurlijke toestand of bij de vervaardiging ontstaan, met inbegrip van alle additieven die nodig zijn voor het behoud van de stabiliteit ervan en alle onzuiverheden ten gevolge van het toegepaste procedé, doch met uitzondering van elk oplosmiddel dat kan worden afgescheiden zonder dat

de stabiliteit van de stof wordt aangetast of de samenstelling ervan wordt gewijzigd.

De definitie van een stof in REACH en CLP is identiek aan de definitie van een stof die werd gebruikt in de zevende wijziging van de Richtlijn gevaarlijke stoffen (Richtlijn 92/32/EEG tot wijziging van Richtlijn 67/548/EEG). In beide gevallen gaat de definitie verder dan een zuivere chemische verbinding die wordt gedefinieerd door één enkele moleculaire structuur. De definitie van de stof omvat verschillende bestanddelen zoals onzuiverheden.

3.2. EG-inventaris

Er zijn drie afzonderlijke inventarissen in het leven geroepen door het vorige regelgevingskader voor chemische stoffen. Dit zijn de Europese inventaris van bestaande chemische handelsstoffen (Einecs), de Europese lijst van stoffen waarvan kennisgeving is gedaan (Elincs) en de lijst van niet langer polymeren (NLP).

Stoffen die op de Europese markt waren tussen 1 januari 1971 en 18 september 1981 zijn opgenomen in de Europese inventaris van bestaande chemische handelsstoffen (Einecs)[4], [5], [6].

Deze inventaris bevat ongeveer 100 000 stoffen die zijn geïdentificeerd met een chemische naam (en een beschrijving voor bepaalde typen stoffen), een CAS-nummer en een nummer van zeven cijfers dat het Einecs-nummer wordt genoemd. Einecs-nummers beginnen altijd met een 2 of een 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Stoffen die zijn aangemeld bij Einecs hebben een verificatiestap doorlopen om de opname van de stof in de inventaris te rechtvaardigen.

Stoffen die na 18 september 1981 zijn aangemeld en in de handel zijn gebracht, zijn vermeld op de Europese lijst van stoffen waarvan kennisgeving is gedaan (Elincs).5 Deze inventaris (lijst) bevat alle stoffen die zijn aangemeld tot 31 mei 2008 in overeenstemming met Richtlijn 67/548/EEG en de wijzigingen daarvan. Deze stoffen zijn de zogenoemde ‘nieuwe stoffen’, aangezien ze niet voor 18 september 1981 op de communautaire markt waren. Na een controle door de bevoegde autoriteiten van de lidstaten (Member States Competent Authorities, MSCA’s) werd door de Europese Commissie een Elincs-nummer aan een stof toegekend. Anders dan in Einecs bevatten de vermeldingen in Elincs geen CAS-nummer, maar het door de MSCA toegekende kennisgevingsnummer, de handelsnaam (indien beschikbaar), de indeling en de IUPAC-naam voor ingedeelde stoffen. De Elincs-nummers tellen ook zeven cijfers en beginnen altijd met een 4 (4xx-xxx-x).

Polymeren konden niet worden aangemeld bij Einecs en waren gebonden aan speciale regels op grond van Richtlijn 67/548/EEG[7] [8]. De term 'polymeer' werd verder gedefinieerd in de zevende wijziging van Richtlijn 67/548/EEG (Richtlijn 92/32/EEG). Als gevolg van de tenuitvoerlegging van deze definitie werden sommige stoffen die volgens de aanmeldingsregels

---

[4] Einecs is gebaseerd op de Europese kerninventaris (**E**uropean **CO**re **IN**ventory, ECOIN) waaraan aanvullende aanmeldingen van stoffen konden worden gedaan door de industrie (volgens criteria voor het aanmelden van stoffen voor Einecs). ECOIN was ontstaan door de samenvoeging van verschillende lijsten van chemische stoffen waarvan werd aangenomen dat ze op de Europese markt werden verhandeld (bijv. TSCA). Einecs werd gepubliceerd op 15 juni 1990 en bevatte meer dan 100 000 stoffen. Gedurende het gebruik van de inventaris werd een aantal fouten gesignaleerd (drukfouten, bijv. onjuiste chemische naam, formule of CAS RN). Daarom werd er op 1 maart 2002 een rectificatie gepubliceerd.

[5] ECB (2005) Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/EEC (Directives 79/831/EEC and 92/32/EEC), niet-vertrouwelijke versie. EUR 20519 EN. Bijgewerkte versie van juni 2005.

[6] Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) The Einecs Inventory of existing chemical substances on the EC market. Tox Env Chem Vol. 37, blz. 21-33.

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

[8] Rasmussen, K., Christ, G. en Davis, J.B. (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. Tox Env Chem Vol. 67, blz. 251-261.

voor Einecs werden gezien als polymeren op grond van de zevende wijzing *niet langer* gezien als polymeren. Aangezien er voor alle stoffen die niet zijn opgenomen in Einecs een meldingsplicht was, moesten alle "*niet langer polymeren*" (NLP's) in theorie aangemeld zijn. De Raad van Ministers maakte echter duidelijk dat deze niet langer polymeren niet met terugwerkende kracht gebonden moesten worden aan meldingsplicht. De Commissie werd verzocht een lijst van niet langer polymeren op te stellen (de NLP-lijst). Op deze lijst moesten de stoffen worden opgenomen die in de EU in de handel waren tussen 18 september 1981 (de datum van inwerkingtreding van Richtlijn 79/831/EEG, de zesde wijziging van Richtlijn 67/548/EEG) en 31 oktober 1993 (de datum van inwerkingtreding van Richtlijn 92/32/EEG, de zevende wijziging van Richtlijn 67/548/EEG) en die voldeden aan de eis dat ze gezien werden als polymeren volgens de meldingsregels voor Einecs maar niet langer als polymeren werden gezien volgens de zevende wijziging. De NLP-lijst is een niet-limitatieve lijst. De stoffen op de NLP-lijst zijn geïdentificeerd met een chemische naam, een CAS-nummer en een nummer van zeven cijfers dat het NLP-nummer wordt genoemd. Een NLP-nummer begint altijd met een 5 (5xx-xxx-x).

Deze drie lijsten met stoffen, Einecs, Elincs en de NLP-lijst, worden samen de EG-inventaris genoemd. Elke stof in deze inventaris heeft een EG-nummer dat is toegekend door de Europese Commissie (zie gedetailleerde informatie over het EG-nummer in aanhangsel II).

Informatie over deze stoffen kan worden verkregen via de website van het Europees Agentschap voor chemische stoffen (http://echa.europa.eu/nl/information-on-chemicals/ec-inventory), waarop ook een inventaris van geregistreerde stoffen wordt bijgehouden en gepubliceerd (http://echa.europa.eu/nl/information-on-chemicals/registered-substances).

3.2.1. De rol van de EG-inventaris bij de inwerkingtreding van REACH

De EG-inventaris kan door fabrikanten en importeurs als hulpmiddel worden gebruikt om te bepalen of een stof een geleidelijk geïntegreerde of een niet-geleidelijk geïntegreerde stof is. Op die manier helpt de EG-inventaris fabrikanten en importeurs na te gaan *wanneer* de registratie van een stof vereist is en of een (late) preregistratie of het inwinnen van informatie noodzakelijk is.

De REACH-verordening beschrijft verschillende procedures voor de registratie van en het gezamenlijk gebruik van gegevens over 'bestaande' ('geleidelijk geïntegreerde') stoffen (zoals gedefinieerd in artikel 3, lid 20) en 'nieuwe' ('niet-geleidelijk geïntegreerde') stoffen.[9]

Als een stof al was aangemeld in overeenstemming met Richtlijn 67/548/EEG en dus vermeld is in Elincs, moet de ingediende kennisgeving worden gezien als een registratie voor de toepassing van REACH (artikel 24). Deze stoffen worden geacht al geregistreerd te zijn door de betreffende fabrikant of importeur die de kennisgeving heeft gedaan en vereisen geen initiële registratie van deze fabrikant/importeur. De fabrikant/importeur is echter wel verplicht de registratie up-to-date te houden. Aanvullende fabrikanten/importeurs van een stof die is opgenomen in Elincs (en niet onder de eerdere kennisgeving(en) valt) zijn verantwoordelijk voor de registratie (als niet-geleidelijk geïntegreerde stof) en voor het gezamenlijk gebruik van gegevens met de eerdere registrant. Meer begeleiding met betrekking tot dit onderwerp is te vinden in het Richtsnoer voor registratie, dat beschikbaar is op de ondersteuningswebsite van ECHA op http://echa.europa.eu/nl/guidance-documents/guidance-on-reach.

3.2.2. De lijstnummers na de inwerkingtreding van REACH

Bij het opzetten van het REACH-IT-systeem was ECHA van mening dat het goed was om

[9] Definities van 'geleidelijk geïntegreerde' en 'niet-geleidelijk geïntegreerde' stoffen vindt u in het *Richtsnoer voor registratie*.

automatisch een nummer toe te kennen aan stoffen in alle binnenkomende technisch volledige indieningen (preregistraties, PPORD, informatieverzoeken, registraties, kennisgevingen van indeling en etikettering, enz.) waarvoor geen EG-nummer was gespecificeerd (zie de criteria voor de toekenning van de lijstnummers hieronder). Dit heeft het beheer, de verdere verwerking en de identificatie van de stoffen in deze indieningen technisch eenvoudiger gemaakt. Deze zogenoemde 'lijstnummers' hebben dezelfde numerieke indeling als Einecs-, Elincs- en NLP-nummers, maar ze beginnen met andere cijfers.

In tegenstelling tot Einecs-, Elincs- en NLP-vermeldingen zijn de lijstnummers niet gebaseerd op een wettelijke eis en zijn ze niet gepubliceerd in het Publicatieblad van de Europese Unie. De lijstnummers hebben daarom niet hetzelfde belang als de EG-nummers en hebben daarmee alleen de numerieke indeling gemeen. Ze zijn uitsluitend van belang voor de administratie, niet voor de regelgeving. Het belangrijkste is dat de grote meerderheid van de lijstnummers en de daaraan gekoppelde stofidentificatie nooit is gecontroleerd op juistheid, geldigheid en naleving van de in dit richtsnoer beschreven conventies.

Om die reden was het aanvankelijk niet de bedoeling om de lijstnummers openbaar bekend te maken voordat ze waren gecontroleerd door ECHA. Maar omdat er tijdens de preregistratieperiode ongeveer 40 000 stoffen zonder een EG-nummer werden gepreregistreerd, heeft ECHA besloten de lijstnummers te publiceren in de lijst met gepreregistreerde stoffen om de vorming van SIEF's te vergemakkelijken.

Hierbij moet worden benadrukt dat het mogelijk is dat er verschillende lijstnummers zijn toegekend aan dezelfde stof als er verschillende identificaties (bijv. namen) voor deze stof zijn gebruikt. Als gevolg daarvan is het ook mogelijk dat er een lijstnummer is toegekend aan een in Einecs, Elincs of NLP vermelde stof als in een indiening bij ECHA via REACH-IT een stofnaam is gebruikt die afwijkt van die in de EG-inventaris.

De lijstnummers beginnen altijd met een 6, 7, 8 of 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

Een stof die in het dossier/de indiening is geïdentificeerd met een CAS-nummer dat niet is gekoppeld aan een EG-nummer of een ander lijstnummer dat al is toegekend door ECHA, krijgt een lijstnummer dat begint met een 6 of 8.

Een stof waarvan alleen een naam is vermeld in het dossier, die niet kan worden gekoppeld aan een naam in de EG-inventaris of een lijstnaam, krijgt een lijstnummer dat begint met een 9.

De lijstnummers die beginnen met een 7 worden toegekend tijdens het inwinnen van informatie (artikel 26 van REACH) na de verificatie van de stofidentificatie. Deze vermeldingen hebben een betrouwbare en gecontroleerde stofidentiteit.

Het is belangrijk om op te merken dat voor sommige Einecs-vermeldingen de beschrijving van de stof relatief breed is en mogelijk van toepassing zou kunnen zijn op meer dan één stofidentiteit volgens artikel 3, lid 1 van REACH. In dergelijke gevallen wordt de potentiële registrant uitgenodigd de betreffende stof nauwkeuriger te beschrijven (bijv. met de IUPAC-naam of andere identificaties). Om de status van geleidelijk geïntegreerde stof aan te tonen, moet de registrant echter aangeven bij welke Einecs-vermelding de stof hoort. In zulke gevallen bepaalt het Europees Agentschap voor chemische stoffen of het gepast is een lijstnummer aan de betreffende stof toe te kennen.

3.3. Vereisten voor stofidentificatie in REACH en CLP

Volgens de REACH-verordening moet een registratie, als die vereist is, informatie bevatten over de identificatie van de stof zoals gespecificeerd in punt 2 van bijlage VI. Deze informatie moet nauwkeurig zijn en voldoende om identificatie van elke stof mogelijk te maken. Als het technisch niet mogelijk is of vanuit wetenschappelijk oogpunt niet noodzakelijk lijkt om

informatie te geven over een of meer van de parameters voor stofidentificatie, moeten de redenen hiervoor duidelijk worden vermeld, zoals aangegeven in opmerking 1 in bijlage VI.

Op dezelfde manier moet volgens de CLP-verordening een kennisgeving, als die vereist is (artikel 40 van CLP), informatie bevatten over de stof zoals gespecificeerd in de punten 2.1 tot en met 2.3.4 van bijlage VI van REACH. Deze informatie moet voldoende zijn om identificatie van elke stof mogelijk te maken. Als het technisch niet mogelijk is of vanuit wetenschappelijk oogpunt niet noodzakelijk lijkt om informatie te geven over een of meer van de parameters voor stofidentificatie, moeten de redenen hiervoor duidelijk worden vermeld, zoals aangegeven in opmerking 1 in bijlage VI.

Een overzicht van de parameters voor stofidentificatie in bijlage VI van REACH vindt u in **tabel 3.1**.

Tabel 3.1: Parameters voor stofidentificatie in punt 2 van bijlage VI van REACH

	Parameters voor stofidentificatie in punt 2 van bijlage VI van REACH
2.	**IDENTIFICATIE VAN DE STOF** *Voor elke stof moet de verstrekte informatie voldoende zijn om de identificatie van elke stof mogelijk te maken. Als het technisch niet mogelijk is of vanuit wetenschappelijk oogpunt niet noodzakelijk lijkt om informatie te verstrekken over een of meer van de onderstaande punten, moeten de redenen daarvoor duidelijk worden vermeld.*
2.1	***Naam of andere identificatie van elke stof***
2.1.1	*Naam/namen in de IUPAC-nomenclatuur of andere internationale chemische naam/namen*
2.1.2	*Andere namen (gebruikelijke naam, handelsnaam, afkorting)*
2.1.3	*Einecs- of Elincs-nummer (indien beschikbaar en gepast)*
2.1.4	*CAS-naam en CAS-nummer (indien beschikbaar)*
2.1.5	*Andere identiteitscode (indien beschikbaar)*
2.2	***Informatie met betrekking tot molecuul- en structuurformule van elke stof***
2.2.1	*Molecuul- en structuurformule (inclusief SMILES-notatie, indien beschikbaar)*
2.2.2	*Informatie over optische activiteit en typische verhouding van (stereo)isomeer (indien van toepassing en passend)*
2.2.3	*Molecuulgewicht of molecuulgewichtbereik*
2.3.	***Samenstelling van elke stof***
2.3.1	*Mate van zuiverheid (%)*
2.3.2	*Aard van onzuiverheden, waaronder isomeren en bijproducten*
2.3.3	*Percentage (significante) hoofdonzuiverheden*
2.3.4	*Aard en orde van grootte (.....ppm, ...%) van eventuele additieven (bijv. stabilisatoren of inhibitoren)*
2.3.5	*Spectrale gegevens (ultraviolet, infrarood, nucleaire magnetische resonantie of massaspectrum)*
2.3.6	*Hogedrukvloeistofchromatogram, gaschromatogram*
2.3.7	*Beschrijving van de analytische methoden of de toepasselijke bibliografische referenties voor de identificatie van de stof en, indien van toepassing, voor de identificatie van onzuiverheden en additieven. Deze informatie moet voldoende zijn om de methoden reproduceerbaar te maken.*

4. Richtsnoer voor stofidentificatie en naamgeving in REACH en CLP

4.1. Inleiding

De regels voor de identificatie en naamgeving verschillen voor de verschillende typen stoffen. Om praktische redenen is dit richtsnoer zo gestructureerd dat de gebruiker voor elk type stof direct wordt doorverwezen naar de paragraaf waarin de bijbehorende begeleiding te vinden is. Daarom wordt hieronder enige uitleg gegeven over de verschillende typen stoffen en daarna volgt een sleutel die helpt de juiste paragraaf te vinden.

Stofidentificatie moet minimaal gebaseerd zijn op de parameters voor stofidentificatie die genoemd zijn in REACH, bijlage VI, punt 2 (zie **tabel 3.1**). Daarom moet elke stof worden geïdentificeerd met een combinatie van de toepasselijke identificatieparameters:

- De IUPAC- en/of andere naam en andere identificaties, bijv. CAS-nummer, EG-nummer (bijlage VI, punt 2.1);
- De molecuul- en structuurinformatie (bijlage VI, punt 2.2);
- De chemische samenstelling (bijlage VI, punt 2.3);

Een stof wordt volledig geïdentificeerd op basis van zijn chemische samenstelling, d.w.z. de chemische identiteit en het gehalte van elk bestanddeel van de stof. Hoewel een dergelijke eenvoudige identificatie voor de meeste stoffen mogelijk is, is zij voor bepaalde stoffen niet haalbaar of niet voldoende binnen het toepassingsgebied van REACH en CLP. In die gevallen is andere of aanvullende stofidentificatie-informatie vereist.

Stoffen kunnen dus in twee hoofdgroepen worden verdeeld:

1. ’Duidelijk gedefinieerde stoffen’: stoffen met een gedefinieerde kwalitatieve en kwantitatieve samenstelling die voldoende kan worden geïdentificeerd op basis van de identificatieparameters van bijlage VI, punt 2 van REACH.
2. 'UVCB-stoffen': stoffen met een onbekende of variabele samenstelling, complexe reactieproducten en biologische materialen. Deze stoffen kunnen niet voldoende worden geïdentificeerd met de bovengenoemde parameters.

Een variabele samenstelling wordt voor duidelijk gedefinieerde stoffen gespecificeerd door de boven- en ondergrens van het concentratiebereik of de concentratiebereiken van het hoofdbestanddeel of de hoofdbestanddelen. Voor UVCB-stoffen is de variabiliteit relatief groot en/of slecht te voorspellen.

Men erkent dat er grensgevallen zijn tussen duidelijk gedefinieerde stoffen (reactieproducten met veel bestanddelen, elk binnen een breed bereik) en UVCB-stoffen (reactieproducten met variabele en slecht voorspelbare samenstelling). De registrant dient zorg te dragen voor de meest passende identificatie van de stof.

De regels voor identificatie en naamgeving verschillen voor ‘duidelijk gedefinieerde stoffen’ met één hoofdbestanddeel en voor ‘duidelijk gedefinieerde stoffen’ met meer dan één hoofdbestanddeel. Voor de verschillende stoftypen die onder de verzamelnoemer ‘UVCB’ vallen, zijn verschillende identificatie- en naamgevingsregels beschreven.

In de **tabellen 4.1** en **4.2** zijn de voornaamste identificaties voor een aantal voorbeelden van verschillende typen stoffen weergegeven. Deze voorbeelden zijn zo gegroepeerd dat de overeenkomsten en verschillen met betrekking tot de stofidentificatie gemakkelijk herkenbaar zijn.

De **tabellen 4.1** en **4.2** vormen geen alomvattende lijst van alle mogelijke stoftypen. Deze groepering van stoffen op basis van identificatie- en naamgevingsregels mag niet worden

gezien als een officieel categoriseringssysteem voor stoffen, maar is bedoeld als een praktisch hulpmiddel om de specifieke regels goed toe te passen en de juiste begeleiding te vinden in dit richtsnoer.

Tabel 4.1: Groepering van belangrijkste identificaties voor voorbeelden die verschillende typen duidelijk gedefinieerde vergelijkbare stoffen vertegenwoordigen

Gemeenschappelijke eigenschappen	Voorbeelden of vertegenwoordigers	Voornaamste identificaties
Duidelijk gedefinieerde stoffen naar chemische samenstelling *[Paragraaf 4.2.]*	Stoffen met één bestanddeel, bijv. - benzeen (95%) - nikkel (99%) *[Subparagraaf 4.2.1]*	Chemische samenstelling: één hoofdbestanddeel ≥ 80%: - Chemische identiteit van het hoofdbestanddeel (chemische naam, CAS-nummer, EG-nummer, enzovoort) - Typische concentratie en boven- en ondergrens
	Stoffen met meerdere bestanddelen, bijv. gedefinieerde reactieproducten zoals Reactiemassa van 2-, 3-, en 4-chloortolueen (elk 30%) *[Subparagraaf 4.2.2]*	Chemische samenstelling: een mengsel (reactiemassa) van hoofdbestanddelen, elk tussen ≥10 - <80%: - Chemische identiteit van elk hoofdbestanddeel - Typische concentraties en boven- en ondergrens voor elk bestanddeel en voor de reactiemassa zelf
	Stoffen die worden gedefinieerd op basis van meer dan alleen de chemische samenstelling, bijv. grafiet en diamant *[Subparagraaf 4.2.3]*	Chemische samenstelling als stof met één bestanddeel of meerdere bestanddelen EN Andere fysische of karakteriseringsparameters: bijv. kristalmorfologie, (geologische) minerale samenstelling, enz.

Tabel 4.2 :Groepering van voornaamste identificaties voor voorbeelden die verschillende typen UVCB-stoffen vertegenwoordigen

Gemeenschappelijke eigenschappen		Voorbeelden of vertegenwoordigers	Voornaamste identificaties		
			Bron	*Procedé*	*Overige identificaties*
UVCB-stoffen (stoffen met een onbekende of variabele samenstelling, complexe reactieproducten en biologische materialen) *[Paragraaf 4.3]*	Biologische materialen (B)	Extracten van biologische materialen, bijv. natuurlijke geurstoffen, natuurlijke oliën, natuurlijke verfstoffen en pigmenten	- Planten- of diersoort en -familie - Deel van plant/dier	- Extractie - Fractioneren, concentreren, isoleren, zuiveren, enz. - Afleiding*	- Bekende of generieke samenstelling - Chromatografische en andere vingerafdrukken - Verwijzing naar standaarden Kleurindex
		Complexe biologische macromoleculen, bijv. enzymen, proteïnen, DNA- of RNA-fragmenten, hormonen, antibiotica			- Standaardenzymenindex - Genetische code - Stereoconfiguratie - Fysische eigenschappen - Functie/activiteit - Structuur - Aminozuurvolgorde
		Fermentatieproducten antibiotica, biopolymeren, enzymenmengsels, vinassen (producten van suikerfermentatie) enz.	- Cultuurmedium - Gebruikt micro-organisme	- Fermentatie - Isolatie van producten - Zuiveringsstappen	- Type producten: bijv. antibiotica, biopolymeren, proteïnen enz. - Bekende samenstelling
	Chemische en minerale stoffen met	Reactiemengsels met slecht voorspelbare en/of variabele samenstelling	Uitgangsmaterialen	Chemisch reactietype, bijv. verestering, alkylering, hydrogenering	- Bekende samenstelling - Chromatografische en andere vingerafdrukken - Verwijzing naar standaarden

	gebrekkig gedefiniee rde, complexe of variabele samenstel ling (UVC)	- Fracties of destillaten, bijv. petroleumstoffen - Klei, bijv. bentoniet - Teren	- Ruwe oliën - Steenkool/turf - Minerale gassen - Mineralen	- Fractionering, destillatie - <u>Omzetting van fracties</u> - Fysische verwerking - Residuen	- Ondergrensbereiken - Bereik van ketenlengtes - Verhouding aromatisch/alifatisch - Bekende samenstelling - Standaardindex
		Concentraten of smelten, bijv. metaalertsen, of residuen van verschillende smelt- of metaalbewerkingsprocedés, bijv. slakken	Ertsen	- Smelten - Hittebehandeling - Verschillende metaalbewerkings-procedés	- Bekende of generieke samenstelling - Concentratie van metalen

* Onderstreepte procedés duiden op synthese van nieuwe moleculen

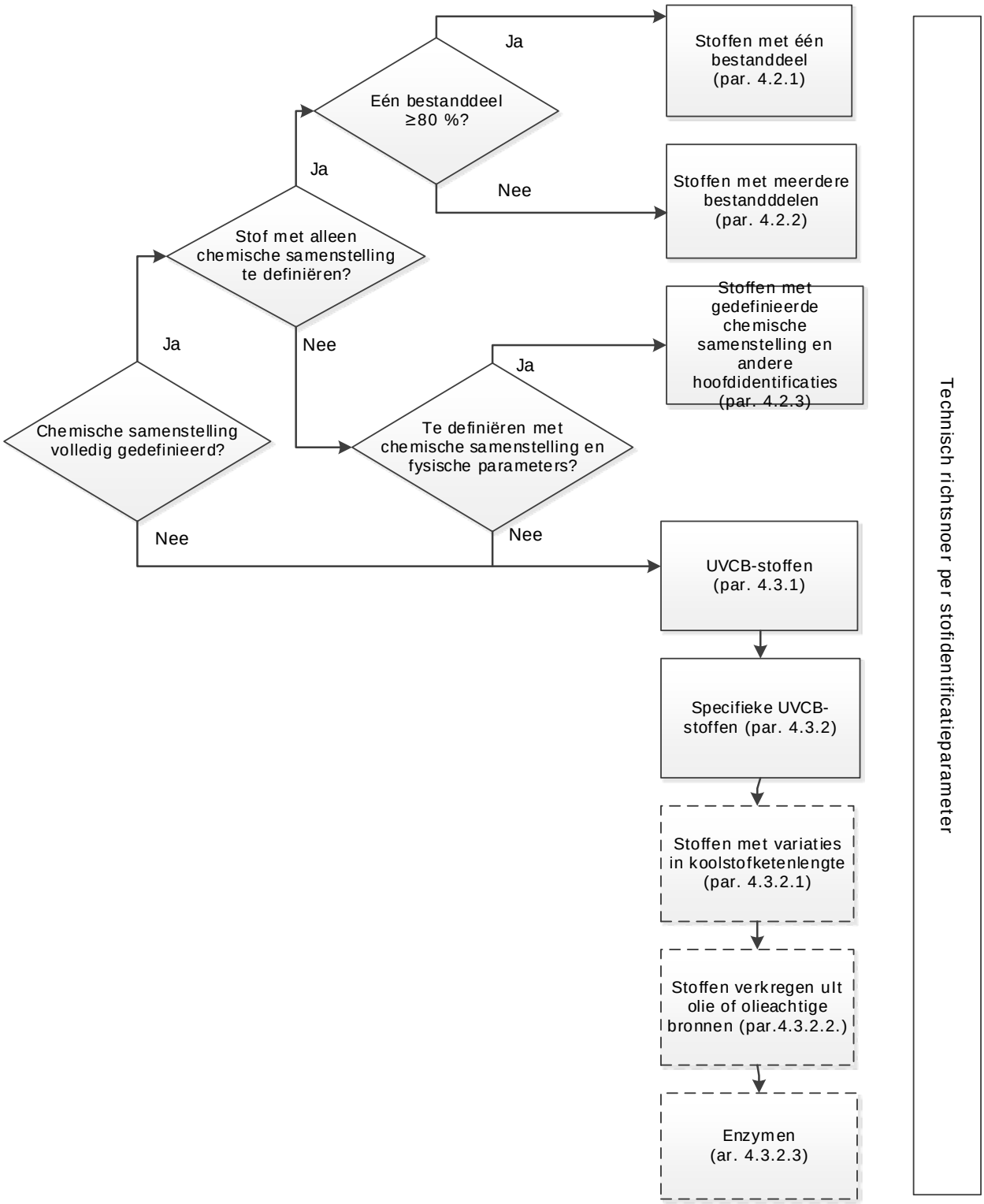
Deze paragraaf is verdeeld in subparagrafen die specifieke leidraden bevatten voor de stofidentificatie van verschillende typen stoffen. **Figuur 4.1** is een hulpmiddel voor het vinden van de juiste subparagraaf.

De leidraad in **figuur 4.1** is gebaseerd op criteria die 'vuistregels' zijn. De registrant is verantwoordelijk voor het kiezen van de meest passende subparagraaf en de vermelding van de stofidentiteit in overeenstemming met de regels en criteria voor dat type stof.

De basisregel is dat stoffen zo veel mogelijk worden gedefinieerd op basis van de chemische samenstelling en de identificatie van de bestanddelen. Alleen als dit technisch niet mogelijk is, mogen er andere identificaties worden gebruikt, zoals is gespecificeerd voor de verschillende typen UVCB-stoffen.

Als de registrant afwijkt van de regels en criteria voor stofidentificatie in dit richtsnoer, moet dit worden gemotiveerd. De stofidentificatie moet transparant en te verantwoorden zijn en zorgen voor consistentie.

Figuur 4.1: Hulpmiddel voor het vinden van subparagrafen en aanhangsels voor passende begeleiding met betrekking tot verschillende typen stoffen



Er moet een beschrijving worden gegeven van de analytische methoden en/of de passende bibliografische referenties voor de identificatie van de stof en, indien van toepassing, voor de identificatie van de onzuiverheden en additieven (REACH, bijlage VI, punten 2.3.5, 2.3.6 en 2.3.7). Deze informatie moet voldoende zijn om de methoden reproduceerbaar te maken. Typische resultaten bij de toepassing van de analytische technieken moeten ook worden verstrekt.

4.2. stoffen met een duidelijk gedefinieerde samenstelling

Stoffen met een duidelijk gedefinieerde chemische samenstelling krijgen hun naam op basis van het hoofdbestanddeel of de hoofdbestanddelen. Voor sommige typen stoffen is de chemische samenstelling alleen niet voldoende voor karakterisering. In die gevallen moeten er enkele aanvullende fysische parameters met betrekking tot de chemische structuren worden toegevoegd aan de stofidentificatie.

Als algemene regel moet het doel zijn de samenstelling tot 100% te dekken en elk bestanddeel vereist een volledige chemische specificatie, inclusief structuurinformatie. Voor stoffen die zijn gedefinieerd op basis van hun chemische samenstelling wordt een onderscheid gemaakt tussen:

- Hoofdbestanddeel: een bestanddeel in een stof, niet zijnde een additief of een onzuiverheid, dat een significant deel vormt van die stof en derhalve wordt gebruikt bij de naamgeving van de stof en gedetailleerde stofidentificatie.
- Onzuiverheid: een onbedoeld bestanddeel dat aanwezig is in een stof zoals die is vervaardigd. Dit kan afkomstig zijn uit de uitgangmaterialen of het resultaat zijn van secundaire of onvolledige reacties tijdens het vervaardigingsprocedé. Hoewel het aanwezig is in de uiteindelijke stof, is het niet opzettelijk toegevoegd.
- Additief: een stof die met opzet is toegevoegd om de stof te stabiliseren.

Alle bestanddelen (behalve additieven) die geen hoofdbestanddeel zijn van een stof met een of meerdere bestanddelen worden gezien als onzuiverheden. Hoewel het in sommige sectoren gebruikelijk is hiervoor de term ‘sporen’ te hanteren, wordt in dit richtsnoer alleen de term ‘onzuiverheden’ gebruikt.

De verschillende bestanddelen hebben verschillende identificatievereisten:

- Hoofdbestanddelen dragen bij aan de naamgeving van de stof en elk hoofdbestanddeel moet volledig worden gespecificeerd met alle relevante identificaties;
- Onzuiverheden dragen niet bij aan de naamgeving van de stof en hoeven alleen te worden gespecificeerd met naam, CAS-nummer en EG-nummer en/of molecuulformule.
- Additieven dragen bij aan de samenstelling van de stof (maar niet aan de naamgeving) en moeten altijd volledig worden geïdentificeerd.

Er worden bepaalde conventies gebruikt om onderscheid te maken tussen stoffen met een of meerdere bestanddelen:

- Een stof met één bestanddeel is een stof waarin één bestanddeel aanwezig is in een concentratie van ten minste 80% (w/w) en die maximaal 20% (w/w) onzuiverheden bevat.

Een stof met één bestanddeel krijgt zijn naam op basis van het hoofdbestanddeel;

- Een stof met meerdere bestanddelen is een stof die bestaat uit meerdere hoofdbestanddelen die aanwezig zijn in concentraties die meestal ≥ 10% en < 80% (w/w) zijn.

Een stof met meerdere bestanddelen krijgt zijn naam als een reactiemassa van twee of meer hoofdbestanddelen.

De bovengenoemde regels zijn als leidraad bedoeld. Afwijking is acceptabel als hiervoor een uitgebreide motivering kan worden gegeven.

Normaliter moeten onzuiverheden die aanwezig zijn in een concentratie van ≥ 1% worden gespecificeerd. Onzuiverheden die relevant zijn voor de indeling en/of de PBT-beoordeling[10] moeten echter altijd worden gespecificeerd, ongeacht de concentratie. Als algemene regel geldt dat de informatie over de samenstelling tot 100% volledig moet zijn.

Additieven zoals gedefinieerd in de REACH- en de CLP-verordening en dit richtsnoer zijn middelen die nodig zijn om de stabiliteit van de stof te waarborgen. Additieven zijn dus een essentieel bestanddeel van de stof en worden in aanmerking genomen bij het maken van de massabalans. Buiten de definitie van REACH en dit richtsnoer wordt de term 'additief' echter ook gebruikt voor opzettelijk toegevoegde stoffen met andere functies, bijv. zuurteregelaars en kleurstoffen. Deze opzettelijk toegevoegde stoffen maken geen deel uit van de stof als zodanig en worden daarom niet in aanmerking genomen bij het maken van de massabalans.

Mengsels, zoals gedefinieerd in REACH en CLP, zijn opzettelijke mengsels van stoffen en mogen dus niet worden gezien als stoffen met meerdere bestanddelen.

Specifieke begeleiding voor stoffen met één bestanddeel is te vinden in subparagraaf 4.2.1 en specifieke begeleiding voor stoffen met meerdere bestanddelen in subparagraaf 4.2.2. Voor stoffen waarvoor aanvullende informatie vereist is (bijv. bepaalde mineralen), vindt u begeleiding in subparagraaf 4.2.3.

4.2.1. Stoffen met één bestanddeel

Een stof met één bestanddeel is een stof, gedefinieerd op basis van de kwantitatieve samenstelling, waarvan één hoofdbestanddeel ten minste 80% (w/w) uitmaakt.

4.2.1.1. Naamgevingsconventie

Een stof met één bestanddeel wordt genoemd naar het hoofdbestanddeel. De naam moet in beginsel worden gegeven in de Engelse taal volgens de IUPAC-nomenclatuurregels (zie aanhangsel I). Andere internationaal geaccepteerde benamingen kunnen erbij worden vermeld.

4.2.1.2. Identificaties

Een stof met één bestanddeel wordt geïdentificeerd door de chemische naam en andere identificaties (waaronder de molecuul- en structuurformule) van het hoofdbestanddeel en de chemische identiteit van de onzuiverheden en/of additieven en de typische concentratie(s) en concentratiebereik(en) daarvan, die worden bewezen door de spectroscopische en analytische informatie.

Voorbeeld				
Hoofdbestanddeel	**Gehalte (%)**	**Onzuiverheid**	**Gehalte (%)**	**Stofidentiteit**
m-xyleen	91	o-xyleen	5	m-xyleen
o-xyleen	87	m-xyleen	10	o-xyleen

Normaal gesproken is het hoofdbestanddeel aanwezig in een concentratie van > 80% en moet het volledig worden gespecificeerd door alle bovengenoemde parameters.

[10] Meer informatie over PBT-beoordeling en de relevante criteria is te vinden in het Richtsnoer over informatie-eisen en chemische veiligheidsbeoordeling, hoofdstuk R11: PBT assessment.

Onzuiverheden die aanwezig zijn in een concentratie van > 1% moeten worden gespecificeerd met ten minste een van de volgende identificaties: chemische naam (IUPAC- en/of CAS-naam), CAS-nummer en EG-nummer en/of molecuulformule. Onzuiverheden die relevant zijn voor de indeling en/of PBT-beoordeling[11] moeten altijd worden gespecificeerd met dezelfde identificaties, ongeacht de concentratie.

Voor correcte toepassing van de 80%-regel mogen opzettelijk toegevoegde stoffen zoals zuurteregelaars of kleurstoffen niet worden meegenomen in de massabalans.

De '80%-regel' werd toegepast voor de kennisgeving van nieuwe stoffen (Richtlijn 67/548/EEG). Hij kan worden gezien als een vuistregel. Afwijking van deze 80%-regel moet echter worden gemotiveerd. Mogelijke voorbeelden van een gemotiveerde afwijking zijn:

- Als het hoofdbestanddeel < 80% is, maar de stof aantoonbaar dezelfde fysisch-chemische eigenschappen en hetzelfde gevarenprofiel heeft als andere stoffen met één bestanddeel met dezelfde identiteit die voldoen aan de 80%-regel.
- Als het bereik van de concentraties van het hoofdbestanddeel en de onzuiverheden overlappen met het criterium van 80% en het hoofdbestanddeel slechts af en toe ≤ 80% is.

Voorbeelden

Stof	Hoofdbestanddeel	Hoogste gehalte (%)	Typisch gehalte (%)	Laagste gehalte (%)	Onzuiverheid	Hoogste gehalte (%)	Typisch gehalte (%)	Laagste gehalte (%)	Stofidentiteit
1	o-xyleen	90	85	65	m-xyleen	35	15	10	o-xyleen
2	o-xyleen m-xyleen	90 35	85 15	65 10	p-xyleen	5	4	1	o-xyleen

Als gevolg van de concentratiebereiken van het hoofdbestanddeel en de onzuiverheid kunnen de stoffen 1 en 2 worden gezien als een stof met meerdere bestanddelen, de twee hoofdbestanddelen o-xyleen en m-xyleen, of als stoffen met één bestanddeel. In een dergelijk geval wordt besloten ze beide als stoffen met één bestanddeel te zien en dit wordt ingegeven door het feit dat o-xyleen typisch aanwezig is in een concentratie van > 80%.

4.2.1.3. Analytische informatie

Er zijn voldoende spectrale gegevens nodig om de structuur van een stof met één bestanddeel te bevestigen. Verschillende spectroscopische methoden kunnen geschikt zijn, in het bijzonder ultraviolet- en zichtbare absorptiespectroscopie (UV/Vis), infraroodspectroscopie (IR), nucleaire magnetische resonantiespectroscopie (NMR) en massaspectroscopie (MS). Voor anorganische stoffen kan het gebruik van röntgendiffractie (XRD) of röntgenfluorescentie (XRF) of atoomabsorptiespectroscopie (AAS) geschikter zijn.

Chromatografische methoden, zoals gaschromatografie (GC) of hogedrukvloeistofchromatografie (HPLC), zijn nodig om de samenstelling van de stof te bevestigen. Indien gepast kunnen er ook andere geldige technieken voor het scheiden van bestanddelen worden gebruikt.

Spectroscopische en analytische methoden zijn voortdurend aan veranderingen onderhevig.

[11] Meer informatie over PBT-beoordeling en de relevante criteria is te vinden in het Richtsnoer over informatie-eisen en chemische veiligheidsbeoordeling, hoofdstuk R11: PBT assessment.

Het is daarom de verantwoordelijkheid van de registrant om passende spectrale en analytische gegevens te verstrekken.

4.2.2. Stoffen met meerdere bestanddelen

Een stof met meerdere bestanddelen is een stof, gedefinieerd op basis van de kwantitatieve samenstelling, waarin meer dan één bestanddeel aanwezig is in een concentratie van ≥ 10% (w/w) en < 80% (w/w). Een stof met meerdere bestanddelen is het resultaat van een vervaardigingsprocedé[12].

REACH vereist de registratie van een stof zoals die wordt geproduceerd. Als een stof met meerdere bestanddelen wordt vervaardigd, moet deze worden geregistreerd[13] [14]. In hoeverre de verschillende stappen van de productie van de stof onder de definitie van 'vervaardiging' vallen, moet per geval worden bepaald. Alle stoffen die eerder onder Einecs vielen (stoffen met meerdere bestanddelen vielen hier bijvoorbeeld onder als alle afzonderlijke bestanddelen waren vermeld in Einecs) komen in aanmerking als geleidelijk geïntegreerde stoffen. Het is niet nodig de stof als zodanig te testen als het gevarenprofiel van de stof voldoende kan worden beschreven aan de hand van de informatie over de afzonderlijke bestanddelen.

4.2.2.1. Naamgevingsconventie

Een stof met meerdere bestanddelen krijgt zijn naam als een reactiemassa van de hoofdbestanddelen van de stof als zodanig, d.w.z. niet de uitgangsmaterialen die nodig zijn om de stof te produceren. De generieke formulering is: 'Reactiemassa van [namen van de hoofdbestanddelen]'. Het wordt aangeraden de namen van de bestanddelen in alfabetische volgorde weer te geven en deze te scheiden door het voegwoord 'en'. Alleen hoofdbestanddelen met een typische concentratie van ≥ 10% dragen bij aan de naam. In beginsel moeten de namen in het Engels worden opgegeven volgens de IUPAC-nomenclatuurregels. Andere internationaal geaccepteerde benamingen kunnen erbij worden vermeld.

4.2.2.2. Identificaties

Een stof met meerdere bestanddelen wordt geïdentificeerd op basis van de chemische naam en identificaties van de stof als zodanig en de kwantitatieve en kwalitatieve chemische samenstelling (chemische identiteit, inclusief de molecuul- en structuurformule) van de bestanddelen en wordt bewezen met analytische informatie.

Voorbeeld				
Hoofdbestand-delen	Gehalte (%)	Onzuiver-heid	Gehalte (%)	Stofidentiteit
m-xyleen o-xyleen	50 45	p-xyleen	5	Reactiemassa van m-xyleen en o-xyleen

Voor stoffen met meerdere bestanddelen is de chemische samenstelling bekend en is er meer dan één hoofdbestanddeel dat relevant is voor de identificatie van de stof. Bovendien is de chemische samenstelling van de stof voorspelbaar door middel van typische waarden

[12] Het verschil tussen een mengsel en een stof met meerdere bestanddelen is dat een mengsel wordt verkregen door twee of meer stoffen samen te voegen zonder een chemische reactie. Een stof met meerdere bestanddelen is het resultaat van een chemische reactie.

[13] Bepaalde stoffen zijn uitgezonderd van registratie in REACH (bijv. de stoffen die zijn genoemd in bijlage IV).

[14] Deze benadering geldt niet voor een aantal specifieke stoffen zoals mineralen (zie paragraaf 7.5 voor meer details.)

en bereiken. De hoofdbestanddelen moeten volledig worden gespecificeerd met alle relevante parameters. De som van de typische concentraties van de hoofdbestanddelen (≥ 10%) en de onzuiverheden (< 10%) moet 100% zijn.

Voor correcte toepassing van de 80%- en 10%-regel mogen opzettelijk toegevoegde stoffen zoals zuurteregelaars of kleurstoffen niet worden meegenomen in de massabalans.

Onzuiverheden die aanwezig zijn in een concentratie van ≥ 1% moeten worden gespecificeerd met ten minste een van de volgende identificaties: chemische naam, CAS-nummer en EG-nummer en/of molecuulformule. Onzuiverheden die relevant zijn voor de indeling en/of PBT-beoordeling moeten altijd worden gespecificeerd met dezelfde identificaties, ongeacht de concentratie.

Voorbeeld								
Hoofd-bestanddeel	**Hoog-ste gehalte (%)**	**Typisch gehalte (%)**	**Laagste gehalte (%)**	**Onzuiverheid**	**Hoogste gehalte (%)**	**Typisch gehalte (%)**	**Laagste gehalte (%)**	**Stofidentiteit**
aniline naftaleen	90 35	75 20	65 10	fenantreen	5	4	1	Reactiemassa van aniline en naftaleen;

Volgens de regels in dit richtsnoer is deze stof een stof met meerdere bestanddelen. Hoewel het bereik van één bestanddeel > 80% is, komt dit slechts af en toe voor en is de typische samenstelling < 80%.

Af en toe is het handig om een stof als een stof met meerdere bestanddelen te beschouwen, zelfs als één bestanddeel aanwezig is in een concentratie van ≥ 80%. Een voorbeeld is een stof die twee bestanddelen bevat, waarvan het ene 85% en het andere 10% uitmaakt, en die voor de rest bestaat uit onzuiverheden. Beide bestanddelen dragen bij aan en zijn essentieel voor het gewenste technische effect van de stof. In zo'n geval kan de stof, ondanks het feit dat één bestanddeel aanwezig is in een concentratie van > 80%, worden beschreven als een stof met twee bestanddelen.

4.2.2.3. Analytische informatie

In gevallen waarin spectrale gegevens informatie leveren over de samenstelling van een stof met meerdere bestanddelen, moet deze informatie worden verstrekt. Verschillende spectroscopische methoden kunnen geschikt zijn, in het bijzonder ultraviolet- en zichtbare absorptiespectroscopie (UV/Vis), infraroodspectroscopie (IR), nucleaire magnetische resonantiespectroscopie (NMR) en massaspectroscopie (MS). Voor anorganische stoffen kan het gebruik van röntgendiffractie (XRD) of röntgenfluorescentie (XRF) of atoomabsorptiespectroscopie (AAS) geschikter zijn.

Het gebruik van chromatografische methoden, zoals gaschromatografie (GC) en/of hogedrukvloeistofchromatografie (HPLC), is nodig om de samenstelling van de stof te bevestigen. Indien gepast kunnen er ook andere geldige technieken voor het scheiden van bestanddelen worden gebruikt.

Spectroscopische en analytische methoden zijn voortdurend aan veranderingen onderhevig. Het is daarom de verantwoordelijkheid van de registrant om passende spectrale en analytische gegevens te verstrekken.

4.2.2.4. Registratie van afzonderlijke bestanddelen van een stof met meerdere bestanddelen

In het algemeen moet het vastleggen van de identiteit van stoffen ten behoeve van

(pre)registratie plaatsvinden volgens de benadering voor stoffen met meerdere bestanddelen (d.w.z. registratie van de stof met meerdere bestanddelen). In afwijking van die benadering kunnen de afzonderlijke bestanddelen worden geregistreerd, als dat te motiveren is. De mogelijkheid om af te wijken van het standaardgeval om stoffen te identificeren (en mogelijk te registreren) op basis van hun afzonderlijke bestanddelen wordt geboden als

- er geen vermindering is in de informatie-eisen;
- er voldoende bestaande gegevens zijn om de registratie van de afzonderlijke bestanddelen te rechtvaardigen, d.w.z. de benadering mag normaliter niet leiden tot extra tests (met gewervelde dieren) in vergelijking met de standaardbenadering;
- registratie van de afzonderlijke bestanddelen leidt tot een efficiëntere situatie (d.w.z. het vermijden van talloze registraties van stoffen die uit dezelfde bestanddelen bestaan);
- de informatie over de samenstelling van de afzonderlijke reactiemassa's wordt opgegeven.

De geboden flexibiliteit mag niet worden misbruikt om gegevenseisen te omzeilen. In het geval van een stof met meerdere bestanddelen '(C + D)', met een samenstelling van 50% C en 50% D, die wordt geproduceerd in een hoeveelheid van 1200 ton per jaar (t/j) zou deze benadering bijvoorbeeld leiden tot twee registraties met de volgende informatie:

Stof C

- Hoeveelheid 600
- Voldoen aan gegevenseisen voor >1000 ton (bijlage X)

Stof D

- Hoeveelheid 600
- Voldoen aan gegevenseisen voor >1000 ton (bijlage X)

Deze benadering moet worden gecombineerd met de REACH-eis om volumes van dezelfde stof per rechtspersoon op te tellen. Het voorstel is om de gegevenseisen als volgt vast te stellen:

- Alle volumes van de afzonderlijke bestanddelen optellen (volgens de hoeveelheden in de stof);
- Verwijzen naar het hoogste volume van een stof die dat bestanddeel bevat.

De informatie-eisen moeten worden vastgesteld op basis van het hoogste resultaat. Voor de melding van hoeveelheden moet de som van de hoeveelheden van alle afzonderlijke bestanddelen worden genomen. Hieronder vindt u vereenvoudigde voorbeelden die de praktische uitvoering van deze aanpak illustreren:

Voorbeeld 1

Stof met meerdere bestanddelen 'C+D+E' is een resultaat van een procedé binnen één rechtspersoon, waaruit verschillende stoffen voortkomen:

- Stof 1: 50% C en 25% D en 25% E, 1100 t/j
- Stof 2: 50% C en 50% D, 500 t/j

Ook in dit geval is het reactieproduct het uitgangspunt: de twee stoffen moeten worden geregistreerd als stoffen met meerdere bestanddelen. Als de benadering van de registratie

van de afzonderlijke bestanddelen wordt gevolgd[15], geldt het volgende:

De melding van stof D betekent in dit geval:

- Hoeveelheid: (25% * 1100) + (50% * 500) = 525 t/j

De vaststelling van de informatie-eisen is gebaseerd op de strengste eis. In dit geval: >1000 t/j, aangezien de totale hoeveelheid van de stof met meerdere bestanddelen 'C+D+E' meer dan 1000 t/j is.

Opmerking: in dit voorbeeld moeten de stoffen C en E overeenkomstig worden geregistreerd.

Voorbeeld 2

Stof met meerdere bestanddelen 'G+H+I' is het resultaat van een procedé binnen één rechtspersoon, waaruit verschillende stoffen voortkomen:

- Stof 3: 65% G en 15% H en 20% I, 90 t/j
- Stof 4: 60% G en 40% H, 90 t/j

Melding van stof G:

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

De vaststelling van de informatie-eisen is gebaseerd op de strengste eis. In dit geval: >100 t/j, aangezien de totale hoeveelheid van bestanddeel G meer dan 100 t/j is.

Opmerking: in dit voorbeeld moeten de stoffen H en I overeenkomstig worden geregistreerd.

Naast de genoemde vaststelling van de informatie-eisen is een andere overweging het aantal nieuwe onderzoeken (met gewervelde dieren) die moeten worden uitgevoerd. Voordat zij een strategie bepalen, moeten potentiële registranten nagaan of er voldoende bestaande onderzoeken (met gewervelde dieren) zijn en of de voorgestelde flexibiliteit zal leiden tot meer of minder nieuwe onderzoeken (met gewervelde dieren). Er moet worden gekozen voor de strategie waarmee nieuwe onderzoeken (met gewervelde dieren) worden voorkomen.

In geval van twijfel moet de standaardroute voor de vastlegging van de stofidentiteit ten behoeve van registratie altijd de identificatie zijn van de stof zoals die is vervaardigd.

4.2.3. Stoffen met gedefinieerde chemische samenstelling en andere hoofdidentificaties

Sommige stoffen (bijv. anorganische mineralen) die kunnen worden geïdentificeerd op basis van hun chemische samenstelling moeten verder worden gespecificeerd met aanvullende identificaties om hun eigen stofidentificatie te krijgen. Deze stoffen kunnen uit één of meerdere bestanddelen bestaan, maar ze hebben, naast de parameters voor stofidentificatie die in de vorige paragrafen zijn beschreven, andere hoofdidentificaties nodig om de stofidentiteit ondubbelzinnig vast te leggen.

[15] Het voorbeeld is alleen bedoeld om de vaststelling van informatie-eisen en de melding van hoeveelheden te illustreren. Hierbij wordt niet ingegaan op de vraag of de benadering in dit geval te rechtvaardigen is.

Voorbeelden

Voor sommige niet-metaalhoudende mineralen (uit natuurlijke bronnen of door de mens gemaakt) met unieke structuren zijn ook de morfologie en de mineraalsamenstelling nodig om de stof ondubbelzinnig te identificeren. Een voorbeeld is kaolien (CAS 1332-58-7), dat bestaat uit kaoliniet, kaliumaluminiumsilicaat, veldspaat en kwarts.

De huidige ontwikkelingen in de nanotechnologie en inzichten in de daaraan gekoppelde gevareneffecten kunnen aanvullende informatie over de grootte van de stoffen in de toekomst noodzakelijk maken. De huidige staat van ontwikkeling is nog niet ver genoeg gevorderd om begeleiding bij de identificatie van stoffen in nanovorm in dit richtsnoer op te nemen.

4.2.3.1. Naamgevingsconventie

In beginsel moet dezelfde naamgevingsconventie als voor stoffen met één bestanddeel (zie subparagraaf 4.2.1) of stoffen met meerdere bestanddelen (zie subparagraaf 4.2.2) worden gevolgd.

Voor anorganische mineralen kunnen de mineralogische namen worden gebruikt voor de bestanddelen. Apatiet is bijvoorbeeld een stof met meerdere bestanddelen die bestaat uit een groep fosfaatmineralen, meestal hydroxylapatiet, fluorapatiet en chloorapatiet genoemd, die genoemd zijn naar hoge concentraties respectievelijk OH--, F-- of Cl--ionen in het kristal. De formule van het mengsel van de drie meest voorkomende soorten is Ca5(PO4)3(OH, F, Cl). Een ander voorbeeld is aragoniet, een van de speciale kristalstructuren van calciumcarbonaat.

4.2.3.2. Identificaties

De identificatie en naamgeving van deze stoffen gebeurt volgens de regels voor stoffen met één bestanddeel (zie subparagraaf 4.2.1) of stoffen met meerdere bestanddelen (zie subparagraaf 4.2.2). De andere specifieke hoofdidentificatieparameters die moeten worden toegevoegd zijn afhankelijk van de stof. Voorbeelden van andere hoofdidentificaties kunnen de elementaire samenstelling met spectrale gegevens, de kristalstructuur zoals die blijkt uit röntgendiffractie (XRD), de infraroodabsorptiepieken, de zwellingsindex, de kationenuitwisselingscapaciteit of andere fysische of chemische eigenschappen zijn.

Voor mineralen is het belangrijk de resultaten van de elementaire samenstelling te combineren met de spectrale gegevens om de mineralogische samenstelling en kristalstructuur te identificeren. Deze worden vervolgens bevestigd door de kenmerkende fysisch-chemische eigenschappen zoals de kristalstructuur (zoals die blijkt uit röntgendiffractie), de vorm, de hardheid, het zwellingsvermogen, de dichtheid en/of het oppervlak.

Er kunnen voorbeelden van specifieke aanvullende hoofdidentificaties worden gegeven voor specifieke mineralen, aangezien mineralen kenmerkende fysisch-chemische eigenschappen hebben die het mogelijk maken hun identificatie compleet te maken, bijv.: zeer lage hardheid voor talk, zwellingsvermogen van bentoniet, vormen van diatomiet, zeer hoge dichtheid van bariet en oppervlak (stikstofabsorptie).

4.2.3.3. Analytische informatie

Dezelfde analytische informatie als voor stoffen met één bestanddeel (zie subparagraaf 4.2.1) of stoffen met meerdere bestanddelen (zie subparagraaf 4.2.2) moet worden opgegeven. Voor die stoffen waarvoor spectrale gegevens, GC- of HPLC-chromatogrammen

niet voldoende zijn voor de identificatie, moet informatie die voortkomt uit andere analytische technieken worden opgegeven, bijv. röntgendiffractie voor mineralen, elementaire analyse enz. Het criterium is dat er voldoende informatie moet worden verstrekt om de structuur van de stof te bevestigen.

4.3. UVCB-stoffen

Stoffen met een onbekende of variabele samenstelling, complexe reactieproducten en biologische materialen[16], [17], [18], ook wel UVCB-stoffen genoemd, kunnen niet voldoende worden geïdentificeerd op basis van hun chemische samenstelling, doordat

- het aantal bestanddelen relatief groot is en/of
- de samenstelling voor een belangrijk deel onbekend is en/of
- de variabiliteit van de samenstelling relatief groot of slecht te voorspellen is.

Als gevolg daarvan zijn voor de identificatie van UVCB-stoffen andere typen informatie vereist naast wat er bekend is over hun chemische samenstelling.

In **tabel 4.2** is te zien dat de hoofdidentificaties voor de verschillende typen UVCB-stoffen verband houden met de bron van de stof en het gebruikte procedé; zo niet, dan behoren ze tot de groep van 'overige hoofdidentificaties' (bijv. 'chromatografische of andere vingerafdrukken'). De aantallen en typen identificaties die zijn genoemd in **tabel 4.2** illustreren de variabiliteit van de typen en mogen niet worden gezien als een alomvattend overzicht. Indien de chemische samenstelling van bijvoorbeeld een complex reactieproduct of een stof van biologische oorsprong bekend is, moet de stof worden geïdentificeerd als een stof met één of meerdere bestanddelen, zoals gepast. De consequentie van het definiëren van een stof als UVCB is dat elke aanzienlijke afwijking van bron of procedé waarschijnlijk leidt tot een andere stof die opnieuw moet worden geregistreerd. Als een reactiemengsel geïdentificeerd is als een 'stof met meerdere bestanddelen', kan de stof worden afgeleid uit een andere bron en/of door middel van een ander procedé, zolang de samenstelling van de uiteindelijke stof maar binnen het opgegeven bereik blijft. Een nieuwe registratie is in zo'n geval dus niet vereist.

Algemene begeleiding met betrekking tot UVCB-stoffen is te vinden in subparagraaf 4.3.1 en specifieke begeleiding met betrekking tot stoffen met variërende koolstofketenlengtes, stoffen die zijn verkregen uit olie of olieachtige bronnen en enzymen, als specifieke typen UVCB-stoffen, vindt u in subparagraaf 4.3.2.

4.3.1. Algemene begeleiding voor UVCB-stoffen

Deze subparagraaf van het richtsnoer geeft algemene begeleiding met betrekking tot het gebruik van bepaalde hoofdidentificaties, naast de parameters voor stofidentificatie van bijlage VI (punt 2) van REACH, voor het identificeren van UVCB-stoffen.

4.3.1.1. Informatie over chemische samenstelling

Voor UVCB-stoffen geldt dat ze niet op unieke wijze kunnen worden gespecificeerd op basis van de IUPAC-naam van de bestanddelen, of dat niet alle bestanddelen kunnen worden

---

[16] Rasmussen K, Pettauer D, Vollmer G et al. (1999) Compilation of Einecs: Descriptions and definitions used for UVCB substances. Tox Env Chem Vol. 69, blz. 403-416.

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

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

geïdentificeerd, of dat ze op algemene wijze kunnen worden gespecificeerd, maar zonder voldoende specificiteit als gevolg van de variabiliteit van de exacte samenstelling. Gezien het gebrek aan differentiatie tussen bestanddelen en onzuiverheden moeten de termen 'hoofdbestanddelen' en 'onzuiverheden' niet relevant worden geacht voor UVCB-stoffen.

De chemische samenstelling en de identiteit van de bestanddelen moeten echter wel worden opgegeven voor zover deze bekend zijn. De beschrijving van de samenstelling kan vaak op meer algemene wijze worden gegeven, bijvoorbeeld 'lineaire vetzuren C8-C16' of 'alcoholethoxylaten met alcoholen C10-C14 en 4-10 ethoxylaateenheden'. Daarnaast kan er informatie worden verstrekt over de chemische samenstelling op basis van bekende referentiemonsters of standaarden en in veel gevallen kunnen daarnaast indexen en bestaande codes worden gebruikt. Andere generieke informatie over de samenstelling kan bestaan uit zogenoemde 'vingerafdrukken', bijvoorbeeld chromatografische of spectrale beelden die een kenmerkend piekverdelingspatroon vertonen.

Voor een UVCB-stof moeten alle bekende bestanddelen en alle bestanddelen die aanwezig zijn in concentraties van ≥ 10% worden gespecificeerd met ten minste een IUPAC-naam in het Engels en bij voorkeur een CAS-nummer; de typische concentraties en concentratiebereiken van de bekende bestanddelen moeten ook worden opgegeven. Bestanddelen die relevant zijn voor de indeling en/of PBT-beoordeling[19] van de stof moeten altijd worden geïdentificeerd met dezelfde identificaties, ongeacht de concentratie.

Onbekende bestanddelen moeten voor zover mogelijk worden geïdentificeerd door middel van een generieke beschrijving van hun chemische aard. Additieven moeten volledig worden gespecificeerd op dezelfde manier als is beschreven voor duidelijk gedefinieerde stoffen.

4.3.1.2. Hoofdidentificatieparameters – naam, bron en procedé

Aangezien de chemische samenstelling alleen niet voldoende is voor de stofidentificatie, moet de stof in het algemeen worden geïdentificeerd op basis van de naam, de herkomst of bron en de meest relevante stappen die zijn uitgevoerd tijdens de verwerking. Andere stofeigenschappen kunnen ook belangrijke identificaties zijn, als relevante generieke identificaties (bijv. kookpunt) of als cruciale identificaties voor specifieke groepen stoffen (bijv. katalytische activiteit voor enzymen).

1. *Naamgevingsconventie*

In het algemeen is de naam van een UVCB-stof een combinatie van bron en procedé met de algemene formulering: eerst de bron en dan het procedé of de procedés.

- Een stof die is afgeleid uit biologische bronnen wordt geïdentificeerd op basis van de naam van de soort.
- Een stof die is afgeleid van niet-biologische bronnen wordt geïdentificeerd op basis van de uitgangsmaterialen.
- Procedés worden geïdentificeerd volgens het type chemische reactie als er synthese van nieuwe moleculen plaatsvindt, of als een type raffinage, bijv. extractie, fractionering, concentratie, of als residu.

[19] Meer informatie over PBT-beoordeling en de relevante criteria is te vinden in het Richtsnoer over informatie-eisen en chemische veiligheidsbeoordeling, hoofdstuk R11: PBT assessment.

Voorbeelden	
EG-nummer	**EG-naam**
296-358-2	Lavendel, Lavandula hybrida, ext., geacetyleerd
307-507-9	Lavendel, Lavandula latifolia, ext., gezwaveld, palladiumzout

In het geval van reactieproducten zijn in de EG-inventaris andere formuleringen gebruikt, bijv.

- Einecs: belangrijkste uitgangsmateriaal, reactieproduct(en) van ander uitgangsmateriaal of andere uitgangsmaterialen
- Elincs: reactieproduct(en) van uitgangsmateria(a)l(en)

Voorbeelden	
EG-nummer	**EG-naam**
232-341-8	Salpeterigzuur, reactieproducten met 4-methyl-1,3-benzeendiamine hydrochloride
263-151-3	Vetzuren, kokos, reactieproducten met di-ethyleentriamine
400-160-5	Reactieproducten van tallolievetzuren, di-ethanolamine en boorzuur
428-190-4	Reactieproduct van: 2,4-diamino-6-[2-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)ethyl]-1,3,5-triazine en cyanuurzuur

In dit richtsnoer is de generieke formulering van de naam van reactieproducten ‘reactieproduct van [namen van uitgangsmaterialen]’. In beginsel moeten de namen in het Engels worden opgegeven volgens de IUPAC-nomenclatuurregels. Andere internationaal geaccepteerde benamingen kunnen erbij worden vermeld. Het wordt aangeraden het woord ‘reactie’ in de naam te vervangen door het specifieke type reactie volgens een algemene beschrijving, bijvoorbeeld verestering of zoutvorming enz. (zie de leidraad voor de vier specifieke UVCB-subklassen hieronder).

2. *Bron*

De bronnen kunnen worden verdeeld in twee groepen:

2.1. *Bronnen van biologische aard*

Stoffen van biologische oorsprong moeten worden gedefinieerd met het geslacht, de soort en de familie, bijv. *Pinus cembra*, *Pinaceae* betekent *Pinus* (geslacht), *cembra* (soort), *Pinaceae* (familie) en indien relevant de stam of het genetische type. Indien gepast moet ook het weefsel of deel van het organisme dat is gebruikt voor de extractie van de stof, bijv. beenmerg, alvleesklier of stam, zaden of wortels, worden vermeld.

Voorbeelden	
EG-nummer	**EG-naam**
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ext. **EG-beschrijving** Extracten en fysisch gemodificeerde derivaten daarvan, zoals tincturen, essences, etherische oliën, olieharsen, terpenen, terpeenvrije fracties, destillaten, residuen, enz., verkregen uit Saccharomyces cerevisiae, Saccharomycelaceae.
296-350-9	Arnica mexicana, ext. **EG-beschrijving** Extracten en fysisch gemodificeerde derivaten daarvan, zoals tincturen, essences, etherische oliën, olieharsen, terpenen, terpeenvrije fracties, destillaten, residuen, enz., verkregen uit Arnica mexicana, Compositae.

2.2. *Chemische of minerale bronnen*

In het geval van reactieproducten van chemische reacties moeten de uitgangsmaterialen worden beschreven met hun IUPAC-naam in het Engels. Minerale bronnen moeten in generieke termen worden beschreven, bijv. fosfaatertsen, bauxiet, porseleinaarde, mineraal gas, steenkool, turf.

3. *Procedé*

Procedés worden geïdentificeerd volgens het type chemische reactie als er synthese van nieuwe moleculen plaatsvindt, of als een type raffinage, bijv. extractie, fractionering, concentratie, of als residu van een raffinage.

Voor sommige stoffen, bijvoorbeeld chemische derivaten, wordt het procedé beschreven als een combinatie van raffinage en synthese.

3.1 *Synthese*

Er vindt een bepaalde chemische of biochemische reactie plaats tussen de uitgangsmaterialen die leidt tot de stof. Voorbeelden zijn de Grignard-reactie, sulfonering, enzymatische splitsing door protease of lipase enz. Veel afleidingsreacties behoren ook tot dit type.

Voor nieuw gesynthetiseerde stoffen waarvan de chemische samenstelling niet kan worden opgegeven zijn de uitgangsmaterialen de hoofdidentificaties, samen met een specificatie van de reactie, d.w.z. het type chemische reactie. Het type chemische reactie is een indicatie voor de te verwachten moleculen in de stof. Er zijn verschillende typen chemische eindreacties: hydrolyse, verestering, alkylering, chlorering enz. Aangezien dit slechts algemene informatie geeft over de mogelijk geproduceerde stoffen, is in veel gevallen ook een chromatografische vingerafdruk noodzakelijk voor een volledige karakterisering en identificatie van de stof.

Voorbeelden	
EG-nummer	**EG-naam**
294-801-4	Lijnzaadolie, geëpoxideerd, reactieproducten met tetra-ethyleenpentamine
401-530-9	Reactieproduct van (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzofenon en tri-ethoxysilaan) met (hydrolyseproduct van silica en methyltrimethoxysilaan)

3.2 *Raffinage*

Raffinage kan op veel manieren worden toegepast op stoffen van natuurlijke of minerale oorsprong, waarbij de chemische identiteit van de bestanddelen niet verandert, maar de concentratie van de bestanddelen wel, bijv. koude verwerking van plantenweefsel gevolgd door extractie met een alcohol.

Raffinage kan verder worden gedefinieerd in procedés zoals extractie. De stofidentificatie is afhankelijk van het type procedé:

- Voor stoffen die zijn afgeleid door middel van fysische methoden, bijv. raffinage of fractionering, moeten het afkapbereik en de parameter van de fractie worden gespecificeerd (bijv.: molecuulgrootte, ketenlengte, kookpunt, vluchtigheidsbereik enz.);
- Voor stoffen die zijn afgeleid door middel van concentratie, bijv. producten van metaalbewerkingsprocedés, gecentrifugeerde uitscheidingen, filterresiduen enz., moet de concentratiestap worden gespecificeerd, samen met de generieke samenstelling van de resulterende stof in vergelijking met het uitgangsmateriaal;

Voorbeelden	
EG-nummer	**EG-naam**
408-250-6	Concentraat van organische wolfraamverbinding (reactieproducten van wolfraamhexachloride met 2-methylpropan-2-ol, nonylfenol en pentaan-2,4-dion)

- Voor residuen van een specifieke reactie, bijv. slakken, teren en zware fracties moet het procedé worden beschreven, samen met de generieke samenstelling van de resulterende stof;

Voorbeelden	
EG-nummer	**EG-naam**
283-659-9	Tin, smeltresiduen **EG-beschrijving** Stof die ontstaat bij het gebruik en de productie van tin en legeringen

	daarvan die zijn verkregen uit primaire en secundaire bronnen, inclusief gerecyclede halffabricaten. Bestaan hoofdzakelijk uit tinverbindingen en kunnen resten van andere non-ferrometalen en verbindingen daarvan bevatten.
293-693-6	Sojabonenmeel, proteïne extn. Residu **EG-beschrijving** Bijproduct dat hoofdzakelijk koolhydraten bevat, geproduceerd door een ethanolextractie van ontvette sojabonen.

- Voor extracten moeten de extractiemethode, het oplosmiddel dat voor de extractie is gebruikt en andere relevante omstandigheden, zoals temperatuur(bereik), worden opgegeven.
- Voor gecombineerde verwerking moet elke stap in het procedé worden gespecificeerd (op een algemene manier), naast de informatie over de bron. Deze gecombineerde verwerking is in het bijzonder relevant in het geval van chemische derivaten.

Voorbeelden:

- Van een plant wordt eerst een extract gemaakt, dat extract wordt gedestilleerd en de gedestilleerde fractie van het plantenextract wordt gebruikt voor chemische afleiding. De daaruit resulterende stof kan verder worden gezuiverd. Het gezuiverde product kan uiteindelijk duidelijk te definiëren zijn op basis van zijn chemische samenstelling en in dat geval is het niet nodig om de stof te identificeren als UVCB. Als het product nog steeds moet worden gezien als UVCB, kan de gecombineerde bewerking worden beschreven als een “gezuiverd chemisch derivaat van een gedestilleerde fractie van een plantenextract.”
- Als de verdere verwerking van een extract alleen fysische afleiding omvat, verandert de samenstelling, maar zonder opzettelijke synthese van nieuwe moleculen. Toch resulteert de verandering van de samenstelling in een andere stof, bijv. een destillaat of neerslag van een plantenextract.
- Voor de productie van aardolieproducten worden chemische afleiding en fractionering vaak in combinatie gebruikt. Oliedestillatie gevolgd door kraken levert bijvoorbeeld een fractie van het uitgangsmateriaal en nieuwe moleculen op. In dat geval moeten beide typen procedés dus worden geïdentificeerd, of het destillaat moet worden gespecificeerd als het uitgangsmateriaal van het kraakprocedé. Dit geldt in het bijzonder voor aardoliederivaten, die vaak voortkomen uit een combinatie van procedés. Er kan echter een apart specifiek systeem worden gebruikt voor de identificatie van aardoliestoffen (zie subparagraaf 4.3.2.2).

Aangezien een chemisch derivaat van een extract niet dezelfde bestanddelen zal bevatten als het uitgangsextract, wordt het gezien als een andere stof. Deze regel kan als gevolg hebben dat de identificatie op basis van naam en beschrijving afwijkt van de eerdere Einecs-naam en -beschrijving. Toen de Einecs-inventaris werd opgezet, vielen extracten van verschillende procedés, verschillende oplosmiddelen en zelfs fysische of chemische derivaten vaak onder één enkele vermelding. Binnen REACH moeten deze stoffen echter als afzonderlijke stoffen worden geregistreerd.

4. *Andere parameters voor stofidentificatie*

Naast de chemische naam, de bron en de specificatie van het procedé moet de identificatie van een UVCB-stof alle eventuele andere relevante informatie bevatten, zoals wordt vereist door bijlage VI, punt 2 van REACH.

In het bijzonder voor specifieke typen UVCB-stoffen kunnen andere identificatieparameters relevant zijn. Andere mogelijke aanvullende identificaties zijn:

- Generieke beschrijving van chemische samenstelling;
- Chromatografische vingerafdruk of andere typen vingerafdrukken;
- Referentiemateriaal (bijv. ISO);
- Fysisch-chemische parameters (bijv. kookpunt);
- Kleurindexnummer;
- AISE-nummer.

Specifieke begeleiding met betrekking tot de regels en criteria en het gebruik van de naam-, bron- en procedé-informatie voor de identificatie van UVCB-stoffen vindt u hieronder voor verschillende typen bronnen en procedés. In de volgende alinea's worden vier subtypen UVCB-stoffen beschreven als een combinatie van biologische of chemische/minerale bronnen en procedés (synthese of raffinage).

UVCB-subtype 1, waarbij de bron biologisch is en het procedé een synthese

Stoffen van biologische aard kunnen worden gemodificeerd in (bio)chemische procedés om bestanddelen te genereren die niet aanwezig waren in het uitgangsmateriaal, bijv. chemische derivaten van plantenextracten of producten van enzymatische behandeling van de extracten. Proteïnen kunnen bijvoorbeeld worden gehydrolyseerd met behulp van protease om oligopeptiden te genereren, of cellulose uit hout kan worden gecarboxyleerd om carboxymethylcellulose (CMC) te maken.

Producten van fermentatie kunnen ook tot dit UVCB-subtype behoren. Vinasse is bijvoorbeeld een product van suikerfermentatie dat, vergeleken met de suiker, veel andere bestanddelen bevat. Als fermentatieproducten verder worden gezuiverd, kunnen de stoffen uiteindelijk volledig identificeerbaar worden op basis van hun chemische samenstelling en in dat geval moeten ze niet meer worden geïdentificeerd als een UVCB-stof.

Enzymen vormen een speciale groep stoffen die kunnen worden afgeleid door extractie en verdere raffinage van een bron van biologische oorsprong. Hoewel de bron en het procedé in detail kunnen worden gespecificeerd, levert dit geen specifieke informatie op over het enzym. Voor deze stoffen moet een specifiek systeem voor de indeling, naamgeving en identificatie worden gebruikt (zie subparagraaf 4.3.2.3).

Voor de stofidentificatie moet de laatste stap van het procedé worden opgegeven en/of een eventuele andere stap in het procedé die relevant is voor de identiteit van de stof.

Een beschrijving van het chemische procedé moet een algemene beschrijving van het type procedé (verestering, alkalinehydrolyse, alkylering, chlorering, substitutie enz.) zijn, samen met de relevante verwerkingsomstandigheden.

Een beschrijving van het biochemische procedé kan een algemene beschrijving van de gekatalyseerde reactie zijn, samen met de naam van het enzym dat als katalysator voor de reactie is gebruikt.

Voor stoffen die worden geproduceerd door middel van fermentatie of (weefsel)culturen van soorten, moeten de fermenterende soort, het type fermentatie en de algemene omstandigheden (ladingsgewijs of continu, aeroob, anaeroob, anoxisch, temperatuur, pH enz.) worden opgegeven, samen met eventuele verdere verwerkingsstappen die zijn toegepast om de fermentatieproducten te isoleren, bijv. centrifuge, neerslag, extractie, enz.

Als deze stoffen verder geraffineerd zijn, kan dit leiden tot een fractie, een concentraat of een residu. Deze verder verwerkte stoffen worden geïdentificeerd met aanvullende specificatie van de verdere verwerkingsstappen.

UVCB-subtype 2, waarbij de bron chemisch of mineraal is en het procedé een synthese

UVCB-stoffen die worden verkregen uit chemische of minerale bronnen en worden afgeleid via een procedé waarbij nieuwe moleculen worden gesynthetiseerd, zijn 'reactieproducten'. Voorbeelden van chemische reactieproducten zijn veresterings-, alkylerings- en chloreringsproducten. Biochemische reacties door de toepassing van geïsoleerde enzymen zijn speciale typen chemische reacties. Als er echter een complexe biochemische route van synthese wordt toegepast waarbij volledige micro-organismen worden gebruikt, is het beter om de resulterende stof te zien als een fermentatieproduct en de stof te identificeren aan de hand van het fermentatieprocedé en de fermenterende soort en niet aan de hand van de uitgangsmaterialen (zie UVCB-subtype 4).

Niet elk reactieproduct moet automatisch worden gespecificeerd als een UVCB. Als een reactieproduct afdoende kan worden gedefinieerd op basis van de chemische samenstelling (inclusief enige variabiliteit), moet de voorkeur worden gegeven aan identificatie als een stof met meerdere bestanddelen (zie subparagraaf 4.2.2). Alleen als de samenstelling van het reactieproduct onvoldoende bekend of slecht voorspelbaar is, moet de stof worden geïdentificeerd als een UVCB-stof ('reactieproduct'). De identificatie van een reactieproduct is gebaseerd op de uitgangsmaterialen voor de reactie en op het (bio)chemische reactieprocedé waarmee de stof wordt gegenereerd.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Einecs-naam**	**CAS-nummer**
294-006-2	Nonaandizuur, reactieproducten met 2-amino-2-methyl-1-propanol	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyde, reactieproducten met di-ethyleenglycol en fenol	91673-32-4

Een belangrijke identificatie voor reactieproducten is de beschrijving van het vervaardigingsprocedé. Voor de stofidentificatie moet de laatste en de meest relevante stap in het procedé worden opgegeven. De beschrijving van het chemische procedé moet een algemene beschrijving zijn van het type procedé (bijv. verestering, alkalinehydrolyse, alkylering, chlorering, substitutie enz.), samen met de relevante verwerkingsomstandigheden. Een biochemisch procedé moet worden beschreven aan de hand van het type reactie, samen met de naam van het enzym dat als katalysator voor de reactie is gebruikt.

UVCB-subtype 3, waarbij de bron biologisch is en het procedé raffinage

UVCB-stoffen van biologische oorsprong die het resultaat zijn van een raffinageprocedé waarbij niet met opzet nieuwe moleculen zijn gegenereerd, kunnen bijvoorbeeld extracten, fracties van extracten, concentraten van extracten, gezuiverde extracten of verwerkingsresiduen van stoffen van biologische oorsprong zijn.

Zodra een extract verder verwerkt is, is de stof niet meer identiek aan het extract, maar is het een andere stof die tot een ander UVCB-subtype behoort, bijv. een fractie of een residu

van een extract. Deze stoffen moeten worden gespecificeerd met aanvullende (verdere) verwerkingsparameters. Als het extract gemodificeerd is in chemische of biochemische reacties waarbij nieuwe moleculen (derivaten) zijn ontstaan, vindt de identificatie van de stof plaats volgens de instructies voor UVCB-subtype 2 of zoals is beschreven in paragraaf 4.2 voor een duidelijk gedefinieerde stof.

Deze differentiatie van verder verwerkte extracten kan als gevolg hebben dat de nieuwe naam en beschrijving afwijken van die in de Einecs-inventaris. Toen deze inventaris werd opgezet, werd een dergelijk onderscheid niet gemaakt en vielen alle typen extracten met verschillende oplosmiddelen en verdere verwerkingsstappen mogelijk onder één enkele vermelding.

De eerste hoofdidentificatie voor dit subtype UVCB-stof is de familie, het geslacht en de soort van het organisme waarvan de stof afkomstig is. Indien van toepassing moet het weefsel of het deel van het organisme dat voor de extractie van de stof is gebruikt worden opgegeven, bijv. beenmerg, alvleesklier of stengel, zaden of wortels. Voor stoffen van microbiologische oorsprong moeten de stam en het genetische type van de soort worden gedefinieerd.

Als de UVCB-stof is afgeleid van een andere soort, wordt hij gezien als een andere stof, zelfs als de chemische samenstelling hetzelfde is.

Voorbeelden	
EG-nummer	**Einecs-naam**
290-977-1	Geoxideerd blauwhout (Haematoxylon campechianum)-extract **EG-beschrijving** Deze stof is geïdentificeerd in de kleurindex met kleurindexconstitutie nr. C.I. 75290 geoxideerd.
282-014-9	Alvleesklierextracten, onteiwit

De tweede hoofdidentificatie is de verwerking van de stof, bijv. het extractieprocedé, het fractionerings-, zuiverings- of concentratieprocedé of het procedé dat de samenstelling van het residu beïnvloedt. Raffinages van extracten die zijn gemaakt door middel van andere procedés, bijv. met behulp van andere oplosmiddelen of andere zuiveringsstappen, leiden dus tot andere stoffen.

Hoe meer stappen er worden toegepast voor de raffinage, hoe beter het mogelijk wordt de stof te definiëren op basis van de chemische samenstelling. In dat geval leiden verschillende bronsoorten of verschillende verwerkingsmodificaties niet automatisch tot verschillende stoffen.

Een belangrijke identificatieparameter voor stoffen van biologische oorsprong is de beschrijving van de relevante procedés. Voor extracten moet het extractieprocedé worden beschreven met de mate van detail die relevant is voor de identiteit van de stof. Het is minimaal noodzakelijk om het gebruikte oplosmiddel te specificeren.

Als er verdere verwerkingsstappen worden gebruikt voor de vervaardiging van de stof, zoals fractionering of concentratie, moet de combinatie van relevante verwerkingsstappen worden beschreven, bijv. de combinatie van extractie en fractionering inclusief de afkapbereiken.

UVCB-subtype 4, waarbij de bron chemisch of mineraal is en het procedé raffinage

Stoffen van niet-biologische oorsprong, d.w.z. die afkomstig zijn van mineralen, ertsen,

steenkool, aardgas en aardolie, of andere grondstoffen voor de chemische industrie, en die het resultaat zijn van verwerking zonder opzettelijke chemische reacties kunnen (gezuiverde) fracties, concentraten of residuen van deze procedés zijn.

Steenkool en aardolie worden gebruikt bij destillatie- of vergassingsprocedés voor het produceren van een groot aantal stoffen, bijv. petroleumstoffen, brandgassen enz., en ook residuen zoals teren en slakken. Heel vaak wordt een gedestilleerd of op andere wijze gefractioneerd product direct verder verwerkt, onder meer met chemische reacties. In dergelijke gevallen moet de stofidentificatie plaatsvinden volgens de instructies die zijn gegeven voor UVCB-subtype 2, aangezien het procedé dan relevanter is dan de bron.

Voor petroleumstoffen wordt een speciaal identificatiesysteem gebruikt (zie subparagraaf 4.3.2.2). Stoffen die onder dat systeem vallen, zijn onder meer fracties en chemische reactieproducten.

Andere stoffen van het UVCB-subtype 4 zijn ertsen, ertsconcentraten en slakken die verschillende hoeveelheden metalen bevatten die door middel van metallurgische verwerking kunnen worden geëxtraheerd.

Mineralen zoals bentoniet of calciumcarbonaat kunnen worden verwerkt met bijvoorbeeld zuuroplossing en/of chemische neerslag of in ionenuitwisselingskolommen. Als de chemische samenstelling volledig gedefinieerd is, moeten mineralen worden geïdentificeerd volgens de instructies in het overeenkomstige deel van paragraaf 4.2. Als mineralen uitsluitend met mechanische methoden worden bewerkt, bijv. door malen, zeven, centrifuge, flotatie enz., worden ze nog steeds identiek geacht aan de mineralen zoals die worden gewonnen. Mineralen die worden gemaakt door middel van een vervaardigingsprocedé kunnen – voor de identificatie[20] – als identiek aan hun in de natuur voorkomend equivalent worden beschouwd op voorwaarde dat de samenstelling hetzelfde is, evenals het toxiciteitsprofiel.

Een belangrijke identificatieparameter voor stoffen van niet-biologische oorsprong is de beschrijving van de relevante verwerkingsstap(pen).

Voor fracties moet het fractioneringsprocedé worden beschreven met de parameters en het afkapbereik voor de geïsoleerde fractie, samen met een beschrijving van de eerdere bewerkingsstappen, indien relevant.

Voor de concentratiestap moet het type procedé, bijv. verdamping, neerslag enz. worden opgegeven, evenals de verhouding tussen de beginconcentratie en de eindconcentratie van de hoofdbestanddelen, naast informatie over de eerdere verwerkingsstap(pen).

Een belangrijk identificatieparameter voor residuen van niet-biologische oorsprong is de beschrijving van het procedé waarbij het residu is ontstaan. Het procedé kan elke fysische reactie zijn die residuen oplevert, bijv. zuivering, fractionering of concentratie.

4.3.1.3. Analytische informatie

In gevallen waarin spectrale gegevens informatie geven over de samenstelling van de UVCB-stof, moet deze informatie worden verstrekt. Er worden verschillende spectroscopische methoden gebruikt voor het genereren van spectra (UV/Vis, infrarood, nucleaire magnetische resonantie of massaspectrum). De methoden en inzichten met betrekking tot het gebruik van deze methoden veranderen voortdurend. Het is daarom de verantwoordelijkheid van de registrant om passende spectrale gegevens te verstrekken.

Een chromatogram dat als vingerafdruk kan worden gebruikt, moet worden verstrekt om de samenstelling van de stof te karakteriseren. Indien gepast kunnen ook andere geldige

[20] Dat de benadering voor de identificatie van in de natuur voorkomende en chemisch geproduceerde mineralen hetzelfde is, hoeft niet te betekenen dat de wettelijke vereisten (bijv. vrijstellingen van registratie) hetzelfde zijn.

technieken voor het scheiden van bestanddelen worden gebruikt.

4.3.2. Specifieke typen UVCB-stoffen

Deze subparagraaf geeft begeleiding met betrekking tot specifieke groepen UVCB-stoffen: stoffen met variatie in de koolstofketenlengte (4.3.2.1), stoffen die zijn verkregen uit olie of olieachtige bronnen (4.3.2.2) en enzymen (4.3.2.3).

4.3.2.1. Stoffen met variatie in de koolstofketenlengte

Deze groep UVCB-stoffen bevat alkylstoffen met een lange keten met variatie in de koolstofketenlengte, bijv. paraffinen en olefinen. Deze stoffen zijn afgeleid van natuurlijke vetten of oliën of synthetisch geproduceerd. De natuurlijke vetten kunnen afkomstig zijn van planten of dieren. Stoffen met lange koolstofketens die zijn afgeleid van planten hebben normaliter alleen ketenlengtes van een even aantal, terwijl stoffen met lange koolstofketens die uit dierlijke bronnen afkomstig zijn ook (enkele) ketenlengtes met oneven aantallen kunnen hebben. Synthetisch geproduceerde stoffen met lange koolstofketens kunnen het hele bereik van koolstofketens omvatten, met even en oneven aantallen.

Identificaties en naamgevingsconventie

De groep omvat stoffen waarvan de afzonderlijke bestanddelen een gemeenschappelijk structuurkenmerk hebben: een of meer alkylgroepen met een lange keten, vaak met een functionele groep daaraan vast. De bestanddelen verschillen van elkaar met betrekking tot een of meer van de volgende kenmerken van de alkylketengroep:

- Lengte van koolstofketen (koolstofgetal)
- Verzadiging
- Structuur (lineair of vertakt)
- Positie van de functionele groep

De chemische identiteit van de bestanddelen kan voldoende worden beschreven en systematisch worden benoemd door gebruik te maken van de volgende drie descriptoren:

- De **alkyldescriptor** die het aantal koolstofatomen in de koolstofketenlengte(s) van de alkylgroep(en) beschrijft.
- De **functionaliteitsdescriptor** die de functionele groep van de stof identificeert, bijv. amine, ammonium, carboxylzuur.
- De **zoutdescriptor**, het kation/anion van een zout, bijv. natrium (Na+), carbonaat (CO32-), chloride (Cl-).

Alkyldescriptor

- In het algemeen verwijst de alkyldescriptor Cx-y naar verzadigde, lineaire alkylketens die alle ketenlengtes omvatten van x tot y, bijv. C8-12 komt overeen met C8, C9, C10, C11 en C12.
- Als de alkyldescriptor alleen naar even of oneven alkylketens verwijst, bijv. C8-12 (even getallen), moet dit worden aangegeven.
- Als de alkyldescriptor (ook) verwijst naar vertakte alkylketens, bijv. C8-12 (vertakt) of C8-12 (lineair en vertakt), moet dit worden aangegeven.
- Als de alkyldescriptor (ook) verwijst naar onverzadigde alkylketens, bijv. C12-22 (C18 onverzadigd), moet dit worden aangegeven.

- Een smalle verspreiding van alkylketenlengtes dekt geen bredere en vice versa, bijv. C10-14 komt niet overeen met C8-18
- De alkyldescriptor kan ook verwijzen naar de bron van de alkylketens, bijv. kokos of dierlijk vet. De koolstofketenlengteverspreiding moet echter overeenkomen met die van de bron.

Het hierboven beschreven systeem moet worden gebruikt voor het beschrijven van stoffen met variatie in de koolstofketenlengtes. Het is niet geschikt voor duidelijk gedefinieerde stoffen, die kunnen worden geïdentificeerd op basis van een exacte chemische structuur.

De informatie over de alkyldescriptor, de functionaliteitsdescriptor en de zoutdescriptor is de basis voor de naamgeving van dit type UVCB-stof. Daarnaast kan informatie over de bron en het procedé nuttig zijn om de stof nauwkeuriger te identificeren.

Voorbeelden		
Descriptoren		**Naam**
Alkyldescriptor **Functionaliteitsdescriptor** **Zoutdescriptor**	alkylketenlengtes C10-18 vetzuren (carboxylzuur) cadmiumzouten	vetzuren (C10-18) cadmiumzouten
Alkyldescriptor **Functionaliteitsdescriptor** **Zoutdescriptor**	di-C10-18-alkyl-dimethyl ammonium chloride	di-C10-18-alkyl-dimethylammoniumchloride
Alkyldescriptor **Functionaliteitsdescriptor** **Zoutdescriptor**	trimethyl talgalkyl ammonium chloride	trimethyl-talgalkyl-ammoniumchloride

4.3.2.2. Stoffen die zijn verkregen uit olie of olieachtige bronnen

Stoffen die zijn verkregen uit olie (petroleumstoffen) of uit olieachtige bronnen (bijv. steenkool) zijn stoffen met een zeer complexe en variabele of gedeeltelijk ongedefinieerde samenstelling. In deze subparagraaf wordt aan de hand van petroleumstoffen gedemonstreerd hoe dit specifieke type UVCB-stof moet worden geïdentificeerd. Dezelfde aanpak kan echter ook worden toegepast op andere stoffen die zijn verkregen uit olieachtige stoffen zoals steenkool.

De uitgangsmaterialen die worden gebruikt in de petroleumraffinage-industrie kunnen bestaan uit ruwe olie of een specifieke raffinagestroom die is verkregen door een of meer procedés. De samenstelling van de eindproducten is afhankelijk van de ruwe olie die voor de vervaardiging is gebruikt (aangezien de samenstelling van ruwe olie varieert afhankelijk van de plaats van herkomst) en de daarop volgende raffinageprocedés. Er is daardoor een natuurlijke, niet van het procedé afhankelijke variatie in de samenstelling van petroleumstoffen16,

1. *Naamgevingsconventie*

Voor de identificatie van petroleumstoffen wordt aanbevolen de naam te geven volgens een

vastgesteld nomenclatuursysteem[21]. Deze naam bestaat normaliter uit het raffinageprocedé, de bron van de stroom en de algemene samenstelling of kenmerken. Als de stof meer dan 5% (w/w) aromatische koolwaterstoffen met vier tot zes gecondenseerde ringen bevat, moet deze informatie worden opgenomen in de beschrijving. Voor petroleumstoffen met een Einecs-nummer moet de naam die in de EG-inventaris staat worden gebruikt.

2. *Identificaties*

De termen en definities voor de identificatie van petroleumstoffen omvatten normaliter de bron van de stroom, het raffinageprocedé, de algemene samenstelling, het koolstofgetal, het kookbereik of andere toepasselijke fysische kenmerken en het overheersende koolwaterstoftype21.

De identificatieparameters van bijlage VI, punt 2 van REACH moeten worden opgegeven. Het wordt erkend dat petroleumstoffen worden vervaardigd met het oog op prestatiespecificaties en niet met het oog op specificaties met betrekking tot de samenstelling. Daarom zijn kenmerken zoals de naam, het koolstofketenlengtebereik, het kookpunt, de viscositeit, de afkapwaarde en andere fysische eigenschappen in het algemeen nuttiger dan informatie over de samenstelling om de petroleumstof zo duidelijk mogelijk te identificeren.

Hoewel de chemische samenstelling niet de primaire identificatie voor UVCB-stoffen is, moeten de bekende hoofdbestanddelen (≥ 10%) worden opgegeven en moet de samenstelling in algemene termen worden beschreven, bijv. molecuulgewichtbereik, alifaten of aromaten, mate van hydrogenering en andere essentiële informatie. Een eventueel ander bestanddeel dat in een lagere concentratie voorkomt, maar van invloed is op de gevarenindeling moet echter ook worden geïdentificeerd met naam en typische concentratie.

4.3.2.3. Enzymen

Enzymen worden meestal geproduceerd door middel van fermentatie van micro-organismen, maar kunnen ook afkomstig zijn van planten of dieren. Het vloeibare enzymenconcentraat dat voortkomt uit de fermentatie of extractie en daarop volgende zuiveringsstappen bevat, naast water, het actieve enzymeiwit en andere bestanddelen, waaronder residuen van de fermentatie, d.w.z. proteïnen, peptiden, aminozuren, koolhydraten, lipiden en anorganische zouten.

Het enzymeiwit moet, samen met de andere bestanddelen die zijn ontstaan bij het fermentatie- of extractieprocedé, maar zonder eventueel water, dat afgescheiden kan worden zonder van invloed te zijn op de stabiliteit van het enzymeiwit of de samenstelling ervan te veranderen, worden gezien als de stof die moet worden geïdentificeerd.

De enzymstof bevat typisch 10-80 % (w/w) van het enzymeiwit. De overige bestanddelen variëren in percentage en zijn afhankelijk van het gebruikte productieorganisme, het fermentatiemedium en de operationele parameters van het fermentatieprocedé, evenals van de downstream toegepaste zuivering, maar de samenstelling ligt typisch tussen de bereiken die in de volgende tabel zijn aangegeven.

Actief enzymeiwit	10–80%
Andere proteïnen + peptiden en aminozuren	5–55%

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

Koolhydraten	3–40%
Lipiden	0–5%
Anorganische zouten	1–45%
Totaal	100%

De enzymstof moet worden gezien als een UVCB-stof vanwege de variabiliteit en gedeeltelijk onbekende samenstelling. Het enzymeiwit moet worden gezien als een bestanddeel van de UVCB-stof. Sterk gezuiverde enzymen kunnen worden geïdentificeerd als stoffen met een duidelijk gedefinieerde samenstelling (met een of meerdere bestanddelen) en moeten overeenkomstig worden geïdentificeerd.

In Einecs is de hoofdidentificatie voor enzymen de katalytische activiteit. Enzymen zijn vermeld als generieke ingangen zonder verdere specificatie of specifieke ingangen waarbij het bronorganisme of het substraat is gespecificeerd.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Einecs-naam**	**CAS-nummer**
278-547-1	Protease, Bacillus neutraal	76774-43-1
278-588-5	Protease, Aspergillus neutraal	77000-13-6
254-453-6	Elastase (varkensalvleesklier)	39445-21-1
262-402-4	Mannanase	60748-69-8

Een onderzoek naar enzymen in opdracht van de Europese Commissie stelde voor enzymen te identificeren volgens het internationale systeem voor enzymennomenclatuur, IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology).[22] Deze benadering wordt in dit richtsnoer overgenomen en maakt een meer systematische, gedetailleerde en alomvattende identificatie van enzymen mogelijk dan Einecs.

1. *Naamgevingsconventie*

Enzymen krijgen hun naam volgens de IUBMB-nomenclatuurconventies.

Het IUBMB-indelingssysteem levert een uniek nummer van vier cijfers voor elk enzymtype en elke katalytische functie (bijv. 3.2.1.1 voor α-amylase).[23] Elk nummer kan gelden voor enzymen met een variabele aminozuurvolgorde en oorsprong, maar de enzymfunctionaliteit is identiek. De naam en het nummer van de IUBMB-nomenclatuur moeten worden gebruikt

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

[23] De termen 'EC-nummer' (≡ Enzyme Commission-nummer) en 'IUBMB-nummer' worden vaak als synoniemen gebruikt. Om misverstanden te voorkomen raden wij aan de term 'IUBMB-nummer' te gebruiken voor de viercijferige code van de IUBMB.

voor de stofidentificatie. De IUBMB-nomenclatuur verdeelt de enzymen in zes hoofdgroepen:

1. Oxidoreductasen
2. Transferasen
3. Hydrolasen
4. Lyasen
5. Isomerasen
6. Ligasen

Het volgende voorbeeld illustreert een vermelding volgens de IUBMB-nomenclatuur:

EC 3.4.22.33

Geaccepteerde naam: vruchtenbromeline

Reactie: Hydrolyse van proteïnen met brede specificiteit voor peptidebindingen.Bz-Phe-Val-Arg┼NHMec is een goed synthetisch substraat, maar er is geen werking op Z-Arg-Arg-NHMec (*vgl.* stambromeline)

Andere na(a)m(en):sapbromeline, ananase, bromelase, bromeline, extranase, pinase, ananasenzym, traumanase, vruchtenbromeline FA2

Commentaar: Afkomstig van de ananasplant, *Ananas comosus*. Nauwelijks geremd door kippencystatine. Een andere cysteïne-endo-peptidase, met vergelijkbare werking op kleine molecuulsubstraten, pinguinain (voorheen EC 3.4.99.18), wordt verkregen uit de verwante plant Bromelia pinguin, maar pinguinain wordt in tegenstelling tot vruchtenbromeline wel geremd door kippencystatine [4].[24] In peptidasefamilie C1[25] (papaïnefamilie). Voorheen EC 3.4.22.5 en opgenomen in EC 3.4.22.4, CAS-registratienummer:9001-00-7

Links naar andere databanken:

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

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

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

Algemene referenties:

Sasaki, M., Kato, T. and Iida, S. Antigenic determinant common to four kinds of thiol proteases of plant origin. *J. Biochem. (Tokio)* 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.* (Tokio) 79 (1976) 1223-1234. [PMID: 956152]

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

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

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

Voorbeelden van enzymenindeling volgens het IUBMB-systeem (http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html) **Proteasen zijn genummerd volgens de volgende criteria:**	
3.	**Hydrolasen**
3.4	**Werkzaam op peptidebindingen (peptidasen), met subklassen:**
3.4.1	α-Amino-Acyl-Peptide Hydrolasen (nu in EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidyl-Aminozuur Hydrolasen (nu in EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptide Hydrolasen (nu in EC 3.4.13)
3.4.4	Peptidyl Peptide Hydrolasen (nu ingedeeld binnen EC 3.4)
3.4.11	Aminopeptidasen
3.4.12	Peptidylaminozuur Hydrolasen of Acylaminozuur Hydrolasen (nu opnieuw ingedeeld binnen 3.4)
3.4.13	Dipeptidasen
3.4.14	Dipeptidyl-peptidasen en tripeptidyl-peptidasen
3.4.15	Peptidyl-dipeptidasen
3.4.16	Serine-type carboxypeptidasen
3.4.17	Metallocarboxypeptidasen
3.4.18	Cysteïne-type carboxypeptidasen
3.4.19	Omega peptidasen
3.4.21	Serine-endopeptidasen
	En verder zijn er specifieke enzymen geïdentificeerd:
3.4.21.1	chymotrypsine
3.4.21.2	chymotrypsine C
3.4.21.3	metridine
3.4.21.4	trypsine
3.4.21.5	trombine
3.4.21.6	coagulatiefactor Xa

3.4.21.7	plasmine
3.4.21.8	valt nu onder EC 3.4.21.34 en EC 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidase
3.4.21.10	acrosine
3.4.21.11	valt nu onder EC 3.4.21.36 en EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-lytische endopeptidase
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Endopeptidasen met onbekend katalytisch mechanisme

Voorbeelden uit Einecs met IUBMB-nummer toegevoegd			
EG-nummer	**Einecs-naam**	**CAS-nummer**	**IUBMB-nummer**
278-547-1	Protease, Bacillus neutraal	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisine	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cellulase	9012-54-8	3.2.1.4

2. *Identificaties*

Enzymstoffen worden geïdentificeerd op basis van het enzymeiwit dat ze bevatten (IUBMB-nomenclatuur) en de andere bestanddelen van de fermentatie. Naast het enzymeiwit is elk specifiek bestanddeel doorgaans niet aanwezig in concentraties van meer dan 1%. Als de identiteit van de specifieke bestanddelen niet bekend is, kunnen deze worden geïdentificeerd door middel van groepering (d.w.z. proteïnen, peptiden, aminozuren, koolhydraten, lipiden en anorganische zouten). Bestanddelen moeten echter worden aangegeven als hun identiteit bekend is en ze moeten worden geïdentificeerd als hun concentratie hoger is dan 10% of als ze relevant zijn voor de indeling en etikettering en/of de PBT-beoordeling[26].

Enzymeiwitten

Enzymeiwitten in het concentraat moeten worden geïdentificeerd met

[26] Meer informatie over PBT-beoordeling en de relevante criteria is te vinden in het Richtsnoer over informatie-eisen en chemische veiligheidsbeoordeling, hoofdstuk R11: PBT assessment.

- IUBMB-nummer
- Namen die zijn gegeven door IUBMB (systeemnaam, enzymnamen, synoniemen)
- Opmerkingen van IUBMB
- Reactie en reactietype
- EG-nummer en -naam, indien gepast
- CAS-nummer en -naam, indien beschikbaar

De reactie die door het enzym teweeg wordt gebracht moet worden gespecificeerd. Deze reactie is gedefinieerd door IUBMB.

Voorbeeld
.alfa.-amylase: Polysaccharide die .alfa.-(1-4)-gebonden glucose-eenheden bevat + H2O = malto-oligosacchariden; endohydrolyse van 1,4-.alfa.-d-glucosidebindingen in polysacchariden die drie of meer 1,4-.alfa.-gebonden d-glucose-eenheden bevatten.

Volgens de enzymklasse moet er een type reactie worden toegekend. Dat kan oxidatie, reductie, eliminatie, additie of een reactienaam zijn.

Voorbeeld
.alfa.-amylase: O-glycosylbinding hydrolyse (endohydrolyse).

Andere bestanddelen dan het enzymeiwit

Alle bestanddelen van ≥ 10% (w/w) of die relevant zijn voor de indeling en etikettering en/of PBT-beoordeling[27] moeten worden geïdentificeerd. De identiteit van de bestanddelen van minder dan 10% kan worden aangegeven als een chemische groep. Hun typische concentratie(s) of concentratiebereik(en) moeten worden opgegeven, d.w.z.:

- (glyco)proteïnen
- peptiden en aminozuren
- koolhydraten
- lipiden
- anorganisch materiaal (bijv. natriumchloride of andere anorganische zouten)

Als het niet mogelijk is de overige bestanddelen van een enzymenconcentraat afdoende te identificeren, moet de naam van het productieorganisme (geslacht en stam of genetisch type indien relevant) worden opgegeven, zoals voor andere UVCB-stoffen van biologische oorsprong.

Indien beschikbaar kunnen aanvullende parameters worden opgegeven, bijv. functionele parameters (d.w.z. pH- of temperatuuroptima en -bereiken), kinetische parameters (d.w.z. specifieke activiteit of omzettingsgetal), liganden, substraten en producten en cofactoren.

[27] Meer informatie over PBT-beoordeling en de relevante concentratiegrenzen is te vinden in RIP 3.2 TGD over chemische veiligheidsbeoordeling, gedeelte over PBT-beoordeling.

5. Criteria om te controleren of stoffen identiek zijn

Bij het controleren of stoffen van verschillende fabrikanten/importeurs als dezelfde stof kunnen worden beschouwd, moeten enkele regels worden gevolgd. Deze regels, die werden toegepast voor het instellen van Einecs, moeten worden gezien als een gemeenschappelijke basis voor de identificatie en naamgeving van een stof en dus voor het vinden van een potentiële mederegistrant van de betreffende stof5, 6, 16, [28], [29] Stoffen die niet als identiek worden gezien, kunnen echter als structureel verwant worden beschouwd door de toepassing van een deskundig oordeel. Gezamenlijk gebruik van gegevens kan evenwel mogelijk zijn voor deze stoffen als dit wetenschappelijk gemotiveerd kan worden. Dat is echter niet het onderwerp van dit richtsnoer, maar wordt besproken in het *Richtsnoer voor gezamenlijk gebruik van gegevens*.

- De '≥ 80%-regel' voor stoffen met één bestanddeel en de '< 80%/≥ 10%-regel' voor stoffen met meerdere bestanddelen moeten worden toegepast.

Er wordt geen onderscheid gemaakt tussen technische, zuivere of analytische kwaliteiten van de stoffen. Dat betekent dat 'dezelfde' stof verschillende zuiverheids-/onzuiverheidsprofielen kan hebben, afhankelijk van de kwaliteit. Duidelijk gedefinieerde stoffen moeten echter hetzelfde hoofdbestanddeel of dezelfde hoofdbestanddelen bevatten en alleen die onzuiverheden die afkomstig zijn van het productieprocedé (zie voor details paragraaf 4.2) en die additieven die noodzakelijk zijn om de stof te stabiliseren.

- Gehydrateerde en watervrije vormen van verbindingen moeten worden gezien als identiek ten behoeve van een registratie.

Voorbeelden

Naam en formule	CAS-nummer	EG-nummer	Regel
Kopersulfaat (Cu H2O4S)	7758-98-7	231-847-6	
Zwavelzuur koper(2+) zout (1:1), pentahydraat (Cu.H2O4 S . 5 H2O)	7758-99-8		Deze stof valt onder een registratie van zijn watervrije vorm (EG-nummer: 231-847-6)

Gehydrateerde en watervrije vormen hebben verschillende chemische namen en verschillende CAS-nummers.

- Zuren of basen en hun zouten moeten worden gezien als verschillende stoffen.

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

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
201-186-8	Per-azijnzuur C2H4O3	Deze stof mag niet worden gezien als identiek aan, bijvoorbeeld, zijn natriumzout (Einecs 220-624-9)
220-624-9	Natriumglycolaat C2H4O3 . Na	Deze stof mag niet worden gezien als identiek aan het bijbehorende zuur (Einecs 201-186-8)
202-426-4	2-Chlooraniline C6H6ClN	Deze stof mag niet worden gezien als identiek aan, bijvoorbeeld, 2-chlooraniline hydrobromide (1:1) (C6H6ClN . HBr)

- Individuele zouten (bijv. natrium of kalium) moeten worden gezien als verschillende stoffen.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
208-534-8	Natriumbenzoaat C7H5O2 . Na	Deze stof mag niet worden gezien als identiek aan, bijvoorbeeld, het kaliumzout (Einecs 209-481-3)
209-481-3	Kaliumbenzoaat C7H5O2 . K	Deze stof mag niet worden gezien als identiek aan, bijvoorbeeld, het natriumzout (Einecs 208-534-8)

- Vertakte of lineaire alkylketens moeten worden gezien als verschillende stoffen.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
295-083-5	Fosforzuur, dipentylester, vertakt en lineair	Deze stof mag niet worden gezien als identiek aan de afzonderlijke stoffen fosforzuur, dipentylester, vertakt of

		fosforzuur, dipentylester, lineair

- Vertakte groepen moeten als zodanig worden genoemd in de naam. Stoffen die alkylgroepen bevatten zonder verdere informatie omvatten alleen de onvertakte lineaire ketens, tenzij anders aangegeven.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
306-791-1	Vetzuren, C12-16	Alleen stoffen met lineaire en onvertakte alkylgroepen worden gezien als identiek
279-420-3	Alcoholen, C12-14	
288-454-8	Aminen, C12-18-alkylmethyl	

- Stoffen met alkylgroepen waarbij aanvullende termen zijn gebruikt zoals iso, neo, vertakt enzovoort mogen niet worden gezien als identiek aan stoffen zonder die specificatie.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
266-944-2	Glyceriden, C12-18 Deze stof is geïdentificeerd met SDA-stofnaam: C12-C18 trialkyl glyceride en SDA-meldingsnummer: 16-001-00	Deze stof mag niet worden gezien als identiek aan C12-18-iso Stof met verzadigde alkylketens die op enige positie vertakt is

- Zonder expliciete specificatie moeten alkylketens in zuren of alcoholen enz. worden geacht alleen de verzadigde ketens te vertegenwoordigen. Onverzadigde ketens moeten als zodanig worden gespecificeerd en worden gezien als andere stoffen.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
200-313-4	Stearinezuur, zuiver C18H36O2	Deze stof mag niet worden gezien als identiek aan oliezuur, zuiver, C18H34O2 (Einecs 204-007-1)

- Stoffen met chirale centra

Een stof met één chiraal centrum kan voorkomen in een linker- en rechtervorm (optische isomeren). Tenzij het tegendeel is aangegeven, wordt aangenomen dat een stof een gelijkmatig (racemisch) mengsel van de twee vormen is.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
201-154-3	2-chloorpropan-1-ol	De individuele optische isomeren (R)-2-chloorpropan-1-ol en (S)-2-chloorpropan-1-ol worden niet gezien als identiek aan deze vermelding

Als een stof is verrijkt met één vorm van de optische isomeren, gelden de regels voor stoffen met meerdere bestanddelen. Op dezelfde manier worden racematen gezien als stoffen met meerdere bestanddelen.

Stoffen met meerdere chirale centra kunnen voorkomen in 2n vormen (waarbij n het aantal chirale centra is). Deze verschillende vormen kunnen van elkaar verschillen in fysisch-chemische, toxicologische en/of ecotoxicologische eigenschappen. Ze moeten worden gezien als afzonderlijke stoffen.

- Anorganische katalysatoren

Anorganische katalysatoren worden gezien als mengsels. Voor de identificatie moeten de metalen of metaalverbindingen erin worden gezien als afzonderlijke stoffen (zonder specificatie van gebruik).

Voorbeelden		
	Naam	**Regel**
	Kobaltoxide-aluminiumoxide katalysator	Moet afzonderlijk worden geïdentificeerd als: - Kobalt II oxide - Kobalt III oxide - Aluminiumoxide - Aluminiumkobaltoxide

- Enzymenconcentraten met hetzelfde IUBMB-nummer kunnen worden gezien als dezelfde stof, ook als er verschillende productieorganismen zijn gebruikt, op voorwaarden dat de gevaarlijke eigenschappen niet significant verschillen en aanleiding geven tot dezelfde indeling.

Stoffen met meerdere bestanddelen

Richtlijn 67/548/EEG regelde het in de handel brengen van stoffen. De productiewijze van de stof was niet relevant. Daardoor viel een in de handel gebrachte stof met meerdere bestanddelen onder Einecs als *alle* afzonderlijke bestanddelen waren opgenomen in Einecs; bijv. het isomerenmengsel difluorbenzenen viel onder de Einecs-vermeldingen 1,2-difluorbenzeen (206-680-7), 1,3-difluorbenzeen (206-746-5) en 1,4-difluorbenzeen (208-742-9), hoewel het isomerenmengsel zelf niet in Einecs stond.

REACH vereist in plaats daarvan de registratie van de vervaardigde stof. Er wordt per geval besloten in hoeverre de verschillende stappen voor de productie van de stof onder de definitie van 'vervaardiging' vallen (bijv. verschillende zuiverings- of destillatiestappen). Als een stof met meerdere bestanddelen wordt geproduceerd, moet deze worden geregistreerd (tenzij hij onder een registratie van de afzonderlijke bestanddelen valt; zie subparagraaf 4.2.2.4); bijv. het isomerenmengsel difluorbenzeen wordt geproduceerd, dus 'difluorbenzeen', als een isomerenmengsel, moet worden geregistreerd. Voor stoffen met meerdere bestanddelen is het echter niet nodig de stof als zodanig te testen als het gevarenprofiel van de stof voldoende kan worden beschreven met de informatie over de afzonderlijke bestanddelen. Als de afzonderlijke isomeren 1,2-difluorbenzeen, 1,3-difluorbenzeen en 1,4-difluorbenzeen worden geproduceerd en daarna worden gemengd, moeten de afzonderlijke isomeren worden geregistreerd en wordt het isomerenmengsel gezien als een mengsel.

Een stof met meerdere bestanddelen met de hoofdbestanddelen A, B en C mag niet worden gezien als identiek aan een stof met meerdere bestanddelen met de hoofdbestanddelen A en B of als een reactiemassa van A, B, C en D.

- Een stof met meerdere bestanddelen wordt niet identiek geacht aan een stof met slechts een deelverzameling van de afzonderlijke bestanddelen.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
207-205-6	2,5-difluortolueen	Deze twee stoffen worden niet gezien als identiek aan het isomerenmengsel difluortoluenen omdat deze twee stoffen slechts een deelverzameling van alle mogelijke isomeren zijn.
207-211-9	2,4-difluortolueen	

- De registratie van een stof met meerdere bestanddelen dekt niet de afzonderlijke bestanddelen.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
208-747-6	1,2-dibroomethyleen	Deze stof beschrijft een mengsel van cis- en trans-isomeren. De afzonderlijke

		stoffen (1Z)-1,2-dibroometheen en (1E)-1,2-dibroometheen vallen niet onder de registratie van het isomerenmengsel.

UVCB-stoffen

- Een UVCB-stof met een smalle verdeling van bestanddelen wordt niet identiek geacht aan een UVCB-stof met een bredere samenstelling en vice versa.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
288-450-6	Aminen, C12-18-alkyl, acetaten	De stoffen 'aminen, C12-14-alkyl, acetaten' of 'aminen, C12-20-alkyl, acetaten' of 'aminen, dodecyl (C12-alkyl), acetaten' of stoffen met alleen even aantallen alkylketens worden niet identiek geacht aan deze stof.

- Een stof die wordt gekarakteriseerd door een soort/geslacht wordt niet gezien als identiek aan een stof die is geïsoleerd uit een andere soort of een ander geslacht.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
296-286-1	Glyceriden, zonnebloemolie di-	Deze stof wordt niet identiek geacht aan glyceriden, soja di- (Einecs: 271-386-8) en ook niet aan glyceriden, talg di- (Einecs: 271-388-9)
232-401-3	Lijnzaadolie, geëpoxideerd	Deze stof wordt niet identiek geacht aan lijnzaadolie, geoxideerd (Einecs: 272-038-8), noch aan lijnzaadolie, gemaleateerd (Einecs: 268-897-3), noch aan ricinusolie, geëpoxideerd (niet vermeld in Einecs).

- Een gezuiverd extract of een concentraat wordt gezien als een andere stof dan het extract.

Voorbeelden		
EG-nummer	**Naam**	**Regel**
232-299-0	Raapolie Extracten en fysisch gemodificeerde derivaten daarvan. Bestaat hoofdzakelijk uit de glyceriden van de vetzuren erucazuur, linolzuur en oliezuur. (Brassica napus, Cruciferae)	De stof '(Z)-docos-13-enzuur (erucazuur)' is een bestanddeel van de stof 'raapolie'. Erucazuur wordt niet gezien als identiek aan raapolie, aangezien het als een zuivere stof uit de raapolie is geïsoleerd; erucazuur heeft zijn eigen Einecs-vermelding (204-011-3). Een geïsoleerd mengsel van palmitinezuur, oliezuur, linolzuur, linoleenzuur, erucazuur en eicoseenzuur wordt niet identiek geacht aan raapolie, aangezien deze bestanddelen niet de hele olie vertegenwoordigen.

6. Stofidentiteit binnen (LATE) preregistratie en informatieverzoek

Begeleiding met betrekking tot de identificatie en naamgeving van stoffen vindt u in hoofdstuk 4 van dit richtsnoer. Deze begeleiding moet worden gevolgd om te bepalen of stoffen als identiek kunnen worden beschouwd voor de toepassing van REACH en CLP. Dit wordt hierna verder uitgewerkt voor (late) preregistratie van geleidelijk geïntegreerde stoffen en voor het inwinnen van informatie over niet-geleidelijk geïntegreerde stoffen.

Volgens artikel 4 kan elke fabrikant of importeur, hoewel hij zelf volledig verantwoordelijk blijft voor het naleven van zijn verplichting op grond van de REACH-verordening, een derde vertegenwoordiger aanwijzen voor alle procedures op grond van titel III waarbij overleg moet worden gevoerd met andere fabrikanten of importeurs.

6.1. (LATE) preregistratie

Het doel van de (late) preregistratieprocedure is potentiële registranten van dezelfde stof bijeen brengen om dubbele onderzoeken te voorkomen, in het bijzonder als het gaat om proeven met gewervelde dieren. (Late) preregistratie geldt alleen voor geleidelijk geïntegreerde stoffen.

Meer informatie over (late) preregistratie en over wie er nog baat bij kunnen hebben, kunt u vinden in het *Richtsnoer voor gezamenlijk gebruik van gegevens* op http://echa.europa.eu/nl/guidance-documents/guidance-on-reach en op de speciale webpagina van ECHA: http://echa.europa.eu/nl/regulations/reach/registration/data-sharing/pre-registration.

6.2. Informatieverzoek

Voor niet-geleidelijk geïntegreerde stoffen of geleidelijk geïntegreerde stoffen die niet zijn gepreregistreerd is de potentiële registrant verplicht voor de registratie informatie in te winnen bij het Agentschap om na te gaan of er al een registratie is ingediend voor dezelfde stof (artikel 26 van REACH). Dit informatieverzoek moet de volgende gegevens bevatten:

- de identiteit van de potentiële registrant zoals gespecificeerd in punt 1 van bijlage VI van de REACH-verordening met uitzondering van de gebruikslocaties;
- de identiteit van de stof, zoals gespecificeerd in punt 2 van bijlage VI van de REACH-verordening;
- voor welke informatie-eisen de potentiële registrant nieuwe onderzoeken met gewervelde dieren zou moeten uitvoeren;
- voor welke informatie-eisen de potentiële registrant andere nieuwe onderzoeken zou moeten uitvoeren.

De potentiële registrant moet de identiteit en naam van de stof opgeven volgens de regels die zijn beschreven in hoofdstuk 4 van dit richtsnoer.

Het Agentschap moet vaststellen of dezelfde stof al eerder is geregistreerd. Ook dit moet worden gedaan volgens de regels die zijn beschreven in hoofdstuk 4 van dit richtsnoer. Het resultaat wordt medegedeeld aan de potentiële registrant en eventuele eerdere of andere potentiële registranten worden op de hoogte gesteld.

Meer informatie over het inwinnen van informatie is te vinden in het *Richtsnoer voor gezamenlijk gebruik van gegevens* op de speciale webpagina van ECHA: http://echa.europa.eu/reachit/inquiry_nl.asp.

7. Voorbeelden

De voorbeelden op de volgende bladzijden zijn uitsluitend bedoeld om te illustreren hoe de gebruiker met de begeleiding in dit richtsnoer kan werken. Ze vormen geen enkel precedent met betrekking tot de plichten op grond van REACH.

De volgende voorbeelden zijn opgenomen:

- ‘Di-ethylperoxydicarbonaat’ is een voorbeeld van een stof met één bestanddeel die een oplosmiddel bevat dat ook als stabilisator werkt (zie paragraaf 7.1);
- ‘Zolimidine’ is een voorbeeld van een stof die zou kunnen worden geïdentificeerd als een stof met één bestanddeel of als een stof met meerdere bestanddelen (zie paragraaf 7.2);
- Een ‘mengsel van isomeren’ dat wordt gevormd tijdens de vervaardigingsreactie is opgenomen als een voorbeeld van een stof met meerdere bestanddelen (zie paragraaf 7.3). Deze stof viel eerder onder de Einecs-vermeldingen van de afzonderlijke isomeren;
- ‘Parfum AH’ is een voorbeeld van een stof die wordt geproduceerd in verschillende kwaliteiten en die kan worden omschreven als een reactiemassa van vijf bestanddelen met concentratiebereiken (paragraaf 7.4). Het is ook een voorbeeld van een gemotiveerde afwijking van de 80%-regel en de 10%-regel;
- Niet-metaalhoudende ‘mineralen’, waaronder montmorilloniet als voorbeeld van een duidelijk gedefinieerde stof waarvoor aanvullende fysische karakterisering nodig is, worden besproken in paragraaf 7.5;
- Een ‘etherische olie van lavendel’ is een voorbeeld van een UVCB-stof die wordt verkregen uit planten (paragraaf 7.6);
- ‘Chrysantenolie en daaruit geïsoleerde isomeren’ is een voorbeeld van een UVCB-stof van biologische oorsprong die verder is verwerkt (paragraaf 7.7);
- ‘Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat’ is een voorbeeld van een variabele UVCB-stof die niet volledig gedefinieerd kan worden (paragraaf 7.8);
- ‘Quaternaire ammoniumverbindingen’ zijn voorbeelden van stoffen met variatie in de koolstofketenlengte (paragraaf 7.9);
- Twee voorbeelden voor ‘petroleumstoffen’, een benzinemengstroom en gasoliën, worden besproken in paragraaf 7.10;
- Twee voorbeelden van het identificeren van enzymen, laccase en amylase, zijn te vinden in paragraaf 7.11.

7.1. Di-ethylperoxydicarBonaat

De stof ‘di-ethylperoxydicarbonaat’ (EG 238-707-3, CAS 14666-78-5, C6H10O6) wordt geproduceerd als een oplossing van 18% in isododecaan (EG 250-816-8, CAS 31807-55-3). Isododecaan werkt ook als een stabilisator tegen explosieve eigenschappen. De hoogst mogelijke concentratie waarbij de stof veilig gehanteerd kan worden is een oplossing van 27%.

Hoe moet de hierboven beschreven stof worden geïdentificeerd en benoemd voor registratie?

Volgens de definitie van stof in REACH moeten oplosmiddelen die kunnen worden afgescheiden zonder dat de stabiliteit van de stof wordt aangetast of de samenstelling ervan wordt gewijzigd buiten beschouwing worden gelaten. Aangezien isododecaan ook werkt als stabilisator en niet volledig kan worden afgescheiden als gevolg van de explosieve eigenschappen van de stof, moet isododecaan worden gezien als een additief en niet alleen

als een oplosmiddel. De stof moet echter nog steeds worden gezien als een stof met één bestanddeel. Daarom moet de stof worden geregistreerd als de oplossing met de laagste concentratie isododecaan die veilig gehanteerd kan worden:

Di-ethylperoxydicarbonaat (bovenste concentratiegrens: 27%). Isododecaan moet worden vermeld onder 'additieven' en de stabiliserende functie moet worden gespecificeerd.

7.2. ZOLIMIDINE

De vervaardigde methanoloplossing bevat 'zolimidine' (EG 214-947-4; CAS 1222-57-7, C14H12N2O2S) en 'imidazool' (EG 206-019-2; CAS 288-32-4, C3H4N2). Na verwijdering van het oplosmiddel 'methanol' en optimalisering van het vervaardigingsprocedé heeft de stof een zuiverheidsbereik van 74-86% zolimidine en 4 12% imidazool.

Hoe moet de hierboven beschreven stof worden geïdentificeerd en benoemd voor registratie?

Volgens de definitie van stof in REACH moeten oplosmiddelen die kunnen worden afgescheiden zonder dat de stabiliteit van de stof wordt aangetast of de samenstelling ervan wordt gewijzigd buiten beschouwing worden gelaten. Aangezien methanol in het bovenstaande geval zonder problemen kan worden afgescheiden, moet de oplosmiddelvrije stof worden geregistreerd.

In het algemeen wordt een stof gezien als een stof met één bestanddeel als één hoofdbestanddeel aanwezig is in een concentratie van ≥ 80%. Een stof wordt gezien als een stof met meerdere bestanddelen als meer dan één hoofdbestanddeel voorkomt in een concentratie van ≥ 10% en < 80%. Het bovenstaande voorbeeld is een grensgeval, want de drempelwaarden worden overschreden. Daarom kan de stof worden gezien als een stof met één bestanddeel, 'zolimidine', of als een stof met meerdere bestanddelen, een reactiemassa van 'zolimidine' en 'imidazool'.

In zo'n grensgeval kan de typische concentratie van de hoofdbestanddelen van de stof als volgt worden gebruikt om te bepalen hoe de stof het beste kan worden beschreven:

(1) Als de typische concentratie van zolimidine 77% en die van imidazool 11% is, wordt aanbevolen de stof te beschouwen als een reactiemassa van zolimidine en imidazool;

(2) Als de typische concentratie van zolimidine 85% en die van imidazool 5% is, wordt aanbevolen de stof te beschouwen als een stof met één bestanddeel, 'zolimidine'.

7.3. Mengsel van isomeren

De betreffende stof is een mengsel (reactiemassa) van twee isomeren dat wordt gevormd tijdens de vervaardigingsreactie. De afzonderlijke isomeren waren aangemeld bij Einecs. Richtlijn 67/548/EEG regelde het in de handel brengen van stoffen. Aangezien de productiewijze van de stof niet relevant was, viel het mengsel onder de Einecs-vermeldingen van de twee afzonderlijke isomeren. REACH vereist de registratie van vervaardigde stoffen. Er wordt per geval besloten in hoeverre de verschillende stappen voor de productie van de stof onder de definitie van 'vervaardiging' vallen. Als het isomerenmengsel wordt geregistreerd als een stof met meerdere bestanddelen (volgens de instructies van subparagraaf 4.2.2), is het niet nodig de stof als zodanig te testen als het gevarenprofiel van de stof voldoende kan worden beschreven met de informatie over de afzonderlijke bestanddelen. Er moet echter worden verwezen naar de Einecs-vermeldingen van de afzonderlijke isomeren om de status van geleidelijk geïntegreerde stof aan te tonen.

1. *Naam en andere identificaties*

Voorbeelden	
IUPAC-naam of andere internationale chemische naam (van de stof)	Reactiemassa van 2,2'-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol en 2,2'-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
Andere namen (van de stof)	2,2'-[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol Reactiemassa van ethanol, 2,2'-[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- en water Ethanol, 2,2'-[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- (9CI) isomere verbinding
EG-nummer (van de stof) **EG-naam** **EG-beschrijving**	Er bestaat geen EG-nummer voor het mengsel, aangezien het mengsel niet was aangemeld bij Einecs. De stof viel echter onder de Einecs-vermeldingen van de bestanddelen (279-502-9, 279-501-3). Het mengsel moet daarom worden gezien als een geleidelijk geïntegreerde stof.
CAS-nummer (van de stof) **CAS-naam**	niet beschikbaar niet beschikbaar
EG-nummer (bestanddeel A) **EG-naam** **EG-beschrijving**	279-502-9 2,2'-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
EG-nummer (bestanddeel B) **EG-naam** **EG-beschrijving**	279-501-3 2,2'-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
CAS-nummer (bestanddeel A) **CAS-naam**	80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
CAS-nummer (bestanddeel B) **CAS-naam**	80584-88-9 Ethanol, 2,2'-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
Andere identiteitscode **Referentie**	ENCS-nummer 5-5917

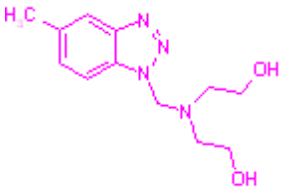
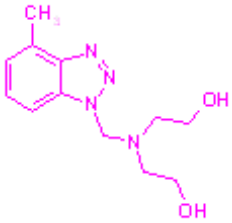
2. *Samenstellingsinformatie – hoofdbestanddelen*

Hoofdbestanddelen	IUPAC-naam	CAS-nummer	EG-nummer	Mol. formule Hill-methode	Typische conc. (%w/w)	Conc. bereik (%w/w)
A	Ethanol, 2,2'-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
B	Ethanol, 2,2'-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

Hoofdbestanddelen	Andere namen
A	2,2'-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
B	2,2'-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol

Hoofdbestanddelen	EG-naam	EG-beschrijving
A	2,2'-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/
B	2,2'-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/

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

	Hoofdbestanddelen Molecuulformule CAS-methode	Structuurformule	SMILES-code
A	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12
B	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12

Hoofdbestanddelen	Molecuulgewicht [g mol-1]	Molecuulgewichtbereik
A	250	/
B	250	/

7.4. Geurstof AH

Geurstof AH bestaat uit gamma (iso-alfa) methyljonon en de isomeren daarvan. Het wordt geproduceerd in drie verschillende kwaliteiten (kwaliteit A, B en C), waarbij de verhouding van de isomeren verschilt.

De volgende tabel geeft een overzicht van de samenstelling van de verschillende kwaliteiten.

Samenstelling van de verschillende kwaliteiten van Parfum AH				
Concentratiebereik [%]	**Kwaliteit A**	**Kwaliteit B**	**Kwaliteit C**	**Algemene bereiken**
gamma (iso-alfa) methyljonon	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (iso-beta) methyljonon	6 - 10	3 - 7	3 – 7	3 - 10
alfa n-methyljonon	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma n-methyljonon	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
beta n-methyljonon	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5 -15
pseudomethyljonon	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Er zijn verschillende opties voor de stofidentificatie:

- Kwaliteit A bevat ten minste 80% van de isomeer gamma (iso-alfa) methyljonon en kan daarom worden gezien als een stof met één bestanddeel, namelijk de isomeer gamma (iso-alfa) methyljonon, met de andere isomeren als onzuiverheden.
- De kwaliteiten B en C bevatten minder dan 80% van de isomeer gamma (iso-alfa) methyljonon en ≥ 10% van andere isomeren. Ze kunnen daarom worden gezien als stoffen met meerdere bestanddelen:
  - Kwaliteit B: als een reactiemassa van gamma (iso-alfa) methyljonon (65-75%) en alfa-n methyljonon (10-20%) met de andere isomeren als onzuiverheden.
  - Kwaliteit C: als een reactiemassa van gamma (iso-alfa) methyljonon (50-60%) en alfa-n methyljonon (20-30%) met de andere isomeren als onzuiverheden.

De samenstelling is variabel en soms is een isomeer aanwezig in een concentratie van ≥ 10% (waardoor hij normaliter een hoofdbestanddeel genoemd zou worden) en soms in een concentratie van < 10% (waardoor hij normaliter een onzuiverheid genoemd zou worden).

Het is mogelijk de verschillende kwaliteiten afzonderlijk te registreren. Dat zou betekenen dat er drie registraties nodig zijn. Read-across van gegevens kan echter te motiveren zijn.

Alternatieven die kunnen worden overwogen zijn:

- Eén registratie als een stof met één bestanddeel met twee subkwaliteiten. In dat geval wijken de subkwaliteiten af van de 80%-regel (zie subparagraaf 4.2.1);
- Eén registratie als een gedefinieerde reactiemassa van vijf isomeren (stof met meerdere bestanddelen). In dat geval wijken sommige isomeren (hoofdbestanddelen) af van de 10%-regel die het onderscheid tussen hoofdbestanddelen en onzuiverheden bepaalt (zie subparagraaf 4.2.2).
- Eén registratie als een gedefinieerde reactiemassa waarbij de variabiliteit van de samenstelling wordt gedekt door het volledige bereik van elke isomeer.

Het kan belangrijk zijn om te overwegen dat:

- De drie kwaliteiten dezelfde of zeer vergelijkbare fysisch-chemische eigenschappen hebben;
- De drie kwaliteiten vergelijkbare gebruiks- en blootstellingsscenario's hebben;
- Alle kwaliteiten dezelfde gevarenindeling en etikettering hebben en de inhoud van de veiligheidsinformatiebladen en veiligheidsrapporten identiek is;
- De beschikbare testgegevens (en toekomstige tests) de variabiliteit van de drie kwaliteiten afdekken.

In dit voorbeeld wordt de identificatie van de stof als een gedefinieerde reactiemassa van vijf isomeren (stof met meerdere bestanddelen) beschreven. Een motivering is hiervoor noodzakelijk, vanwege de afwijking van de 80%-regel (zie subparagraaf 4.2.1) en de 10%-regel (zie subparagraaf 4.2.2). Aangezien elke kwaliteit als zodanig wordt geproduceerd, moet de samenstelling van elk van de drie kwaliteiten worden gespecificeerd in het registratiedossier. Formeel kunnen er echter ten minste twee registraties nodig zijn: (1) Gamma (iso-alfa) methyljonon en (2) Reactiemassa van gamma (iso-alfa) methyljonon en alfa-n-methyljonon.

Stofidentificatie

Parfum AH wordt geproduceerd in drie verschillende kwaliteiten (A, B en C) met dezelfde kwalitatieve maar een andere kwantitatieve samenstelling. Alle drie de kwaliteiten worden

beschreven in één registratiedossier voor een stof met meerdere bestanddelen. Hoewel dit impliceert dat de 80%- en de 10%-regel niet strikt zijn toegepast, is de registratie als één stof met meerdere bestanddelen gerechtvaardigd, aangezien (1) de beschikbare testgegevens de variabiliteit van de drie kwaliteiten afdekken, (2) de drie kwaliteiten zeer vergelijkbare fysisch-chemische eigenschappen hebben, (3) alle kwaliteiten dezelfde gevarenindeling en etikettering hebben (en de veiligheidsinformatiebladen dus identiek zijn), en (4) de drie kwaliteiten vergelijkbare gebruiks- en blootstellingsscenario's hebben (en dus vergelijkbare chemische veiligheidsrapporten).

1. *Naam en andere identificaties*

IUPAC-naam of andere internationale chemische naam	Reactiemassa van 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-on; 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-on; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on; 1-(6,6-methyl-2-methyleencyclohex-1-yl)pent-1-en-3-on; 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-ten-3-on
Andere namen	Methyljonon Gamma kwaliteit A Methyljonon Gamma kwaliteit B Methyljonon Gamma kwaliteit C
EG-nummer EG-naam EG-beschrijving	niet beschikbaar / /
CAS-nummer CAS-naam	niet beschikbaar /

2. *Samenstellingsinformatie – hoofdbestanddelen*

In theorie zijn er aanvullende optische isomeren mogelijk. De volgende isomeren zijn echter geanalyseerd:

Hoofdbestanddelen						
	IUPAC-naam	CAS-nummer	EG-nummer	Mol. formule Hill-methode	Min. conc. (%w/w)	Max. conc. (%w/w)
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-on	127-51-5	204-846-3	C14H22O	50	85
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-on	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-on	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
D	1-(6,6-methyl-2-methyleencyclohex-1-yl)pent-1-en-3-on	niet beschikbaar	niet beschikbaar	C14H22O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

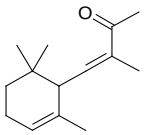
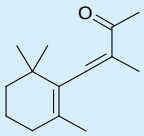
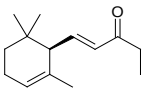
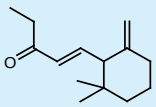
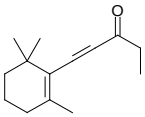
Hoofdbestanddelen	
	Andere namen
A	alfa-iso-methyljonon; gamma-methyljonon
B	beta-iso-methyljonon; delta-methyljonon
C	alfa-n-methyljonon
D	gamma-n-methyljonon
E	beta-n-methyljonon

Hoofdbestanddelen		
	EG-naam	**EG-beschrijving**
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on	/
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on	/
C	[R-*(E)*]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	/
D	1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	/
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	/

Hoofdbestanddelen		
	CAS-naam	**CAS-nummer**
A	3-buten-2-on, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	127-51-5
B	3-buten-2-on, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	79-89-0
C	1-penten-3-on, 1-[(1R)-2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)]-, (1E)-	127-42-4
D	niet beschikbaar	niet beschikbaar
E	1-penten-3-on, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	127-43-5

Hoofdbestanddelen		
	Andere identiteitscode	**Referentie**
A	2714 07.036	FEMA EU-repertorium van aromastoffen
B	07.041	EU-repertorium van aromastoffen

C	2711 07.009	FEMA EU-repertorium van aromastoffen
D	niet beschikbaar	niet beschikbaar
E	2712 07.010	FEMA EU-repertorium van aromastoffen

Hoofdbestanddelen			
	Molecuulformule **CAS-methode**	**Structuurformule**	**SMILES-code**
A	C14H22O		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C
B	C14H22O		O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C
C	C14H22O		O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC
D	C14H22O		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC
E	C14H22O		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

Hoofdbestanddelen		
	Molecuulgewicht / g mol-1	Molecuulgewichtbereik
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. *Samenstellingsinformatie – onzuiverheden en additieven*

Onzuiverheden						
	IUPAC-naam	CAS-nummer	EG-nummer	Mol. formule	Typische conc. (%w/w)	Conc. bereik (%w/w)
F						
aantal niet-gespecificeerde onzuiverheden:				11 (pseudomethyljononen)		
totale concentratie niet-gespecificeerde onzuiverheden:				0,5 – 3% w/w		

Additieven						
	IUPAC-naam	CAS-nummer	EG-nummer	Mol. formule	Typische conc. (%w/w)	Conc. bereik (%w/w)
G	Gebutyleerd Hydroxytoluen (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0,1	0,05 – 0,15

4. *Informatie over de verschillende kwaliteiten*

Hieronder staan de bereiken van de vijf hoofdbestanddelen in de drie verschillende kwaliteiten:

Concentratiebereik [%]	Kwaliteit A	Kwaliteit B	Kwaliteit C
gamma (iso-alfa) methyljonon	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (iso-beta) methyljonon	6 - 10	3 - 7	3 – 7
alfa n-methyljonon	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-methyljonon	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4
beta n-methyljonon	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15
pseudomethyljonon	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Mineralen

Een mineraal is gedefinieerd als een combinatie van anorganische bestanddelen zoals die worden gevonden in de aardkorst met een karakteristieke set chemische samenstellingen, kristalvormen (van zeer sterk kristallijn tot amorf) en fysisch-chemische eigenschappen.

Mineralen zijn vrijgesteld van registratie als ze voldoen aan de definitie van een stof die in de natuur voorkomt (*artikel 3, lid 39* van REACH) en als ze niet chemisch zijn gewijzigd (*artikel 3, lid 40* van REACH). Dit geldt voor mineralen waarvan de chemische structuur ongewijzigd is, zelfs als ze een chemisch procedé of een chemische behandeling hebben ondergaan, of een fysische mineralogische transformatie, bijvoorbeeld om onzuiverheden te verwijderen.

Sommige mineralen kunnen op unieke wijze worden beschreven op basis van hun chemische samenstelling (zie subparagrafen 4.2.1 en 4.2.2 voor stoffen met een of meerdere bestanddelen), maar voor andere is de chemische samenstelling alleen niet voldoende voor een unieke identificatie van deze stoffen (zie subparagraaf 4.2.3).

Anders dan bij andere stoffen met een of meer bestanddelen moet de identificatie van veel mineralen worden gebaseerd op de chemische samenstelling *en* de interne structuur (bijv. zoals die blijkt uit röntgendiffractie), omdat deze samen de essentie van het mineraal vertegenwoordigen en de fysisch-chemische eigenschappen bepalen.

Net als bij andere stoffen met meerdere bestanddelen moet het CAS-nummer voor het mineraal worden gebruikt als onderdeel van de identificatie (d.w.z. de combinatie van anorganische bestanddelen). De CAS-nummers van de anorganische bestanddelen (zoals gedefinieerd door systematische mineralogie) worden gebruikt om de verschillende bestanddelen te beschrijven. Als er één anorganisch bestanddeel zou worden geproduceerd (een stof met één bestanddeel) moet het CAS-nummer van die stof worden gebruikt voor de identificatie van de stof. Bijvoorbeeld:

- Het mineraal kaolien (Einecs: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) bestaat in wezen uit primaire en secundaire kaolinieten (Einecs: 215-286-4, CAS: 1318-74-7) en is een gehydrateerde aluminiumsilicaatklei.

Als er een raffinageprocedé zou worden toegepast op kaolien om één enkel bestanddeel van Kaolone te produceren, bijv. kaolinieten, dan zou het CAS-/Einecs-nummer voor de stof Einecs: 215-286-4, CAS: 1318-74-7 zijn.

- Het mineraal bentoniet (Einecs: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) is in Einecs omschreven als “Een colloïdale klei. Bestaat hoofdzakelijk uit montmorilloniet” en bevat een groot aandeel van het anorganische bestanddeel montmorilloniet (Einecs: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) maar niet alleen dat.

Indien het zuivere montmorilloniet (Einecs: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) zou worden geproduceerd, zou het CAS-nummer dat wordt gebruikt voor het identificeren van de stof dat van montmorilloniet zijn.

Hierbij moet worden benadrukt dat bentoniet (Einecs: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) en montmorilloniet (Einecs: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) niet als dezelfde stof worden gezien.

Kort samengevat krijgen mineralen in het algemeen hun naam op basis van het anorganische bestanddeel of de gecombineerde anorganische bestanddelen. Ze kunnen worden gezien als stoffen met één bestanddeel of als stoffen met meerdere bestanddelen (algemene leidraad in subparagrafen 4.2.1 en 4.2.2). Sommige mineralen kunnen niet op unieke wijze worden beschreven op basis van hun chemische samenstelling, maar vereisen aanvullende fysische karakterisering of verwerkingsparameters voor een toereikende identificatie (zie subparagraaf 4.2.3). In de volgende tabel vindt u enkele voorbeelden.

Voorbeelden van mineralen

Naam	CAS	Einecs	Aanvullende beschrijving[30]
Cristobaliet	14464-46-1	238-455-4	O2Si (kristalstructuur: kubische symmetrie)
Kwarts	14808-60-7	238-878-4	O2Si (kristalstructuur: rombische symmetrie)
Kiezelgoer	61790-53-2	-	Ook bekend als diatomiet, bergmeel en celite Beschrijving: Een zachte, kiezelhoudende vaste stof die bestaat uit de skeletten van kleine prehistorische waterplanten. Bevat hoofdzakelijk silica.
Dolomiet	16389-88-1	240-440-2	CH2O3.1/2Ca.1/2Mg
Mineralen in de veldspaatgroep	68476-25-5	270-666-7	Een anorganische stof die het reactieproduct is van calcinatie bij hoge temperatuur waarbij aluminiumoxide, bariumoxide, calciumoxide, magnesiumoxide, siliciumoxide en strontiumoxide in verschillende hoeveelheden homogeen en ionisch worden geïnterdiffundeerd om een kristalmatrix te vormen.
Talk	14807-96-6	238-877-9	Mg3H2(SiO3)4
Vermiculiet	1318-00-9	-	(Mg0.33[Mg2-3(Al0-1Fe0-1)0-1](Si2.33-3.33 Al0.67-1.67) (OH)2O10 .4H2O)

[30] Definitie zoals gegeven in Richtlijn 2001/30/EG van de Commissie (PB L 146 van 31/5/2001, blz. 1)

Analytische informatie die vereist is voor mineralen

Elementaire samenstelling	De chemische samenstelling geeft een totaaloverzicht van de samenstelling van het mineraal, ongeacht het aantal bestanddelen en de aandelen daarvan in het mineraal. De conventie is dat de chemische samenstelling wordt uitgedrukt voor oxiden.
Spectrale gegevens (XRD of equivalent)	XRD of andere technieken kunnen mineralen identificeren op basis van hun kristallografische structuur. De karakteristieke XRD- of IR-pieken die het mineraal identificeren moeten worden opgegeven, samen met een korte beschrijving van de analytische methode of bibliografische referentie.
Typische fysisch-chemische eigenschappen	Mineralen hebben karakteristieke fysisch-chemische eigenschappen die het mogelijk maken hun identificatie volledig te maken, bijv. - Zeer lage hardheid - Zwellingsvermogen - Vormen van diatomiet (optische microscoop) - Zeer hoge dichtheid - Oppervlak (stikstofabsorptie)

7.6. Etherische olie van Lavandin grosso

Etherische oliën zijn stoffen die worden verkregen uit planten. Daarom kunnen etherische oliën ook worden gekarakteriseerd als botanisch afgeleide stoffen.

In het algemeen zijn botanisch afgeleide stoffen complexe natuurlijke stoffen die worden verkregen door het verwerken van een plant of delen daarvan met een behandeling zoals extractie, destillatie, persing, fractionering, zuivering, concentratie of fermentatie. De samenstelling van deze stoffen varieert afhankelijk van het geslacht, de soort, de groeiomstandigheden en de oogstperiode van de bronnen en de toegepaste verwerkingstechnieken.

Etherische oliën zouden kunnen worden gedefinieerd op basis van hun hoofdbestanddelen, zoals gebruikelijk is voor stoffen met meerdere bestanddelen. Etherische oliën kunnen echter uit honderden bestanddelen bestaan, die aanzienlijk kunnen variëren, afhankelijk van veel factoren (bijv. geslacht, soort, groeiomstandigheden, oogstperiode, toegepaste procedés). Daarom is een beschrijving van de hoofdbestanddelen vaak niet voldoende om deze UVCB-stoffen te beschrijven. De etherische oliën zouden moeten worden beschreven op basis van de bronplant en het behandelingsprocedé, zoals is beschreven in subparagraaf 4.3.1 (met UVCB-subtype 3).

In veel gevallen zijn er industriestandaarden beschikbaar voor etherische oliën (voor veel etherische oliën ook ISO-standaarden). Informatie over standaarden kan als aanvulling worden gegeven. De stofidentificatie moet echter gebaseerd worden op de stof zoals die wordt vervaardigd.

Het onderstaande voorbeeld beschrijft de ‘etherische olie van Lavandin grosso’, waarvoor een ISO-standaard beschikbaar is (ISO 8902-1999).

1. *Namen en andere identificaties*

Bron

Soort	*Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae)

Procedé

Beschrijving van (bio)chemische reactieprocedés die zijn gebruikt voor de vervaardiging van de stof:
Waterstoomdestillatie van de bloemtoppen van *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) en daarop volgend de afscheiding van het water uit de etherische olie; De scheiding die volgt is een spontaan, fysische procedé dat normaliter plaatsvindt in een separator (een zogenoemde 'Florentijnse fles') waarmee de afgescheiden olie eenvoudig geïsoleerd kan worden. De temperatuur in deze fase van het destillatieprocedé is ongeveer 40 °C.

Naam

IUPAC-naam of andere internationale chemische naam	Etherische olie van *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae)
EG-nummer EG-naam EG-beschrijving	297-385-2 Lavendel, *Lavandula hybrida grosso*, ext. Extracten en fysisch gemodificeerde derivaten daarvan, zoals tincturen, essences, etherische oliën, olieharsen, terpenen, terpeenvrije fracties, destillaten, residuen, enz. verkregen uit Lavandula hybrida grosso, Labiatae[31].
CAS-nummer CAS-naam	93455-97-1 Lavendel, *Lavandula hybrida grosso*, ext.

[31] "Labiatae" en "Lamiaceae" zijn synoniemen.

2. *Samenstellingsinformatie – bekende bestanddelen*

Bekende bestanddelen					
	Chemische naam **EG** **CAS** **IUPAC** **overig**	**Nummer** **EG** **CAS**	**Mol. formule Hill-methode**	**Typische conc. % (w/w)**	**Conc. bereik % (w/w)**
A	**EG** linalylacetaat **CAS** 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, acetaat **IUPAC** 3,7-Dimethyl octa-1,6-dien-3-yl acetaat	**EG** 204-116-4 **CAS** 115-95-7	C12H20O2	33	28 – 38
B	**EG** linalool **CAS** 1,6-octadien-3-ol, 3,7-dimethyl- **IUPAC** 3,7-Dimethyl octa-1,6-diene-3-ol	**EG** 201-134-4 **CAS** 78-70-6	C10H18O	29,5	24 – 35
C	**EG** Bornan-2-on **CAS** Bicyclo[2.2.1] heptan-2-on, 1,7,7-trimethyl- **IUPAC** 1,7,7-Trimethylbicyclo[2.2.1]-2-heptanon **Overig** Kamfer	**EG** 200-945-0 **CAS** 76-22-2	C10H16O	7	6 – 8
D	**EG** Cineool **CAS** 2-oxabicyclo [2.2.2]octaan, 1,3,3-trimethyl- **IUPAC** 1,3,3-Trimethyl-2-oxabicyclo[2.2.2]octaan **Overig** 1,8-cineool	**EG** 207-431-5 **CAS** 470-82-6	C10H18O	5,5	4 – 7

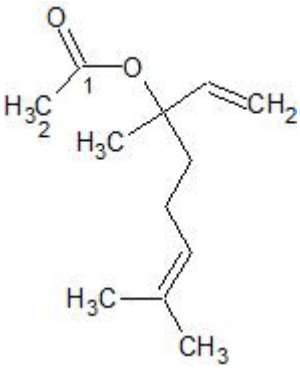
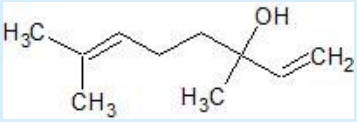
E	**EG** P-menth-1-en-4-ol **CAS** 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- **IUPAC** 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol **Overig** terpinen-4-ol	**EG** 209-235-5 **CAS** 562-74-3	C10H18O	3,25	1,5 – 5
F	**EG** 2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetaat **CAS** 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetaat **IUPAC** 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol **Overig** (±)-Lavandulolacetaat	**EG** 247-327-7 **CAS** 25905-14-0	C12H20O2	2,25	1,5 – 3
G	**EG** DL-borneol **CAS** Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, (1R,2S,4R)-rel- **IUPAC** (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol **Overig** borneol	**EG** 208-080-0 **CAS** 507-70-0	C10H18O	2,25	1,5 – 3
H	**EG** Caryofylleen **CAS** Bicyclo[7.2.0]undec-4-een, 4,11,11-trimethyl-8-methyleen-, (1R,4E,9S)- **IUPAC** (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methyleen bicyclo[7.2.0]undec-4-een **Overig** trans-beta-caryofylleen	**EG** 201-746-1 **CAS** 87-44-5	C15H24	1,75	1 – 2,5

I	**EG** (E)-7,11-dimethyl-3-methylenedodeca-1,6,10-trieen **CAS** 1,6,10-Dodecatrieen, 7,11-dimethyl-3-methyleen-, (6E)- **IUPAC** (E)-7,11-Dimethyl-3-methyleen-1,6,10-dodecatrieen **Overig** trans-beta-farneseen	**EG** 242-582-0 **CAS** 18794-84-8	C15H24	1,1	0,2 – 2
J	**EG** (R)-p-mentha-1,8-dieen **CAS** cyclohexeen, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (4R)- **IUPAC** (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexeen **Overig** limoneen	**EG** 227-813-5 **CAS** 5989-27-5	C10H16	1	0,5 – 1,5
K	**EG** 3,7-dimethylocta-1,3,6-trieen **CAS** 1,3,6-Octatrieen, 3,7-dimethyl- **IUPAC** 3,7-Dimethylocta-1,3,6-trieen **Overig** cis-beta-ocimeen	**EG** 237-641-2 **CAS** 13877-91-3	C10H16	1	0,5 – 1,5

Bekende bestanddelen ≥ 10%

Bekende bestanddelen		
	EG-naam	**EG-beschrijving**
A	linalylacetaat C12H20O2	
B	linalool C10H18O	

Bekende bestanddelen		
	CAS-naam	Verwante CAS-nummers
A	linalylacetaat C12H20O2	115-95-7
B	linalool C10H18O	78-70-6

Bekende bestanddelen			
	Molecuulformule CAS-methode	Structuurformule	SMILES-code
A	C12H20O2		
B	C10H18O		

Bekende bestanddelen		
	Molecuulgewicht	Molecuulgewichtbereik
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Chrysantenolie en daaruit geïsoleerde isomeren

Een bedrijf produceert een chrysantenolie die wordt geëxtraheerd nadat de bloemen en blaadjes van *Chrysanthemum cinerariafolim*, Compositae zijn gekneusd met een oplosmiddel dat een mengsel van water/ethanol (1:10) bevat. Na de extractie wordt het oplosmiddel verwijderd en wordt het 'zuivere' extract in verdere stappen geraffineerd tot de uiteindelijke chrysantenolie.

Daarnaast worden er twee isomeren geïsoleerd uit het extract als een reactiemassa van:

Jasmoline I

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

Jasmoline II

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

Daarnaast heeft het bedrijf besloten ook de isomere reactiemassa van Jasmoline I en II te synthetiseren.

Het bedrijf stelt de volgende vragen:

1. Hoe moet de chrysantenolie worden geïdentificeerd voor de registratie?
2. Valt de reactiemassa van de geïsoleerde isomeren Jasmoline I en II onder de registratie van de olie?
3. Kan het gesynthetiseerde mengsel van de twee isomeren worden gezien als identiek aan het mengsel van de isomeren die uit de chrysantenolie zijn geïsoleerd?

1. Hoe moet de chrysantenolie worden geïdentificeerd voor de registratie?

Chrysantenolie wordt gezien als een UVCB-stof die niet voldoende kan worden geïdentificeerd op basis van zijn chemische samenstelling (zie voor gedetailleerde begeleiding paragraaf 4.3). Andere identificatieparameters, zoals de bron en het procedé, zijn essentieel. Chrysantenolie is van biologische aard en moet worden geïdentificeerd via de soort en het onderdeel van het organisme waaruit de stof is verkregen en het raffinageprocedé (extractie met oplosmiddel). De chemische samenstelling en de identiteit van de bestanddelen moeten echter wel worden opgegeven voor zover ze bekend zijn.

De volgende informatie wordt noodzakelijk geacht voor een toereikende identificatie van de stof:

Naam van de stof	***Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae; olie verkregen uit gekneusde bloemen en blaadjes door extractie met water:ethanol (1:10)**
Bron	
Geslacht, soort, ondersoort	Chrysanthemum, cinerariafolium, Compositae

Deel van plant dat is gebruikt voor olie	Bloemen en blaadjes
Procedé	
Vervaardigingsmethode	Kneuzing gevolgd door extractie
Oplosmiddel gebruikt voor extractie	Water:ethanol (1:10)

Samenstellingsinformatie – bekende bestanddelen in % (w/w)

Naam van het bestanddeel	EG-nr.	CAS-nr.	Min %	Max %
Pyrethrine I: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl) cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-chrysantemaat	204-455-8	121-21-1	30	38
Pyrethrine 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-dimethylcyclopropaancarboxylaat	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerine I: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropaancarboxylaat	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerine II: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropaancarboxylaat	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmoline I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropaancarboxylaat	geen	4466-14-2	4	10

Jasmoline II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropaancarboxylaat	geen	1172-63-0	4	10
Daarnaast bevat de stof tot veertig bestanddelen in een concentratie van minder dan 1%.				

Men kan ook overwegen de stof te identificeren als een duidelijk gedefinieerde stof met meerdere bestanddelen die zes hoofdbestanddelen bevat (reactiemassa van Pyrethrine I, Pyrethrine II, Cinerine I, Cinerine II, Jasmoline I en Jasmoline II).

De stof zou dan worden gezien als een 'stof die in de natuur voorkomt' als het vervaardigingsprocedé alleen zou bestaan uit 'kneuzen' en zou dan vrijgesteld zijn van de registratieplicht, tenzij hij voldeed aan de criteria voor indeling als gevaarlijk volgens Richtlijn 67/548/EEG.

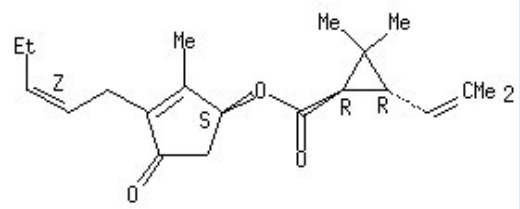
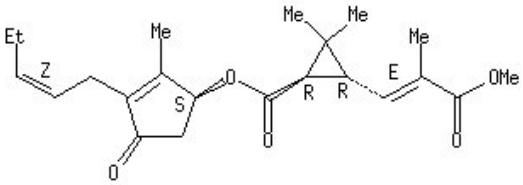
2. Valt de reactiemassa van de geïsoleerde isomeren Jasmoline I en II onder de registratie van de olie?

De reactiemassa van de geïsoleerde isomeren Jasmoline I en II valt niet onder de registratie van de '*Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae-olie' aangezien afzonderlijke bestanddelen niet worden gedekt door de gehele UVCB-stof en vice versa. De reactiemassa van Jasmoline I en II wordt gezien als een andere stof.

De reactiemassa van Jasmoline I en Jasmoline II kan worden gezien als een stof met meerdere bestanddelen (zie voor gedetailleerde begeleiding subparagraaf 4.2.3) die twee hoofdbestanddelen bevat.

De volgende informatie wordt noodzakelijk geacht voor een toereikende identificatie van de stof:

IUPAC-naam van de stof	Reactiemassa van (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropaancarboxylaat) en (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropaancarboxylaat)
Andere naam	Reactiemassa van Jasmoline I en Jasmoline II
Zuiverheid van de stof	95-98% (w/w)
Samenstellingsinformatie – hoofdbestanddelen in % (w/w)	

Naam van het bestanddeel	EG-nr.	CAS-nr.	Min %	Max %
Jasmoline I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropaancarboxylaat	geen	4466-14-2	40	60
Molecuulformule Structuurformule Molecuulgewicht		 C22H30O5 M = 374 g/mol		
Jasmoline II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropaancarboxylaat Molecuulformule Structuurformule Molecuulgewicht	geen	1172-63-0  C21H30O3 M = 330 g/mol	35	65

3. Kan het gesynthetiseerde mengsel van de twee isomeren worden gezien als identiek aan het mengsel van de isomeren die uit de chrysantenolie zijn geïsoleerd?

Voor chemisch duidelijk gedefinieerde stoffen, die voldoende kunnen worden beschreven op basis van hun bestanddelen, is het niet relevant of de stof geïsoleerd is uit een extract of gesynthetiseerd is door middel van een chemisch procedé. De gesynthetiseerde reactiemassa van Jasmoline I en Jasmoline II kan daarom worden gezien als identiek aan het isomerenmengsel dat wordt geïsoleerd uit de chrysant, ook al is het verkregen met andere vervaardigingsprocedés, op voorwaarde dat de zuiverheid van het mengsel en het concentratiebereik van de hoofdbestanddelen hetzelfde zijn.

4. Conclusies

Er worden twee stoffen geïdentificeerd:

1. *Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae; olie verkregen uit gekneusde bloemen en blaadjes door extractie met water:ethanol (1:10)
2. Reactiemassa van de isomeren Jasmoline I en Jasmoline II, onafhankelijk van het vervaardigingsprocedé van de stof.

Als de bovengenoemde stoffen *uitsluitend* worden gebruikt in gewasbeschermingsproducten en biociden, worden ze geacht geregistreerd te zijn op grond van REACH (*artikel 15*).

7.8. Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat

Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat (3:1) is een UVCB-stof waarbij de variabiliteit van de geïsopropyleerde entiteit niet volledig kan worden gedefinieerd.

1. *Naam en andere identificaties*

IUPAC-naam of andere internationale chemische naam	Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat (3:1)
Andere namen	Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat (3:1) (gebaseerd op een 1:1 molverhouding tussen propyleen en fenol)
EG-nummer **EG-naam** **EG-beschrijving**	273-066-3 Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat (3:1) /
CAS-nummer **CAS-naam**	68937-41-7 Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat (3:1)

2. *Samenstellingsinformatie – hoofdbestanddelen*

Hoofdbestanddelen					
IUPAC-naam	CAS-nummer	EG-nummer	Mol. formule Hill-methode	Typische conc. (%w/w)	Conc. bereik (%w/w)
Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Niet gespecificeerd		

Hoofdbestanddelen	
EG-naam	**EG-beschrijving**
Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat (3:1)	/
CAS-naam	**CAS-nummer**
Fenol, geïsopropyleerd, fosfaat (3:1)	68937-41-7

7.9. Quaternaire ammoniumverbindingen

Een bedrijf synthetiseert de volgende stoffen:

Stof A

Quaternaire ammoniumverbindingen, di-C10-18-alkyldimethyl, chloriden

EG-nummer 294-392-2

CAS-nummer 91721-91-4

Koolstofketenlengteverdeling:

C10 10%

C11 5,5%

C12 12%

C13 7,5%

C14 18%

C15 8%

C16 24%

C17 7%

C18 8%

Stof B

Quaternaire ammoniumverbindingen, dikokosalkyldimethyl, chloriden

EG-nummer 263-087-6

CAS-nummer 61789-77-3

De exacte samenstelling van deze stof is niet bekend bij het bedrijf.

Stof C

Didodecyldimethylammoniumbromide

Stof D

Didodecyldimethylammoniumchloride

Stof E

Stof E wordt vervaardigd als een reactiemassa van didodecyldimethylammoniumbromide en didodecyldimethylammoniumchloride (reactiemassa van de stoffen C en D)

Stof F

Quaternaire ammoniumverbindingen, di-C14-18-alkyldimethylammonium, chloriden

EG-nummer 268-072-8

CAS-nummer 68002-59-5

Koolstofketenlengteverdeling:

C14	20%
C15	10%
C16	40%
C17	10%
C18	20%

Stof G

Quaternaire ammoniumverbindingen, di-C4-22-alkyldimethyl, chloriden

Koolstofketenlengteverdeling (één accent geeft een dubbele binding aan; een dubbel accent geeft een driedubbele binding aan):

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%

Tot nu toe gebruikt het bedrijf alleen stof B (quaternaire ammoniumverbindingen, dikokosalkyldimethyl chloriden, EG-nummer 263-087-6 en CAS-nummer 61789-77-3) voor de naamgeving, omdat die het beste past bij alle stoffen (de stoffen A tot en met G). Het bedrijf wil weten of het mogelijk is alle stoffen (A tot en met G) af te dekken met één registratie van stof B.

1. Algemene opmerkingen

Koolwaterstoffen (paraffinen, olefinen) die zijn afgeleid van vetten en oliën of synthetische substituten daarvan worden geïdentificeerd op basis van hun koolstofketenverdeling of hun herkomst (alkyldescriptor), op basis van een functionele groep (functionaliteitsdescriptor), bijv. ammonium, en het anion/kation (zoutdescriptor), bijv. chloride. De ketenlengteverdeling, bijv. C8-18, verwijst naar

verzadigd

lineair (onvertakt)

alle koolstofgetallen inbegrepen (C8, C9, C10, C11,…., C18) waarbij een smalle verdeling een bredere niet dekt en vice versa

Als dit niet het geval is, moet dat als volgt worden aangegeven:

onverzadigd (C16 onverzadigd)

vertakt (C10 vertakt)

even aantallen (C12-18 even aantallen)

Koolstofketens die worden beschreven op basis van de bron moeten de verdeling bevatten die in de bron voorkomt, bijv. talgalkylaminen:

De talgalkylaminen zijn 99% primaire alkylaminen met een lineaire keten met de volgende koolstofketenlengteverdeling (Ullmann, 1985) [één accent geeft een dubbele binding aan; een dubbel accent geeft een driedubbele binding aan]:

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

2. Hoe moeten de stoffen worden geïdentificeerd voor de registratie?

Elke stof wordt vergeleken met stof B (die tot nu toe voor de naamgeving is gebruikt) om te bepalen of de twee stoffen als identiek kunnen worden gezien.

Vergelijking van de stoffen A en B

De volgende ketenlengteverdeling kan worden gevonden voor ‘kokos’ van stof B (Ullmann, 1985) [één accent geeft een dubbele binding aan; een dubbel accent geeft een driedubbele binding aan]:

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

De ketenlengteverdeling van stof A wijkt dus af van de koolstofketenlengteverdeling van de ‘kokos’ van stof B. Aangezien de kwalitatieve en kwantitatieve samenstelling van de twee stoffen significant verschilt, kunnen ze niet als identiek worden beschouwd.

Vergelijking van de stoffen B en C

Stof B ‘quaternaire ammoniumverbindingen, dikokosalkyldimethyl, chloriden’ beschrijft een mengsel van bestanddelen met verschillende koolstofketenlengtes (C6 tot en met C18 even aantallen, lineair, verzadigd en onverzadigd), terwijl stof C slechts één bestanddeel met één gedefinieerde en verzadigde ketenlengte (C12) met een ander anion (bromide) beschrijft. Daarom kan stof C niet identiek worden geacht aan stof B.

Vergelijking van de stoffen B en D

Stof B ‘quaternaire ammoniumverbindingen, dikokosalkyldimethyl, chloriden’ beschrijft een mengsel van bestanddelen met verschillende koolstofketenlengtes (C6 tot en met C18 even aantallen, lineair, verzadigd en onverzadigd), terwijl stof D één bestanddeel met één gedefinieerde en verzadigde ketenlengte (C12) en hetzelfde anion (chloride) beschrijft. Stof B en stof D hebben verschillende namen en kunnen niet worden gezien als dezelfde stof, aangezien één bestanddeel niet wordt afgedekt door een mengsel met een bepaald bestanddeel en vice versa.

Vergelijking van de stoffen B en E

Stof E is een mengsel van de stoffen C en D. Deze hebben beide een verzadigde ketenlengte van C12, maar verschillende anionen (bromide en chloride). Stof B ‘quaternaire ammoniumverbindingen, dikokosalkyldimethyl, chloriden’ beschrijft een mengsel van bestanddelen met verschillende koolstofketenlengtes (C6 tot en met C18 even aantallen, lineair, verzadigd en onverzadigd) en chloride als anion. Stof E wordt echter uitsluitend beschreven met de koolstofketenlengte C12 met bromide als aanvullend anion. Daarom kunnen de stoffen B en E niet als identiek worden gezien. Een afzonderlijke registratie voor stof E is derhalve noodzakelijk.

Vergelijking van de stoffen B en F

Stof F 'quaternaire ammoniumverbindingen, di-C14-18-alkyldimethylammonium, chloriden' is een mengsel van bestanddelen met verschillende koolstofketenlengtes (C14 tot en met C18 even en oneven aantallen, lineair en verzadigd). Stof F verschilt van stof B in samenstelling en in het bereik van de koolstofketenverdeling. Stof F heeft een smalle koolstofketenlengteverdeling en daarnaast de koolstofketens C15 en C17. Daarom kunnen de stoffen B en F niet identiek worden geacht.

Vergelijking van de stoffen B en G

De stoffen B en G lijken heel vergelijkbaar, aangezien de koolstofketenverdeling bijna hetzelfde bereik heeft. Stof G bevat echter ook de koolstofketenlengtes C4, C20 en C22. De verdeling van de koolstofketenlengtes van stof G omvat een breder bereik dan die van stof B. Daarom kunnen de stoffen B en G niet als identiek worden gezien.

3. Conclusies

Koolwaterstoffen (paraffinen, olefinen) kunnen alleen als dezelfde stof worden gezien als alle drie de descriptoren (alkyl, functionaliteit en zout) hetzelfde zijn.

In het bovenstaande voorbeeld zijn de descriptoren steeds verschillend. De stoffen kunnen daarom niet worden afgedekt met één registratie van stof B.

7.10. Petroleumstoffen

Aan de hand van de begeleiding voor specifieke UVCB-stoffen in subparagraaf 4.3.3.2 worden twee voorbeelden gegeven.

7.10.1. Benzinemengstroom (C4-C12)

1. *Naam en andere identificaties*

Naam

IUPAC-naam of andere internationale chemische naam	Nafta (petroleum), katalytisch gereformeerd

Bron

Identificatie of beschrijving van de bronstroom	Ruwe olie

Procedé

Beschrijving raffinageprocedé	**Katalytisch reformatieprocedé**

Koolstofbereik	C4-C12
Kookpunt- of afkapbereik	30°C tot 220°C
Andere fysische eigenschappen, bijv. viscositeit	lager dan 7 mm2 /s bij 40°C (viscositeit)
EG-nummer **CAS-nummer** **EG-naam / CAS-naam** **EG-beschrijving / CAS-beschrijving**	273-271-8 68955-35-1 Nafta (petroleum), katalytisch gereformeerd Een complexe combinatie van koolwaterstoffen die wordt geproduceerd door de destillatie van producten van een katalytisch reformatieprocedé. De stof bestaat uit koolwaterstoffen met koolstofgetallen die hoofdzakelijk binnen het bereik C4 tot en met C12 vallen en die koken tussen ongeveer 30°C en 220°C (90°F tot 430°F). Hij bevat een relatief groot aandeel aromatische koolwaterstoffen en koolwaterstoffen met een vertakte keten. Deze stroom kan 10 vol-% of meer benzeen bevatten.

2. *Samenstellingsinformatie*

Bekende bestanddelen			
IUPAC-naam	**CAS-nummer**	**EG-nummer**	**Conc. bereik (%w/w)**
Benzeen	71-43-2	200-753-7	1-10
Tolueen	108-88-3	203-625-9	20-25
Xyleen	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Gasoliën (petroleum)

1. *Naam en andere identificaties*

IUPAC-naam of andere internationale chemische naam	Gasoliën (petroleum), zwaar atmosferisch

Bron

Identificatie of beschrijving van de bronstroom	Ruwe olie

Procedé

Beschrijving raffinageprocedé	**Atmosferische destillatie**
Koolstofbereik	C7 - C35
Kookpunt- of afkapbereik	121°C tot 510°C
Andere fysische eigenschappen, bijv. viscositeit	20 mm2/s bij 40°C (viscositeit)
EG-nummer **CAS-nummer** **EG-naam / CAS-naam** **EG-beschrijving / CAS-beschrijving**	272-184-2 68783-08-4 Gasoliën (petroleum), zwaar atmosferisch Een complexe combinatie van koolwaterstoffen die zijn verkregen door de destillatie van ruwe olie. De stof bestaat uit koolwaterstoffen met koolstofgetallen die hoofdzakelijke binnen het bereik C7 tot C35 liggen en koken tussen ongeveer 121°C en 510°C (250°F tot 950°F).

2. *Chemische samenstelling*

Geen informatie beschikbaar.

7.11. Enzymen

Aan de hand van de begeleiding voor specifieke UVCB-stoffen in subparagraaf 4.3.2.3 worden twee voorbeelden voor enzymenconcentraten gegeven: subtilisine (geïdentificeerd op basis van IUBMB-nomenclatuur + overige bestanddelen) en α-amylase (geïdentificeerd op basis van IUBMB-nomenclatuur + productieorganisme)

7.11.1. Subtilisine

Enzymeiwit	Subtilisine
IUBMB-nummer	3.4.21.623.4.21.62
Namen gegeven door IUBMB (Systeemnaam, enzymnaam, synoniemen)	Subtilisine; alcalase; alcalase 0.6L; alcalase 2.5L; ALK-enzym; bacillopeptidase A; bacillopeptidase B; Bacillus subtilis alkaline proteïnase bioprase; bioprase AL 15; bioprase APL 30; colistinase; (zie ook opmerkingen); subtilisine J; subtilisine S41; subtilisine Sendai; subtilisine GX; subtilisine E; enz.
Opmerkingen van IUBMB	Subtilisine is een serine-endopeptidase, typevoorbeeld van peptidasefamilie S8. Het bevat geen cysteïneresiduen (hoewel deze worden aangetroffen in homologe enzymen). Soortvarianten zijn onder meer subtilisine BPN' (ook subtilisine B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse, Nagarse proteïnase, subtilisine Novo, bacteriële proteïnase Novo) en subtilisine Carlsberg (subtilisine A, subtilopeptidase A, alcalase Novo). Voorheen EC 3.4.4.16 en opgenomen in EC 3.4.21.14. Soortgelijke enzymen worden geproduceerd door verschillende stammen van *Bacillus subtilis* en andere *Bacillus*-soorten [1,3]
Reactie	Hydrolyse van proteïnen met brede specificiteit voor peptidebindingen en een voorkeur voor een groot ongeladen residu in P1. Hydrolyseert peptideamiden
Reactietype	Hydrolasen; Werkzaam op peptidebindingen (peptidasen); Serine-endopeptidasen
EG-nummer	232-752-2
EG-naam	Subtilisine
CAS-nummer	9014-01-1
CAS-naam	Subtilisine

Concentratie enzymeiwit	26%
Overige bestanddelen	
Andere proteïnen, peptiden en aminozuren Koolhydraten Lipiden Anorganische zouten	39% 11% 1% 23%
Aanvullende parameters	
Substraten en producten	Proteïnen of oligopeptiden, water peptiden

7.11.2. α-Amylase

Enzymeiwit	α-Amylase
IUBMB-nummer	3.2.1.1
Namen gegeven door IUBMB (Systeemnaam, enzymnaam, synoniemen)	1,4-α-D-glucan glucanohydrolase; glycogenase; α-amylase; alfa-amylase; endoamylase; Taka-amylase A
Opmerkingen van IUBMB	Werkzaam op zetmeel, glycogeen en verwante polysacchariden en oligosacchariden op willekeurige wijze; reducerende groepen worden vrijgemaakt in de α-configuratie. De term 'α' heeft betrekking op de initiële anomere configuratie van de drie suikergroepen die vrijkomen en niet op de configuratie van de gehydrolyseerde binding.
Reactie	Endohydrolyse van 1,4- α-D-glucosidische bindingen in polysacchariden die drie of meer 1,4- α-gebonden D-glucose-eenheden bevatten

Reactietype	hydrolasen; glycosidasen; glycosidasen, d.w.z. enzymen die O- en S-glycosylverbindingen hydrolyseren
EG-nummer	232-565-6
EG-naam	Amylase, α–
CAS-nummer	9000-90-2
Verwante CAS-nummers	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (allemaal geschrapt)
CAS-naam	Amylase, α–
Concentratie enzymeiwit	37%
Overige bestanddelen	
Andere proteïnen, peptiden en aminozuren Koolhydraten Anorganische zouten	30% 19% 14%
Aanvullende parameters	
Substraten en producten	zetmeel; glycogeen; water; polysaccharide; oligosaccharide;

Aanhangsel I - Begeleidingsinstrumenten

Dit aanhangsel bevat een lijst met websites, databanken en handboeken die nuttig kunnen zijn voor het vinden van de juiste IUPAC-, CAS- en EG-namen, CAS- en EG-nummers, molecuul- en structuurformules, waaronder SMILES-notaties, en andere parameters die vereist zijn voor de stofidentificatie. Commerciële databanken en begeleidingsdocumenten zijn niet opgenomen.

Algemeen		
Stofidentiteits-parameter	**Bron**	**Beschrijving bron**
U.S. Department of Health and Human Services	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	Een verzameling databanken en hulpmiddelen die gebruikers helpen chemische informatie te zoeken
Perkin Elmer Informatics	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	Een gratis databank die chemische structuren, fysische eigenschappen en hyperlinks naar relevante informatie bevat
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	http://accelrys.com/products/informatics/	Chemische software; Accord Alphabetical Product Listing

Naam en andere identificaties		
Stofiden-titeitspara-meter	**Bron**	**Beschrijving bron**
IUPAC-naam	http://www.iupac.org/home/publications/e-resources/nomenclature-and-terminology.html	Officiële website IUPAC
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	chemische nomenclatuur IUPAC en aanbevelingen (in opdracht van IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (blauwboek) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Belangrijkste publicaties IUPAC-nomenclatuur, bijwerking verwacht 2006
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (aanbevelingen 1993) (aanvullend blauwboek) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Belangrijkste publicaties IUPAC-nomenclatuur, bijwerking verwacht 2006
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (aanbevelingen 1990) (roodboek) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Belangrijkste publicaties IUPAC-nomenclatuur, bijwerking verwacht juli 2005
IUPAC-naam	Biochemical Nomenclature and Related Documents (witboek) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Belangrijkste publicaties IUPAC-nomenclatuur
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Inleidend deel over alle typen verbindingen
IUPAC-naam	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Commercieel geautomatiseerd naamgevingsprogramma dat erg handig kan zijn bij het benoemen van structuren met een gematigde complexiteit. Ook freeware beschikbaar voor kleine moleculen (aanbevolen door IUPAC)

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	IUPAC-nomenclatuur van organische scheikunde (aanbevolen door IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Complete lijst van goedgekeurde triviale en semisystematische basisnamen van organische verbindingen
	http://www.chemexper.com/	Het doel van de ChemExper Chemical Directory is een gemeenschappelijke en vrij toegankelijke databank van chemische stoffen te maken op het internet. Deze databank bevat chemische stoffen met hun fysische kenmerken. Iedereen kan chemische informatie toevoegen en zoeken via een webbrowser
IUBMB-nomen-clatuur	http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/ of http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb	Biochemische nomenclatuurdatabank IUBMB (in opdracht van IUBMB)
Andere namen	http://www.colour-index.org	Kleurindex generieke namen, Kleurindex internationaal, vierde editie online
	http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp	INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients), Officiële website Personal Care Products Council
	http://www2.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	US EPA stoffen met variërende koolstofketenlengtes (alkylbereiken met behulp van de CX-Y-notatie)
Overige identificaties	http://www.cenorm.be	CEN-normen, officiële Europese CEN-site
EG-nummer	http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	EG-inventaris: zoek op Einecs, Elincs, NLP en *bijlage I* van 67/548/EEG
CAS-nummer	http://www.cas.org	Officiële website CAS-registratieservice

	http://www.chemistry.org	Officiële website American Chemical Society

Molecuul- en structuurformule		
Stofidenti-teitspara-meter	**Bron**	**Beschrijving bron**
SMILES	http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/	Gratis SMILES-generator
Molecuul-gewicht en SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, freeware (ook commercieel verkrijgbaar)
Verschil-lende fysisch-chemische parameters	http://www2.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface	De EPI (Estimation Programs Interface) SuiteTM is een op Windows® gebaseerde suite van modellen voor het inschatten van fysisch-chemische eigenschappen en milieubestemming, ontwikkeld door het Office of Pollution Prevention Toxics van EPA en Syracuse Research Corporation (SRC).

Aanhangsel II – Technisch richtsnoer per stofidentificatieparameter

De informatie in dit aanhangsel is bedoeld voor gebruikers van dit richtsnoer die niet vertrouwd zijn met de technische regels voor de nomenclatuur, het gebruik van verschillende registratienummers en notatieregels voor molecuul- en structuurinformatie, spectrale gegevens enz.

Het aanhangsel geeft een algemene inleiding door de belangrijkste beginselen samen te vatten en het wijst de gebruiker de weg naar de oorspronkelijke bronnen voor de volledige informatie.

Dit overzicht is een vereenvoudigde versie, niet volledig of alomvattend, en niet voldoende gedetailleerd voor de professionele gebruiker. Het mag in geen geval gelijkwaardig worden geacht aan de officiële bron.

1 Na(a)m(en) in de IUPAC- of andere Internationale nomenclatuur

Voor registratie moet de Engelse IUPAC-naam of een andere goed gedefinieerde, internationaal geaccepteerde naam van de stof worden opgegeven.

Een IUPAC-naam is gebaseerd op de internationale chemische standaardnomenclatuur die is vastgesteld door de internationale organisatie IUPAC, de International Union of Pure and Applied Chemistry (Internationale Unie voor Zuivere en Toegepaste Chemie; zie voor passende referenties aanhangsel 1). De IUPAC-nomenclatuur is een systematische manier om chemische stoffen, zowel organisch als anorganisch, een naam te geven. In de IUPAC-nomenclatuur worden voorvoegsels, achtervoegsels en tussenvoegsels gebruikt om het type en de plaats van functionele groepen in de stof te beschrijven.

Bijvoorbeeld **penta-1,3-di-en-1-ol**:

het voorvoegsel is ***penta-1,3-***

het tussenvoegsel is ***-di*** en

het achtervoegsel is ***-ol***

en- is de kern van de naam, de basisnaam.

De set regels is in de loop van meerdere jaren ontwikkeld en verandert voortdurend om in te spelen op nieuwe componenten van moleculaire diversiteit en mogelijke conflicten of verwarringen die zijn gesignaleerd. De regels die zijn ingesteld door IUPAC kunnen uitsluitend worden gebruikt voor duidelijk gedefinieerde stoffen.

Hieronder vindt u enige algemene begeleiding met betrekking tot de structuur van een IUPAC-naam. Voor gedetailleerde ondersteuning kunt u gebruik maken van de begeleiding in hoofdstuk 4 van het richtsnoer.

1.1 Organische stof

Stap 1 Identificeer het aantal C-atomen in de langste continue keten van koolstofatomen; dit aantal bepaalt het voorvoegsel, het eerste deel van de basisnaam:

Aantal koolstofatomen	Basis
1	meth-

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

Stap 2 Bepaal de verzadiging van de keten; de verzadiging van de keten bepaalt het achtervoegsel, het tweede deel van de basisnaam:

Verzadi-ging	Bindingen	Achter-voegsel
Onverzadigd	Dubbel Driedubbel	-een -yn
Verzadigd	-	-aan

In het geval van meerdere dubbele of driedubbele bindingen, wordt het aantal bindingen aangegeven met ‘mono’, ‘di’, ‘tri’ enz. voor het achtervoegsel:

Penteen met twee dubbele bindingen: pentadieen

Stap 3 Combineer voorvoegsel, achtervoegsel en aanvullingen met de basisnaam

Let op: voor de basisnaam mogen ook door IUPAC goedgekeurde triviale en semisystematische namen worden gebruikt:

Benzeen, tolueen, enz.

Stap 4 Gebruik de onderstaande tabel:

- Identificeer substituenten en/of functionele groepen: koolstof- en niet-koolstofgroepen aan de keten van koolstofatomen die is geïdentificeerd onder 1;
- Bepaal de volgorde van prioriteit van de substituenten en/of functionele groepen;
- Voeg het achtervoegsel voor de eerste substituent/functionele groep en eventuele volgende in volgorde van prioriteit toe;
- Voeg het voorvoegsel voor de overige substituenten en functionele groepen in alfabetische volgorde toe.

Prioriteit	Groep	Formule	Achter-voegsel	Voor-voegsel
1	Carboxylzuur	R-COOH	-zuur	Carboxy
2	Ester	R-CO-O-R	-oaat	-
3	Amide	R-CONH2	-amide	Carbamoyl
4	Cyanide	R-CN	-nitriel	Cyano
5	Aldehyde	R-CHO	-al	Oxo
6	Keton	R-CO-R	-on	Oxo
7	Alcohol	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Thiol	R-SH	-thiol	Sulfanyl
9	Amine	R-NH2	-amine	Amino

1.2 Anorganische stof

1.2.1 Naamgeving van eenvoudige anorganische stoffen

De naamgeving van anorganische stoffen is gebaseerd op een set regels (IUPAC-roodboek, zie referentie in 7.1), waarvan de meest basale hieronder zijn weergegeven:

1 Anionen met één atoom krijgen een naam met het achtervoegsel -ide:

O2- is oxide

2 Eenvoudige ionische verbindingen krijgen een naam waarin het kation wordt gevolgd door het anion. Voor kationen met ladingen >1 worden de ladingen direct na de elementnaam tussen haakjes vermeld in Romeinse cijfers:

Cu2+ is koper(II)

3 Hydraten worden benoemd als de ionische verbinding gevolgd door een numeriek voorvoegsel en -hydraat. De numerieke voorvoegsels zijn mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, deca-:

CuSO4 · 5H2O is 'koper(II)sulfaat pentahydraat'

Let op: voor de registratie worden hydraten en de eventuele watervrije vorm van een bepaald metaalzout gezien als dezelfde stof.

4 Anorganische moleculaire verbindingen worden vernoemd met een voorvoegsel (zie hydraten) voor elk element. Het meest elektronegatieve element wordt achteraan gezet, met het achtervoegsel -ide:

CO2 is koolstofdioxide en CCl4 is koolstoftetrachloride

5 Zuren worden genoemd naar het anion dat ontstaat als het zuur wordt opgelost in water. Er zijn verschillende mogelijkheden:

a Als het zuur bij oplossing in water uiteenvalt in anionen met de naam 'x'-ide, wordt het zuur 'x'-waterstofzuur genoemd:

chloorwaterstofzuur vormt een chloride-anion

b Als het zuur bij oplossing in water uiteenvalt in anionen met de naam 'x'-aat, wordt het zuur 'x'-zuur genoemd:

chloorzuur valt uiteen in chloraat-anionen in water

c Als het zuur bij oplossing in water uiteenvalt in anionen met de naam 'x'-iet, wordt het zuur 'x'-igzuur genoemd:

chlorigzuur valt uiteen in chloriet-anionen

1.2.2 Naamgeving van mineralogische fasen

Complexe mineralogische fasen bevatten in het algemeen drie of meer elementen in combinatie. De meeste van de aanwezige elementen zijn gecombineerd met zuurstof en om de identificatie te vereenvoudigen, worden de complexe verbindingen door mineralogen meestal gezien als opgebouwd uit oxiden, waarvan sommige basisch en andere zuur zijn. In het geval van silicaten is het bijvoorbeeld altijd gebruikelijk geweest om ze weer te geven als de som van een aantal oxiden of als zouten van kiezelzuur of aluminium-kiezelzuren. Op dezelfde manier kan calciumorthosilicaat worden weergegeven als 2CaO.SiO2, een combinatie van afzonderlijke oxiden, of als Ca2SiO4, als het calciumzout van orthokiezelzuur H4SiO4. Hetzelfde geldt voor andere complexe mineraaloxiden – deze krijgen een naam met een voorvoegsel voor elk oxide (bijv. Ca3SiO5 = tricalciumsilicaat = 3CaO.SiO2). In sommige industriële sectoren is een verdere vereenvoudiging geïntroduceerd om de formules van de verbindingen korter te maken. In het geval van portlandcementklinker wordt 2CaO.SiO2 (calciumorthosilicaat of dicalciumsilicaat) bijvoorbeeld verkort tot C2S, waarin C = CaO en S = SiO2. Verwijzing naar mineralogische of industriële standaardteksten wordt aangeraden bij het benoemen of identificeren van complexe mineralogische fasen.

1.3 Natuurproducten en verwante componenten

Voor natuurproducten heeft IUPAC verschillende regels voor systematische naamgeving ontwikkeld. In het kort komt het erop neer dat voor stoffen die zijn geëxtraheerd uit een natuurlijke bron de naam waar mogelijk gebaseerd is op de familie-, geslachts- of soortnaam van het organisme waaruit de stof is geëxtraheerd:

Voor het hypothetische eiwit *Hypothecalia Examplare* zijn de namen gebaseerd op hypothecalia en/of examplare, bijvoorbeeld paardenexamplare

Zo mogelijk moet de naam de bekende of waarschijnlijke verdeling van het natuurproduct weerspiegelen. Indien gepast kan de klasse of orde ook worden gebruikt als basis voor de naam van een stof die voorkomt in een aantal verwante families. De naam van natuurproducten met een onbekende structuur mag geen voor-, achter- of tussenvoegsels bevatten die worden gebruikt in de organische nomenclatuur:

Condensatieproduct van paardenexamplare, Valarine toegevoegd aan de N-terminus

Veel stoffen die in de natuur voorkomen behoren tot duidelijk gedefinieerde structurele klassen, die elk kunnen worden gekarakteriseerd op basis van een set moederstructuren die nauw verwant zijn, dat wil zeggen, die elk kunnen worden afgeleid van een fundamentele structuur. De systematische naam van deze in de natuur voorkomende stoffen en derivaten daarvan kan gebaseerd zijn op de naam van een passende fundamentele moederstructuur:

Bekende moederstructuren zijn alkaloïden, steroïden, terpenoïden en vitaminen

Een fundamentele moederstructuur moet het basisskelet weerspiegelen dat de meeste

stoffen in de betreffende klasse gemeen hebben. In de natuur voorkomende stoffen of derivaten daarvan worden genoemd naar de moederstructuur, waaraan voor-, achter- en tussenvoegsels worden toegevoegd om de volgende zaken aan te geven:

- wijzigingen in de skeletstructuur
- vervanging van skeletatomen
- veranderingen in de staat van hydrogenering die wordt geïmpliceerd door de naam van de moederstructuur
- atomen of groepen die de plaats innemen van waterstofatomen in de moederstructuur
- configuraties die nog niet worden geïmpliceerd door de naam van de moederstructuur, of die afwijken van de geïmpliceerde configuraties

Thiaminechloride is ook bekend als vitamine B1

Voor gedetailleerdere informatie over systematische naamgeving van natuurproducten en verwante stoffen dient u contact op te nemen met de IUPAC (zie aanhangsel 1).

1.4 IUPAC-naam kan niet worden afgeleid

Als het niet mogelijk is een IUPAC-naam af te leiden voor bepaalde stoffen, kan ook andere internationaal erkende nomenclatuur worden gebruikt die specifiek is voor die stoffen, zoals:

- Mineralen en ertsen; mineralogische namen;
- Petroleumstoffen
- Generieke namen kleurindex3;
- Olieadditieven;
- INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients)4;
- Namen SDA (Soap and Detergent Association) voor oppervlakteactieve stoffen5;
- Enzovoort.

2 Andere namen

Alle relevante namen en/of openbare identificaties in alle talen waarin een stof in de EU in de handel wordt gebracht of zal worden gebracht (bijv. handelsnamen) zijn nuttig om op te nemen bij de registratie in het kader van REACH. Hiertoe behoren handelsnamen, synoniemen, afkortingen enzovoort.

- http://www.colour-index.org, Colour Index International, vierde editie online
- http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp, INCI, officiële website Personal Care Products Council
- http://www.cleaninginstitute.org/, officiële website van de American Cleaning Institute (ACI).**3**

EG-nummer van Einecs, Elincs of NLP (EG-inventaris)

Het EG-nummer, d.w.z. het nummer van Einecs, Elincs of NLP, is het officiële nummer van de stof binnen de Europese Unie. Het EG-nummer kan worden gevonden in de officiële publicaties van Einecs, Elincs en NLP en van het Europees Agentschap voor chemische stoffen.

Het EG-nummer bestaat uit zeven cijfers van het type x1x2x3-x4x5x6-x7. Het eerste cijfer wordt bepaald door de lijst waartoe de stof behoort:

Lijst	Eerste cijfer van EG-nummer
Einecs	2 of 3
Elincs	4
NLP	5

4 CAS-naam en CAS-nummer

De Chemical Abstracts Service (CAS), een onderdeel van de American Chemical Society (ACS), kent een CAS-naam en -nummer toe aan elke chemische stof die wordt opgenomen in de CAS-registratiedatabank. De namen en nummers worden in volgorde van binnenkomst toegekend aan uniek stoffen die worden geïdentificeerd door wetenschappers van CAS. Elke stof die wordt geregistreerd bij de Chemical Abstracts Service heeft een naam volgens de CAS-nomenclatuur, die de ACS aanneemt na aanbevelingen van de ACS-commissie voor nomenclatuur (zie referenties in aanhangsel 1).

4.1 CAS-naam

De CAS-naam is de naam die wordt gegeven door de Chemical Abstract Service en deze is anders dan van IUPAC-naam. De CAS-nomenclatuur is gebaseerd op een beperkte set criteria die niet altijd voldoende zijn om de naam voor een stof af te leiden. Daarom wordt in het algemeen aangeraden contact op te nemen met de Chemical Abstract Service om de correcte CAS-naam te verkrijgen.

De basisregels voor de nomenclatuur zijn in het kort:

- Een ‘hoofddeel’ van de stof wordt geselecteerd als naamgever of ouder.
- Substituenten worden vermeld na de naamgever/ouder, wat een omgekeerde volgorde wordt genoemd
- Als er meerdere substituenten aanwezig zijn, worden ze in alfabetische volgorde genoemd, (met inbegrip van de voorvoegsels):

o-xylen-3-ol is benzeen, 1,2-dimethyl, 3-hydroxy

4.2 CAS-nummer

CAS-nummers kunnen worden verkregen van de Chemical Abstract Service.

Het CAS-nummer bestaat uit minimaal vijf cijfers, verdeeld in drie delen, gescheiden door streepjes. Het tweede deel bestaat altijd uit twee cijfers, het derde deel uit één cijfer,

Ni .....N4 N3 – N2 N1 - R

Voor het controleren van het CAS-nummer bestaat een ‘controlesom’:

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

Het CAS-nummer moet correct zijn volgens de controlesom.

5 Andere identiteitscodes

Andere internationaal erkende identiteitscodes kunnen ook worden opgegeven, zoals:

- VN-nummer;
- Kleurindexnummer;
- Kleurstofnummer.

6 Molecuulformule, structuurformule en SMILES

6.1 Molecuulformule

Een molecuulformule identificeert elk type element door middel van zijn chemische symbool en identificeert het aantal atomen van elk van die elementen dat voorkomt in één molecule van de stof.

Molecuulformules moeten worden opgegeven volgens het (traditionele) Hill-systeem en daarnaast volgens het CAS-systeem, in het geval dat dit afwijkt van de formule volgens het Hill-systeem.

Voor het toepassen van de Hill-methode kunnen de volgende stappen worden gevolgd:

1. Identificeer de elementen en noteer de chemische symbolen;
2. Rangschik de elementen in de juiste volgorde:

a. Stoffen die koolstof bevatten:

Elk element wordt weergegeven met zijn chemische symbool, in deze volgorde:

(1) Koolstof;

(2) Waterstof;

(3) Andere elementsymbolen in alfabetische volgorde:

Pentaan: C5H12

Penteen: C5H10

Pentanol: C5H12O

b. Stoffen die geen koolstof bevatten:

Alle elementen worden weergegeven in alfabetische volgorde:

Chloorwaterstofzuur: ClH

3. Voor elk element geeft u, als het aantal atomen meer dan één bedraagt, het aantal atomen als subscript bij de chemische symbolen;

4. Voeg informatie die geen betrekking heeft op de hoofdstructuur aan het eind van de molecuulformule weer, gescheiden door een punt of komma:

Natriumbenzoaat is C7H6O2, natriumzout

Kopersulfaat-dihydraat is CuO4S.2H2O

Indien de Hill-methode niet kan worden toegepast voor een specifieke stof, moet de molecuulformule op een andere manier worden gegeven, bijvoorbeeld als een empirische formule, een eenvoudige beschrijving van de atomen en de verhouding tussen de beschikbare atomen of de formule die wordt verstrekt door de Chemical Abstract Service (zie hoofdstuk 4 van dit richtsnoer).

6.2 Structuurformule

Een structuurformule is nodig voor de visualisatie van de ordening van de moleculen binnen de stof en hun relaties tot elkaar. De structuurformule moet de plaats van de atomen, ionen of groepen en de aard van de verbindingen daartussen aangeven. Hiertoe behoort ook isomerie, d.w.z. cis/trans, chiraliteit, optische isomeren enz.

De structuurformule kan in verschillende vormen worden gegeven: in de vorm van een molecuulformule en/of in de vorm van een structuurdiagram.

- Structuurformule in de vorm van een molecuulformule

1. Noteer alle elementen groepsgewijs en in de volgorde waarin ze voorkomen:

   n-pentaan: CH3CH2CH2CH2CH3

2. Elke substituent wordt tussen haakjes geschreven, direct na het atoom waaraan hij is gebonden:

   2-methylbutaan: CH3CH(CH2)CH2CH3

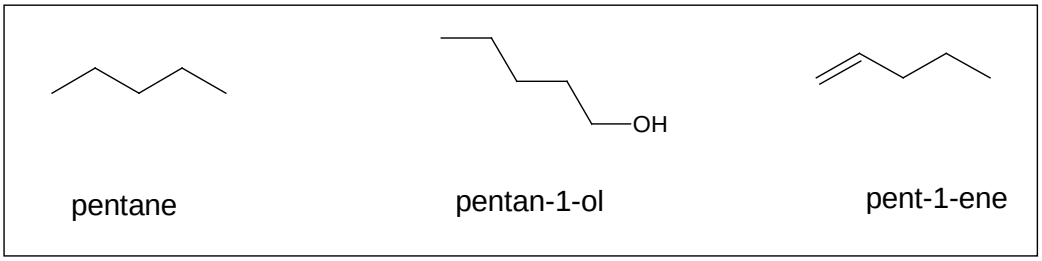
3. Eventuele dubbele of driedubbele bindingen moeten worden weergegeven tussen de betreffende groepen elementen:

   pent-1-een: CH2=CHCH2CH2CH3

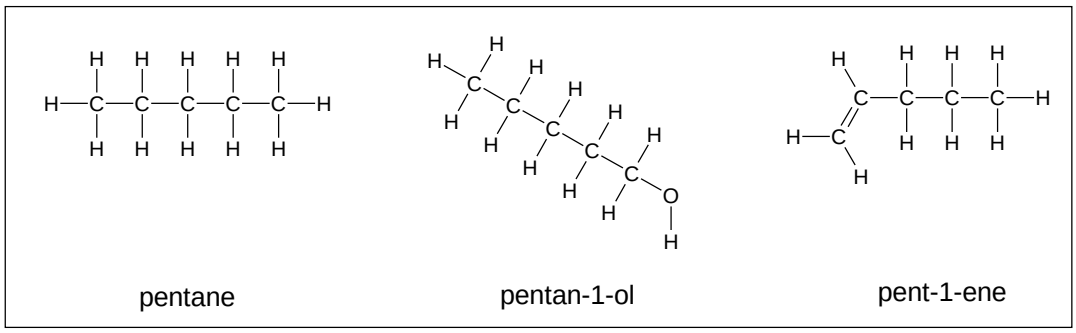
- Structuurformule in de vorm van een structuurdiagram

Voor een structuurdiagram worden de elementen en de bindingen tussen de elementen gevisualiseerd in een 2D- of 3D-afbeeldingen. Er bestaan verschillende methoden:

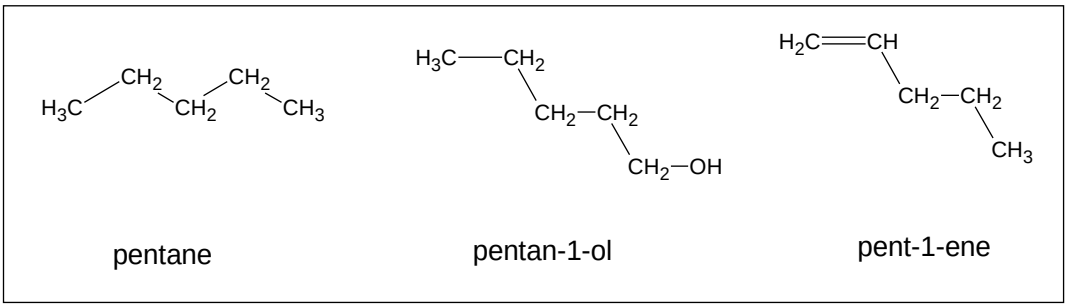
1. Alle niet-koolstofelementen en waterstof dat is gebonden aan niet-koolstofelementen weergeven.



2. Alle elementen met naam weergeven.



3. Koolstof en waterstof weergeven als groepen (bijv. CH3), alle niet-koolstofelementen en alle waterstofatomen die niet zijn gebonden aan koolstof.



6.3 SMILES-notatie

SMILES is een acroniem voor Simplified Molecular Input Line Entry Specification.[32] Het is een chemisch notatiesysteem dat wordt gebruikt om een moleculaire structuur weer te geven als een lineaire reeks symbolen. Bij de standaard SMILES-notatie is de naam van een molecule synoniem aan de structuur ervan: zij geeft indirect een tweedimensionaal beeld van de moleculaire structuur. Aangezien een tweedimensionale chemische structuur op verschillende manieren kan worden getekend, zijn er verschillende correcte SMILES-notaties voor één molecule. De basis van SMILES is de weergave van een valentiemodel van een molecule; het systeem is daarom niet geschikt voor het beschrijven van moleculen die niet met een valentiemodel kunnen worden weergegeven.

SMILES-notaties bestaan uit atomen, aangeduid met elementaire symbolen, bindingen, haakjes, gebruikt om vertakkingen aan te geven, en getallen, gebruikt voor cyclische verbindingen. Een SMILES-notatie geeft een moleculaire structuur weer als een grafiek met optionele chirale indicaties. Een SMILES-notatie die de structuur uitsluitend in termen van bindingen en atomen weergeeft, wordt een generieke SMILES genoemd; een SMILES-notatie met isotopische en chirale specificaties noemen we een isomere SMILES.

Kort samengevat is de SMILES-notatie gebaseerd op verschillende basisregels:

1. Atomen worden weergegeven met hun atoomsymbolen;
2. Elk atoom, met uitzondering van waterstof, wordt afzonderlijk gespecificeerd;
   a. Elementen in de ‘organische deelverzameling’ B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br en I worden zonder haakjes en zonder gebonden H genoteerd, zolang het aantal H-atomen overeenkomt met de laagste normale valentie(s) die consistent is/zijn met expliciete bindingen:

Element in ‘organische deelverzameling’	‘Laagste normale valentie(s)’
B	3
C	4
N	3 en 5
O	2

[32] 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.

P	3 en 5
S	2, 4 en 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

b. Elementen in de ‘organische deelverzameling’ worden met vierkante haken geschreven zodra het aantal H-atomen niet overeenkomt met de laagste normale valentie:

Ammoniumkation is NH4+

c. Andere elementen dan die in de ‘organische deelverzameling’ worden tussen vierkante haken geschreven, waarbij elke gebonden waterstof wordt weergegeven.

3. Alifatische atomen worden in hoofdletters weergegeven; aromatische atomen in kleine letters:

benzeen is c1ccccc1 en cyclohexaan is C1CCCCC1

4. Waterstof wordt alleen in de volgende situaties vermeld:

a. Geladen waterstof, d.w.z. een proton, [H+];

b. Waterstofatomen die gebonden zijn aan andere waterstofatomen, d.w.z. moleculaire waterstof, [H][H];

c. Waterstofatomen die gebonden zijn aan meer dan één ander atoom, bijv. waterstofbruggen;

d. Isotopische waterstofspecificaties, bijv. deuterium ([2H]);

e. Als het waterstofatoom is gebonden aan een chiraal atoom.

5. De vier basisbindingen worden als volgt weergegeven:

Type binding	SMILES-notatie
Enkel	- (hoeft niet weergegeven te worden)
Dubbel	=
Driedubbel	#
Aromatisch	Kleine letters

6. Substituenten worden weergegeven tussen haakjes, direct achter de atomen waaraan ze gebonden zijn:

2-methylbutaan is CC(C)CC

a Substituenten worden altijd direct na de relevante atomen weergegeven;

ze kunnen niet volgen op een symbool voor een dubbele of driedubbele binding:

Pentaanzuur is CCCCC(=O)O

b. Substituenten binnen substituenten zijn toegestaan:

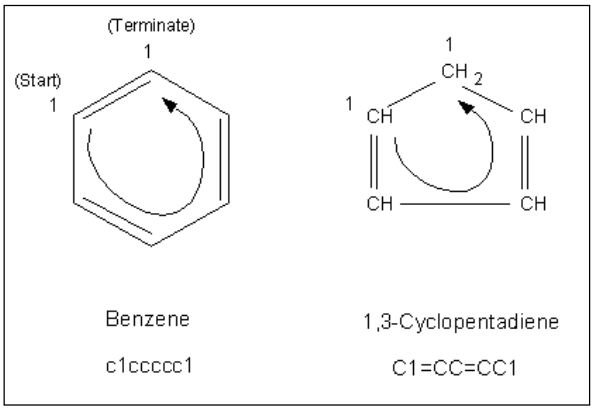
2-(1-methylethyl)butaan is CC(C(C)C)CC

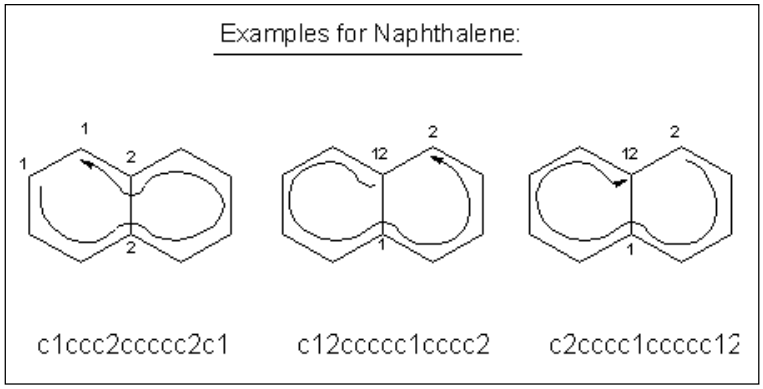
7. Voor cyclische structuren worden de cijfers 1 tot en met 9 gebruikt om het eerste en laatste atoom van de ring aan te geven.

   a. Hetzelfde cijfer wordt gebruikt om het eerste en laatste atoom van elke ring aan te geven. Het eerste en het laatste atoom moeten met elkaar verbonden zijn.

   b. De cijfers worden direct na de atomen geplaatst om de begin- en eindpositie aan te geven.

   c. Een eerste of laatste atoom kan worden gekoppeld aan twee opeenvolgende cijfers.





8. Losse verbindingen worden weergegeven als afzonderlijke structuren of ionen die van elkaar zijn gescheiden door een punt ('.'). Aangrenzende atomen die zijn gescheiden door een punt ('.') zijn niet rechtstreeks met elkaar verbonden, bijv. van-der-Waalsbinding:

Aminopropeen-hydrochloride is C=CC(N).HCl

9. Een isomere configuratie wordt gespecificeerd met de schuine strepen '\' en '/'. Deze symbolen geven de relatieve richting tussen twee isomere bindingen aan. (cis = '/ \', trans = '/ /'). SMILES gebruikt lokale chiraliteit, wat betekent dat de chiraliteit

volledig moet worden gespecificeerd:

cis-1,2-dibroometheen is Br/C=C\Br

trans-1,2-dibroometheen is Br/C=C/Br

10. Optische isomeren of chiraliteit worden weergegeven met het symbool '@'. Het symbool '@' geeft aan dat de volgende buren van het chirale atoom tegen de klokrichting in zijn vermeld. Als het symbool '@@' is gebruikt, zijn de atomen in de richting van de klok vermeld. Het chirale atoom en het '@' worden tussen vierkante haken weergegeven:

2-chloor-2-hydroxypropaanzuur met

gespecificeerde chiraliteit is C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)

11. Isotopische specificaties worden aangegeven door voor het atoomsymbool een getal te noteren dat gelijk is aan de relevante integrale atoommassa. Een atoommassa kan alleen tussen vierkante haken worden gespecificeerd:

Koolstof-13 is [13C] en zuurstof-18 is [18O]

Voor het bepalen van de SMILES-notatie zijn verschillende hulpmiddelen (SMILES-generatoren) beschikbaar (zie aanhangsel 1).

7 Informatie over optische activiteit

Optische activiteit is het vermogen van asymmetrische stoffen om het polarisatievlak van gepolariseerd licht te draaien. Zulke stoffen en hun spiegelbeelden worden optische isomeren genoemd en hebben een of meer chirale centra. Hoewel ze verschillen in geometrische opbouw, hebben optische isomeren identieke chemische en fysische eigenschappen. Aangezien elk type optische isomeer een ander effect heeft op gepolariseerd licht, kan de optische activiteit worden gebruikt om na te gaan welke optische isomeer aanwezig is in een monster en zo kan ook de zuiverheid van de stof worden bepaald. De grootte van de rotatie is een intrinsieke eigenschap van het molecule.

Optische isomeren hebben altijd tegengestelde rotaties: ze polariseren licht in dezelfde mate, maar in tegengestelde richtingen. De optische activiteit van een mengsel van optische isomeren is dus een indicatie van de verhouding tussen de twee optische isomeren. Een mengsel van 50-50 van optische isomeren heeft een optische activiteit van 0.

De waargenomen rotatie hangt af van de concentratie, de lengte van de monsterbuis, de temperatuur en de golflengte van de lichtbron.

Optische activiteit is dus de bepalende parameter om een asymmetrische stof te identificeren en het is de enige parameter waarmee de stof van zijn spiegelbeeld kan worden onderscheiden. Daarom moet, indien van toepassing, de optische activiteit van de stof worden opgegeven.

De standaard voor optische activiteit heet de specifieke rotatie. De specifieke rotatie wordt gedefinieerd als de waargenomen rotatie van licht bij 5896 ångström, met een padlengte van 1 dm en een monsterconcentratie van 1 g/ml. De specifieke rotatie is de waargenomen rotatie gedeeld door de padlengte (dm) maal de concentratie (g/ml).

Optische activiteit kan met een aantal verschillende methoden worden gemeten. De meest gebruikelijke zijn:

- Optische rotatie, waarbij de rotatie van het polarisatievlak van een lichtstraal die door het monster schijnt wordt gemeten;
- Circulair dichroïsme, waarbij de absorptie van rechts en links gepolariseerd licht door een monster wordt gemeten.

Als de stof het licht naar rechts roteert (met de klok mee) wordt hij rechtsdraaiend genoemd en aangeduid met het teken +. Als hij het licht naar links roteert (tegen de klokrichting in) wordt hij linksdraaiend genoemd en aangeduid met het teken -.

8 Molecuulgewicht of molecuulgewichtbereik

Het molecuulgewicht is het gewicht van een molecule van een stof uitgedrukt in atomaire massaeenheden (amu) of als de molaire massa (g/mol). Het molecuulgewicht kan worden berekend op basis van de molecuulformule van de stof: het is de som van de atoomgewichten van de atomen waaruit het molecule is opgebouwd. Voor moleculen zoals bepaalde eiwitten of ongedefinieerde reactiemengsels, waarvoor niet één molecuulgewicht kan worden vastgesteld, kan een molecuulgewichtbereik worden opgegeven.

Voor het bepalen van het molecuulgewicht van stoffen kunnen verschillende methoden worden gebruikt:

- Voor het bepalen van de molecuulgewichten van gasvormige stoffen kan de wet van Avogadro worden gebruikt, die stelt dat een bepaald volume van elk gas onder bepaalde temperatuurs- en druk omstandigheden een specifiek aantal moleculen van het gas bevat.

$$PV = nRT = NkT$$

n = aantal mol

R = universele gasconstante = 8.3145 J/mol K

N = aantal moleculen

k = Boltzmannconstante = 1.38066 x 10-23 J/K = 8.617385 x 10-5 eV/K

k = R/NA

NA = getal van Avogadro = 6.0221 x 1023 /mol

- Voor vloeistoffen en vaste stoffen kan het molecuulgewicht worden vastgesteld door het bepalen van hun effecten op het smeltpunt, het kookpunt, de dampspanning of de osmotische druk van een bepaald oplosmiddel;
- Massaspectrometrie, een zeer nauwkeurige meetmethode;
- Voor moleculen van complexe stoffen met een hoog molecuulgewicht, zoals eiwitten of virussen, kan het molecuulgewicht worden bepaald door bijvoorbeeld de bezinkingssnelheid in een ultracentrifuge te meten or door lichtverstrooiingsfotometrie;
- Er zijn verschillende hulpmiddelen beschikbaar die het molecuulgewicht kunnen berekenen op basis van een structuurdiagram of een molecuulformule van de stof (zie aanhangsel 1).

9 Samenstelling van de stof

Voor elke stof moet de samenstelling als een combinatie van de hoofdbestanddelen, additieven en onzuiverheden worden gemeld in overeenstemming met de regels en criteria die zijn beschreven in hoofdstuk 4 van dit richtsnoer.

Elk bestanddeel, elk additief en elke onzuiverheid moet correct worden geïdentificeerd met

behulp van:

- Naam (IUPAC-naam of andere internationaal geaccepteerde naam);
- CAS-nummer (indien beschikbaar);
- EG-nummer (indien beschikbaar).

Voor elk bestanddeel, elk additief en elke onzuiverheid moet het percentage worden opgegeven (bij voorkeur naar gewicht, anders naar volume), waarbij indien mogelijk het bereik in de handelsstof moet worden vermeld.

Voor het bestanddeel of de bestanddelen moet het typische percentage onzuiverheid met de boven- en ondergrens voor typische commerciële partijen worden opgegeven; voor additieven en onzuiverheden moet het typische percentage onzuiverheid of de boven- en ondergrenzen worden opgegeven. Normaliter moeten de opgegeven waarden samen 100% zijn.

10 Spectrale gegevens

Spectrale gegevens zijn nodig om de opgegeven structuur van een stof met één bestanddeel te bevestigen of om te bevestigen dat een reactiemengsel geen preparaat is. Er kunnen verschillende methoden worden gebruikt voor spectra (ultraviolet, infrarood, nucleaire magnetische resonantie of massaspectrum). Niet alle methoden zijn geschikt voor alle typen stoffen. Waar mogelijk geeft het richtsnoer begeleiding met betrekking tot de passende spectra die moeten worden opgenomen voor verschillende stoftypes (ECB, 2004; ECB, 2005).

Voor verschillende van de bekende methoden moet de volgende informatie worden aangegeven op het spectrum zelf of in bijlagen:

Ultraviolet-zichtbaar (UV-VIS) spectrum

- De identiteit van de stof;
- Oplosmiddel en concentratie;
- Bereik;
- Positie (en epsilonwaarden) van voornaamste pieken;
- Effect van zuur;
- Effect van alkali.

Infraroodspectroscopie (IR)-spectrum

- De identiteit van de stof;
- Medium;
- Bereik;
- Resultaten (geef de voornaamste pieken aan die belangrijk zijn voor de identificatie, bijv. interpretatie van het vingerafdrukgebied).

Spectrum nucleaire magnetische resonantie-spectroscopie (NMR)

- De identiteit van de stof;
- Kern en frequentie;
- Oplosmiddel;
- Indien gepast, interne of externe referentie;
- Resultaten (geef de signalen aan die belangrijk zijn voor de stofidentificatie en de

signalen die overeenkomen met het oplosmiddel en de onzuiverheden);

- Voor 1H NMR-spectra moet de integratiecurve worden gegeven;
- De intensiteit van zwakke NMR-pieken moet verticaal worden versterkt en complexe patronen moeten worden vergroot.
-

Massaspectroscopie (MS)-spectrum

- De identiteit van de stof;
- Versnellingsvoltage;
- Laadmethode (rechtstreeks inbrengen, via GC, enz.);
- Ionisatiewijze (elektron-impact, chemische ionisatie, velddesorptie, enz.);
- Het moleculaire ion (M);
- Significante fragmenten voor de identificatie van de stof;
- M/z-waarden of toewijzing van de pieken die belangrijk zijn voor de identificatie van de structuur;
- Complexe patronen moeten worden vergroot.

Er kunnen ook andere internationaal erkende methoden worden gebruikt als de spectrale gegevens de identificatie van de stof bevestigen, bijv. de interne structuur. Voorbeelden zijn onder meer XRD voor het identificeren van de bestanddelen van complexe mineraaloxiden en XRF voor het analyseren van hun chemische samenstelling.

De volgende algemene vereisten zijn nodig voor de duidelijk begrip en/of een duidelijke interpretatie van de spectra:

- Vermeld significante golflengtes of andere gegevens indien nodig;
- Verstrek extra informatie, bijv. spectra van uitgangsmaterialen;
- Vermeld het gebruikte oplosmiddel en/of andere essentiële details zoals hierboven aangegeven voor bepaalde methoden;
- Verstrek duidelijke kopieën (geen originelen) met een duidelijk aangegeven schaal;
- Verstrek informatie over de gebruikte concentraties van de stof;
- Zorg ervoor dat de meest intense aan de stof gerelateerde pieken de volle uitslag benaderen.

11 Hogedrukvloeistofchromatografie, gaschromatografie

Indien dit gepast is voor het type stof, moet er een chromatogram worden verstrekt om de samenstelling te bevestigen. Een passend chromatogram bevestigt bijvoorbeeld het voorkomen van onzuiverheden, additieven en de bestanddelen van een reactiemengsel. De twee bekendste methoden voor het scheiden en identificeren van mengsels zijn gaschromatografie (GC) en hogedrukvloeistofchromatografie (HPLC). De twee methoden zijn gebaseerd op de interactie van een mobiele fase met een stationaire fase, die leidt tot de scheiding van de bestanddelen van een mengsel.

Voor GC/HPLC-chromatogrammen moet de volgende informatie worden aangegeven op het chromatogram zelf of in bijlagen (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC

- De identiteit van de stof;
- Kolomeigenschappen, zoals diameter, vulling, lengte;
- Temperatuur, ook temperatuurbereik indien gebruikt;
- Samenstelling van de mobiele fase, ook bereik indien gebruikt;

- Concentratiebereik van de stof;
- Visualisatiemethode, bijv. UV-VIS;
- Resultaten (geef de voornaamste pieken aan die belangrijk zijn voor de stofidentificatie);

GC

- De identiteit van de stof;
- Kolomeigenschappen, zoals diameter, vulling, lengte;
- Temperatuur, ook temperatuurbereik indien gebruikt;
- Injectietemperatuur;
- Draaggas en druk van draaggas;
- Concentratiebereik van de stof;
- Visualisatiemethode, bijv. MS;
- Piekidentificatie;
- Resultaten (geef de voornaamste pieken aan die belangrijk zijn voor de stofidentificatie).

12 Beschrijving van de analytische methoden

Bijlage VI van REACH vereist dat de registrant de analytische methoden beschrijft en/of de bibliografische referenties opgeeft voor de methoden die zijn gebruikt voor de identificatie van de stof en, indien van toepassing, voor de identificatie van onzuiverheden en additieven. Deze informatie moet voldoende zijn om de methoden reproduceerbaar te maken.

Europees Agentschap voor chemische stoffen
P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finland
http:/echa.europa.eu