

Vägledning om identifiering och namngivning av ämnen enligt Reach och CLP

Maj 2017
Version 2.1



RÄTTSLIGT MEDDELANDE

Det här dokumentet syftar till att hjälpa användare uppfylla sina skyldigheter enligt Reach- och CLP-förordningarna. Vi vill dock påminna användarna om att texten i Reach- och CLP-förordningarna är den enda gällande rättsliga grunden och att den information som finns i detta dokument inte är avsedd som juridisk hjälp. Ansvar för hur denna information används åvilar helt den enskilda användaren. Europeiska kemikaliemyndigheten fransäger sig allt ansvar för hur informationen i detta dokument kan komma att användas.

Vägledning om identifiering och namngivning av ämnen enligt Reach och CLP

Referens: ECHA-16-B-37.1-SV
Katalognr: ED-07-18-147-SV-N
ISBN: 978-92-9495-727-6
DOI: 10.2823/789788
Publ.datum: Maj 2017
Språk: SV

© Europeiska kemikaliemyndigheten, 2017

Om du har några kommentarer som rör detta dokument kan du skicka in dem genom att använda formuläret för återkoppling (ange dokumentets referens, publiceringsdatum samt det kapitel och/eller den sida i dokumentet som kommentaren gäller). Formuläret finns på Echass webbsida för vägledningar eller kan nås direkt via följande länk:

<https://comments.echa.europa.eu/comments cms/FeedbackGuidance.aspx>

Ansvarsfriskrivning: Detta är en arbetsöversättning av ett dokument som ursprungligen offentliggjorts på engelska. Originalen finns på Echass webbplats.

Europeiska kemikaliemyndigheten

Postadress: Box 400, FI-00121 Helsingfors, Finland

Besöksadress: Annegatan 18, Helsingfors, Finland

FÖRORD

Detta dokument innehåller en beskrivning av hur man namnger och identifierar ett ämne i enlighet med Reach och CLP. Dokumentet är en del av en serie vägledande dokument som syftar till att hjälpa alla berörda parter under förberedelserna för att uppfylla sina skyldigheter enligt Reach- och CLP-förordningarna. Dokumenten ger utförlig vägledning om en rad viktiga Reach- och CLP-processer samt om vissa specifika vetenskapliga och/eller tekniska metoder som industrin eller myndigheterna behöver använda enligt Reach och CLP.

Vägledningsdokumenten utarbetades och diskuterades inom projekten för det praktiska genomförandet av Reach som leddes av avdelningar inom Europeiska kommissionen och omfattade alla intressenter: medlemsstaterna, industrin och icke-statliga organisationer. Vägledningsdokumenten kan fås från Europeiska kemikaliemyndighetens webbplats (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Ytterligare vägledningar kommer att publiceras på webbplatsen när de har slutförts eller aktualiserats.

Dokumenthistorik

Version	Kommentar	Datum
Version 1	Första upplagan	Juni 2007
Version 1.1	<p>Rättelse av följande:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Hänvisning till CLP-förordningen (förordning (EG) nr 1272/2008 av den 16 december 2008) har lagts till i rubriken och i kapitelrubrikerna. - Ytterligare text har lagts till för att förtydliga vägledningens dokumentets tillämpningsområde. Överflödigt text har genomgående tagits bort i dokumentet. - Hänvisningar till CLP-förordningen har införts genomgående i dokumentet i tillämpliga fall. - Termen "TGD" har ändrats till "vägledningsdokument" genomgående i dokumentet. - Termen "beredning" har ändrats till "blandning" genomgående i dokumentet. - Termen "post" har ändrats till "avsnitt" genomgående i dokumentet. - Termen "förhandsregistrering" har ändrats till "(sen) förhandsregistrering" genomgående i dokumentet. - Förkortningarna AAS och CLP har lagts till, medan RIP och TGD har tagits bort. - Beskrivningarna av "legering", "EU-registret" och "IUCLID" har ändrats. Definitioner av "EG-nummer", "listnummer", "blandning" och "anmält ämne" har lagts till. Definitionen av "beredning" har tagits bort. - Avsnitt 3.2 har omarbetats för att förtydliga innehållet. - Avsnitt 3.3 har omarbetats för att förtydliga innehållet med avseende på CLP-skyldigheter. - I avsnitt 4.2.2.1 har sättet att presentera 	November 2011 (enbart på engelska)

	<p>beståndsdelarna ändrats från procentuell koncentration till alfabetisk ordning så att inte den relativa sammansättningen kan härledas från ordningsföljden i förteckningen.</p> <ul style="list-style-type: none"> - I avsnitt 4.2.3.1 har termen "gitter" ändrats till "kristall". - Avsnitt 4.3.1.2.3 har omarbetats för att förtydliga innehållet. - I avsnitt 5 har hänvisning till <i>Handbok för inlämning av data, del 18 – Rapportera ämnesidentitet i IUCLID 5 för registrering enligt Reach</i> införts. - Avsnitt 5 har omarbetats för att förtydliga innehållet. - I avsnitt 6 har termen "förhandsregistrering" ändrats till "(sen) förhandsregistrering". - I tillägg I har trasiga hyperlänkar uppdaterats. - Avsnitt 4.3 har tagits bort eftersom innehållet kan återfinnas på berörd webbplats. 	
Version 1.2	<p>Rättelse</p> <p>Definitionen av "infasningsämne" har ändrats för att överensstämma med definitionen i förordning (EG) nr 1907/2006, som ändrades genom rådets förordning (EG) nr 1354/2007 och genom rättelsen i EUT L 36, 5.2.2009, s. 84 (1907/2006). Observera att ändringarna i version 1.1 och 1.2 har sammanförts i en enda översatt version, version 1.2, när det gäller andra språk än engelska.</p>	Mars 2012
Version 1.3	<p>Rättelse</p> <p>Två strukturformler som saknades i kapitel 7.6 har infogats.</p>	Februari 2014
Version 1.4	<p>Rättelse av följande:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Dokumentet har omformaterats så att det följer gällande företagsprofil. - Kapitel 8 har tagits bort på grund av föråldrad version av IUCLID. 	Juni 2016

	<ul style="list-style-type: none"> - Hänvisningar till kapitel 8 och <i>Handbok för inlämning av data</i> har tagits bort. Hänvisning till nya Echa-handböcker har lagts till. - Tillägg III har tagits bort och innehållet flyttats till tabellen över dokumenthistorik. - Trasiga länkar till webbplatser har reparerats och redaktionella fel rättats. 	
Version 2.0	<p>Partiell uppdatering begränsad till:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Beskrivningen i avsnitt 7.5 av kristobalit och kvarts har rättats och hänvisningen till direktiv 2000/30/EG har tagits bort. - En ny bilaga III har lagts till med beskrivning av konceptet ämnesidentitetsprofil. <p>Ny text har lagts till i kapitel 1 för att introducera den nya bilaga III.</p> <p>Skrivfel och redaktionella fel har rättats.</p>	December 2016
Version 2.1	<p>Korrigerings av typografiska fel i texten och rättelse av felaktiga uppgifter om sammansättning i exemplen i figur 2 i tillägg III.</p>	Maj 2017

Innehållsförteckning

1. Allmänt	9
1.1. Mål	9
1.2. Tillämpningsområde	10
1.3. Vägledningsdokumentets struktur	11
2. Definitioner och förkortningar	12
2.1. Förkortningar	12
2.2. Definitioner	14
3. Regelverk för ämnesidentifiering enligt Reach och CLP	18
3.1. Definition av ämne	18
3.2. EG-register	18
3.2.1. EG-registrets roll vid ikraftträdandet av Reach	19
3.2.2. Listnumren efter ikraftträdandet av Reach	20
3.3. Krav för ämnesidentifiering enligt Reach och CLP	21
4. Vägledning om identifiering och namngivning av ämnen enligt Reach och CLP	23
4.1. Inledning	23
4.2. Ämnen med väldefinierad sammansättning	29
4.2.1. Ämnen med en beståndsdel	30
4.2.2. Ämnen med flera beståndsdelar	31
4.2.3. Ämnen med definierad kemisk sammansättning och andra huvudsakliga identitetsbeteckningar ..	35
4.3. UVCB-ämnen	36
4.3.1. Allmän vägledning om UVCB-ämnen	37
4.3.2. Särskilda typer av UVCB-ämnen	45
5. Kriterier för att kontrollera om ämnen är identiska	54
6. Ämnesidentitet inom (SEN) förhandsregistrering och förfrågan	61
6.1. (SEN) förhandsregistrering	61
6.2. Förfrågan	61
7. Exempel	62
7.1. Dietylperoxidikarbonat	62
7.2. Zolimidin	63
7.3. Isomerblandning	63
7.4. Doftämne AH	67
7.5. Mineraler	73
7.6. Eterisk olja från från Lavandin grosso	76
7.7. Krysantemumolja och isomerer som isoleras från denna	82

7.8. Fenol, isopropylerad, fosfat	86
7.9. Kvartära ammoniumföreningar	87
7.10. Oljederivat	91
7.10.1. Bensinkomponentsflöde (C4-C12)	91
7.10.2. Gasoljor (petroleum)	92
7.11. Enzymer	93
7.11.1. Subtilisin	93
7.11.2. α -amylas	95
Tillägg I – Vägledningsinstrument.....	97
Tillägg II – Teknisk vägledning om de enskilda ämnesidentifieringsparametrarna	101
Bilaga III – Ämnesidentifiering och gemensamt inlämnande av data.....	116

Tabell över tabeller

Tabell 1: Förkortningar.....	12
Tabell 2: Definitioner	14
Tabell 3: Ämnesidentifieringsparametrar i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach	21
Tabell 4: Indelning av huvudsakliga identitetsbeteckningar i exempel som representerar olika typer av väldefinierade liknande ämnen.	24
Tabell 5: Indelning av huvudsakliga identitetsbeteckningar för exempel som representerar olika typer av UVCB- ämnen.....	25

Tabell över figurer

Figur 1: Nyckel till hur man väljer kapitel och bilagor för lämplig vägledning för olika typer av ämnen	28
Figur 2 (nästa sida): En schematisk översikt över de steg potentiella registranter behöver ta från det att de har fastställt sina registreringsskyldigheter (1) till dess att de definierar sin SIP för sin enda ämnesidentitet (4) och slutligen lämnar in sina registreringar och uppfyller sina formella skyldigheter att registrera sina ämnen (8).	122
Figur 3: Åskådliggörande schema för definition av en SIP (steg 4 i figur 2) för ett ämne av UVCB-typ som identifierats baserat på deskriptorer för källa och process från enskilda juridiska enheters beskrivningar av källa och process.	125

1. Allmänt

I och med Reachförordningen (förordning (EG) nr 1907/2006) inrättades ett system för registrering, utvärdering, godkännande och begränsning av kemikalier och Europeiska kemikaliemyndigheten (Echa) upprättades för att genomdriva förordningen.¹

Förordning (EG) nr 1272/2008 (CLP-förordningen eller CLP) är den nya EU-lagstiftningen om klassificering, märkning och förpackning av ämnen och blandningar (CLP-förordningen).² Genom lagstiftningen införs ett nytt system över hela EU för klassificering och märkning av kemikalier som är grundat på Förenta nationernas globalt harmoniserade system (FN:s GHS).

Reachförordningen är inriktad på ämnen. En korrekt och otvetydig identifiering av ämnen är nödvändig för att säkerställa att Reach-förfarandena fungerar på rätt sätt. Detta vägledningsdokument om identifiering och namngivning av ämnen är avsett att stödja industrin, medlemsstaterna och Europeiska kemikaliemyndigheten.

Vägledningsdokumentet bygger på erfarenheterna från identifiering av ämnen enligt den tidigare kemiska lagstiftningen (direktiv 67/548/EEG och direktiv 98/8/EEG). Aktuella metoder som rör ämnesidentiteten enligt Reachförordningen och förordningen om klassificering, märkning och förpackning av ämnen och blandningar (CLP) ligger till grund för förfiningen av denna vägledning. Dessutom har tillvägagångssätt från andra kemiska system utanför Europeiska unionen beaktats i tillämpliga fall.

Vägledning som är särskilt anpassad för olika typer av ämnen har tagits med.

Det här vägledningsdokumentet bör användas vid identifiering och namngivning av ämnen som regleras av Reach- och CLP-förordningarna.

1.1. Mål

Målet med detta vägledningsdokument är att ge vägledning till tillverkare och importörer om registrering och rapportering av ett ämnes identitet i enlighet med Reach och CLP. Dokumentet ger viktig information och vägledning om hur ett ämne identifieras och tilldelas ett namn. Det ger också vägledning om huruvida ämnen kan betraktas som identiska i enlighet med Reach och CLP och hur principen "ett ämne, en registrering (OSOR) kan tillämpas genom att ämnesidentitetsprofilen (SIP) identifieras.. Identifieringen av identiska ämnen som kan omfattas av samma SIP har betydelse för (sen) förhandsregistrering av infasningsämnen, för förfrågningar, för gemensamt datautnyttjande, för gemensam datainlämning, för anmälan till klassificerings- och märkningsregistret och för harmonisering av klassificering och märkning.

Identifieringen av ämnen bör främst utföras av experter inom industrin. Med tanke på de parter inom industrin som har ringa sakkunskap om identifiering av ämnen har ytterligare vägledning om identifieringsparametrar infogats i ett tillägg till vägledningsdokumentet.

Dessutom innehåller vägledningsdokumentet länkar till relevanta verktyg som är till hjälp för karakterisering och kontroll av ett ämnes kemiska identitet.

¹ Europaparlamentets och rådets förordning (EG) nr 1907/2006 av den 18 december 2006 om registrering, utvärdering, godkännande och begränsning av kemikalier (Reach), inrättande av en europeisk kemikaliemyndighet, ändring av direktiv 1999/45/EG och upphävande av rådets förordning (EEG) nr 793/93 och kommissionens förordning (EG) nr 1488/94 samt rådets direktiv 76/769/EEG och kommissionens direktiv 91/155/EEG, 93/67/EEG, 93/105/EG och 2000/21/EG ("Reach").

² Europaparlamentets och rådets förordning (EG) nr 1272/2008 av den 16 december 2008 om klassificering, märkning och förpackning av ämnen och blandningar, ändring och upphävande av direktiven 67/548/EEG och 1999/45/EG samt ändring av förordning (EG) nr 1907/2006 (Text av betydelse för EES) ("CLP").

Mer detaljerade anvisningar om hur man fyller i ämnets identitet i IUCLID vid olika förfaranden enligt Reach och CLP finns i Echas handböcker på <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Tillämpningsområde

Enligt artikel 1 i Reach avser förordningen skyldigheter som gäller tillverkning, import, utsläppande på marknaden och användning av ämnen som sådana eller ingående i blandningar eller varor. Blandningar och varor som sådana regleras inte genom Reach.

I enlighet med artikel 10 i Reach måste ämnets identitet anges vid registreringen med hjälp av de parametrar som anges i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach (se **tabell 3**). Liknande parametrar (enligt avsnitt 2.1 till 2.3.4 i bilaga VI till Reach) ska användas då ämnets identitet ska anges i samband med anmälan enligt artikel 40.1 i CLP. Detta vägledningsdokuments fokus ligger på att identifieringen av ämnen som omfattas av den rättsliga definitionen av ett ämne enligt Reach och CLP sker på ett korrekt sätt och ger vägledning om ämnets identifieringsparametrar i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach. Den information som lämnas om ämnets identitet ska vara tillräcklig för att varje ämne ska kunna identifieras. En eller flera av identifieringsparametrarna för ämnet kan utelämnas om det inte är tekniskt möjligt eller inte förefaller vara nödvändigt ur vetenskaplig synvinkel att lämna den begärda informationen. Skälen till att sådana utelämnanden görs ska tydligt anges och motiveringen ska ha vetenskaplig grund.

Metoden för att identifiera ett ämne beror på typen av ämne. Därför lotsas användaren av detta vägledningsdokument till särskilda kapitel om olika typer av ämnen.

De EG-register som användes inom ramen för direktiv 67/548/EEG (Einecs, Elincs och NLP-förteckningen) är viktiga hjälpmedel vid identifiering av ämnen. Vägledning om dessa registers funktion inom ramen för Reach ges i kapitel 3.2.

Ämnen som omfattas av Reach och CLP (och följaktligen av detta vägledningsdokument) bildas vanligen från kemiska reaktioner i samband med tillverkningen av ämnet och kan innefatta flera distinkta beståndsdelar. Ämnen, enligt definition i Reach och CLP, omfattar även ämnen som utvinns på kemisk väg eller isoleras från naturligt förekommande material och som kan utgöra ett enstaka grundämne eller molekyl (t.ex. rena metaller eller vissa mineraler) eller flera beståndsdelar (t.ex. eteriska oljor, metallskärsten som bildas vid smältning av sulfidhaltiga metallmalmer). Dock är ämnen som regleras genom annan gemenskapslagstiftning i ett antal fall undantagna från registrering enligt Reach (se artikel 2 i Reach). Undantagna från registrering är även ämnen som förtecknas i bilaga IV till Reach samt ämnen som uppfyller vissa kriterier som anges i bilaga V till Reach. Det bör observeras att det faktum att ett ämne undantas från registrering inte behöver innebära att ämnet är föremål för undantag i andra avdelningar i Reachförordningen eller från kraven i CLP-förordningen.

Enligt Reach måste registranter av samma ämne samlas och komma överens om det gemensamma inlämnandet av viss information om ämnet (OSOR-principen)³. Det måste stå klart hur registranten har definierat tillämpningsområdet för sitt ämnets identitetsprofil för att den principen ska kunna tillämpas.

³ Närmare information om datadelning om samma ämne vid gemensamt inlämnande finns i *Vägledning om datadelning*.

1.3. Vägledningsdokumentets struktur

Bakgrundsinformation i form av vägledningsdokumentets mål och tillämpningsområde ges i kapitel 1 och de förkortningar och definitioner som används anges i kapitel 2. Relevant information om regelverket för identifiering av ämnen enligt Reach, t.ex. ämnesdefinition och informationskrav i lagtexten ges i kapitel 3.

Praktisk vägledning om identifiering och namngivning av ämnen ges i kapitel 4.

- I kapitel 4.1 beskrivs skillnaden mellan "väldefinierade" och "bristfälligt definierade" ämnen och inom dessa två huvudgrupper kan olika typer av ämnen urskiljas som kräver sin egen särskilda vägledning om ämnesidentifiering. För att leda användaren till rätt kapitel med vägledning om identifieringen av den särskilda typen av ämne visas ett översiktsdiagram.
- I de följande kapitlen ges särskild vägledning för varje typ av ämne i form av en uppsättning regler med förklaringar och exempel.

I kapitel 5 ges vägledning om hur man kontrollerar om ämnen kan betraktas som identiska. Vägledning om ämnesidentitet inom (sen) förhandsregistrering och förfrågningsförfaranden ges i kapitel 6.

I kapitel 7 har dessutom ett par utförliga exempel tagits fram med hjälp av den praktiska vägledningen i kapitel 4.

I tillägg I finns några länkar till relevanta verktyg som är till hjälp för karakterisering och kontroll av ett ämnes kemiska identitet.

Tillägg II innehåller mer bakgrundsinformation om de enskilda ämnesidentifieringsparametrar som används vid ämnesidentifiering, såsom nomenklaturregler, EG-nummer och CAS-nummer, beteckning av molekyl- och strukturformel samt analysmetoder.

I bilaga III finns information om begreppet ämnesidentitetsprofil (SIP), dess relevans för skyldigheterna vid gemensamt inlämnande och hur det ska definieras och rapporteras.

2. Definitioner och förkortningar

2.1. Förkortningar

Viktiga förkortningar som används i detta vägledningsdokument förtecknas och förklaras i **tabell 1**.

Tabell 1: Förkortningar

Förkortning	Betydelse
AAS	Atomabsorptionsspektroskopi
AISE	Internationella sammanslutningen för tvål, rengöringsmedel och underhållsprodukter
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Förordning (EG) nr 1272/2008 om klassificering, märkning och förpackning av ämnen och blandningar
EG	Europeiska kommissionen
Einecs	European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (europeisk förteckning över befintliga kommersiella kemiska ämnen)
Elincs	European List of Notified Chemical Substances (europeisk förteckning över förhandsanmälda ämnen)
ENCS	Existing and New Chemical Substances (Japan) (befintliga och nya kemiska ämnen)
ESIS	European chemical Substances Information System (europeiskt informationssystem för kemiska ämnen)
EU	Europeiska unionen
GC	Gaskromatografi
GHS	Globalt harmoniserat system
HPLC	Högupplösande vätskekromatografi
InChI	IUPAC International Chemical Identifier (internationell kemisk identitetsbeteckning utarbetad av IUPAC)
INCI	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients (internationell nomenklatur för kosmetiska produkter)
IR	Infraröd
ISO	Internationella standardiseringsorganisationen
IUBMB	International Union of Biochemistry and Molecular Biology (internationella föreningen för biokemi och molekylärbiologi)
IUCLID	Databasen "International Uniform Chemical Information Database"
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry (internationella

	kemiunionen)
MS	Masspektroskopi
NLP	Före detta polymerer
NMR	Kärnmagnetisk resonans
ppm	Miljondelar
Reach	Registrering, utvärdering, godkännande och begränsning av kemikalier
SIEF	Substance Information Exchange Forum (forum för informationsutbyte om ämnen)
SIP	Substance Identity Profile (ämnesidentitetsprofil)
Smiles	Simplified Molecular Input Line Entry System
TSCA	Toxic Substances Control Act (USA) (lagen om kontroll av giftiga ämnen)
UV/VIS	Ultraviolett/synligt
UVCB	Ämnen med okänd eller varierande sammansättning, komplexa reaktionsprodukter eller biologiskt material.
Vikt-%	Viktprocent
XRD	Röntgendiffraktion
XRF	Röntgenfluorescens

2.2. Definitioner

Viktiga definitioner som används i detta vägledningsdokument förtecknas och förklaras i **tabell 2**.

Dessa definitioner följer de definitioner som används i Reachförordningen och CLP-förordningen. Av denna anledning är definitionerna för några termer annorlunda än när de användes inom ramen för direktiv 67/548/EEG.

Tabell 2: Definitioner

Definition	Beskrivning
Anmält ämne*	Ett ämne för vilket en anmälan har lämnats in och som får släppas ut på marknaden i enlighet med direktiv 67/548/EEG.
Beståndsdel	Varje i ett ämne ingående enstaka ingrediens som kännetecknas av en unik kemisk identitet.
Blandning*	Blandning eller lösning som består av två eller flera ämnen.
EG-nummer	EG-numret utgör den numeriska identitetsbeteckningen för ämnen i EG-registret.
EG-register	EG-registret är inte rättsligt definierat i Reachförordningen men består av tre oberoende och rättsligt godkända europeiska förteckningar över ämnen från det tidigare europeiska ramverket för kemikalietillsyn: EINECS, ELINCS och NLP-förteckningen (före detta polymerer). Posterna i EG-registret består av ett kemiskt namn och ett nummer (EG-namn och EG-nummer), ett CAS-nummer, molekylformel (i förekommande fall) och beskrivning (för vissa typer av ämnen).
Förorening	En beståndsdel som oavsiktligt förekommer i ett ämne i tillverkad form. Den kan härröra från utgångsmaterialet eller bildas som ett resultat av sekundära eller ofullständiga reaktioner under tillverkningsprocessen. Även om den finns i det slutliga ämnet har den inte avsiktligt tillförts.
Huvudbeståndsdel	En i ett ämne ingående beståndsdel som inte utgör någon tillsats eller förorening och som utgör en betydande del av ämnet och därför används för namngivning av ämnet och utförlig identifiering av ämnet.
Icke-infasningsämne	Ett ämne som kräver registrering och för vilket man inte kan dra nytta av övergångsreglerna som gäller för infasningsämnena enligt Reachförordningen.

Definition	Beskrivning
Infasningsämne*	<p>Ett ämne som uppfyller minst ett av följande kriterier:</p> <ul style="list-style-type: none"> (a) Ämnet listas i den europeiska förteckningen över befintliga kommersiella kemiska ämnen (Einecs). (b) Det har tillverkats i gemenskapen eller i de länder som anslöt sig till Europeiska unionen den 1 januari 1995, den 1 maj 2004, den 1 januari 2007 eller den 1 juli 2013, men inte släppts ut på marknaden av tillverkaren eller importören, åtminstone en gång under de 15 år som föregår förordningens ikraftträdande, under förutsättning att tillverkaren eller importören har skriftligt bevis på detta. (c) Det släpptes ut på marknaden i gemenskapen, eller i de länder som anslöt sig till Europeiska unionen den 1 januari 1995, den 1 maj 2004, den 1 januari 2007 eller den 1 juli 2013, av tillverkaren eller importören innan denna förordning trädde i kraft, och ansågs ha anmälts i enlighet med artikel 8.1 första strecksatsen i direktiv 67/548/EEG, i den version av artikel 8.1 som är ett resultat av den ändring som genomfördes genom direktiv 79/831/EEG, men det motsvarar inte definitionen av en polymer enligt denna förordning, under förutsättning att tillverkaren eller importören har skriftligt bevis på detta, inbegripet att de kan styrka att ämnet släpptes ut på marknaden av en tillverkare eller importör under perioden från och med den 18 september 1981 till och med den 31 oktober 1993.
Inte kemiskt modifierat ämne*	<p>Ett ämne vars kemiska struktur kvarstår oförändrad, även om det har genomgått en kemisk process eller behandling, eller en fysikalisk mineralogisk omvandling, exempelvis för att avlägsna föroreningar.</p>
Intermediär*	<p>Ett ämne som tillverkas för och förbrukas eller används vid kemisk bearbetning för att omvandlas till ett annat ämne (nedan kallat <i>syntes</i>):</p> <ul style="list-style-type: none"> (a) <i>Icke-isolerad intermediär</i>: en intermediär som under syntesen inte avsiktligt avlägsnas från den utrustning i vilken syntesen äger rum (utom för provtagning). Sådan utrustning omfattar reaktionskärlet med kringutrustning och all utrustning genom vilken ämnet passerar under en kontinuerlig eller satsvis process, samt rörledningar för överföring från ett kärl till ett annat inför nästa reaktionssteg; dock omfattas inte tankar eller andra kärl vilka ämnet lagras i efter tillverkningen. (b) <i>Icke-isolerad intermediär som används på plats</i>: en intermediär som inte uppfyller de kriterier som gäller för icke-isolerade intermediärer och där tillverkningen av intermediären och syntesen av ett eller flera andra ämnen från denna intermediär äger rum på en och samma plats och ombesörjs av en eller flera rättsliga enheter. (c) <i>Isolerad intermediär som transporteras</i>: en intermediär som inte uppfyller de kriterier som gäller för icke-isolerade intermediärer och som transporteras mellan eller levereras till andra platser.

Definition	Beskrivning
IUCLID	Databasen "International Uniform Chemical Information Database" IUCLID är en databas och ett informationshanteringssystem för kemiska ämnen.
Komponent	Ämne som avsiktligt tillsätts för bildandet av en blandning.
Kromatografiskt fingeravtryck	Återgivning av ett ämnes sammansättning genom en karakteristisk fördelning av beståndsdelar i ett analytiskt kromatogram.
Legering*	Ett metallmaterial, homogent i makroskopisk skala, bestående av två eller flera element som är kombinerade på ett sådant sätt att de inte utan vidare kan skiljas åt på mekanisk väg. Legeringar betraktas som särskilda blandningar.
Listnummer	Automatiskt fördelade nummer som tilldelas av Reach-IT. Används till alla inkommande giltiga inlämningar (t.ex. förhandsregistreringar, PPORD, förfrågningar, registreringar, klassificerings- och märkningsanmälningar). Ett listnummer har ingen rättslig betydelse och används endast som en teknisk identitetsbeteckning vid hantering av inlämningar inom Echa.
Monomer*	Ett ämne som kovalent kan bindas till en sekvens av andra likadana eller olika molekyler under de förhållanden som råder vid den polymerbildande reaktion som används för en given process.
Polymer*	Ett ämne bestående av molekyler som är uppbyggda av en sekvens av en eller flera typer av monomerenheter. Molekylerna ska vara fördelade över en rad molekyllvikter, där skillnaden i molekyllvikt främst kan hänföras till skillnader i antalet monomerenheter. En polymer utgörs av: (a) en enkel viktmajoritet molekyler som innehåller åtminstone tre monomerenheter kovalent bundna till åtminstone en annan monomerenhet eller annan reaktant, (b) mindre än en enkel viktmajoritet molekyler med samma molekyllvikt. I denna definition avses med "monomerenhet" en monomers form i en polymer efter reaktionen.
Tillsats	Ett ämne som avsiktligt tillsätts för att ämnet ska stabiliseras ⁴ .
Tillverkning*	Produktion eller utvinning av ämnen i naturlig form.
Vara*	Ett föremål som under tillverkningen får en särskild form, yta eller formgivning, vilken i större utsträckning än dess kemiska sammansättning bestämmer dess funktion.

⁴ Inom andra områden kan en tillsats även ha andra funktioner, t.ex. som pH-reglerare eller färgämne. I Reachförordningen och i detta tekniska vägledningsdokument utgör dock tillsatsen ett stabiliseringsmedel.

Definition	Beskrivning
Ämne med en beståndsdel	Som en allmän regel avses ett ämne som definieras av sin sammansättning, i vilket en huvudbeståndsdel uppgår till minst 80 viktprocent.
Ämne med flera beståndsdelar	Som en allmän regel avses ett ämne som definieras genom sin sammansättning, i vilket en huvudbeståndsdel ingår i ≥ 10 viktprocent och < 80 viktprocent.
Ämne som förekommer i naturen*	Ett naturligt förekommande ämne som sådant, obearbetat eller bearbetat endast med manuella eller mekaniska medel eller genom inverkan av tyngdkraften, genom lösning i vatten, flotation, extraktion med vatten, ångdestillation eller upphettning enbart i syfte att avlägsna vatten, eller som utvunnits ur luft på vilket sätt som helst.
Ämne*	Ett kemiskt grundämne och föreningar av detta grundämne i naturlig eller tillverkad form, inklusive de eventuella tillsatser som är nödvändiga för att bevara dess stabilitet och sådana föroreningar som härrör från tillverkningsprocessen, men exklusive eventuella lösningsmedel som kan avskiljas utan att det påverkar ämnets stabilitet eller ändrar dess sammansättning.

* Definitioner enligt artikel 3 i Reach.

3. Regelverk för ämnesidentifiering enligt Reach och CLP

I Reach och CLP anges definitionen av ett ämne och i Reach anges de ämnesidentifieringsparametrar (bilaga VI, avsnitt 2) som ska användas för identifiering av ämnet i samband med registrering.

Det här kapitlet innehåller ämnesdefinitionen enligt Reach och CLP (kapitel 3.1), allmän vägledning om hur man använder EG-registret från det tidigare europeiska ramverket för kemikalietillsyn (kapitel 3.2) och ger mer bakgrundsinformation om de krav på ämnesidentifiering som anges i Reach (kapitel 3.3).

3.1. Definition av ämne

Begreppet ämne definieras i artikel 3.1 i Reach och i artikel 2.7 i CLP:

"ämne: kemiskt grundämne och föreningar av detta grundämne i naturlig eller tillverkad form, inklusive de eventuella tillsatser som är nödvändiga för att bevara dess stabilitet och sådana föroreningar som härrör från tillverkningsprocessen, men exklusive eventuella lösningsmedel som kan avskiljas utan att det påverkar ämnets stabilitet eller ändrar dess sammansättning."

Ämnesdefinitionen i Reach och CLP är identisk med den definition av ett ämne som användes i sjunde ändringen av direktivet om farliga ämnen (direktiv 92/32/EEG om ändring av direktiv 67/548/EEG). I båda fallen går definitionen utöver en ren kemisk förening definierad av en enda molekyelstruktur. I ämnesdefinitionen ingår olika beståndsdelar, exempelvis föroreningar.

3.2. EG-register

Tre separata förteckningar hade sammanställts inom ramen för det tidigare kemikalierregelverket. Förteckningarna är European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (Einecs), European List of Notified Chemical Substances (Elincs) och förteckningen över före detta polymerer (NLP).

De ämnen som fanns på EU:s marknad mellan den 1 januari 1971 och den 18 september 1981 förtecknas i European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (Einecs)^{5, 6, 7}.

Detta register innehåller över 100 000 ämnen som anges med ett kemiskt namn (och en beskrivning för vissa typer av ämnen), ett CAS-nummer och ett sju-siffrigt nummer benämnt Einecs-nummer. Einecs-nummer börjar alltid med siffran 2 eller 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Ämnen som registreras i Einecs har genomgått ett kontrollsteg som motiverar att ämnet

⁵ Einecs grundar sig på registret **E**uropean **C**ore **I**nventory (ECOIN) till vilket industrin kunde lämna kompletterande rapportering om ämnen (enligt kriterierna för registrering av ämnen i Einecs). ECOIN byggdes upp genom att man slog samman olika förteckningar över kemikalier som förväntades förekomma på den europeiska marknaden (t.ex. TSCA). Einecs offentliggjordes den 15 juni 1990 och innehåller över 100 000 ämnen. Under det att registret använts har man hittat ett antal fel (tryckfel, t.ex. felaktiga kemiska namn, formler eller CAS-registreringsnummer). Därför offentliggjordes en rättelse den 1 mars 2002.

⁶ ECB:s (2005) handbok över beslut för genomförande av den sjätte och sjunde ändringen av direktiv 67/548/EEG (direktiven 79/831/EEG och 92/32/EEG), icke konfidentiell version. EUR 20519 EN. Uppdaterad version från juni 2005.

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

införs i registret.

Ämnen som anmälts och släppts ut på marknaden efter den 18 september 1981 är förtecknade i European List of Notified Chemical Substances (Elincs)⁶. Registret (förteckningen) innehåller alla ämnen som anmälts till och med den 31 maj 2008 enligt direktiv 67/548/EEG och tillhörande ändringar. Dessa ämnen är så kallade "nya ämnen", eftersom de inte släpptes ut på gemenskapsmarknaden före den 18 september 1981. Efter att ett ämne granskats av medlemsstaternas behöriga myndigheter tilldelades det ett Elincs-nummer av Europeiska kommissionen. I motsats till EINECS tar Elincs inte med något CAS-nummer i sina poster utan tar i stället med det anmältningsnummer som erhållits genom medlemsstaternas berörda myndigheter, handelsnamnet (i tillämpliga fall), klassificeringen och IUPAC-namnet för klassificerade ämnen. Även Elincs-numren är sju-siffriga nummer och de börjar alltid med 4 (4xx-xxx-x).

Polymerer undantogs från anmälningssplikten till EINECS och var föremål för särskilda regler enligt direktiv 67/548/EEG⁸ ⁹. Begreppet polymer definieras närmare i den sjunde ändringen av direktiv 67/548/EEG (direktiv 92/32/EEG). Till följd av tillämpningen av denna definition anses vissa ämnen, som förut ansågs vara polymerer enligt reglerna för registrering i EINECS, *inte längre* vara polymerer enligt den sjunde ändringen. Eftersom alla ämnen som inte listas i EINECS var anmälningsspliktiga borde alla *före detta polymerer* (NLP) i teorin ha anmälts. Ministerrådet klargjorde dock att dessa före detta polymerer inte behövde anmälas i efterhand. Kommissionen ombads upprätta en förteckning över före detta polymerer (NLP-förteckningen). De ämnen som skulle tas med i förteckningen var de som hade släppts ut på EU-marknaden mellan den 18 september 1981 (dagen för ikraftträdandet av direktiv 79/831/EEG, sjätte ändringen av direktiv 67/548/EEG) och den 31 oktober 1993 (dagen för ikraftträdandet av direktiv 92/32/EEG, sjunde ändringen av direktiv 67/548/EEG) och som uppfyllde kravet på att de betraktades som polymerer enligt registreringsreglerna för EINECS, men inte längre betraktades som polymerer enligt sjunde ändringen. NLP-förteckningen är en icke-uttömmande förteckning. Ämnena i NLP-förteckningen identifieras med ett kemiskt namn, ett CAS-nummer och ett sju-siffrigt nummer som kallas NLP-nummer. Ett NLP-nummer börjar alltid med 5 (5xx xxx-x).

De tre europeiska förteckningarna EINECS, Elincs och NLP-förteckningen kallas sammantaget för EG-registret. Varje ämne i detta register har ett EG-nummer som det tilldelats från Europeiska kommissionen (se utförlig information om EG-numret i tillägg II).

Information om dessa ämnen finns på Europeiska kemikaliemyndighetens webbplats (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), där det även finns ett register över registrerade ämnen som upprätthålls och offentliggörs av myndigheten (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

3.2.1. EG-registrets roll vid ikraftträdandet av Reach

Tillverkare och importörer kan använda EG-registret som ett verktyg för att avgöra huruvida ett ämne är ett infasningsämne eller ett icke-infasningsämne. Således kan tillverkare och importörer ta hjälp av EG-registret för att ta reda på *när* ett ämne måste registreras och om en (sen) förhandsregistrering eller en förfrågan är nödvändig.

I Reachförordningen fastställs olika förfaranden för registrering av och gemensamt utnyttjande av data för "befintliga" ("infasningsämnena") (enligt artikel 3.20) samt "nya"

⁸ (ECB, 2003) Anmälan av nya kemiska ämnen enligt direktiv 67/548/EEG om klassificering, förpackning och märkning av farliga ämnen. Förteckning över före detta polymerer. EUR 20853 EN.

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

(”icke-infasningsämnen”) ämnen¹⁰.

Om ett ämne tidigare anmälts enligt direktiv 67/548/EEG och därmed är förtecknat i Elincs, ska den inlämnade anmälan betraktas som en registrering för Reach-ändamål (artikel 24). Dessa ämnen anses redan vara registrerade av den aktuella tillverkare eller importör som gjorde anmälan och det krävs därmed inte att denna tillverkare/importör gör en inledande registrering. Tillverkaren/importören har ändå skyldighet att hålla registreringen uppdaterad. Övriga tillverkare/importörer av ett ämne som är förtecknat i (och som inte omfattas av tidigare anmälningar) är skyldiga att registrera ämnet (precis som för icke-infasningsämnen) och utbyta data med den tidigare registranten. Mer information om detta finner du i *Vägledning om registrering* som finns tillgänglig på webbplatsen för Echas vägledningar på <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

3.2.2. Listnumren efter ikraftträdandet av Reach

Vid upprättandet av Reach-IT-systemet ansåg Echa det vara fördelaktigt att automatiskt tilldela ett nummer till ämnen i alla inkommande tekniskt fullständiga inlämningar (förhandsregistreringar, PPORD-anmälningar, förfrågningar, registreringar, klassificerings- och märkningsanmälningar osv.) för vilka ett EG-nummer inte angetts (se kriterierna för tilldelning av listnummer nedan). Detta har underlättat hantering, ytterligare bearbetning och identifiering av ämnena i dessa inlämningar ur teknisk synvinkel. Dessa så kallade ”listnummer” har samma numeriska format som används för EINECS-, Elincs- och NLP-numren, men de börjar med andra siffror.

Till skillnad från EINECS-, Elincs- och NLP-posterna har listnumren varken grundats på ett rättsligt krav eller offentliggjorts i Europeiska unionens officiella tidning. Därför har listnumren inte samma betydelse som EG-numren utan har bara det numeriska formatet gemensamt med dessa. De har enbart administrativ och inte lagstiftningsmässig betydelse. Det är viktigt att nämna att den allra största delen av listnumren och den ämnesidentifiering som är knuten till dem aldrig har kontrollerats med avseende på riktighet, giltighet och om de konventioner som beskrivs i detta vägledningsdokument följs.

Av det skälet planerade man ursprungligen inte att göra listnumren tillgängliga för allmänheten förrän de hade kontrollerats av Echa. Eftersom nästan 40 000 ämnen förhandsregistrerades utan ett EG-nummer under förhandsregistreringsperioden beslutade Echa emellertid att offentliggöra listnumren tillsammans med förteckningen över förhandsregistrerade ämnen för att underlätta bildandet av forum för informationsutbyte om ämnen (SIEF).

Det måste betonas att det är möjligt att olika listnummer kan ha tilldelats samma ämne när olika identitetsbeteckningar (t.ex. namn) har använts för detta ämne. Till följd av detta är det också möjligt att ett listnummer kan ha tilldelats ett ämne som finns i EINECS-, Elincs- eller NLP-förteckningen i det fall ett namn som skiljer sig från det i EG-registret används i en inlämning till Echa via Reach-IT.

Listnumren börjar alltid med siffran 6, 7, 8 eller 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-xx, 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-xx).

Ett ämne som identifieras i inlämningsunderlaget med ett CAS-nummer, som inte är knutet till ett EG-nummer eller ett annat listnummer som redan tilldelats från Echa, får ett listnummer som börjar med 6 eller 8.

Ett ämne som bara anges med ett namn i underlaget, som inte kan knytas till ett namn i EG-registret eller med ett listnamn, tilldelas ett listnummer som börjar med 9.

Listnumren som börjar med 7 tilldelas under förfrågningsförfarandet (artikel 26 i Reach)

¹⁰ Definitioner av ”infasningsämnen” och ”icke-infasningsämnen” ges i *Vägledning om registrering*.

efter det att identifieringen av ämnet kontrollerats. Dessa poster har en tillförlitlig och bekräftad ämnesidentitet.

Det är viktigt att notera att beskrivningen av ett ämne i vissa EINECS-poster är relativt bred och eventuellt skulle kunna omfatta mer än en ämnesidentitet enligt artikel 3.1 i Reach. I dessa fall föreslås att den eventuella registranten beskriver det aktuella ämnet mer precist (t.ex. via IUPAC-namnet eller andra identitetsbeteckningar). För att visa ämnets infasningsstatus bör registranten under alla omständigheter ange vilken EINECS-post ämnet tillhör. I sådana fall kommer Europeiska kemikaliemyndigheten att besluta om det är lämpligt att tilldela det aktuella ämnet ett listnummer eller inte.

3.3. Krav för ämnesidentifiering enligt Reach och CLP

Om det krävs en registrering enligt Reachförordningen ska den innehålla information om identifieringen av ämnet såsom anges i avsnitt 2 i bilaga VI. Denna information måste vara relevant och tillräcklig för att möjliggöra identifiering av varje ämne. Om det inte är tekniskt möjligt eller om det ur vetenskaplig synvinkel inte förefaller nödvändigt att lämna information om en eller flera av ämnesidentifieringsparametrarna ska skälen till detta tydligt anges i anmärkning 1 i bilaga VI.

På samma sätt ska en anmälan som krävs enligt CLP-förordningen (artikel 40 i CLP) innehålla information om identifieringen av ämnet enligt avsnitt 2.1 till 2.3.4 i bilaga VI till Reach. Denna information måste vara relevant för att möjliggöra identifiering av varje ämne. Om det inte är tekniskt möjligt eller om det ur vetenskaplig synvinkel inte förefaller nödvändigt att lämna information om en eller flera av ämnesidentifieringsparametrarna ska skälen till detta tydligt anges i anmärkning 1 i bilaga VI.

I **tabell 3** ges en översikt av ämnesidentifieringsparametrarna i bilaga VI till Reach.

Tabell 3: Ämnesidentifieringsparametrar i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach

	Ämnesidentifieringsparametrar i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach
2.	IDENTIFIERING AV ÄMNET <i>För varje ämne ska den givna informationen vara tillräcklig för att göra det möjligt att identifiera varje ämne. Om det inte är tekniskt möjligt eller om det ur vetenskaplig synvinkel inte förefaller nödvändigt att lämna information på en eller flera av följande punkter ska skälen till detta anges tydligt.</i>
2.1	Namn eller annan identitetsbeteckning för varje ämne
2.1.1	<i>Namn enligt IUPAC-nomenklaturen eller annat internationellt kemiskt namn.</i>
2.1.2	<i>Andra namn (trivialnamn, handelsnamn, förkortning).</i>
2.1.3	<i>EINECS- eller ELINCS-nummer (om sådant finns och detta är tillämpligt).</i>
2.1.4	<i>CAS-nummer och CAS-namn (i förekommande fall).</i>
2.1.5	<i>Annan identitetskod (om sådan finns).</i>
2.2	Information om varje ämnes molekyl- och strukturformel
2.2.1	<i>Molekyl- och strukturformel (inklusive Smiles-notation, om sådan finns).</i>

	Ämnesidentifieringsparametrar i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach
2.2.2	<i>Information om optisk aktivitet och typisk andel av respektive stereoisomer (i tillämpliga fall).</i>
2.2.3	<i>Molekylvikt eller molekylviktsintervall.</i>
2.3.	Varje ämnes sammansättning
2.3.1	<i>Renhetsgrad (%).</i>
2.3.2	<i>Typ av föroreningar, inklusive isomerer och biprodukter.</i>
2.3.3	<i>Procentandelar av (betydelsefulla) huvudföroreningar.</i>
2.3.4	<i>Typ och halt (... ppm, ... %) av eventuella tillsatser (t.ex. stabiliseringsmedel eller inhibitorer).</i>
2.3.5	<i>Spektraldata (UV-, IR-, NMR- eller masspektrum).</i>
2.3.6	<i>Vätskekromatogram eller gaskromatogram.</i>
2.3.7	<i>Beskrivning av de analysmetoder eller lämpliga bibliografiska referenser som använts för att identifiera ämnet och, i tillämpliga fall, för att identifiera föroreningar och tillsatser. Denna information ska vara så fylldig att det är möjligt att reproducera metoderna.</i>

4. Vägledning om identifiering och namngivning av ämnen enligt Reach och CLP

4.1. Inledning

Reglerna för identifiering och namngivning skiljer sig åt för olika typer av ämnen. Av praktiska skäl är detta vägledningsdokument strukturerat på ett sådant sätt att användaren för varje typ av ämne direkt styrs till det kapitel där det ges lämplig vägledning. Därför ges en del förklaringar om olika typer av ämnen nedan och slutligen ges en kod med vars hjälp man hittar rätt kapitel.

Ämnesidentifiering bör som minst bygga på de ämnesidentifieringsparametrar som anges i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach (se **tabell 3**). Därför behöver varje ämne identifieras med hjälp av en kombination av lämpliga identifieringsparametrar:

- IUPAC-namnet och/eller andra namn och andra identitetsbeteckningar, t.ex. CAS-nummer, EG-nummer (avsnitt 2.1 i bilaga VI).
- Uppgifter av molekylär och strukturell natur (avsnitt 2.2 i bilaga VI).
- Den kemiska sammansättningen (avsnitt 2.3 i bilaga VI).

Ett ämne blir fullständigt identifierat genom sin kemiska sammansättning, dvs. den kemiska identiteten och innehållet av varje beståndsdel i ämnet. Även om det kan vara möjligt att göra en sådan enkel identifiering för de flesta ämnen är det inte möjligt eller lämpligt för vissa ämnen inom ramen för Reach och CLP. I sådana fall krävs andra eller ytterligare uppgifter för identifiering av ämnet.

Ämnen kan delas in i två huvudgrupper:

1. "Väldefinierade ämnen": Ämnen med en definierad kvalitativ och kvantitativ sammansättning som kan identifieras tillräckligt utifrån identifieringsparametrarna i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach.
2. "UVCB-ämnen" Ämnen med okänd eller varierande sammansättning, komplexa reaktionsprodukter eller biologiskt material. Dessa ämnen kan inte identifieras tillräckligt enbart utifrån ovanstående parametrar.

Sammansättningens variation anges för väldefinierade ämnen med en övre och undre gräns för huvudbeståndsdelarnas koncentration. För UVCB-ämnen varierar sammansättningen relativt mycket och/eller är svår att förutsäga.

Det är lätt att inse att det kommer att finnas gränssfall mellan väldefinierade ämnen (reaktionsprodukter med många beståndsdelar, var och en inom ett brett intervall) och UVCB-ämnen (reaktionsprodukter med varierande och svårförutsägbar sammansättning). Det är registrantens ansvar att identifiera ett ämne på det sätt som passar bäst.

Reglerna för identifiering och namngivning skiljer sig mellan "väldefinierade ämnen" med en enda huvudbeståndsdel och "väldefinierade ämnen" med fler än en huvudbeståndsdel. I denna vägledning beskrivs olika regler för identifiering och benämning av de många typerna av ämnen under paraplybegreppet "UVCB".

I **tabellerna 4** och **5** anges de huvudsakliga identitetsbeteckningarna i flera exempel på olika typer av ämnen. Dessa exempel är indelade på ett sådant sätt att det är lätt att upptäcka likheter och skillnader när det gäller ämnesidentifiering.

Tabellerna 4 och **5** utgör inte någon fullständig förteckning över alla typer av ämnen som är möjliga. Indelningen av ämnen enligt regler för identifiering och namngivning ska inte betraktas som ett officiellt system för indelning av ämnen utan som en praktisk hjälp när det gäller att tillämpa de särskilda reglerna på ett lämpligt sätt och att hitta rätt vägledning i

detta vägledningsdokument.

Tabell 4: Indelning av huvudsakliga identitetsbeteckningar i exempel som representerar olika typer av väldefinierade liknande ämnen.

Gemensamma egenskaper	Exempel eller typexempel	Huvudsakliga identitetsbeteckningar
Väldefinierade ämnen som definieras genom den kemiska sammansättningen [Kapitel 4.2.]	Ämnen med en beståndsdel, t.ex. - bensen (95 %) - nickel (99 %) [Kapitel 4.2.1]	Kemisk sammansättning: en huvudbeståndsdel ≥80 %: - Huvudbeståndsdelens kemiska identitet (kemiskt namn, CAS-nummer, EG-nummer osv.) - Typisk koncentration och övre och undre gräns
	Ämnen med flera beståndsdelar, t.ex. definierade reaktionsprodukter såsom reaktionsblandning av 2-, 3- och 4-klortoluen (vardera 30 %) [Kapitel 4.2.2]	Kemisk sammansättning: en blandning (reaktionsblandning) av huvudbeståndsdelar där var och en utgör ≥10 – <80 % - Kemisk identitet för varje huvudbeståndsdel - Typiska koncentrationer och övre och undre gräns för varje beståndsdel och för blandningen
	Ämnen som definieras av mer än sin kemiska sammansättning, t.ex. grafit och diamant [Kapitel 4.2.3]	Kemisk sammansättning i form av ämne med en eller flera beståndsdelar OCH andra fysikaliska parametrar eller karakteriseringsparametrar t.ex. kristallmorfologi, (geologisk) mineralsammansättning osv.

Tabell 5: Indelning av huvudsakliga identitetsbeteckningar för exempel som representerar olika typer av UVCB- ämnen.

Gemensamma egenskaper		Exempel eller typexempel	Huvudsakliga identitetsbeteckningar		
			Källa	Process	Andra identitetsbeteckningar
UVCB-ämnen (Ämnen med okänd eller varierande sammansättning, komplexa reaktionsprodukter eller biologiskt material) [Kapitel 4.3.]	Biologiska material (B)	Extrakt från biologiska material, t.ex. naturliga doftämnen, naturliga oljor, naturliga färgämnen och pigment	<ul style="list-style-type: none"> - Art och familj för växter och djur - Del av växt/djur 	<ul style="list-style-type: none"> - Extraktion - Fraktionering, koncentrerings, isolering, rening osv. - <u>Derivatisering</u>* 	<ul style="list-style-type: none"> - Känd eller generell sammansättning - Kromatografiskt fingeravtryck och andra fingeravtryck - Referens för standarder Färgindex
		Komplexa biologiska makromolekyler, t.ex. enzymer, proteiner, DNA- eller RNA-fragment, hormoner, antibiotika			<ul style="list-style-type: none"> - Standardindex för enzymer - Genetisk kod - Stereokonfiguration - Fysikaliska egenskaper - Funktion/aktivitet - Struktur - Aninosyrasekvens
		Fermentationsprodukter Antibiotika, biopolymerer, enzymblandningar, vinass (produkter från sockerfermentation) osv.		<ul style="list-style-type: none"> - Fermentation - Isolering av produkter - Reningssteg 	<ul style="list-style-type: none"> - Typ av produkter: t.ex. antibiotika, biopolymerer, proteiner etc. - Känd sammansättning
	Kemiska ämnen och mineralämnen	Reaktionsblandningar med svårförutsägbar och/eller varierande sammansättning	Utgångsmaterial	<u>Kemisk reaktionstyp</u> , t.ex. förestring, alkylering, hydrering	<ul style="list-style-type: none"> - Känd sammansättning - Kromatografiskt fingeravtryck och andra fingeravtryck - Referens för standarder

	med bristfälligt definierad , komplex eller varierande sammansättning (UVC)	<ul style="list-style-type: none"> - Fraktioner eller destillat, t.ex. oljederivat - Lera. t.ex. bentonit - Tjäror 	<ul style="list-style-type: none"> - Råoljor - Kol/torv - Naturgaser - Mineraler 	<ul style="list-style-type: none"> - Fraktionering, destillering - <u>Omvandling av fraktioner</u> - Fysikalisk bearbetning - Restprodukter 	<ul style="list-style-type: none"> - Gränsintervall - Kedjelängdsintervall - Förhållande mellan aromatiska och alifatiska föreningar - Känd sammansättning - Standardindex
		Koncentrat eller smältor, t.ex. metallmineraler eller rester från olika smältprocesser eller metallurgiska processer, t.ex. slagg.	Malmer	<ul style="list-style-type: none"> - Smältning - Värmebehandling - Olika metallurgiska processer 	<ul style="list-style-type: none"> - Känd eller generell sammansättning - Koncentration av metaller

* Processer med understrykning innebär syntes av ny molekyl

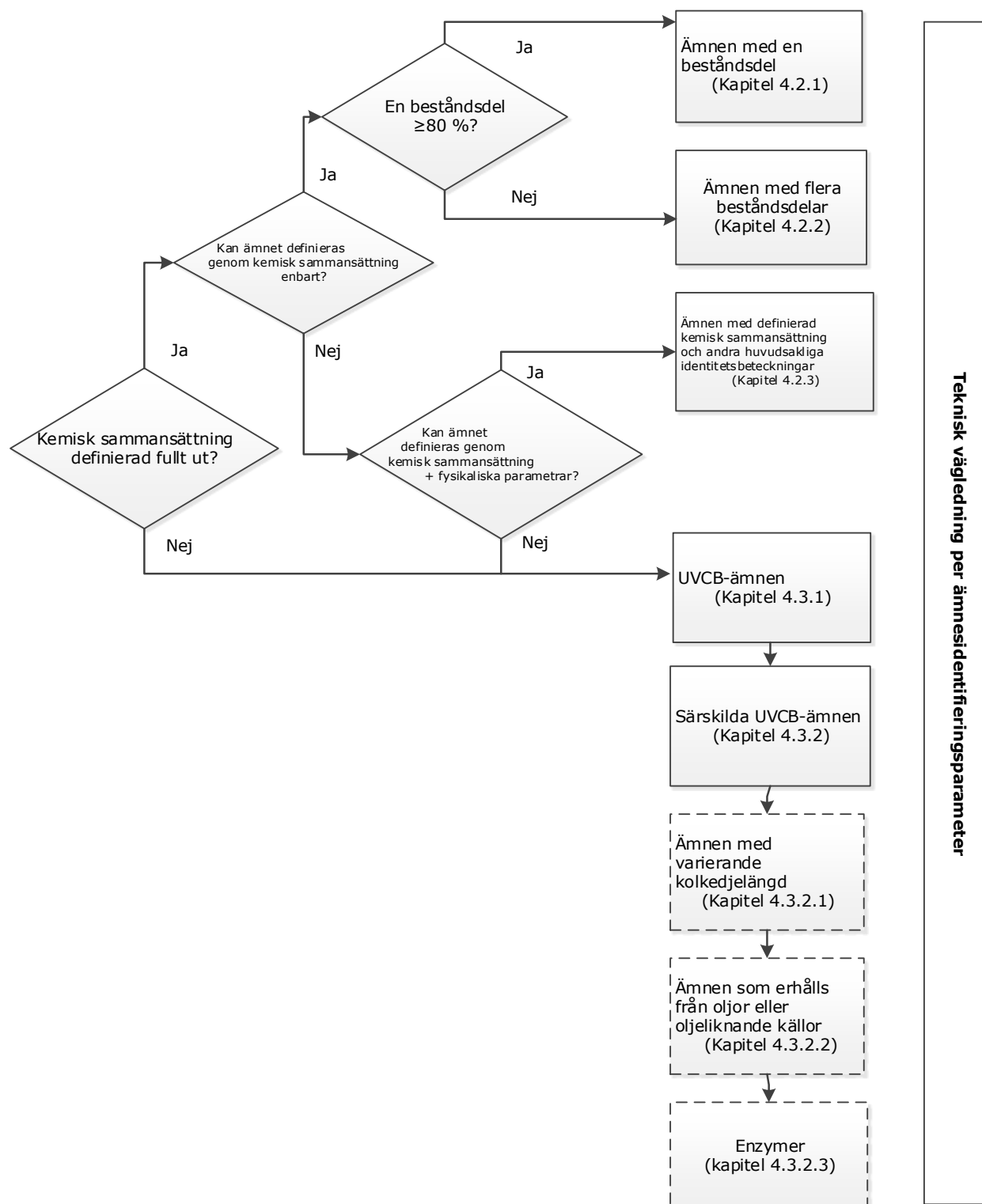
Detta kapitel är indelat i delkapitel som innehåller särskild vägledning om ämnesidentifiering för olika typer av ämnen. I **figur 1** ges en nyckel till hur man väljer de kapitel som är lämpliga.

Den nyckel som ges i **figur 1** bygger på kriterier motsvarande "tumregler". Registranten är ansvarig för att välja ut det lämpligaste kapitlet och att ange ämnesidentiteten i överensstämmelse med de regler och kriterier som gäller för den typen av ämne.

Grundregeln är att ämnen definieras genom den kemiska sammansättningen och identifieringen av beståndsdelarna så långt det är möjligt. Andra identitetsbeteckningar ska enbart användas om ovanstående tillvägagångssätt inte är tekniskt möjligt, såsom anges för de olika typerna av UVCB-ämnen.

Om registranten avviker från reglerna och kriterierna för ämnesidentifiering i denna vägledning bör en motivering lämnas. Ämnesidentifieringen bör vara öppen, tydlig och säkerställa samstämmighet.

Figur 1: Nyckel till hur man väljer kapitel och bilagor för lämplig vägledning för olika typer av ämnen



En beskrivning av de analysmetoder och/eller bibliografiska referenser som använts för att identifiera ämnet och, i tillämpliga fall, för att identifiera föroreningar och tillsatser måste ges (avsnitten 2.3.5, 2.3.6 och 2.3.7 i bilaga VI till Reach). Denna information ska vara så fylldig att det är möjligt att reproducera metoderna. Dessutom bör typiska resultat från tillämpning av analysteknikerna redovisas.

4.2. Ämnen med väldefinierad sammansättning

Ämnen med väldefinierad kemisk sammansättning namnges efter huvudbeståndsdelen eller huvudbeståndsdelarna. För vissa typer av ämnen är inte den kemiska sammansättningen i sig tillräcklig för karakterisering. I sådana fall måste ämnesidentifieringen utökas med ytterligare några fysikaliska parametrar med avseende på de kemiska strukturerna.

Som en allmän regel bör syftet vara att täcka in sammansättningen upp till 100 %. Dessutom krävs en fullständig kemisk specifikation, däribland uppgifter om struktur. För ämnen som definieras av den kemiska sammansättningen görs följande åtskillnad:

- Huvudbeståndsdelen: En i ett ämne ingående beståndsdelen som inte utgör en tillsats eller förorening och som utgör en betydande del av ämnet, vilket innebär att den används vid namngivning och utförlig identifiering av ämnet.
- Förorening: En beståndsdelen som oavsiktligt tillkommer vid tillverkning av ett ämne. Den kan härröra från utgångsmaterialet eller bildas som ett resultat av sekundära eller ofullständiga reaktioner under produktionsprocessen. Även om föroreningar förekommer i det slutliga ämnet har de inte tillsatts avsiktligt.
- Tillsats: Ett ämne som avsiktligt tillsätts för att ämnet ska stabiliseras.

Alla beståndsdelar (förutom tillsatser) som inte utgör en eller flera huvudbeståndsdelar i ämnet med en beståndsdelen eller ämnet med flera beståndsdelar betraktas som föroreningar. Även om man i vissa industrisektorer generellt använder termen "spår" används enbart termen "föroreningar" i detta vägledningsdokument.

Det ställs olika krav på identifiering av de olika beståndsdelarna

- Huvudbeståndsdelarna bidrar till namngivningen av ämnet och varje huvudbeståndsdelen ska specificeras fullt ut med hjälp av alla relevanta identitetsbeteckningar.
- Föroreningar bidrar inte till namngivningen av ämnet och behöver bara anges med namn, CAS-nummer, EG-nummer och/eller molekylformel.
- Tillsatser bidrar till ämnets sammansättning (men inte namngivningen) och ska alltid identifieras fullständigt.

För att särskilja mellan ämnen med en beståndsdelen och ämnen med flera beståndsdelar används vissa konventioner:

- Ett ämne med en beståndsdelen är ett ämne som innehåller en beståndsdelen i en koncentration av minst 80 viktprocent och som innehåller upp till 20 viktprocent föroreningar.

Ett ämne med en beståndsdelen namnges efter denna enda huvudbeståndsdelen.

- Ett ämne med flera beståndsdelar, är ett ämne som består av flera huvudbeståndsdelar som vanligen ingår i koncentrationer på ≥ 10 viktprocent och < 80 viktprocent.

Ett ämne med flera beståndsdelar namnges i form av en reaktionsblandning av två eller flera huvudbeståndsdelar.

De ovannämnda reglerna är avsedda som vägledning. Det är tillåtet att avvika från dessa om det är möjligt att ge en fylldig motivering.

Normalt ska föroreningar som förekommer i en koncentration på ≥ 1 % anges. Föroreningar

som har betydelse för klassificeringen och/eller för PBT-bedömningen¹¹ ska dock alltid anges oavsett koncentration. Som en allmän regel ska uppgifterna om sammansättning omfatta upp till 100 % av denna.

Tillsatser i den mening som anges i Reach-förordningen och CLP-förordningen och i detta vägledningsdokument är medel som är nödvändiga för att bevara ämnets stabilitet. Det innebär att tillsatser är väsentliga beståndsdelar i ämnen och bör beaktas när massbalansen beräknas. I sammanhang som inte omfattas av definitionen i Reach och detta vägledningsdokument används emellertid formuleringen "tillsats" även för avsiktligt tillsatta ämnen som har andra funktioner, exempelvis som pH-reglerare eller färgämnen. Dessa avsiktligt tillsatta ämnen ingår inte i ämnena som sådana och behöver därför inte beaktas vid beräkning av massbalansen.

Blandningar, såsom de definieras i Reach och CLP, är avsiktligt framställda blandningar av ämnen och betraktas följaktligen inte som ämnen med flera beståndsdelar.

Det finns särskild vägledning om ämnen med en beståndsdel i kapitel 4.2.1 och särskild vägledning om ämnen med flera beståndsdelar i kapitel 4.2.2. När det gäller ämnen för vilka ytterligare uppgifter krävs (t.ex. vissa mineraler) ges vägledning i kapitel 4.2.3.

4.2.1. Ämnen med en beståndsdel

Ett ämne med en beståndsdel, definierat genom sin kvantitativa sammansättning, är ett ämne i vilket en huvudbeståndsdel utgör minst 80 viktprocent.

Namnkonvention

Ett ämne med en beståndsdel benämns efter huvudbeståndsdelens kemiska namn och anges på engelska enligt reglerna för IUPAC-nomenklaturen (se tillägg I). Andra internationellt vedertagna benämningar kan anges utöver detta.

Identitetsbeteckningar

Ett ämne med en beståndsdel identifieras genom huvudbeståndsdelens kemiska namn och andra identitetsbeteckningar (däribland molekyl- och strukturformel) och föroreningars och/eller tillsatser kemiska identitet samt deras typiska koncentrationer och koncentrationsintervall som bekräftats genom spektroskopiska och analytiska uppgifter.

Exempel				
Huvudbeståndsdel	Halt (%)	Förorening	Halt (%)	Ämnesidentitet
m-xilen	91	o-xilen	5	m-xilen
o-xilen	87	m-xilen	10	o-xilen

Vanligen förekommer huvudbeståndsdelens i en koncentration på >80 % och ska anges fullständigt med alla ovannämnda parametrar. Föroreningar som förekommer i en koncentration på >1 % ska anges med minst en av följande identitetsbeteckningar: kemiskt namn (IUPAC och/eller CAS-namn), CAS-nummer och EG-nummer och/eller molekylformel. Föroreningar som har betydelse för klassificeringen och/eller PBT-bedömningen¹² ska alltid anges med samma identitetsbeteckningar oavsett koncentration.

¹¹ Det finns mer information om PBT-bedömning och berörda kriterier i Vägledning om informationskrav och kemikaliesäkerhetsbedömning, kapitel R11: PBT-bedömning.

¹² Det finns mer information om PBT-bedömning och berörda kriterier i Vägledning om informationskrav och kemikaliesäkerhetsbedömning, kapitel R11: PBT-bedömning.

För korrekt användning av 80 %-regeln tas inte avsiktligt tillsatta ämnen som pH-reglerare eller färgämnen med i massbalansen.

”80 %-regeln” har tillämpats för anmälan av nya ämnen (direktiv 67/548/EEG). Den kan betraktas som en ”tumregel”. Avvikelse från denna 80 %-regel måste dock motiveras. Möjliga exempel på en avvikelse som kan motiveras är följande:

- Om huvudbeståndsdelen förekommer i en koncentration på <80 %, samtidigt som det kan visas att ämnet har liknande fysisk-kemiska egenskaper och samma faroprofil som andra ämnen med en beståndsdelen som har samma identitet och uppfyller 80 %-regeln.
- Huvudbeståndsdelen och föroreningarnas koncentrationsintervall överlappar 80 %-kriteriet och huvudbeståndsdelen är endast tillfälligtvis ≤80 %.

Exempel									
Ämne	Huvudbeståndsdelen	Övre halt (%)	Typisk halt (%)	Undre halt (%)	Förorening	Övre halt (%)	Typisk halt (%)	Undre halt (%)	Ämnes-ident.
1	o-xylen	90	85	65	m-xylen	35	15	10	o-xylen
2	o-xylen m-xylen	90 35	85 15	65 10	p-xylen	5	4	1	o-xylen

På grund av huvudbeståndsdelen och föroreningens koncentrationsintervall kan ämnena 1 och 2 betraktas som ett ämne med två huvudbeståndsdelenar, o-xylen och m-xylen, eller som två ämnen med en beståndsdelen. I det här fallet har beslutet tagits att betrakta båda som ämnen med en beståndsdelen och detta beror på det faktum att o-xylen vanligen förekommer vid en koncentration på >80 %.

Analytisk information

För att bekräfta strukturen hos ett ämne med en beståndsdelen krävs tillräckliga spektraldata. Det finns flera lämpliga spektroskopiska metoder, särskilt ultraviolett och synlig absorptionsspektroskopi (UV/Vis), infraröd spektroskopi (IR) kärnmagnetisk resonansspektroskopi (NMR) och masspektroskopi (MS). För oorganiska ämnen kan det vara lämpligare att använda röntgendiffraktion (XRD), röntgenfluorescens (XRF) eller atomabsorptionsspektroskopi.

För att bekräfta ämnets sammansättning krävs kromatografiska metoder, såsom gaskromatografi (GC) eller högupplösande vätskekromatografi (HPLC). I tillämpliga fall kan även andra validerade separationstekniker användas.

Spektroskopiska och analytiska metoder är föremål för ständig förändring. Därför är det registrantens ansvar att uppvisa lämpliga spektraldata och analytiska data.

4.2.2. Ämnen med flera beståndsdelenar

Ett ämne med flera beståndsdelenar är ett ämne med en kvantitativ sammansättning där mer än en huvudbeståndsdelen ingår med en andel på ≥10 viktprocent och <80 viktprocent. Ett ämne med flera beståndsdelenar är resultatet av en kemisk reaktion¹³.

Enligt Reach krävs registrering av ett ämne i tillverkad form. Om ett ämne med flera

¹³ Skillnaden mellan en blandning och ett ämne med flera beståndsdelenar är att en blandning erhålls genom att två eller flera ämnen blandas utan att det sker någon kemisk reaktion. Ett ämne med flera beståndsdelenar är resultatet av en kemisk reaktion.

beståndsdelar är tillverkat måste detta ämne registreras¹⁴, ¹⁵. I vilken omfattning de olika stegen vid tillverkning av ett ämne omfattas av definitionen "tillverkning" beslutas från fall till fall. Alla ämnen som tidigare omfattades av EINECS (t.ex. omfattades ämnen med flera beståndsdelar om alla enskilda beståndsdelar fanns med i EINECS) skulle kunna karakteriseras som infasningsämnen. Det finns inget behov av att testa ämnet som sådant om ämnets faroprofil kan beskrivas i tillräcklig utsträckning genom uppgifter om de enskilda beståndsdelarna.

Namnkonvention

Ett ämne med flera beståndsdelar namnges som en reaktionsblandning av ämnets huvudbeståndsdelar som sådana, dvs. inte det utgångsmaterial som behövs för tillverkning av ämnet. Det generella formatet är: "reaktionsblandning av [namnen på huvudbeståndsdelarna]". Det rekommenderas att namnen på beståndsdelarna presenteras i alfabetisk ordning och att de åtskiljs med konjunktionen "och". Enbart huvudbeståndsdelar som normalt har en koncentration på ≥ 10 % ingår i namnet. I princip ska namnen anges på engelska enligt reglerna för IUPAC-nomenklaturen. Andra internationellt vedertagna benämningar kan anges utöver detta.

Identitetsbeteckningar

Ett ämne med flera beståndsdelar identifieras genom det kemiska namnet och identitetsbeteckningarna för ämnet som sådant samt den kvantitativa och kvalitativa sammansättningen (kemisk identitet, däribland molekyl- och strukturformeln) för beståndsdelarna, varvid allt bekräftas med analytisk information.

Exempel				
Huvudbeståndsdelar	Halt (%)	Förorening	Halt (%)	Ämnesidentitet
m-xilen	50	p-xilen	5	Reaktionsblandning av m-xilen och o-xilen
o-xilen	45			

För ämnen med flera beståndsdelar är den kemiska sammansättningen känd och fler än en huvudbeståndsdel har betydelse för identifiering av ämnet. Vidare är ämnets kemiska sammansättning förutsägbar i form av typiska värden och intervall. Huvudbeståndsdelarna ska specificeras fullständigt med alla relevanta parametrar. Summan av typiska koncentrationer för huvudbeståndsdelar (≥ 10 %) och föroreningar (< 10 %) ska vara 100 %.

För korrekt användning av 10 %-80 %-regeln tas inte avsiktligt tillsatta ämnen som pH-reglerare eller färgämnen med i massbalansen.

Föroreningar som förekommer i en koncentration på > 1 % ska anges med minst en av följande identitetsbeteckningar: kemiskt namn, CAS-nummer och EG-nummer och/eller molekylformel. Föroreningar som har betydelse för klassificeringen och/eller PBT-bedömningen ska alltid anges med samma identitetsbeteckningar oavsett koncentration.

¹⁴ Ett antal ämnen är undantagna från registrering enligt Reach (t.ex. de ämnen som är förtecknade i bilaga IV).

¹⁵ Det här tillvägagångssättet gäller inte för ett antal specifika ämnen såsom mineraler (se kapitel 7.5 för mer information).

Exempel								
Huvudbeståndsdel	Övre halt (%)	Typisk halt (%)	Undre halt (%)	Förorening	Övre halt (%)	Typisk halt (%)	Undre halt (%)	Ämnesidentitet
anilin	90	75	65	fenantren	5	4	1	Reaktionsblandning av anilin och naftalen
naftalen	35	20	10					

Enligt reglerna i detta vägledningsdokument är detta ämne ett ämne med flera beståndsdelar. Även om intervallet för en beståndsdel är >80 %, händer detta endast i vissa fall och den typiska sammansättningen är <80 %.

I vissa fall är det lämpligt att betrakta ett ämne som ett ämne med flera beståndsdelar även om en beståndsdel förekommer i en koncentration på ≥ 80 %. Om ett ämne till exempel innehåller två beståndsdelar, en vid 85 % och en annan vid 10 % utgörs restprodukten upp till 100 % av föroreningar. Båda beståndsdelarna bidrar till och är nödvändiga för ämnets önskade tekniska effekt. I det här fallet kan ämnet beskrivas som ett ämne med två beståndsdelar, trots att en beståndsdel förekommer i en koncentration på >80 %.

Analytisk information

I sådana fall där spektraldata ger information om sammansättningen hos ämnet med flera beståndsdelar bör denna information lämnas. Det finns flera lämpliga spektroskopiska metoder, särskilt ultraviolett och synlig absorptionsspektroskopi (UV/Vis), infraröd spektroskopi (IR) kärnmagnetisk resonansspektroskopi (NMR) och masspektroskopi (MS). För oorganiska ämnen kan det vara mer lämpligt att använda röntgendiffraktion (XRD), röntgenfluorescens (XRF) eller atomabsorptionsspektroskopi (AAS).

För att bekräfta ämnets sammansättning krävs kromatografiska metoder, såsom gaskromatografi (GC) och/eller högupplösande vätskekromatografi (HPLC). I tillämpliga fall kan även andra validerade separationstekniker användas.

Spektroskopiska och analytiska metoder är föremål för ständig förändring. Därför är det registrantens ansvar att uppvisa lämpliga spektraldata och analytiska data.

Registrering av enskilda beståndsdelar hos ämnet med flera beståndsdelar

I allmänhet bör angivandet av ett ämnets identitet för (förhands-)registrering följa tillvägagångssättet för ämnen med flera beståndsdelar (dvs. registrering av ämnet med flera beståndsdelar). Det är möjligt att avvika från det tillvägagångssättet genom att registrera enskilda beståndsdelar om det går att motivera. Möjligheten att avvika från standardfallet för att identifiera (och eventuellt registrera) ämnen genom deras enskilda beståndsdelar ges när

- det inte finns någon begränsning av informationskraven,
- det finns tillräckliga befintliga data för att motivera tillvägagångssättet att registrera de enskilda beståndsdelarna, dvs. tillvägagångssättet skulle vanligen inte ge upphov till ytterligare försök (på ryggradsdjur) jämfört med det standardmässiga tillvägagångssättet,
- registrering av de enskilda beståndsdelarna leder till en mer effektiv situation (dvs. att otaliga registreringar av ämnen som består av samma beståndsdelar undviks),
- uppgifter ges om de enskilda reaktionsblandningarnas sammansättning.

Den flexibilitet som erbjuds bör inte missbrukas genom att informationskraven undviks. När det t.ex. gäller 1 200 ton per år av ett ämne med flera beståndsdelar "(C + D)", med en sammansättning på 50 % C och 50 % D, skulle detta tillvägagångssätt leda till två registreringar som innehåller följande information:

Ämne C

- Mängd 600
- Informationskrav som ska uppfyllas för >1 000 ton (bilaga X)

Ämne D

- Mängd 600
- Informationskrav som ska uppfyllas för >1 000 ton (bilaga X)

Detta tillvägagångssätt måste kombineras med kravet enligt Reach att summera volymer av samma ämne per juridisk enhet. Det föreslås att informationskraven fastställs på följande sätt:

- Lägg ihop de enskilda beståndsdelarnas volymer (enligt de mängder som förekommer i ämnet).
- Hänvisa till den största volymen av ett ämne som innehåller den beståndsdel.

Informationskraven bör fastställas med utgångspunkt från det högsta resultatet. Vid rapportering av mängder bör resultatet från summeringen av mängden för varje enskild beståndsdel väljas. Här nedan illustreras det praktiska genomförandet av tillvägagångssättet med hjälp av enkla exempel.

Exempel 1:

Ämnet med flera beståndsdelar, "C+D+E", är ett resultat av en process inom en juridisk enhet, från vilken olika ämnen erhålls:

- Ämne 1: 50 % C och 25 % D och 25 % E, 1 100 ton per år
- Ämne 2: 50 % C och 50 % D, 500 ton per år

Även i det här fallet är reaktionsprodukten utgångspunkten: De två ämnena ska registreras som ämnen med flera beståndsdelar. Om man följer metoden som innebär registrering av enskilda beståndsdelar¹⁶, gäller följande:

Rapporteringen av ämne D skulle i det här fallet innebära:

- Mängd: $(25 \% * 1\,100) + (50 \% * 500) = 525$ ton per år

Fastställandet av informationskraven utgår från det strängaste kravet. I det här fallet: >1 000 ton per år, eftersom den sammanlagda mängden av ämnet med flera beståndsdelar, "C+D+E", överstiger 1 000 ton per år.

Observera att även ämnena C och E ska registreras i enlighet med detta.

Exempel 2:

Ämnet med flera beståndsdelar, "G+H+I", är ett resultat av en process inom en juridisk enhet, från vilken olika ämnen erhålls:

- Ämne 3: 65 % G och 15 % H och 20 % I, 90 ton per år
- Ämne 4: 60 % G och 40 % H, 90 ton per år

Rapportering av ämne G:

- Mängd: $(65 \% * 90) + (60 \% * 90) = 112,5$ ton per år

¹⁶ Exemplet är endast avsett att illustrera fastställandet av informationskraven och rapporteringen av volymer. Det säger ingenting om huruvida tillvägagångssättet är motiverat i det här fallet.

Fastställandet av informationskraven utgår från det strängaste kravet. I det här fallet: >100 ton per år, eftersom den sammanlagda mängden av beståndsdelen G är över 100 ton per år.

Observera att även ämnena H och I ska registreras i enlighet med detta.

Förutom fastställandet av de nämnda informationskraven bör även behovet av antalet nya försök (på ryggradsdjur) beaktas. Innan det fattas beslut om en strategi måste potentiella registranter överväga om det finns tillräckliga befintliga försök (på ryggradsdjur) och om den föreslagna flexibiliteten kommer att leda till färre eller fler nya försök (på ryggradsdjur). En strategi som undviker nya försök (på ryggradsdjur) bör följas.

I tveksamma fall bör standardmetoden för att ange ämnesidentiteten i samband med registrering alltid gälla identifieringen av ämnet i tillverkad form.

4.2.3. Ämnen med definierad kemisk sammansättning och andra huvudsakliga identitetsbeteckningar

Vissa ämnen (t.ex. oorganiska mineraler) som kan identifieras genom den kemiska sammansättningen behöver specificeras med hjälp av ytterligare identitetsbeteckningar för att de ska bli identifierade i sig själva. Dessa ämnen kan antingen vara ämnen med en beståndsdelen eller ämnen med flera beståndsdelar, men kräver, utöver de ämnesidentifieringsparametrar som beskrivs i de tidigare kapitlen, även andra huvudsakliga identitetsbeteckningar för att en entydig ämnesidentitet ska kunna anges.

Exempel

För vissa icke-metalliska mineraler (av naturligt eller syntetiskt ursprung) med unika strukturer måste också morfologi och mineralsammansättning anges för att identifieringen av ämnet ska vara entydig. Ett exempel är kaolin (CAS 1332-58-7) som består av kaolinit, kaliumaluminiumsilikat, fältspat och kvarts.

Den aktuella utvecklingen av nanoteknologi och kunskaperna om förbundna faroeffekter kan orsaka ett behov av ytterligare uppgifter om ämnens storlek i framtiden. Området har ännu inte uppnått ett tillräckligt moget utvecklingsstadium för att vägledning om identifiering av ämnen i nanoform ska ingå i detta vägledningsdokument.

Namnkonvention

I princip gäller samma namnkonvention som för ämnen med en beståndsdelen (se kapitel 4.2.1) eller ämnen med flera beståndsdelar (se kapitel 4.2.2).

När det gäller oorganiska mineraler kan beståndsdelarna få mineralogiska namn. Till exempel är apatit ett ämne med flera beståndsdelar och som består av en grupp fosfatmineraler, vanligen kallade hydroxylapatit, fluorapatit och klorapatit och namngivna efter de höga koncentrationerna av jonerna OH^- , F^- respektive Cl^- i kristallen. Formeln för de tre vanligaste beståndsdelarna är $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$. Ett annat exempel är aragonit, en av de särskilda kristallstrukturerna för kalciumkarbonat.

Identitetsbeteckningar

Dessa ämnen identifieras och namnges enligt reglerna för ämnen med en beståndsdelen (se kapitel 4.2.1) eller ämnen med flera beståndsdelar (se kapitel 4.2.2). Vilka andra särskilda huvudsakliga identifieringsparametrar som ska läggas till beror på ämnet. Exempel på andra

huvudsakliga identitetsbeteckningar kan vara grundämnessammansättning tillsammans med spektraldata, kristallstruktur erhållen genom röntgendiffraktion, toppar från infraröd absorption, svällningsindex, katjonbytesförmåga eller andra fysikaliska och kemiska egenskaper.

När det gäller mineraler är det viktigt att lägga samman resultaten från grundämnessammansättning med spektraldata för att identifiera mineralsammansättningen och kristallstrukturen. Detta bekräftas sedan av karakteristiska fysikalisk-kemiska egenskaper som kristallstruktur (erhållen genom röntgendiffraktion), form, hårdhet, svällförmåga, densitet och/eller ytare.

Exempel på särskilda ytterligare huvudsakliga identitetsbeteckningar kan ges för särskilda mineraler, eftersom mineraler har karakteristiska fysikalisk-kemiska egenskaper som möjliggör en fullständig identifiering, t.ex. mycket låg hårdhet för talk, svällförmåga för bentonit, former av diatomit, mycket hög densitet för barit och ytare (kväveadsorption).

Analytisk information

Samma analytiska information som för ämnen med en beståndsdel (se kapitel 4.2.1) eller ämnen med flera beståndsdelar (se kapitel 4.2.2) ska lämnas. För de ämnen för vilka spektraldata, GC- eller HPLC-kromatogram inte är tillräckliga för identifiering kan uppgifter som erhållits från andra analystekniker lämnas, t.ex. röntgendiffraktion för mineraler, grundämnesanalys osv. Det kriterium som gäller är att det ska lämnas in tillräckliga uppgifter för att bekräfta ämnets struktur.

4.3. UVCB-ämnen

Ämnen med okänd eller varierande sammansättning, komplexa reaktionsprodukter eller biologiskt material^{17, 18, 19}, även kallade UVCB-ämnen, kan inte i tillräcklig utsträckning identifieras genom deras kemiska sammansättning på grund av att

- antalet beståndsdelar är relativt stort och/eller
- sammansättningen till en väsentlig del är okänd och/eller
- sammansättningen varierar relativt mycket eller är svår att förutsäga.

Därför kräver UVCB-ämnen andra typer av information för att identifieras, utöver vad som är känt om deras kemiska sammansättning.

Det framgår av **tabell 5** att de huvudsakliga identitetsbeteckningarna för de olika typerna av UVCB-ämnen har att göra med källan för ämnet och den process som används eller också tillhör de en grupp av "andra huvudsakliga identitetsbeteckningar" (t.ex. "kromatografiska fingeravtryck eller andra fingeravtryck"). Det antal och slag av identitetsbeteckningar som anges i **tabell 5** illustrerar variationen av olika typer och ska inte betraktas som en fullständig översikt. Om den kemiska sammansättningen av exempelvis en komplex reaktionsprodukt eller ett ämne av biologiskt ursprung är känd ska ämnesidentifieringen anges antingen som ett ämne med en eller beståndsdel eller ett ämne med flera beståndsdelar, beroende på vad som är lämpligt. Följden av att definiera ett ämne som UVCB-ämne är att varje betydande ändring av källa eller process sannolikt skulle

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

¹⁸ US EPA (2005-B) Registrering i TCA-registret (Toxic Substances Control Act Inventory Registration) för kombinationer av två eller flera ämnen.

¹⁹ US-EPA (2005-B) Registrering i TCA-registret (Toxic Substances Control Act Inventory Registration) för kemiska ämnen med okänd eller varierande sammansättning, komplexa reaktionsprodukter eller biologiska material: UVCB-ämnen.

leda fram till ett annat ämne som ska registreras igen. Om en reaktionsblandning identifieras som ett "ämne med flera beståndsdelar" kan ämnet ha sitt ursprung från en annan källa och/eller från andra processer så länge som sammansättningen hos det slutliga ämnet förblir inom det angivna intervallet. Därmed skulle det inte krävas någon ny registrering.

Det finns en allmän vägledning om UVCB-ämnena i kapitel 4.3.1 och särskild vägledning om ämnena med varierande kolkedjelängder, ämnena som härrör från oljor eller oljeliknande källor samt enzymer, såsom särskilda exempel på UVCB-ämnena, i kapitel 4.3.2.

4.3.1. Allmän vägledning om UVCB-ämnena

I detta kapitel i vägledningsdokumentet ges allmän vägledning om hur huvudsakliga identitetsbeteckningar anges, förutom de ämnesidentifieringsparametrar som anges i bilaga VI till Reach (avsnitt 2), för att identifiera UVCB-ämnena.

Uppgifter om kemisk sammansättning

När det gäller UVCB-ämnena kan de inte anges enbart med beståndsdelarnas IUPAC-namn eftersom det inte går att identifiera alla beståndsdelar, eller också kan de anges allmänt, men inte i detalj till följd av att sammansättningen varierar. Termerna "huvudbeståndsdel" och "föroreningar" ska inte anses vara relevanta för UVCB-ämnena på grund av svårigheten att särskilja beståndsdelar och föroreningar.

Den kemiska sammansättningen och beståndsdelarnas identitet ska dock anges så långt det är möjligt. Sammansättningen kan dock beskrivas på ett mer generellt sätt, exempelvis "linjära C8-C16-fettsyror" eller "alkoholetoxylater av C10-C14-alkoholer och 4-10 etoxylatenheter". Dessutom kan uppgifter om kemisk sammansättning ges på grundval av välkända referensprover eller referensstandarder och i många fall kan även index och befintliga koder användas. Andra allmänna uppgifter om sammansättningen kan bestå av så kallade "fingeravtryck", vilket exempelvis innefattar kromatografiska eller spektrala återgivningar som visar ett karakteristiskt toppfördelningsmönster.

För ett UVCB-ämne ska alla kända beståndsdelar och alla beståndsdelar som förekommer vid koncentrationer ≥ 10 % anges med åtminstone ett IUPAC-namn på engelska och företrädesvis ett CAS-nummer, varvid de typiska koncentrationerna och koncentrationsintervallen för de kända beståndsdelarna också ska anges. Beståndsdelar som har betydelse för klassificeringen och/eller PBT-bedömningen²⁰ ska alltid anges med samma identitetsbeteckningar oavsett koncentration.

Okända beståndsdelar ska så långt det är möjligt identifieras genom en allmän beskrivning av deras kemiska egenskaper. Tillsatser anges utförligt på samma sätt som beskrivs för väldefinierade ämnena.

Huvudsakliga identifieringsparametrar – namn, källa och process

Eftersom det inte räcker med den kemiska sammansättningen för att identifiera ett ämne ska ämnet i allmänhet anges med namn, ursprung eller källa och de viktigaste processtegen. Andra egenskaper hos ämnet kan också utgöra viktiga identitetsbeteckningar, antingen som betydelsefulla allmänna identitetsbeteckningar (t.ex. kokpunkt) eller som avgörande identitetsbeteckningar för särskilda grupper av ämnena (t.ex. katalytisk aktivitet för enzymer).

²⁰ Det finns mer information om PBT-bedömning och berörda kriterier i Vägledning om informationskrav och kemikaliesäkerhetsbedömning, kapitel R11: PBT-bedömning.

1. Namnkonvention

I allmänhet är UVCB-ämnets namn en kombination av källa och process enligt det allmänna formatet: källan först och därefter processen/processerna.

- Ett ämne som härrör från biologiska källor anges med artnamnet.
- Ett ämne som härrör från icke-biologiska källor anges med utgångsmaterialen.
- Processer identifieras genom typen av kemisk reaktion om det rör sig om syntes av nya molekyler eller som en typ av raffineringsssteg, exempelvis extraktion, fraktionering, koncentrering eller som restprodukt.

Exempel

EG-nummer	EG-namn
296-358-2	Lavendel, Lavandula hybrida, extrakt, acetylerat
307-507-9	Lavendel, Lavandula hybrida, extrakt, sulfuriserat, palladiumsalt

När det gäller reaktionsprodukter har man använt olika format i EG-registret, exempelvis:

- EINECS: Huvudsakligt utgångsmaterial, en eller flera reaktionsprodukter av ett eller flera andra utgångsmaterial
- ELINCS: En eller flera reaktionsprodukter av ett eller flera utgångsmaterial

Exempel

EG-nummer	EG-namn
232-341-8	Salpetersyrighet, reaktionsprodukter med 4-metyl-1,3-bensendiaminhydroklorid
263-151-3	Reaktionsprodukter av kokosfettsyror och dietylenträmin
400-160-5	Reaktionsprodukter av talloljefettsyror, dietanolamin och borsyra
428-190-4	Reaktionsprodukt av 2,4-diamino-6-[2- (2-metyl-1H-imidazol-1-yl)etyl]-1,3,5-triazin och cyanursyra

I detta vägledningsdokument är det allmänna formatet för reaktionsprodukter "Reaktionsprodukter av [namnen på utgångsmaterialen]". I princip ska namnen anges på engelska enligt reglerna för IUPAC-nomenklaturen (se tillägg I). Andra internationellt vedertagna benämningar kan anges utöver detta. Det rekommenderas att ordet "reaktion" i namnen ersätts med den särskilda typen av reaktion beskriven på ett allmänt sätt, exempelvis förestring eller bildning av salt (se vägledningen för de fyra särskilda underindelningarna av UVCB-ämnena nedan).

2. Källa

Källan kan delas in i två grupper:

2.1. Källor av biologisk natur

Ämnen av biologisk natur måste definieras genom släkte, art och familj, exempelvis. *Pinus cembra*, *Pinaceae* uttyds *Pinus* (släkte), *cembra* (art), *Pinaceae* (familj), samt stam eller genetisk typ i förekommande fall. Om det är tillämpligt bör den vävnad eller del av organism som används för extraktion av ämnet, exempelvis benmärg, bukspottkörtel, eller stam, fröer eller rötter, också anges.

Exempel	
EG-nummer	EG-namn
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, extrakt EG-beskrivning Extrakt och deras fysikaliskt modifierade derivat såsom tinkturer, "concretes", "absolutes", eteriska oljor, gummiheartser, terpenier, terpenfria fraktioner, destillat, restprodukter osv., vilka erhållits från <i>Saccharomyces cerevisiae</i> , <i>Saccharomycelaceae</i> .
296-350-9	Extrakt av <i>Arnica mexicana</i> EG-beskrivning Extrakt och deras fysikaliskt modifierade derivat såsom tinkturer, "concretes", "absolutes", eteriska oljor, gummiheartser, terpenier, terpenfria fraktioner, destillat, restprodukter osv., vilka erhållits från <i>Arnica mexicana</i> , <i>Compositae</i> .

2.2. Kemiska eller mineraliska källor

När det gäller reaktionsprodukter från kemiska reaktioner måste utgångsmaterialen beskrivas med IUPAC-namnen på engelska. Mineraliska källor ska beskrivas i allmänna termer, t.ex. fosfatmalmer, bauxit, kaolin, naturgas, kol, torv.

3. Process

Processer identifieras genom typen av kemisk reaktion om det rör sig om syntes av nya molekyler eller som en typ av raffineringsssteg, exempelvis extraktion, fraktionering, koncentrerings eller som restprodukt.

För vissa ämnen, t.ex. kemiska derivat ska processen beskrivas som en kombination av raffinering och syntes.

3.1 Syntes

Det sker en viss kemisk eller biokemisk reaktion mellan utgångsmaterialen som ger upphov till ämnet. Exempel på det är Grignardreaktion, sulfonering, enzymatisk klyvning med proteas eller lipas osv. Många derivatiseringsreaktioner hör till den här typen.

För nyligen syntetiserade ämnen för vilka den kemiska sammansättningen inte kan anges,

utgör utgångsmaterialen de huvudsakliga identitetsbeteckningarna tillsammans med en specificering av reaktionen, dvs. typen av kemisk reaktion. Typen av reaktion ger en antydning om vilka molekyler som förväntas förekomma i ämnet. Det finns flera typer av slutliga kemiska reaktioner: hydrolys, förestring, alkylering, klorering osv. Eftersom detta endast ger allmän information om de möjliga ämnen som framställs kan ett kromatografiskt fingeravtryck i många fall också vara nödvändigt för att karakterisera och identifiera ämnet fullt ut.

Exempel	
EG-nummer	EG-namn
294-801-4	Linolja, epoxiderad, reaktionsprodukter med tetraetylenpentamin
401-530-9	Reaktionsprodukt av (2-hydroxi-4-(3-propenoxi)bensofenon och trietoxisilan) med (hydrolysisprodukt av kiseldioxid och metyltrimetoxisilan)

3.2 Raffinering

Raffinering kan tillämpas på många sätt på ämnen av naturligt eller mineraliskt ursprung där beståndsdelarnas kemiska identitet inte förändras, samtidigt som beståndsdelarnas koncentration förändras, t.ex. kallbearbetning av växtvävnad följt av extraktion med alkohol.

Raffinering kan definieras ytterligare i sådana processer som extraktion. Ämnesidentifieringen beror på typ av process:

- För ämnen som erhålls genom fysikaliska processer, t.ex. raffinering eller fraktionering ska gränsintervallet och parametrarna för fraktionerna anges (t.ex. molekylstorlek, kedjelängd, kokpunkt, flyktighetsintervall osv.).
- För ämnen som erhålls genom koncentreringsprocesser, t.ex. produkter från metallurgiska processer, centrifugerade fällningar, filterrester osv. ska koncentreringssteget anges tillsammans med det erhållna ämnets allmänna sammansättning jämfört med utgångsmaterialet.

Exempel	
EG-nummer	EG-namn
408-250-6	Koncentrat av organisk volframförening (reaktionsprodukter av volframhexaklorid med 2-metylpropan-2-ol, nonylfenol och pentan-2,4-dion)

- För restprodukter från en särskild reaktion, t.ex. slagg, tjära och tunga fraktioner ska processen beskrivas tillsammans med det erhållna ämnets allmänna sammansättning.

Exempel

EG-nummer	EG-namn
283-659-9	Tenn, smältrester EG-beskrivning Ämne som bildas vid användning och framställning av tenn och dess legeringar som erhålls från primära och sekundära källor och som innefattar återvunna intermediärer från fabriksanläggningen. Består främst av tennföreningar och innehåller eventuellt andra icke-järnhaltiga metallrester och föreningar därav.
293-693-6	Sojabönsmjöl, proteinextraktion. Restprodukt. EG-beskrivning Biprodukt, innehåller huvudsakligen kolhydrater, framställd genom extraktion av avfettade sojabönor med etanol.

- För extrakt ska extraktionsmetod, lösningsmedel som används för extraktionen och andra relevanta betingelser, t.ex. temperatur/temperaturintervall, anges.
- För sammansatt bearbetning ska varje processteg anges (i allmänna ordalag) förutom uppgifter om källan. Denna sammansatta bearbetning har särskild betydelse när det gäller kemiska derivatiseringar.

Exempel

- När det gäller en växt extraheras den först, varefter extraktet destilleras och den destillerade fraktionen av växtextraktet används för kemisk derivatisering. Det bildade ämnet kan sedan renas ytterligare. Den renade produkten skulle eventuellt kunna vara väldefinierad genom sin kemiska sammansättning och därmed finns inget behov av att identifiera ämnet som ett UVCB-ämne. Om produkten fortfarande betraktas som ett UVCB-ämne kan den sammantagna bearbetningen beskrivas som "ett renat kemiskt derivat av en destillerad fraktion från ett växtextrakt".
- Om det endast ingår fysikalisk derivatisering i den ytterligare bearbetningen av ett extrakt kommer sammansättningen att förändras, men utan avsiktlig syntes av nya molekyler. Inte desto mindre leder ändringen i sammansättning till ett annat ämne, t.ex. ett destillat eller en utfällning från ett växtextrakt.
- För framställning av oljeprodukter används ofta kemisk derivatisering och fraktionering i kombination. Till exempel kan destillering av olja åtföljd av krackning ge upphov till en fraktion av utgångsmaterialet och även nya molekyler. I sådana fall ska således båda processtyperna anges eller också ska destillatet anges som utgångsmaterial för krackningen. Det gäller i synnerhet oljederivat som ofta erhålls från processer i kombination. Däremot kan ett separat specifikt system användas för identifiering av oljederivat (se kapitel 4.3.2.2).

Eftersom det kemiska derivatet av ett extrakt inte kommer att innehålla samma beståndsdelar som moderextraktet ska det betraktas som ett annat ämne. Denna regel kan få till följd att identifieringen genom namn och beskrivning avviker från det tidigare EINECS-namnet med tillhörande beskrivning. Vid den tidpunkt då EINECS-registret upprättades samlades ofta extrakt från olika processer, olika lösningsmedel och även fysikaliska eller kemiska derivat under en och samma post. Men enligt Reach bör dessa ämnen registreras som separata ämnen.

4. Andra ämnesidentifieringsparametrar

Utöver det kemiska namnet, källan och specifikation av processer bör all annan relevant information som rör ett UVCB-ämne anges, enligt avsnitt 2 i bilaga VI i Reach.

Det gäller speciellt för särskilda typer av UVCB-ämnen att andra identifieringsparametrar kan vara relevanta. Ytterligare andra identitetsbeteckningar kan innefatta

- en allmän beskrivning av den kemiska sammansättningen,
- ett kromatografiskt fingeravtryck eller andra typer av fingeravtryck,
- referensmaterial (t.ex. ISO),
- fysikalisk-kemiska parametrar (t.ex. kokpunkt),
- färgindexnummer,
- AISE-nummer.

För olika typer av källor och processer finns det särskild vägledning nedan om reglerna och kriterierna för hur man använder uppgifterna om namnet, källan och processen för identifiering av UVCB-ämnen. I de följande styckena beskrivs de fyra olika deltyperna av UVCB-ämnen som en kombination av biologiska eller kemiska/mineraliska källor och processer (syntes eller raffinering).

Deltyp 1 av UVCB-ämnena där källan är biologisk och processen är en syntes

Ämnen av biologisk natur kan modifieras vid (bio-)kemisk bearbetning för att bilda beståndsdelar som inte förelåg i utgångsmaterialet, t.ex. kemiska derivat av plantextrakt eller produkter från enzymatisk behandling av extrakten. Exempelvis kan proteiner hydrolyseras med proteas för bildning av oligopeptider eller så kan träcellulosa karboxyleras för erhållande av karboximetylcellulosa.

Till denna UVCB-deltyp tillhör eventuellt även fermentationsprodukter. Till exempel är vinass en produkt från fermentering av socker som innehåller många olika beståndsdelar jämfört med socker. När fermentationsprodukter renas ytterligare kan ämnena så småningom bli möjliga att identifiera till fullo genom sin kemiska sammansättning och bör inte längre identifieras som ett UVCB-ämne.

Enzymer är en särskild grupp av ämnen som kan erhållas genom extraktion och ytterligare raffinering från en källa av biologiskt ursprung. Även om källan och processerna kan anges i detalj ger detta inte upphov till någon särskild information om enzymet. För dessa ämnen bör ett särskilt system för klassificering, namngivning och identifiering användas (se kapitel 4.3.2.3).

För identifiering av ämnen ska det slutliga processteget anges och/eller varje processteg som har betydelse för ämnets identitet.

Beskrivningen av den kemiska processen ska vara en allmän beskrivning av processtypen (förestring, alkalisk hydrolys, alkylering, klorering, substitution osv.) tillsammans med relevanta processbetingelser.

Beskrivningen av den biokemiska processen kan vara en allmän beskrivning av den katalyserade reaktionen tillsammans med namnet på det enzym som katalyserar reaktionen.

För ämnen som framställs genom fermentation eller (vävnads-)odlingar av arter, bör fermentationsarten, typen av fermentation och dess allmänna betingelser (satsvis eller kontinuerlig, aerob, anaerob, anoxisk, temperatur, pH-värde osv.) anges, tillsammans med alla ytterligare processteg som tillämpas för isolering av fermentationsprodukterna, t.ex. centrifugering, utfällning, extraktion osv. Om dessa ämnen raffinerar ytterligare är det möjligt att utvinna en fraktion, ett koncentrat eller en restprodukt. Dessa ytterligare

bearbetade ämnen identifieras genom att de extra processtegen också specificeras.

Deltyp 2 av UVCB-ämnena där källan är kemisk eller mineralisk och processen är en syntes

UVCB-ämnena som erhålls från kemiska eller mineraliska källor erhålls via en process där nya molekyler som syntetiseras utgör "reaktionsprodukter". Exempel på kemiska reaktionsprodukter är produkter från förestring, alkylering eller klorering. Biokemiska reaktioner som framkallas genom användning av isolerade enzymer är särskilda typer av kemiska reaktioner. Om en komplex biokemisk syntesväg tillämpas med användning av hela mikroorganismer är det dock bättre att betrakta det bildade ämnet som en fermentationsprodukt och hellre identifiera det genom att ange fermentationsprocess och fermentationsarter än genom att ange utgångsmaterialen (se UVCB-deltyp 4).

Alla reaktionsprodukter ska inte automatiskt anges som ett UVCB-ämne. Om en reaktionsprodukt kan definieras tillräckligt genom den kemiska sammansättningen (inberäknat en viss variation) bör en identifiering som ett ämne med flera beståndsdelar (se kapitel 4.2.2) företrädesvis användas. Det är bara när sammansättningen av reaktionsprodukten är otillräckligt känd eller svårförutsägbar som ämnet ska identifieras som ett UVCB-ämne ("reaktionsprodukt"). Identifieringen av en reaktionsprodukt grundas på reaktionens utgångsmaterial och på den (bio-)kemiska reaktionsprocess med vars hjälp ämnet bildas.

Exempel

EG-nummer	Einecs-namn	CAS-nummer
294-006-2	Nonandisyra, reaktionsprodukter med 2-amino-2-metyl-1-propanol	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyd, reaktionsprodukter med dietylenglykol och fenol	91673-32-4

En huvudsaklig identitetsbeteckning för reaktionsprodukter är beskrivningen av tillverkningsprocessen. För identifiering av ämnet ska det slutliga eller mest betydelsefulla processteget anges. Beskrivningen av den kemiska processen ska vara en allmän beskrivning av typen av process (t.ex. förestring, alkalisk hydrolys, alkylering, klorering, substituering osv.) tillsammans med relevanta processbetingelser. Beskrivningen av den biokemiska processen ska vara en beskrivning av reaktionstypen, tillsammans med namnet på det enzym som katalyserar reaktionen.

Deltyp 3 av UVCB-ämnena där källan är biologisk och processen är raffinering

UVCB-ämnena av biologiskt ursprung, som erhållits från en raffineringsprocess i vilken några nya molekyler inte bildas avsiktligt kan t.ex. vara extrakt, fraktioner av ett extrakt, koncentrat av ett extrakt, ett renat extrakt eller rester av ämnen av biologiskt ursprung från processen.

Så snart ett extrakt behandlas vidare är inte ämnet längre identiskt med extraktet utan utgör ett annat ämne som tillhör en annan UVCB-deltyp, t.ex. en fraktion eller en restprodukt av ett extrakt. Dessa ämnen ska anges med extra (ytterligare) processparametrar. Om extraktet modifieras i kemiska eller biokemiska reaktioner, i vilka nya molekyler (derivat) alstras, omfattas identifieringen av ämnet av vägledningen om UVCB-deltyp 2 eller kapitel 4.2 för ett väldefinierat ämne.

Denna särskiljning av ytterligare bearbetade extrakt kan få till följd att det nya namnet och beskrivningen kommer att skilja sig från de motsvarande namnen i EINECS-registret. Vid den tidpunkt då registret upprättades hade inte någon sådan åtskillnad gjorts och det kan vara så att alla typer av extrakt med olika lösningsmedel och ytterligare processteg samlats under samma post.

Den första huvudsakliga identitetsbeteckningen för denna deltyp av UVCB-ämnen är familj, släkte och art för den organism från vilken ämnet härrör. Om det är tillämpligt ska den vävnad eller del av organism som används för extraktion av ämnet, exempelvis benmärg, bukspottkörtel eller stam, fröer eller rötter också anges. För ämnen av mikrobiologiskt ursprung ska stammen och den genetiska typen för arten anges.

Om UVCB-ämnet kommer från en annan art, kommer det att betraktas som ett annat ämne även om den kemiska sammansättningen kan vara liknande.

Exempel	
EG-nummer	EINECS-namn
290-977-1	Oxiderat extrakt av blåträ (Haematoxylon campechianum) EG-beskrivning (Detta ämne identifieras i färgindexet med "Colour Index Constitution Number C.I. 77605 oxiderat".)
282-014-9	Bukspottkörtelextrakt, proteinfritt

Den andra huvudsakliga identitetsbeteckningen är bearbetningen av ämnet, t.ex. extraktionsprocessen, fraktionerings-, renings- eller koncentreringsprocessen som påverkar restprodukternas sammansättning. Det innebär att raffinering av extrakt kan åstadkommas med olika processer, t.ex. kan användningen av olika lösningsmedel eller olika reningssteg leda till olika ämnen.

Ju fler raffineringssteg som tillämpas desto större blir möjligheten att identifiera ämnet genom dess kemiska sammansättning. I det fallet leder arter från olika källor eller olika processmodifieringar inte automatiskt till ett annat ämne.

En huvudsaklig identifieringsparameter för ämnen av biologiskt ursprung är beskrivningen av relevanta processer. För extrakt ska extraktionsprocessen beskrivas på den detaljnivå som är relevant för ämnets identitet. Åtminstone ska det lösningsmedel som användes anges.

Om ytterligare processteg används vid tillverkning av ämnet, t.ex. fraktionering eller koncentreringsprocesser ska relevanta processteg i kombination beskrivas, t.ex. kombinationen av extraktion och fraktionering inklusive gränsvärdena.

Deltyp 4 av UVCB-ämnena där källan är kemisk eller mineralisk och processen är raffinering

Ämnen av icke-biologiskt ursprung, dvs. som är eller kommer från mineraler, malmer, kol, naturgas och råolja eller andra råmaterial för den kemiska industrin och som erhålls från bearbetning utan avsiktliga kemiska reaktioner kan vara (renade) fraktioner, koncentrat eller restprodukter från dessa processer.

Kol och råolja används vid destillerings- eller förgasningsprocesser för framställning av många olika ämnen, t.ex. oljederivat och bränslen och även restprodukter som tjära och slag. Mycket ofta bearbetas en destillerad eller på annat sätt fraktionerad produkt

omedelbart vidare, däribland genom kemiska reaktioner. I sådana fall ska ämnesidentifieringen följa den vägledning som ges för UVCB-deltyp 2, eftersom processen är mer relevant än källan.

För oljederivat används ett särskilt identifieringssystem (se kapitel 4.3.2.2). Bland de ämnen som omfattas av det systemet ingår fraktioner och kemiska reaktionsprodukter.

Andra ämnen som tillhör UVCB-deltyp 4 kan innefatta malmer, malmkoncentrat och slagg som innehåller olika mängder metall som kan extraheras genom metallurgisk bearbetning.

Mineraler som exempelvis bentonit eller kalciumkarbonat kan bearbetas genom t.ex. syraupplösning och/eller kemisk utfällning eller i jonbyteskolonner. När den kemiska sammansättningen är fullständigt definierad ska mineraler identifieras enligt vägledning i en lämplig del av kapitel 4.2. Om mineraler endast bearbetas med mekaniska metoder, t.ex. genom malning, sållning, centrifugering, flotation osv., betraktas de fortfarande som samma mineraler som ursprungligen bröts. Mineraler som framställs genom en tillverkningsprocess kan – för identifieringsändamålet²¹ – betraktas som identiska med sin naturligt förekommande motsvarighet, förutsatt att sammansättningen är likadan och toxicitetsprofilen identisk.

En huvudsaklig identifieringsparameter för ämnen av icke-biologiskt ursprung är beskrivningen av relevanta processteg.

För fraktioner ska fraktioneringsprocessen beskrivas med parametrar och gränsintervall för den isolerade fraktionen, tillsammans med en beskrivning av tidigare processteg om det anses relevant.

För koncentreringssteget ska typen av process, t.ex. indunstning, utfällning osv. anges och förhållandet mellan utgångskoncentrationen och slutkoncentrationen för huvudbeståndsdelarna ska anges utöver informationen om de tidigare processtegen.

En huvudsaklig identifieringsparameter för restprodukter av icke-biologiskt ursprung är beskrivningen av den process som restprodukten kommer från. Processen kan vara vilken fysikalisk process som helst som ger upphov till restprodukter, t.ex. rening, fraktionering och koncentrerings.

Analytisk information

I sådana fall där det behövs spektraldata för att ge information om sammansättningen hos UVCB-ämnet ska sådan information lämnas in. Det finns flera spektroskopiska metoder som kan användas för framtagning av spektra (spektrum från UV/Vis-spektroskopi, infraröd spektroskopi, kärnmagnetisk resonans eller masspektrometri). Metoderna och kunskaperna om hur man använder dessa metoder är föremål för ständig förändring. Därför är det registrantens ansvar att uppvisa lämpliga spektraldata.

Ett kromatogram som kan användas som ett fingeravtryck ska lämnas in för att karakterisera ämnets sammansättning. I tillämpliga fall kan även andra vedertagna tekniker för separation av beståndsdelar användas.

4.3.2. Särskilda typer av UVCB-ämnen

I det här avsnittet finns vägledning om särskilda grupper av UVCB-ämnen: ämnen med varierande kolkedjelängder (4.3.2.1), ämnen som erhålls från oljor eller oljeliknande källor (4.3.2.2) och enzymer (4.3.2.3).

²¹ Att samma tillvägagångssätt används för identifiering av naturligt förekommande och kemiskt framställda mineraler behöver inte nödvändigtvis betyda att de rättsliga kraven (t.ex. undantag från registrering) är desamma.

4.3.2.1 Ämnen med *varierande* kolkedjelängd

I den här gruppen av UVCB-ämnen ingår ämnen med långa alkylkedjor av varierande längd, t.ex. alkaner och alkener. Dessa ämnen erhålls antingen från naturliga fetter eller oljor eller från sådana som har framställts syntetiskt. Naturliga fetter kommer antingen från växter eller från djur. Ämnen som har långa kolkedjor och kommer från växtriket har vanligen ett jämnt antal kolatomer i kolkedjan, medan det bland de ämnen som har långa kolkedjor och kommer från djurriket även finns (några) med udda antal kolatomer i kolkedjan. Syntetiskt framställda ämnen med långa kolkedjor kan omfatta alla sorters kolkedjor, både med jämnt och udda antal kolatomer.

Identitetsbeteckningar och namnkonvention

Gruppen omfattar ämnen vars enskilda beståndsdelar har en strukturell egenskap som är gemensam: En eller flera alkylgrupper med långa kedjor, ofta med en tillhörande funktionell grupp. Beståndsdelarna skiljer sig från varandra med avseende på en eller flera av följande kännetecken som är typiska för grupper med alkylkedjor:

- Kolkedjelängd (koltal)
- Mättnadsgrad
- Struktur (linjär eller grenad)
- Den funktionella gruppens läge

Beståndsdelarnas kemiska identitet kan beskrivas i tillräcklig grad och systematiskt namnges med hjälp av följande tre deskriptorer:

- **Alkyldeskriptorn** som anger antalet kolatomer i alkylgruppens eller alkylgruppernas kolkedjelängd(er).
- **Funktionalitetsdeskriptorn** som anger ämnets funktionella grupp, t.ex. amin, ammonium, karboxylsyra.
- **Saltdeskriptorn** anger katjon/anjon för varje salt, t.ex. natrium (Na^+), karbonat (CO_3^{2-}), klorid (Cl^-).

Alkyldeskriptor

- I allmänhet avser alkyldeskriptorn C_{x-y} mättade, linjära alkylkedjor med kedjelängder från x till y, t.ex. motsvaras av C_{8-12} av C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} och C_{12} .
- Det måste anges om alkyldeskriptorn endast avser alkylkedjor med jämnt eller udda antal kol, t.ex. C_{8-12} (jämnt antal kolatomer).
- Det måste anges om alkyldeskriptorn (också) avser grenade alkylkedjor, t.ex. C_{8-12} (grenad) eller C_{8-12} (linjär och grenad).
- Det måste anges om alkyldeskriptorn (också) avser omättade alkylkedjor, t.ex. C_{12-22} (C_{18} omättad).
- En smal fördelning av alkylkedjelängder kan inte omfatta en bredare fördelning och omvänt, t.ex. motsvarar C_{10-14} inte C_{8-18} .
- Alkyldeskriptorn kan också ange alkylkedjornas källa, t.ex. kokos eller talg. Fördelningen av kolkedjelängder måste dock överensstämma med motsvarande fördelning hos källan.

Det ovannämnda systemet ska användas för beskrivning av ämnen med varierande kolkedjelängder. Det är inte tillämpligt på väldefinierade ämnen som kan identifieras genom en bestämd kemisk struktur.

Informationen om alkyldeskriptorn, funktionalitetsdeskriptorn och saltdeskriptorn är

grundvalen för namngivning av denna typ av UVCB-ämnen. Dessutom kan uppgifter om källa och process vara användbara för att ge en mer exakt identifiering av ämnet.

Exempel		
Deskriptorer		Namn
Alkyldeskriptor Funktionalitetsdeskriptor Saltdeskriptor	alkylkedjelängder C ₁₀₋₁₈ fettsyror (karboxylsyra) kadmiumsalter	fettsyror (C ₁₀₋₁₈), kadmiumsalter
Alkyldeskriptor Funktionalitetsdeskriptor Saltdeskriptor	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl-dimetyl ammonium klorid	di-C ₁₀₋₁₈ - alkyldimetylammoniumklorid
Alkyldeskriptor Funktionalitetsdeskriptor Saltdeskriptor	trimetyl-talg-alkyl ammonium klorid	trimetyl-talg- alkylammoniumklorid

4.3.2.2 Ämnen som erhålls från oljor eller oljeliknande källor

Ämnen som erhålls från olja (oljederivat) eller oljeliknande källor (t.ex. kol) är ämnen med en mycket komplex och varierande eller delvis odefinierad sammansättning. I det här kapitlet används oljederivat som ett exempel på hur man identifierar denna särskilda typ av UVCB-ämne. Men denna metod kan bara tillämpas på andra ämnen som erhållits från oljeliknande källor som kol.

De utgångsmaterial som används inom oljeraffineringsindustrin kan vara råolja eller varje särskilt raffineringsflöde som erhålls genom en eller flera processer. Slutprodukternas sammansättning beror på den råolja som används för tillverkningen (eftersom råoljans sammansättning är beroende av dess ursprungsort) och efterföljande raffineringsprocesser. Det finns därför en naturlig variation i oljederivatens sammansättning som är inte är beroende av processen¹⁷.

1. Namnkonvention

För identifiering av oljederivat rekommenderas att namngivningen följer det vedertagna nomenklatursystemet²². Detta namn utgörs vanligen av raffineringsprocessen, flödets källa och allmän sammansättning eller kännetecken. Om ämnet innehåller >5 viktprocent aromatiska kolväten med 4- till 6-ledade kondenserade ringar ska den informationen också tas med i beskrivningen. För oljederivat med ett Eines-nummer ska det namn som det erhållit i EG-registret användas.

2. Identitetsbeteckningar

Termer och definitioner för identifiering av oljederivat omfattar i allmänhet flödets källa, raffineringsprocess, allmän sammansättning, koltal, kokpunktsintervall eller andra lämpliga fysikaliska egenskaper samt dominerande kolvätetyp²².

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

Identifieringsparametrarna i avsnitt 2 i bilaga VI till Reach bör anges. Det är vedertaget att oljederivat snarare tillverkas för att uppfylla specifikationer rörande prestanda i stället för specifikationer som rör sammansättningen. Det innebär att kännetecken som namn, kolkedjelängd, kokpunkt, viskositet, gränsvärden och andra fysikaliska egenskaper i allmänhet är till större hjälp för att identifiera oljederivat så fullständigt som möjligt.

Även om kemisk sammansättning inte är den primära identitetsbeteckningen för UVCB-ämnen ska de huvudbeståndsdelar som är kända ($\geq 10\%$) och sammansättningen beskrivas i allmänna termer, t.ex. molekylviktsintervall, alifatiska eller aromatiska föreningar, hydreringsgrad och annan nödvändig information. Vidare ska alla andra beståndsdelar som förekommer vid lägre koncentrationer, men som har inverkan på faroklassificeringen, identifieras med namn och typisk koncentration.

Enzymer

Enzymer erhålls främst genom fermentation av mikroorganismer, men ibland från växter eller djur. Det flytande enzymkoncentrat som erhålls från fermentation eller extraktion och efterföljande reningssteg innehåller, förutom vatten, det verksamma enzymproteinet och andra beståndsdelar som utgör rester från fermentationen, t.ex. proteiner, peptider, aminosyror, kolhydrater, lipider och oorganiska salter.

Enzymproteinet ska, tillsammans med övriga beståndsdelar som kommer från fermentations- eller extraktionsprocessen, förutom vatten som kan avskiljas utan att det påverkar enzymproteinets stabilitet eller ändrar dess sammansättning, betraktas som det ämne som är föremål för identifieringen.

Enzymämnet innehåller vanligen 10–80 viktprocent av enzymproteinet. De andra beståndsdelarna varierar i procentandel och beror på vilken produktionsorganism som använts, fermentationsmedium och fermentationsprocessens driftsparametrar såväl som den rening som tillämpats nedströms, men sammansättningen kommer vanligen att föreligga inom de intervall som anges i följande tabell.

Verksamt enzymprotein	10–80 %
Övriga proteiner + peptider och aminosyror	5–55 %
Kolhydrater	3–40 %
Lipider	0–5 %
Oorganiska salter	1–45 %
Totalt	100 %

Enzymämnet ska betraktas som ett UVCB-ämne på grund av dess variation och dess delvis okända sammansättning. Enzymproteinet ska betraktas som en beståndsdel av UVCB-ämnet. Högrenade enzymer kan betraktas som ämnen med väldefinierad sammansättning (ämnen med en eller flera beståndsdelar) och ska identifieras i enlighet med detta.

I Einecs är den huvudsakliga identitetsbeteckningen för enzymer den katalytiska aktiviteten. Enzymer förtecknas i allmänna poster utan att det specificeras närmare, eller i särskilda poster där källans organism eller substratet anges.

Exempel		
EG-nummer	Einecs-namn	CAS-nummer
278-547-1	Neutralt proteinas, Bacillus	76774-43-1
278-588-5	Neutralt proteinas, Aspergillus	77000-13-6
254-453-6	Elastas (bukspottkörtel från gris)	39445-21-1
262-402-4	Mannanas	60748-69-8

I en undersökning av enzymer som gjorts på uppdrag av Europeiska kommissionen föreslogs det att enzymer ska identifieras enligt det internationella systemet för enzymnomenklatur, IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology)²³. Denna metod har introducerats i detta vägledningsdokument och kommer att göra det möjligt att identifiera enzymer på ett mer systematiskt, utförligt och uttömmande sätt jämfört med Einecs.

1. **Namnkonvention**

Enzymer namnges enligt reglerna för IUBMB-nomenklaturen.

IUBMB-klassificeringssystemet tillhandahåller ett unikt fyrsiffrigt tal för varje enzymtyp och katalytisk funktion (t.ex. 3.2.1.1 för α -amylas)²⁴. Varje nummer kan innefatta enzymer med varierande aminosyrasekvens och ursprung, men enzymfunktionaliteten är identisk. Det namn och nummer som erhålls genom IUBMB-nomenklaturen ska användas för ämnesidentifiering. Enligt IUBMB-nomenklaturen indelas enzymerna i sex huvudgrupper:

1. Oxidoreduktaser
2. Transferaser
3. Hydrolaser
4. Lyaser
5. Isomeraser
6. Ligaser

I följande exempel anges det hur en post är uppbyggd enligt IUBMB-nomenklaturen:

EC 3.4.22.33

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

²⁴ Termerna "EC-nummer" (Enzymkommissionens nummer) och "IUBMB-nummer" används ofta som synonymer. För att undvika missförstånd rekommenderas det att termen "IUBMB-nummer" används för den fyrsiffriga koden från IUBMB.

Godtaget namn: fruktbromelain

Reaktion: Hydrolys av proteiner med bred specificitet för peptidbindningar. Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec är ett bra syntetiskt substrat, men det förekommer ingen inverkan på Z-Arg-Arg-NHMec (jfr stambromelain).

Övriga namn: juice-bromelain; ananas; bromelas; bromelin; extranas; juice-bromelain; pinas; ananasenzym; traumanas; fruktbromelain FA2.

Kommentar: Från ananasplantan *Ananas comosus*. Hämmas knappast av cystatin från kyckling. Ett annat cysteinendopeptidas, med liknande inverkan på små moleky substrat, pinguinain (tidigare EC 3.4.99.18), erhålls från den besläktade växten, *Bromelia pinguin*, men pinguinain skiljer sig från fruktbromelain i det avseendet att det hämmas av cystatin från kyckling [4]²⁵. I peptidasfamilj C1²⁶ (papainfamiljen). Tidigare EC 3.4.22.5 och införd i EC 3.4.22.4, CAS-registreringsnummer: 9001-00-7

Länkar till andra databaser:

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

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

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

Allmänna litteraturhänvisningar:

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

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

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

Exempel på klassificering av enzym enligt IUBMB-systemet

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

Proteaser numreras enligt följande kriterier:

3.	Hydrolaser
3.4	Inverkar på peptidbindningar (peptidaser), med underindelningar:
3.4.1	α-amino-acyl-peptid-hydrolaser (nu i EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidyl-aminosyra-hydrolaser (nu i EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptid-hydrolaser (nu i EC 3.4.13)

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

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

3.4.4	Peptidyl-peptid-hydrolaser (nu omklassificerade inom EC 3.4)
3.4.11	Aminopeptidaser
3.4.12	Peptidylaminosyra-hydrolaser eller acylaminosyra-hydrolaser (nu omklassificerade inom 3.4)
3.4.13	Dipeptidaser
3.4.14	Dipeptidyl-peptidaser och tripeptidylpeptidaser
3.4.15	Peptidyl-dipeptidaser
3.4.16	Karboxipeptidaser av serintyp
3.4.17	Metallokarboxipeptidaser
3.4.18	Karboxipeptidaser av cysteintyp
3.4.19	Omega-peptidaser
3.4.21	Serinendopeptidaser
Vidare identifieras specifika enzymer:	
3.4.21.1	kymotrypsin
3.4.21.2	kymotrypsin C
3.4.21.3	metridin
3.4.21.4	trypsin
3.4.21.5	trombin
3.4.21.6	koagulationsfaktor Xa
3.4.21.7	plasmin
3.4.21.8	omfattas nu av EC 3.4.21.34 och EC 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidas
3.4.21.10	akrosin
3.4.21.11	omfattas nu av EC 3.4.21.36 och EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-lytiskt endopeptidas
...	
3.4.21.105	

3.4.99	Endopeptidaser med okänd katalytisk mekanism
--------	--

Exempel från Einecs med tillagt IUBMB-nummer			
EG-nummer	Einecs-namn	CAS-nummer	IUBMB-nummer
278-547-1	Neutralt proteinas, Bacillus	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisin	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cellulas	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identitetsbeteckningar

Enzymämnen identifieras genom det ingående enzymproteinet (IUBMB-nomenklaturen) och de andra beståndsdelarna från fermentationen. Förutom enzymproteinet förekommer vanligen inte någon specifik beståndsdel i koncentrationer över 1 %. Om dessa specifika beståndsdelars identitet inte är känd kan de anges genom indelning i grupper (dvs. proteiner, peptider, aminosyror, kolhydrater, lipider och oorganiska salter). Beståndsdelarna måste dock anges om de har känd identitet och de måste identifieras om deras koncentrationer överskrider 10 % eller om de är lämpliga för klassificering och märkning och/eller PBT-bedömning²⁷.

Enzymproteiner

Enzymproteiner i konzentratet ska identifieras med

- IUBMB-nummer
- Namn som tilldelats av IUBMB (systematiskt namn, enzymnamn, synonymer)
- Kommentarer från IUBMB
- Reaktion och reaktionstyp
- EG-nummer och EG-namn (i tillämpliga fall)
- CAS-nummer och CAS-namn (i förekommande fall)

Den av enzymet framkallade reaktionen ska anges. Denna reaktion definieras enligt IUBMB.

Exempel
Alfa-amylas: Polysackarid som innehåller alfa-(1-4)-bundna glukosenheter + H ₂ O = maltooligosackarider; endohydrolys av 1,4-alfa-d-glukosidbindningar i polysackarider innehållande tre eller flera 1,4-alfabundna d-glukosenheter.

²⁷ Det finns mer information om PBT-bedömning och berörda kriterier i *Vägledning om informationskrav och kemikaliesäkerhetsbedömning, kapitel R11: PBT-bedömning*.

Beroende på enzymklassen bestäms en reaktionstyp. Det kan röra sig om oxidation, reduktion, elimination, addition eller ett reaktionsnamn.

Exempel

Alfa-amylas: Hydrolys av O-glykosylbindning (endohydrolys)

Andra beståndsdelar än enzymproteinet

Alla beståndsdelar som utgör ≥ 10 viktprocent eller som har betydelse för klassificering och märkning och/eller PBT-bedömning²⁸ ska identifieras. Identiteten för beståndsdelar vilkas koncentration är lägre än 10 % kan anges i form av en kemisk grupp. Deras typiska koncentrationer eller koncentrationsintervall måste anges, dvs.:

- (Glyko-)proteiner
- Peptider och aminosyror
- Kolhydrater
- Lipider
- Oorganiskt material (t.ex. natriumklorid och andra oorganiska salter)

Om det inte är möjligt att i tillräcklig grad identifiera de övriga beståndsdelarna i ett enzymkoncentrat ska produktionsorganismens namn anges (släkte och stam eller genetisk typ i förekommande fall) precis som för andra UVCB-ämnen av biologiskt ursprung.

Om sådana finns kan ytterligare parametrar anges, t.ex. funktionsparametrar (dvs. pH-värdet eller optimala temperaturer och intervall), kinetiska parametrar (dvs. specifik aktivitet eller omsättningstal), ligander, substrat och produkter samt kofaktorer.

²⁸ Det finns mer information om PBT-bedömning och relevanta koncentrationsgränser i avsnittet om PBT-bedömning i vägledningsdokumentet om hur man utarbetar kemikaliesäkerhetsbedömningar, RIP 3.2.

5. Kriterier för att kontrollera om ämnen är identiska

När man kontrollerar om ämnen från olika tillverkare/importörer är identiska eller inte bör man följa vissa regler. Dessa regler som tillämpades när EINECS upprättades bör anses vara en stabil grund för att identifiera och namnge ett ämne och därmed hitta en eventuell medregistrant för gemensam registrering av det aktuella ämnet ^{5, 6, 16, 29, 30}. Ämnen som inte betraktas som identiska kan dock betraktas som strukturellt liknande ämnen genom tillämpning av expertbedömning. Gemensamt utnyttjande av data skulle ändå vara möjligt när det gäller dessa ämnen om det är vetenskapligt motiverat. Den frågan tas inte upp i det här vägledningsdokumentet utan behandlas i vägledningen om gemensamt utnyttjande av data.

- Regeln "≥80 %" för ämnen med en beståndsdel och regeln "<80 %/≥10 %" för ämnen med flera beståndsdelar ska användas.

Det görs ingen åtskillnad mellan ämnets renhetsgrader såsom teknisk kvalitet, laboratorie kvalitet eller analytisk kvalitet. Det innebär att "samma" ämne kan ha olika renhets-/föroreningsprofil beroende på renhetsgrad. Väldefinierade ämnen ska innehålla samma huvudbeståndsdel(ar) och de enda tillåtna föroreningarna är de som härrör från tillverkningsprocessen (se kapitel 4.2 för en utförlig beskrivning) och tillsatser som krävs för att stabilisera ämnet.

- Hydratiserade och vattenfria former av samma förening ska betraktas som identiska ämnen i samband med registrering

Exempel			
Namn och formel	CAS-nummer	EG-nummer	Regel
Kopparsulfat (Cu H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Svavelsyra och koppar(II)salt (1:1), pentahydrat (Cu.H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Detta ämne omfattas av registrering av dess vattenfria form (EG-nummer: 231-847-6)

Hydratiserade och vattenfria former har olika kemiska namn och olika CAS-nummer.

- Syror eller baser och salterna av dessa ska betraktas som olika ämnen.

²⁹ Vollmer m fl. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, s. 113-122.

³⁰ Handbok över beslut, regler för rapportering av ämnen i EINECS ECB:s webbplats: 1992, Vollmer m fl. 1998, Rasmussen m fl. 1999.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
201-186-8	Perättiksyra $C_2H_4O_3$	Detta ämne ska inte betraktas som identiskt med till exempel sitt natriumsalt (Einecs 220-624-9)
220-624-9	Natriumglykolat $C_2H_4O_3 \cdot Na$	Detta ämne ska inte betraktas som identiskt med sin motsvarande syra (Einecs 201-186-8)
202-426-4	2-kloranilin C_6H_6ClN	Detta ämne ska inte betraktas som identiskt med till exempel 2-kloranilinhydrobromid (1:1) ($C_6H_6ClN \cdot HBr$)

- Enskilda salter (t.ex. natrium- eller kaliumsaltet av ämnet) ska betraktas som olika ämnen.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
208-534-8	Natriumbensoat $C_7H_5O_2 \cdot Na$	Detta ämne ska. inte betraktas som identiskt med till exempel sitt kaliumsalt (Einecs 209-481-3)
209-481-3	Kaliumbensoat $C_7H_5O_2 \cdot K$	Detta ämne ska inte betraktas som identiskt med till exempel sitt natriumsalt (Einecs 208-534-8)

- Grenade eller linjära alkylkedjor ska betraktas som olika ämnen.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
295-083-5	Fosforsyra, dipentylester, grenad och linjär	Detta ämne ska inte betraktas som identiskt med de enskilda ämnena fosforsyra, dipentylester, grenad eller fosforsyra, dipentylester, linjär

- Det ska framgå av namnet att det finns grenade grupper. Om namnen på ämnen som innehåller alkylgrupper inte innehåller någon ytterligare information avses endast icke-grenade linjära kedjor, om inte annat anges.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
306-791-1	Fettsyror, C12-16	Enbart ämnen med linjära, icke-grenade alkylgrupper kan betraktas som identiska
279-420-3	Alkoholer, C12-14	
288-454-8	Aminer, C12-18-alkylmetyl	

- Ämnen med alkylgrupper som ges ytterligare beteckningar som iso-, neo-, grenad osv. ska inte betraktas som identiska med ämnen som saknar denna beteckning.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
266-944-2	Glycerider, C ₁₂₋₁₈ Detta ämne identifieras genom SDA "Substance Name": C12-C18 trialkylglycerid och SDA "Reporting Number": 16-001-00	Detta ämne ska inte betraktas som identiskt med C _{12-18-iso} Ämne med mättade alkylkedjor som är grenade i någon position

- Om det inte uttryckligen anges ska alkylkedjor i syror eller alkoholer osv. enbart betraktas som mättade kedjor. Omättade kedjor ska anges som sådana och ska betraktas som olika ämnen.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
200-313-4	Stearinsyra, kemiskt ren C18H36O2	Detta ämne ska inte betraktas som identiskt med oljesyra, kemiskt ren C18H34O2 (Einecs 204-007-1)

- Ämnen med kirala centrum

Ett ämne som har ett kiralt centrum kan förekomma i vänster- och högerhandsformer (enantiomerer). Om det däremot saknas uppgift om detta förutsätts det att ämnet är en (racemisk) blandning av de två formerna i lika mängd.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
201-154-3	2-klorpropan-1-ol	De enskilda enantiomererna (R)-2-klorpropan-1-ol och (S)-2-klorpropan-1-ol betraktas inte som identiska med denna post

Om ett ämne har anrikats med avseende på en enskild enantiomerform gäller reglerna för ämnen med flera beståndsdelar. Likaså betraktas racemater som ämnen med flera beståndsdelar.

Ämnen som har flera kirala centrum kan förekomma i 2^n former (där n står för antalet kirala centrum). Dessa olika former kan skilja sig åt med avseende på sina fysikalisk-kemiska, toxikologiska och/eller ekotoxikologiska egenskaper. De ska betraktas som skilda ämnen.

- Oorganiska katalysatorer

Oorganiska katalysatorer betraktas som blandningar. För identifiering ska ingående metaller eller metallföreningar betraktas som enskilda ämnen (utan att användning anges).

Exempel		
	Namn	Regel
	Koboltoxid-aluminiumoxid-katalysator	Ska identifieras separat som: Kobolt(II)oxid Kobolt(III)oxid Aluminiumoxid Aluminiumkoboltoxid

- Enzymkoncentrat med samma IUBMB-nummer kan betraktas som identiska, även om olika produktionsorganismer har använts, förutsatt att de farliga egenskaperna inte skiljer sig åt på något avgörande sätt och att det är berättigat att de har samma klassifikation.

Ämnen med flera beståndsdelar

Utsläppandet av ämnen på marknaden reglerades av direktiv 67/548/EEG. Ämnets produktionssätt ansågs inte vara relevant. Därför omfattades ett ämne med flera beståndsdelar som släppts ut på marknaden av EINECS, om *alla* de enskilda beståndsdelarna var införda i EINECS. Exempelvis omfattades den isomera difluorbensenblandningen av EINECS-posterna 1,2 difluorbensen (206-680-7), 1,3-difluorbensen (206-746-5) och 1,4-difluorbensen (208-742-9) trots att själva isomerblandningen inte var införd i EINECS.

Enligt Reach ska registreringen istället omfatta det tillverkade ämnet. I vilken omfattning de olika stegen vid tillverkning av ämnet omfattas av definitionen "tillverkning" beslutas från fall till fall (t.ex. olika renings- eller destillationssteg). Om ett ämne med flera beståndsdelar tillverkas måste det registreras (såvida det inte omfattas av en registrering av de enskilda beståndsdelarna, se kapitel 4.2.2.4). Isomerblandningen av difluorbensen tillverkas exempelvis, vilket innebär att "difluorbensen", i egenskap av en isomer blandning, måste registreras. För ämnen med flera beståndsdelar finns det inget behov av att testa ämnet som sådant om ämnets faroprofil kan beskrivas i tillräcklig grad genom uppgifterna om de enskilda beståndsdelarna. Om de enskilda isomererna 1,2-difluorbensen, 1,3-difluorbensen och 1,4-difluorbensen tillverkas och blandas efteråt måste de enskilda isomererna registreras och isomerblandningen skulle betraktas som en blandning.

Ett ämne med flera beståndsdelar innehållande huvudbeståndsdelarna A, B och C ska inte betraktas som identisk med ett ämne med flera beståndsdelar innehållande huvudbeståndsdelarna A och B eller med en reaktionsblandning innehållande A, B, C och D.

- Ett ämne med flera beståndsdelar betraktas inte som identiskt med ett ämne som endast innehåller en delmängd av de enskilda beståndsdelarna.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
207-205-6	2,5-difluortoluen	Dessa två ämnen betraktas inte som identiska med den isomera difluortoluenblandningen, eftersom dessa två ämnen endast utgör en delmängd av alla isomerer som är möjliga.
207-211-9	2,4-difluortoluen	

- Registreringen av ett ämne med flera beståndsdelar omfattar inte de enskilda beståndsdelarna.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
208-747-6	1,2-dibrometylen	Det här ämnet utgör en blandning av cis- och transisomerer. De enskilda ämnena (1Z)-1,2-dibrometen och (1E)-1,2-dibrometen omfattas inte av registreringen av isomerblandningen.

UVCB-ämnen

- Ett UVCB-ämne med en smal fördelning av beståndsdelar betraktas inte som identiskt

med ett UVCB-ämne med en bredare sammansättning och omvänt.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
288-450-6	Aminer, C12-18-alkyl, acetater	Ämnena "aminer, C12-14-alkyl, acetater" eller "aminer, C12-20-alkyl, acetater" eller "aminer, dodecyl (C12-alkyl), acetater" eller ämnen som endast består av alkylkedjor med jämnt antal kol betraktas inte som identiska med detta ämne

- Ett ämne som karakteriseras genom en art/ett släkte betraktas inte som identiskt med ett ämne som isolerats från en annan art/ett annat släkte.

Exempel		
EG-nummer	Namn	Regel
296-286-1	Glycerider, solrosolja di-	Ämnet betraktas varken som identiskt med glycerider, soja di- (Einecs: 271-386-8), eller med glycerider, talg di- (Einecs: 271-388-9)
232-401-3	Linolja, epoxiderad	Ämnet betraktas varken som identiskt med linolja, oxiderad (Einecs: 272-038-8), eller med linolja, omvandlad till maleat (Einecs: 268-897-3), eller som ricinolja, epoxiderad (ej införd i Einecs).

- Ett renat extrakt eller ett koncentrat betraktas som ett annat ämne än extraktet.

Exempel

EG-nummer	Namn	Regel
232-299-0	Rapsolja Extrakt och deras fysikaliskt modifierade derivat. Det består huvudsakligen av glyceriderna av fettsyrorna erukasyra, linolsyra och oljesyra. (Brassica napus, Cruciferae)	Ämnet "(Z)-docos-13-ensyra (erukasyra)" är en beståndsdel i ämnet "rapsolja". Erukasyra betraktas inte som identisk med rapsolja eftersom den isoleras i form av ett rent ämne från rapsoljan. Erukasyra har en egen EINECS-post (204-011-3). En isolerad blandning av palmitinsyra, oljesyra, linolsyra, linolensyra, erukasyra och eikosensyra betraktas inte som identisk med rapsolja eftersom dessa beståndsdelar inte representerar hela oljan.

6. Ämnesidentitet inom (SEN) förhandsregistrering och förfrågan

Vägledning om hur man identifierar och namnger ämnen ges i kapitel 4 i detta vägledningsdokument. Denna vägledning ska följas när man fastställer om ämnen kan betraktas som identiska i enlighet med Reach och CLP. Detta beskrivs närmare nedan vad gäller (sen) förhandsregistrering av infasningsämnen och förfrågan om icke-infasningsämnen.

Enligt artikel 4 kan varje tillverkare eller importör, samtidigt som denne behåller sitt fulla ansvar för att uppfylla sin skyldighet i enlighet med Reachförordningen, utse en tredjepartsföreträdare för alla processer inom ramen för avdelning III, däribland diskussioner med andra tillverkare eller importörer.

6.1. (SEN) förhandsregistrering

Syftet med det (sena) förhandsregistreringsförfarandet är att föra samman potentiella registranter av samma ämne för att undvika upprepning av samma undersökningar, särskilt försök på ryggradsdjur. (Sen) förhandsregistrering gäller endast infasningsämnen.

Det finns mer information om (sen) förhandsregistrering och vem som fortfarande kan använda sig av den i *Vägledning om gemensamt utnyttjande av data* på <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach> och på Echa:s särskilda webbplats för ämnet <http://echa.europa.eu/regulations/reach/registration/data-sharing/pre-registration>.

6.2. Förfrågan

För icke-infasningsämnen eller infasningsämnen som inte har förhandsregistrerats är de potentiella registranterna förpliktade att före en registrering inge en förfrågan om utredning till kemikaliemyndigheten om en registrering redan har lämnats in för samma ämne (artikel 26 i Reach). Denna förfrågan ska innehålla

- uppgifter om den potentiella registranten enligt avsnitt 1 i bilaga VI till Reachförordningen med undantag för användningsplatserna,
- uppgifter om ämnets identitet i enlighet med avsnitt 2 i bilaga VI till Reachförordningen,
- uppgifter om vilka informationskrav som skulle innebära att nya undersökningar som omfattar ryggradsdjur måste utföras av den potentiella registranten,
- uppgifter om vilka informationskrav som skulle innebära att andra nya undersökningar måste utföras av den potentiella registranten.

Den potentiella registranten ska ange ämnets identitet och namn enligt de regler som föreskrivs i kapitel 4 i detta vägledningsdokument.

Kemikaliemyndigheten ska fastställa om samma ämne har registrerats tidigare. Detta görs också genom tillämpning av reglerna i kapitel 4 i detta vägledningsdokument. Den potentiella registranten meddelas resultatet liksom alla tidigare eller andra registranter.

Det finns mer information om förfrågningsförfarandet i *Vägledning om gemensamt utnyttjande av data* och på Echas särskilda webbplats för ämnet <https://www.echa.europa.eu/web/guest/regulations/reach/registration/data-sharing/inquiry>.

7. Exempel

Exemplen på följande sidor är endast avsedda att visa hur användaren kan utnyttja vägledningen i detta vägledningsdokument. De utgör inte några prejudicerande fall avseende förpliktelser enligt Reach.

Följande exempel ingår:

- "Dietylperoxidikarbonat" är ett exempel på ett ämne med en beståndsdel, inklusive ett lösningsmedel som också fungerar som ett stabiliseringsmedel (se kapitel 7.1).
- "Zolimidin" är ett exempel på ett ämne som skulle kunna identifieras som ett ämne med en beståndsdel eller som ett ämne med flera beståndsdelar (se kapitel 7.2).
- En "isomerblandning" som bildas under en tillverkningsreaktion tas med som ett exempel på ett ämne med flera beståndsdelar (se kapitel 7.3). Detta ämne omfattades tidigare av EINECS-posterna för de enskilda isomererna.
- "Doftämne AH" är ett exempel på ett ämne som tillverkas i former med olika kvalitet, vilket kan beskrivas genom en reaktionsblandning av fem beståndsdelar med koncentrationsintervall (kapitel 7.4). Dessutom är ämnet ett exempel på en motiverad avvikelse från 80 %-regeln och 10 %-regeln.
- Icke-metallhaltiga "mineraler", inklusive montmorillonit som ett exempel på ett väldefinierat ämne som kräver ytterligare fysikalisk karakterisering, beskrivs i kapitel 7.5.
- En "eterisk lavendelolja" är ett exempel på ett UVCB-ämne som erhålls från växter (kapitel 7.6).
- "Krysantemumolja och isomerer som isolerats från denna" är ett exempel på ett UVCB-ämne av biologiskt ursprung som bearbetats vidare (kapitel 7.7).
- "Fenol, isopropylerad, fosfat" är ett exempel på ett variabelt UVCB-ämne som inte kan definieras helt (kapitel 7.8).
- "Kvartära ammoniumföreningar" är exempel på ämnen med varierande kolkedjelängd (kapitel 7.9).
- Två exempel på "oljederivat", ett bensinkomponentsflöde och gasoljor, finns i kapitel 7.10.
- I kapitel 7.11 ges två exempel på hur man identifierar enzymer, laccas och amylas.

7.1. Dietylperoxidikarbonat

Ämnet "dietylperoxidikarbonat" (EG-nummer 238-707-3, CAS-nummer 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) tillverkas i form av en lösning i isododekan med koncentrationen 18 % (EG-nummer 250-816-8, CAS-nummer 31807-55-3). Isododekan fungerar också som stabiliseringsmedel mot explosiva egenskaper. Högsta möjliga koncentration som säkerställer en säker hantering av ämnet är en lösning med koncentrationen 27 %.

Hur ska ovannämnda ämne identifieras och namnges för registrering?

Enligt definitionen på ett ämne i Reach ska lösningsmedel som kan avskiljas utan att det påverkar ämnets stabilitet eller ändrar dess sammansättning uteslutas. Eftersom isododekan i det här fallet också fungerar som ett stabiliserande medel och inte kan avskiljas helt på grund av ämnets explosiva egenskaper måste isododekan betraktas som en tillsats och inte bara som ett lösningsmedel. Ämnet ska dock fortfarande betraktas som ett ämne med en beståndsdel. Det ska därför registreras som en lösning med den lägsta isododekankoncentration som fortfarande säkerställer en säker hantering:

Dietylperoxidikarbonat (övre koncentrationsgräns: 27 %). Isododekan ska rapporteras under "tillsatser" och dess stabiliserande funktion ska anges.

7.2. Zolimidin

Den tillverkade metanollösningen innehåller "zolimidin" (EC 214-947-4; CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) och "imidazol" (EC 206-019-2; CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Efter att lösningsmedlet metanol har avlägsnats och tillverkningsförfarandet optimerats har ämnet ett renhetsintervall på 74–86 % för zolimidin och 4–12 % för imidazol.

Hur ska ovannämnda ämne identifieras och namnges för registrering?

Enligt definitionen på ett ämne i Reach ska lösningsmedel som kan avskiljas utan att det påverkar ämnets stabilitet eller ändrar dess sammansättning uteslutas. Eftersom metanol i det här fallet kan avskiljas utan svårigheter måste ämnet registreras utan förekomst av lösningsmedel

I allmänhet betraktas ett ämne som ett ämne med en beståndsdel om en huvudbeståndsdel förekommer i en koncentration på ≥ 80 %. Om fler än en huvudbeståndsdel förekommer i en koncentration på ≥ 10 % och < 80 % ska ämnet betraktas som ett ämne med flera beståndsdelar. Ovanstående exempel är ett gränsfall eftersom tröskelvärdena överskrids. Därför ska ämnet betraktas som ett ämne med en beståndsdel, benämnt "zolimidin", eller som ett ämne med flera beståndsdelar, en reaktionsblandning av "zolimidin" och "imidazol".

Vid ett sådant gränsfall ska de typiska koncentrationerna för ämnets huvudbeståndsdelar vara vägledande för beslutet om hur ämnet bäst beskrivs enligt följande:

(1) Om den typiska koncentrationen för zolimidin är 77 % och för imidazol 11 %, då bör ämnet betraktas som en reaktionsblandning av zolimidin och imidazol.

(2) Om den typiska koncentrationen för zolimidin är 85 % och för imidazol 5 %, då bör ämnet betraktas som ett ämne med en beståndsdel, benämnt "zolimidin".

7.3. Isomerblandning

Det aktuella ämnet är en blandning (reaktionsblandning) av två isomerer som bildas under tillverkningsreaktionen. De enskilda isomererna har registrerats i EINECS. Utsläppandet av ämnen på marknaden reglerades av direktiv 67/548/EEG. Eftersom ämnets produktionssätt inte hade betydelse omfattades blandningen av EINECS-posterna för de två enskilda isomererna. Enligt Reach krävs istället registrering av tillverkade ämnen. I vilken omfattning de olika stegen vid tillverkning av ett ämne omfattas av definitionen "tillverkning" beslutas från fall till fall. Om isomerblandningen registreras som ett ämne med flera beståndsdelar (enligt kapitel 4.2.2 i denna vägledning) finns det inget behov av att testa ämnet som sådant om ämnets faroprofil kan beskrivas i tillräcklig grad genom uppgifterna om de enskilda beståndsdelarna. Däremot bör man hänvisa till EINECS-posterna med de enskilda isomererna för att visa ämnets infasningsstatus.

1. Namn och andra identitetsbeteckningar

Exempel	
IUPAC-namn eller andra internationella kemiska namn (på ämnet)	Reaktionsblandning av 2,2'-[[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol och 2,2'-[[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol
Andra namn på ämnet	2,2'-[[[(metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol Reaktionsblandning av etanol, 2,2'-[[[(metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bis- och vatten Etanol, 2,2'-[[[(metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bis- (9CI) isomerisk förening
EG-nummer (för ämnet) EG-namn EG-beskrivning	Blandningen har inte något EG-nummer eftersom blandningen inte registrerats i EINECS. Ämnet omfattades dock av EINECS-posterna för beståndsdelarna (279-502-9, 279-501-3). Därför ska blandningen betraktas som ett infasningsämne.
CAS-nummer (för ämnet) CAS-namn	uppgift saknas uppgift saknas
EG-nummer (beståndsdel A) EG-namn EG-beskrivning	279-502-9 2,2'-[[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol /
EG-nummer (beståndsdel B) EG-namn EG-beskrivning	279-501-3 2,2'-[[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol /
CAS-nummer (beståndsdel A) CAS-namn	80584-89-0 Etanol, 2,2'-[[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bis-
CAS-nummer (beståndsdel B) CAS-namn	80584-88-9 Etanol, 2,2'-[[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bis-
Annan identitetskod Referens	ENCS-nummer 5-5917

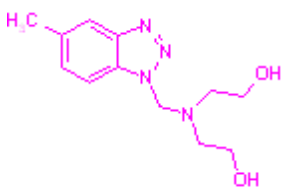
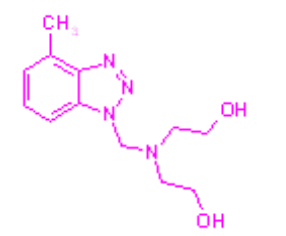
2. Uppgifter om sammansättning – huvudbeståndsdelar

Huvudbeståndsdelar						
	IUPAC-namn	CAS-nummer	EG-nummer	Mol.-formel Hill-metoden	Typisk konc. (viktprocent)	Konc.-intervall (viktprocent)
A	Etanol, 2,2'-[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	Etanol, 2,2'-[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Huvudbeståndsdelar	
Övriga namn:	
A	2,2'-[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol
B	2,2'-[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol

Huvudbeståndsdelar		
	EG-namn	EG-beskrivning
A	2,2'-[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol	/
B	2,2'-[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bisetanol	/

Huvudbeståndsdelar		
	CAS-namn	CAS-nummer
A	Etanol, 2,2'-[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bis-	80584-89-0
B	Etanol, 2,2'-[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]bis-	80584-88-9

Huvudbeståndsdelar			
	Molekylformel CAs- metod	Strukturformel	Smiles-notation
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Huvudbeståndsdelar		
	Molekylvikt [g mol ⁻¹]	Molekylviktsintervall
A	250	/
B	250	/

7.4. Doftämne AH

Doftämne AH består av gamma (iso-alfa)-metyljonon och dess isomerer. Det tillverkas i tre olika kvaliteter (kvalitet A, B och C) som skiljer sig åt när det gäller isomerförhållandet.

I följande tabell ges en översikt av de tre olika kvaliteternas sammansättningar.

Sammansättning av de olika kvaliteterna av doftämne AH				
Koncentrationsintervall [%]	Kvalitet A	Kvalitet B	Kvalitet C	Totalintervall
gamma (iso-alfa)-metyljonon	80–85	65–75	50–60	50–85
delta (iso-beta)-metyljonon	6–10	3–7	3–7	3–10
alfa-n-metyljonon	3–11	10–20	20–30	3–30
gamma-n-metyljonon	0,5–1,5	2–4	2–4	0,5–4
beta-n-metyljonon	0,5–1,5	4–6	5–15	0,5–15
pseudo-metyljononer	0,5–1,5	1–3	1–3	0,5–3

Det finns flera alternativ för att identifiera ämnet:

- Kvalitet A innehåller minst 80 % av gamma (iso-alfa)-metyljononisomeren och kan därför betraktas som ett ämne med en beståndsdel med utgångspunkt från gamma (iso-alfa)-metyljononisomeren med de andra isomererna som föroreningar.
- Kvaliteterna B och C innehåller mindre än 80 % av gamma (iso-alfa)-metyljononisomeren och ≥ 10 % av övriga isomerer. Därför skulle de kunna betraktas som ämnen med flera beståndsdelar:
 - Kvalitet B: som en reaktionsblandning av gamma (iso-alfa)-metyljonon (65–75 %) och alfa-n-metyljonon (10–20 %) med de andra isomererna som föroreningar.
 - Kvalitet C: som en reaktionsblandning av gamma (iso-alfa)-metyljonon (50–60%) och alfa-n-metyljonon (20–30 %) med de andra isomererna som föroreningar.

Sammansättningen varierar och ibland förekommer en isomer i en koncentration på ≥ 10 % (och kallas därför vanligen huvudbeståndsdel) och ibland < 10 % (och kallas därför vanligen förorening).

Det skulle kunna vara möjligt att registrera de olika kvaliteterna separat. Det skulle innebära tre registreringar. Jämförelse med strukturlika ämnen kan dock vara motiverat.

Ett annat alternativ är att överväga:

- En registrering som ett ämne med en beståndsdel med två underkvaliteter. I det här fallet avviker underkvaliteterna från 80 %-regeln (se kapitel 4.2.1).
- En registrering som en definierad reaktionsblandning med 5 isomerer (ämne med flera beståndsdelar). I det här fallet avviker några isomerer (huvudbeståndsdelar) från 10 %-regeln som särskiljer huvudbeståndsdelar från föroreningar (se kapitel 4.2.2).

- En registrering som en definierad reaktionsblandning där sammansättningens variation täcks in av varje isomers sammanlagda intervall.

Det kan vara av vikt att beakta följande:

- De tre kvaliteterna har samma eller mycket likartade fysikalisk-kemiska egenskaper.
- De tre kvaliteterna har liknande användning och exponeringsscenarier.
- Alla kvaliteterna har samma faroklassificering och märkning och säkerhetsdatabladens och säkerhetsrapporternas innehåll är identiska.
- Tillgängliga försöksdata (och framtida försök) omfattar de tre kvaliteternas variationer.

I det här exemplet beskrivs identifieringen av ämnet som en definierad reaktionsblandning av 5 isomerer (ämne med flera beståndsdelar). Det krävs en motivering på grund av avvikelser från 80 %-regeln (se kapitel 4.2.1) och 10 %-regeln (se kapitel 4.2.2). Eftersom varje kvalitet tillverkas i sig ska sammansättningen av var och en av de tre kvaliteterna anges i registreringsunderlaget. Under formella förhållanden kan det krävas minst två registreringar: (1) Gamma (iso-alfa)-metyljonon och (2) reaktionsblandning av gamma (iso-alfa)-metyljonon och alfa-n-metyljonon.

Ämnesidentifiering

Doftämne AH tillverkas i tre olika kvaliteter (A, B och C) med samma kvalitativa sammansättning, men där den kvantitativa sammansättningen skiljer sig åt. Alla tre kvaliteterna beskrivs i ett registreringsunderlag utformat för ett ämne med flera beståndsdelar. Även om det betyder att 80 %- och 10 %-regeln inte tillämpas strängt är registreringen som ett ämne med flera beståndsdelar motiverad, eftersom 1) det finns tillgång till försöksdata som omfattar de tre kvaliteternas variationer, 2) de tre kvaliteternas fysisk-kemikaliska egenskaper är mycket likartade, 3) alla kvaliteterna har samma faroklassificering och märkning (och därmed identiska säkerhetsdatablad) och 4) de tre kvaliteterna har liknande användning och exponeringsscenarier (och därmed liknande kemikaliesäkerhetsrapporter).

1. Namn och andra identitetsbeteckningar

IUPAC-namn eller andra internationella kemiska namn	Reaktionsblandning av 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on, 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on, [R- (E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on, 1-(6,6-metyl-2-metylcyclohex-1-yl)pent-1-en-3-on, 1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on.
Övriga namn:	Metyljonon, gamma, kvalitet A Metyljonon, gamma, kvalitet B Metyljonon, gamma, kvalitet C
EG-nummer EG-namn EG-beskrivning	uppgift saknas / /
CAS-nummer	uppgift saknas

CAS-namn	/
----------	---

2. Uppgifter om sammansättning – huvudbeståndsdelar

Ur teoretisk synvinkel är ytterligare enantiomerer möjliga. Följande isomerer analyserades emellertid:

Huvudbeståndsdelar						
	IUPAC-namn	CAS-nummer	EG-nummer	Mol.-formel Hill-metoden	Lägsta konc. (viktprocent)	Högsta konc. (viktprocent)
A	3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
B	3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	127-42-4	204-842-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	30
D	1-(6,6-metyl-2-metylcyklohex-1-yl)pent-1-en-3-on	uppgift saknas	uppgift saknas	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	127-43-5	204-843-7	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	15

Huvudbeståndsdelar	
Övriga namn:	
A	alfa-iso-metyljonon; gamma-metyljonon
B	beta-iso-metyljonon; delta-metyljonon

C	alfa-n-metyljonon
D	gamma-n-metyljonon
E	beta-n-metyljonon

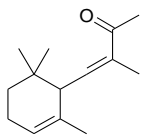
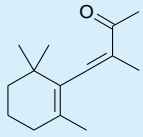
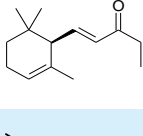
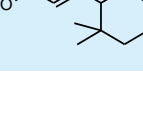
Huvudbeståndsdelar

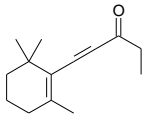
	EG-namn	EG-beskrivning
A	3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on	/
B	3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on	/
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	/
D	1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	/
E	1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	/

Huvudbeståndsdelar

	CAS-namn	CAS-nummer
A	3-buten-2-on, 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)-	127-51-5
B	3-buten-2-on, 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)-	79-89-0
C	1-penten-3-on, 1-[(1R)-2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl]-, (1E)-	127-42-4
D	uppgift saknas	uppgift saknas
E	1-penten-3-on, 1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)-	127-43-5

Huvudbeståndsdelar		
	Andra identitetskoder	Referens
A	2714 07.036	FEMA EU:s register över aromämnen
B	07.041	EU:s register över aromämnen
C	2711 07.009	FEMA EU:s register över aromämnen
D	uppgift saknas	uppgift saknas
E	2712 07.010	FEMA EU:s register över aromämnen

Huvudbeståndsdelar			
	Molekylformel CAS-metod	Strukturformel	Smiles-notation
A	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
B	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
C	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>
D	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem>

E	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC
----------	-----------------------------------	---	------------------------------

Huvudbeståndsdelar

	Molekylvikt [g mol ⁻¹]	Molekylviktsintervall
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Uppgifter om sammansättning – föroreningar och tillsatser

Föroreningar

	IUPAC-namn	CAS-nummer	EG-nummer	Mol.-formel	Typisk konc. (viktprocent)	Konc.-intervall (viktprocent)
F						
antal icke-specificerade föroreningar: sammanlagd koncentration av icke-specificerade föroreningar:				11 (pseudo-metyljononer) 0,5–3 viktprocent		

Tillsatser

	IUPAC-namn	CAS-nummer	EG-nummer	Mol.-formel	Typisk konc. (viktprocent)	Konc.-intervall (viktprocent)
G	Butylerat hydroxitoluen (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05–0,15

4. Uppgifter om de olika kvaliteterna

Nedan anges koncentrationsintervallen för de fem olika beståndsdelarna i de tre olika kvaliteterna:

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

7.5. Mineraler

Ett mineral definieras som en blandning av oorganiska beståndsdelar som återfinns i jordskorpan, med en karakteristisk uppsättning av kemiska sammansättningar, kristallina former (från högkristallina till amorfa) och fysikalisk-kemiska egenskaper.

Mineraler undantas från registrering om de motsvarar definitionen för ett ämne som förekommer i naturen (artikel 3.39 i Reach) och om de inte är kemiskt modifierade (artikel 3.40 i Reach). Detta gäller för mineraler vilkas kemiska struktur kvarstår oförändrad, även om de har genomgått en kemisk process eller behandling eller en fysikalisk mineralogisk omvandling, exempelvis för att avlägsna föroreningar.

Även om vissa mineraler kan beskrivas entydigt genom sin kemiska sammansättning (se kapitel 4.2.1 och 4.2.2 för ämnen med en beståndsdel och ämnen med flera beståndsdelar) är inte enbart den kemiska sammansättningen tillräcklig för att entydigt identifiera dessa ämnen (se kapitel 4.2.3).

I motsats till andra ämnen med en eller flera beståndsdelar kan identifieringen av många mineraler bygga på kemisk sammansättning *och* inre struktur (som t.ex. visas genom röntgendiffraktion), eftersom dessa tillsammans representerar mineralens grunddrag och avgör dess fysikalisk-kemiska egenskaper.

Som för andra ämnen med flera beståndsdelar ska mineralets CAS-nummer användas som en del av identifieringen (dvs. blandningen av oorganiska beståndsdelar). De oorganiska beståndsdelarnas CAS-nummer (enligt systematisk mineralogi) används när de olika beståndsdelarna ska beskrivas. Om en enskild oorganisk beståndsdel tillverkas (ett ämne med en beståndsdel) ska ämnets CAS-nummer användas för identifieringen av ämnet. Till exempel:

- Mineralet kaolin (Einecs: 310-194-1, CAS-nr: 1332-58-7) består huvudsakligen av primär och sekundär kaolinit (Einecs: 215-286-4, CAS-nr: 1318-74-7) som är en hydratiserad

aluminiumsilikatlera.

I det fall en raffineringprocess skulle tillämpas på kaolin för att tillverka en enskild beståndsdel av kaolon, t.ex. kaolinit, skulle ämnets CAS-/Einecs-nummer vara Einecs: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Mineraliet bentonit (Einecs: 215-108-5, CAS-nr: 1302-78-9) som beskrivs i Einecs som "en kolloidal lera, består främst av montmorillonit" innehåller en stor andel av den oorganiska beståndsdelen montmorillonit (Einecs: 215-288-5, CAS-nr: 1318-93-0) men inte enbart.

I det fall rent montmorillonit (Einecs: 215-288-5, CAS-nr: 1318-93-0) skulle tillverkas ska det CAS-nummer som används för identifiering av ämnet vara det för montmorillonit.

Observera att bentonit (Einecs: 215-108-5, CAS-nr: 1302-78-9) och montmorillonit (Einecs: 215-288-5, CAS-nr: 1318-93-0) inte betraktas som identiska ämnen.

Sammanfattningsvis namnges alltså ett mineral i allmänhet efter sin(a) oorganiska beståndsdel(ar), i kombination. De kan betraktas som ämnen med en eller flera beståndsdelar (allmän vägledning i kapitel 4.2.1 och 4.2.2). Vissa mineraler kan inte enbart beskrivas genom sin kemiska sammansättning utan för dessa krävs ytterligare fysikalisk karakterisering eller processparametrar som tillräckligt underlag för identifiering (se kapitel 4.2.3). I följande tabell presenteras några exempel.

Exempel på mineraler

Namn	CAS	Einecs	Ytterligare beskrivning
Kristobalit	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (kristallstruktur: kubisk/tetragonal)
Kvarts	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (kristallstruktur: trigonal/hexagonal)
Kiselgur	61790-53-2	-	Även känd som diatomit, kiselgur och celit Beskrivning: Ett mjukt kiseldioxidhaltigt fast ämne som består av skelett från små förhistoriska vattenväxter. Innehåller huvudsakligen kiseldioxid.
Dolomit	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Fältspat (mineralgrupp)	68476-25-5	270-666-7	Ett oorganiskt ämne som utgör reaktionsprodukten från kalcinering vid hög temperatur, där aluminiumoxid, bariumoxid, kalciumoxid, magnesiumoxid, kiseloxid och strontiumoxid i varierande mängder är homogent och joniskt utspridda för att bilda en kristallin matris.
Talk	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Vermikulit	1318-00-9	-	(Mg _{0.33} [Mg ₂₋₃ (Al ₀₋₁ Fe ₀₋₁) ₀₋₁](Si _{2.33-3.33} Al _{0.67-1.67})(OH) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O)

Analytisk information som krävs för mineraler

Grundämnessammansättning	Den kemiska sammansättningen ger en total översikt över mineralets sammansättning, oavsett antalet beståndsdelar och deras proportioner i mineralet. Enligt konvention uttrycks den kemiska sammansättningen med avseende på oxider.
Spektraldata (röntgendiffraktion eller liknande)	Mineraler kan identifieras med utgångspunkt från deras kristallografiska struktur med röntgendiffraktion eller andra tekniker. De karakteristiska topparna från röntgendiffraktion eller infraröd spektroskopi som ger en identifiering av mineralet bör anges tillsammans med en kort beskrivning av analysmetoden eller litteraturreferens.
Typiska fysikalisk-kemiska egenskaper	Mineraler har karakteristiska fysikalisk-kemiska egenskaper som möjliggör en fullständig identifiering, t.ex. <ul style="list-style-type: none"> – mycket låg hårdhet, – svällförmåga, – diatomitformer (optisk mikroskopi), – mycket hög densitet, – ytarea (kväveadsorption)

7.6. Eterisk olja från från Lavandin grosso

Eteriska oljor är ämnen som utvinns från växter. Därför kan eteriska oljor också karakteriseras som ämnen med botaniskt ursprung.

I allmänhet är ämnen med botaniskt ursprung komplexa naturliga ämnen som utvunnits genom bearbetning av en växt eller dess delar genom en behandling som extraktion, destillation, pressning, fraktionering, rening, koncentrerings eller fermentation. Dessa ämnens sammansättning varierar beroende på släkte, art, odlingsförhållanden och källornas skördeperioder samt de processtekniker som används.

Eteriska oljor skulle kunna definieras av sina huvudbeståndsdelar som är brukligt för ämnen med flera beståndsdelar. Eteriska oljor kan emellertid innehålla flera hundra beståndsdelar, vilka kan variera åtskilligt beroende på många faktorer (t.ex. släkte, arter, odlingsförhållanden, skördeperiod och använda processer). Därför räcker det oftast inte med en beskrivning av huvudbeståndsdelarna för att beskriva dessa UVCB-ämnen. De eteriska oljorna ska beskrivas genom växtens ursprung och bearbetningsprocessen, såsom beskrivs i kapitel 4.3.1 (utgående från UVCB-deltyp 3).

I många fall finns det tillgång till industristandarder för eteriska oljor (för många eteriska oljor även ISO-standarder). Uppgifter om standarder kan också anges. Identifieringen av ämnet ska dock grundas på ämnet i tillverkad form.

I nedanstående exempel behandlas "eterisk olja från Lavandin grosso" för vilken det finns en ISO-standard (ISO 8902-1999).

1. Namn och andra identitetsbeteckningar

Källa

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

Process

Beskrivning av (bio-)kemiska reaktionsprocesser som används för tillverkning av ämnet:

Vattenångdestillation av blomskott från *Lavandula hybrida grosso* (Lamiaceae) och efterföljande avskiljning av vattnet från den eteriska oljan.

Den efterföljande avskiljningen är en spontan, fysikalisk process som vanligen äger rum i en avskiljare (en så kallad "rundkolv") som underlättar isolering av den separerade oljan. Temperaturen är vid detta stadium i destillationsprocessen omkring 40 °C.

Namn

IUPAC-namn eller andra internationella kemiska namn	Eterisk olja från <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
EG-nummer EG-namn EG-beskrivning	297-385-2 Lavendel, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extrakt Extrakt och deras fysikaliskt modifierade derivat såsom tinkturer, "concreter", "absoluter", eteriska oljor, gummiheartser, terpener, terpenfria fraktioner, destillat, restprodukter osv., vilka utvinnes från <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³¹ .
CAS-nummer CAS-namn	93455-97-1 Lavendel, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extrakt

³¹ "Labiatae" och "Lamiaceae" är synonymer.

2. Uppgifter om sammansättning – kända beståndsdelar

Kända beståndsdelar					
	Kemiskt namn EG CAS IUPAC Övrigt	Nummer EG CAS	Mol.- formel Hill- metoden	Typisk konc. (viktproc ent)	Konc.- intervall (viktproc ent)
A	EC linalylacetat CAS 1,6-oktadien-3-ol, 3,7- dimetyl-, acetat IUPAC 3,7-dimetyl-okta-1,6-dien-3- yl acetat	EC 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28–38
B	EC linalol CAS 1,6-oktadien-3-ol, 3,7- dimetyl- IUPAC 3,7-dimetyl-okta-1,6-dien-3- ol	EC 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24–35
C	EC Bornan-2-on CAS Bicyklo[2.2.1] heptan-2-on, 1,7,7-trimetyl- IUPAC 1,7,7-trimetylbicyklo[2.2.1]- 2-heptanon Övrigt kamfer	EC 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6–8
D	EC Cineol CAS 2-oxabicyklo [2.2.2]oktan, 1,3,3-trimetyl- IUPAC 1,3,3-trimetyl-2- oxabicyklo[2.2.2]oktan Övrigt 1,8-cineol	EC 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4–7

E	EC P-ment-1-en-4-ol CAS 3-cyklohexen-1-ol, 4-metyl-1-(1-metyletyl)- IUPAC 1-(1-metyletyl)-4-metyl-3-cyklohexen-1-ol Övrigt terpinen-4-ol	EC 209-235-5 CAS 562-74-3	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5-5
F	EC 2-Isopropenyl-5-metylhex-4-enyl acetat CAS 4-hexen-1-ol, 5-metyl-2-(1-metyletenyl)-, acetat IUPAC 2-(1-metyletenyl)-5-metylhex-4-en-1-ol Övrigt (±)-Lavandulolacetat	EC 247-327-7 CAS 25905-14-0	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5-3
G	EC DL-borneol CAS Bicyklo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimetyl-, (1R,2S,4R)-rel- IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetyl bicyklo[2.2.1]heptan-2-ol Övrigt borneol	EC 208-080-0 CAS 507-70-0	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5-3
H	EC Karyofyllen CAS Bicyklo[7.2.0]undek-4-en, 4,11,11-trimetyl-8-metylen-, (1R,4E,9S)- IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimetyl-8-metylenbicyklo[7.2.0]undek-4-en Övrigt trans-beta-karyofyllen	EC 201-746-1 CAS 87-44-5	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1-2,5
I	EC (E)-7,11-dimetyl-3-metylendodeka-1,6,10-trien CAS 1,6,10-dodekatrien, 7,11-dimetyl-3-metylen-, (6E)- IUPAC (E)-7,11-dimetyl-3-metylen-1,6,10-dodekatrien Övrigt trans-beta-farnesen	EC 242-582-0 CAS 18794-84-8	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2-2

J	EC (R)-p-menta-1,8-dien CAS cyklohexen, 1-metyl-4-(1-metyletenyl)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-metyl-4-(1-metyletenyl)cyklohexen Övrigt limonen	EC 227-813-5 CAS 5989-27-5	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5–1,5
K	EC 3,7-dimetylokta-1,3,6-trien CAS 1,3,6-oktatrien, 3,7-dimetyl- IUPAC 3,7-dimetylokta-1,3,6-trien Övrigt cis-beta-ocimen	EC 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5–1,5

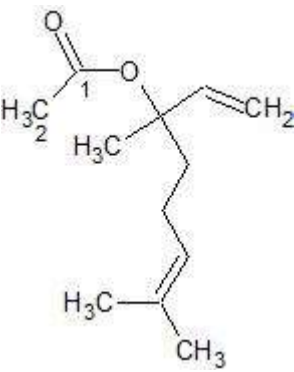
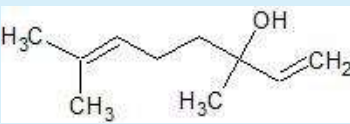
Kända beståndsdelar ≥10 %

Kända beståndsdelar		
	EG-namn	EG-beskrivning
A	linalylacetat C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	linalol C ₁₀ H ₁₈ O	

Kända beståndsdelar

	CAS-namn	Besläktade CAS-nummer
A	linalylacetat C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linalol C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Kända beståndsdelar

	Molekylformel CAS-metod	Strukturformel	Smiles-notation
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Kända beståndsdelar

	Molekylvikt	Molekylviktsintervall
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Krysantemumolja och isomerer som isoleras från denna

Ett företag tillverkar en krysantemumolja som extraheras efter att blommorna och bladen från *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae krossats i ett lösningsmedel bestående av en blandning av vatten och etanol (1:10). Efter extraktionen avlägsnas lösningsmedlet och det "rena" extraktet raffinerar i ytterligare steg som leder fram till den slutliga krysantemumoljan.

Dessutom isoleras isomererna från extraktet i form av en reaktionsblandning av:

jasmolin I

(cyklopropankarboxylsyra, 2,2-dimetyl-3-(2-metyl-1-propenyl)-, (1S)-2-metyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyklopenten-1-yl-ester, (1R,3R)-; CAS-nummer 4466-14-2) och

jasmolin II

(cyklopropankarboxylsyra, 3-[(1E)-3-metoxi-2-metyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-dimetyl-, (1S)-2-metyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyklopenten-1-yl-ester, (1R,3R)-; CAS-nummer 1172-63-0.

Dessutom beslutade företaget att även syntetisera den isomera reaktionsblandningen av jasmolin I och II.

Företaget ställer då följande frågor:

1. Hur identifierar man krysantemumoljan för registreringsändamål?
2. Omfattar registreringen av oljan även reaktionsblandningen av de isolerade isomererna jasmolin I och II?
3. Kan den syntetiska blandningen av de två isomererna betraktas som identisk med blandningen av de isomerer som isolerats från krysantemumolja?

1. Hur identifierar man krysantemumoljan för registreringsändamål?

Krysantemumolja betraktas som ett UVCB-ämne som inte enbart kan identifieras genom sin kemiska sammansättning (se kapitel 4.3 för utförlig vägledning). Andra identifieringsparametrar som källa och process är nödvändiga. Krysantemumolja har biologiskt ursprung och bör identifieras via de arter och den del av den organism som den utvunnits från samt via raffineringprocessen (extraktion med lösningsmedel). Den kemiska sammansättningen och beståndsdelarnas identitet ska dock anges så långt det är möjligt.

Följande uppgifter anses nödvändiga för tillräcklig identifiering av ämnet:

Ämnets namn	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae;olja som utvinns från krossade blommor och blad genom extraktion med vatten:etanol (1:10).
Källa	
Släkte, art, underart	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae
Växtedel som oljan utvunnits från	Blommor och blad

Process				
Tillverkningsmetod	Krossning följt av extraktion			
Extraktionsmedel	Vatten:etanol (1:10)			
Uppgifter om sammansättning – kända beståndsdelar i viktprocent				
Beståndsdelens namn	EG-nummer	CAS-nummer	Lägstakonc. (%)	Högsta konc. (%)
Pyretrin I: 2-metyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-krysantemat	204-455-8	121-21-1	30	38
Pyretrin II: 2-metyl-4-oxo-3- (penta-2,4-dienyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-3-(3-metoxi-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimetylcyklopropankarboxylat	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerin I: 3-(but-2-enyl)-2-metyl-4-oxocyklopent-2-enyl 2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropankarboxylat	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerin II: 3-(but-2-enyl)-2-metyl-4-oxocyklopent-2-enyl 2,2-dimetyl-3-(3-metoxi-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropankarboxylat	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolin I: (2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-di metyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropankarboxylat)	uppgift saknas	4466-14-2	4	10

Jasmolin II 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklo pent-2-en-1-yl[1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]- 2,2-dimetyl-3- (3-metoxi-2-metyl-3- oxoprop-1- enyl)cyklopropankarboxylat	uppgift saknas	1172-63-0	4	10
Dessutom innehåller ämnet upp till 40 beståndsdelar med en koncentration under 1 %.				

Man kan också överväga att identifiera ämnet som ett väldefinierat ämne med flera beståndsdelar, i det här fallet sex huvudbeståndsdelar (reaktionsblandning av pyretrin I, pyretrin II, cinerin I, cinerin II, jasmolin I och jasmolin II).

Ämnet skulle betraktas som ett "naturligt förekommande ämne" om tillverkningsprocessen endast skulle omfatta "krossning" och skulle vara undantaget från registreringsplikten, såvida det inte uppfyllde kriterierna för klassificering som farligt enligt direktiv 67/548/EEG.

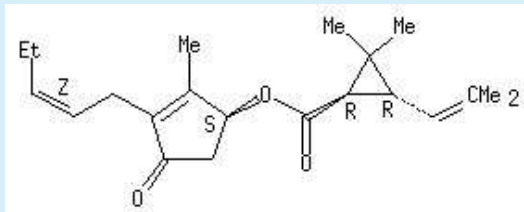
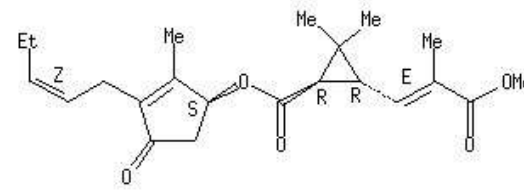
2. Omfattar registreringen av oljan även reaktionsblandningen av de isolerade isomererna jasmolin I och II?

Reaktionsblandningen av de isolerade isomererna jasmolin I och II omfattas inte av registreringen av "*Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, olja" eftersom enstaka beståndsdelar inte omfattas av hela UVCB-ämnet och omvänt. Reaktionsblandningen av jasmolin I och II betraktas som ett annat ämne.

Reaktionsblandningen av jasmolin I och II kan betraktas som ett ämne med flera beståndsdelar (i kapitel 4.2.3 ges närmare vägledning) i det här fallet två huvudbeståndsdelar.

Följande uppgifter anses nödvändiga för tillräcklig identifiering av ämnet:

Ämnets IUPAC-namn	Reaktionsblandning av (2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di metyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropankarboxylat) och (2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-en-1-yl[1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxi-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropankarboxylat)			
Övriga namn	Reaktionsblandning av jasmolin I och jasmolin II			
Ämnets renhetsgrad	95–98 viktprocent			
Uppgifter om sammansättning – huvudbeståndsdelar i viktprocent				
Beståndsdelens namn	EG-nummer	CAS-nummer	Lägstakonc. (%)	Högstakonc. (%)

Jasmolin I: (2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropankarboxylat)	uppgift saknas	4466-14-2	40	60
Molekylformel				
Strukturformel Molekylvikt		$C_{22}H_{30}O_5$ M = 374 g/mol		
Jasmolin II 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxi-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropankarboxylat	uppgift saknas	1172-63-0	35	65
Molekylformel				
Strukturformel Molekylvikt		$C_{21}H_{30}O_3$ M = 330 g/mol		

3. Kan den syntetiska blandningen (reaktionsblandningen) av de två isomererna betraktas som identisk med blandningen av de isomerer som isolerats från krysantemumoljan?

För kemiskt väldefinierade ämnen som beskrivs i tillräcklig utsträckning av sina beståndsdelar har det ingen betydelse om ämnet isolerats från ett extrakt eller syntetiserats genom en kemisk process. Därför kan den syntetiserade reaktionsblandningen av jasmolin I och jasmolin II betraktas som identisk med den isomerblandning som isolerats från krysantemumoljan även om de utvunnits genom olika tillverkningsprocesser, förutsatt att blandningarna har samma renhetsgrad och att deras huvudbeståndsdelar har samma koncentrationsintervall.

4. Slutsats

Två ämnen har identifierats:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, olja som utvinns från krossade blommor och blad genom extraktion med vatten:etanol (1:10).

2. Reaktionsblandning av isomererna jasmolin I och jasmolin II, oberoende av den process som används för tillverkning av ämnet.

Om ovannämnda ämnen *enbart* skulle användas som växtskydds- och biocidprodukter skulle de anses vara registrerade i enlighet med Reach (artikel 15).

7.8. Fenol, isopropylerad, fosfat

Fenol, isopropylerad, fosfat (3:1) är ett UVCB-ämne där variationerna hos den isopropylerade enheten inte kan definieras fullt ut.

1. Namn och andra identitetsbeteckningar

IUPAC-namn eller andra internationella kemiska namn	Fenol, isopropylerad, fosfat (3:1)
Övriga namn:	Fenol, isopropylerad, fosfat Fenol, isopropylerad, fosfat (3:1) (baserad på ett molförhållande mellan propylen och fenol på 1:1)
EG-nummer EG-namn EG-beskrivning	273-066-3 Fenol, isopropylerad, fosfat (3:1) /
CAS-nummer CAS-namn	68937-41-7 Fenol, isopropylerad, fosfat (3:1)

2. Uppgifter om sammansättning – huvudbeståndsdelar

Huvudbeståndsdelar					
IUPAC-namn	CAS-nummer	EG-nummer	Mol.-formel Hill-metoden	Typisk konc. (viktprocent)	Konc.-intervall (viktprocent)
Fenol, isopropylerad, fosfat (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Ej angivet		

Huvudbeståndsdelar	
EG-namn	EG-beskrivning
Fenol, isopropylerad, fosfat (3:1)	/
CAS-namn	CAS-nummer
Fenol, isopropylerad, fosfat (3:1)	68937-41-7

7.9. Kvartära ammoniumföreningar

Ett företag syntetiserar följande ämnen:

Ämne A

Kvartära ammoniumföreningar, di-C₁₀₋₁₈-alkyldimetyl, klorider

EG-nummer 294-392-2

CAS-nummer 91721-91-4

Fördelning av kolkedjelängder:

C ₁₀	10 %
C ₁₁	5,5 %
C ₁₂	12 %
C ₁₃	7,5 %
C ₁₄	18 %
C ₁₅	8 %
C ₁₆	24 %
C ₁₇	7 %
C ₁₈	8 %

Ämne B

Kvartära ammoniumföreningar, dikokosalkyldimetyl, klorider

EG-nummer 263-087-6

CAS-nummer 61789-77-3

Företaget känner inte till ämnets exakta sammansättning.

Ämne C

Didodecyldimetylammonuimbromid

Ämne D

Didodecyldimetylammoniumklorid

Ämne E

Ämne E tillverkas som en reaktionsblandning av didodecyldimetylammoniumbromid och didodecyldimetylammoniumklorid (reaktionsblandning av ämne C och D).

Ämne F

Kvartära ammoniumföreningar, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimetylammonium, klorider
(Einecs-nummer 268-072-8).

CAS-nummer 68002-59-5

Fördelning av kolkedjelängder:

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

Ämne G

Kvartära ammoniumföreningar, di-C₁₀₋₁₈-alkyldimetyl, klorider

Fördelning av kolkedjelängder (ett enkelt primtecken betecknar en dubbelbindning och ett dubbelt primtecken en trippelbindning):

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 %

För närvarande använder företaget endast ämne B (kvartära ammoniumföreningar, dikokosalkyldimetylklorider, EG-nummer 263-087-6 och CAS-nummer 61789-77-3) som beteckning eftersom den passar bäst till alla ämnena (ämnena A till G). Företaget undrar om det är möjligt att låta alla ämnena (A till G) omfattas av en registrering av ämne B.

1. Allmänna anmärkningar

Kolväten (alkaner, alkener) som härrör från fetter och oljor eller syntetiska substitut identifieras genom sin kolkedjefördelning eller sitt ursprung (alkyldeskriptor), genom en funktionell grupp (funktionalitetsdeskriptor), t.ex. ammonium, och anjon/katjon (saltdeskriptor), t.ex. klorid. Kedjelängdsfördelningen, t.ex. C₈₋₁₈, avser

mättad

linjär (ogrenad)

alla koltal, inklusive (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁, ..., C₁₈), samtidigt som en smal fördelning inte omfattar en bredare fördelning och omvänt.

I annat fall kan den anges på följande sätt:

omättad (C₁₆ omättad)

grenad (C₁₀ grenad)

jämnt antal kolatomer (C₁₂₋₁₈ jämnt antal kolatomer)

Kolkedjor som beskrivs genom källan måste omfatta den kolkedjefördelning som källan har, t.ex. talgalkylaminer.

Talgalkylaminer är till 99 % primära alkylaminer med linjära kedjor med följande fördelning av kolkedjelängder (Ullmann, 1985) [ett enkelt primecken betecknar en dubbelbindning och ett dubbelt primecken en trippelbindning]:

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

2. Hur identifierar man ämnen för registreringsändamål?

Varje ämne jämförs med ämne B (som hittills använts för namngivning) i syfte att besluta om de två ämnena kan betraktas som identiska.

Jämförelse mellan ämne A och B

Följande fördelning av kolkedjelängder kan påvisas för "kokos" (Ullmann, 1985) [ett enkelt primecken betecknar en dubbelbindning och ett dubbelt primecken en trippelbindning]:

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

Således avviker kedjelängdsfördelningen för ämne A från kedjelängdsfördelningen för "kokos"-ämnet B. Eftersom de båda ämnenas sammansättningar avviker betydligt från varandra ur både kvalitativ och kvantitativ synvinkel kan de inte betraktas som identiska.

Jämförelse mellan ämne B och C

Ämne B, "kvartära ammoniumföreningar, dikokosalkyldimetyl, klorider" utgör en blandning av beståndsdelar med olika kolkedjelängder (C₆ till C₁₈ med jämnt antal kolatomer, linjära, mättade och omättade), medan ämne C endast utgörs av en beståndsdel med en definierad och mättad kolkedjelängd (C₁₂) med en annan anjon (bromid). Därför kan inte ämne C betraktas som identiskt med ämne B.

Jämförelse mellan ämne B och D

Ämne B, "kvartära ammoniumföreningar, dikokosalkyldimetyl, klorider" utgör en blandning av beståndsdelar med olika kolkedjelängder (C₆ till C₁₈ med jämnt antal kolatomer, linjära, mättade och omättade), medan ämne D endast utgörs av en beståndsdel med en definierad och mättad kolkedjelängd (C₁₂) och samma anjon (klorid). Ämne B och D har olika namn och kan inte betraktas som identiska, eftersom en enda beståndsdel inte omfattas av en blandning innehållande en viss beståndsdel och omvänt.

Jämförelse mellan ämne B och E

Ämne E är en blandning av ämnena C och D. Båda har en mättad C₁₂-kedjelängd, men de har olika anjoner (bromid och klorid). Ämne B, "kvartära ammoniumföreningar, dikokosalkyldimetyl, klorider" utgör en blandning av beståndsdelar med olika kolkedjelängder (C₆ till C₁₈ med jämnt antal kolatomer, linjära, mättade och omättade) och med klorid som anjon. Ämne E utgörs dock endast av kolkedjelängden C₁₂ med bromid som ytterligare anjon. Därför kan inte ämnena B och E betraktas som identiska. Följaktligen måste ämne E registreras separat.

Jämförelse mellan ämne B och F

Ämne F, "kvartära ammoniumföreningar, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimetylammonium, klorider" utgör en blandning av beståndsdelar med olika kolkedjelängder (C₁₄ till C₁₈ med jämnt och udda antal kolatomer, linjära och mättade). Ämne F skiljer sig från ämne B när det gäller

sammansättning och intervall för kedjelängdsfördelningen. Ämne F har en small kedjelängdsfördelning och dessutom innehåller det C₁₅- och C₁₇-kolkedjor. Därför kan inte ämnena B och F betraktas som identiska.

Jämförelse mellan ämne B och G

Ämnena B och G förefaller vara mycket likartade, eftersom kedjelängdsfördelningen ligger i nästan samma intervall. Men ämne G innehåller dessutom kolkedjelängderna C₄, C₂₀ och C₂₂. Fördelningen av kolkedjelängder för ämne G omfattar ett bredare intervall än intervallet för ämne B. Därför kan inte ämnena B och G betraktas som identiska.

3. Slutsats

Kolväten (alkaner, alkener) kan endast betraktas som identiska om alla tre deskriptorerna (alkyl-, funktionalitets- och saltdeskriptorn) är desamma.

I ovannämnda exempel skiljer sig deskriptorerna hela tiden från varandra. Därför kan inte ämnena omfattas av en enda registrering av ämne B.

7.10. Oljederivat

Med utgångspunkt från vägledningen om särskilda UVCB-ämnena i kapitel 4.3.3.2 har två exempel lagts till.

7.10.1. Bensinkomponentsflöde (C4-C12)

1. Namn och andra identitetsbeteckningar

Namn

IUPAC-namn eller andra internationella kemiska namn	Nafta (petroleum), katalytiskt reformerad
--	---

Källa

Identifiering eller beskrivning av flödeskälla	Råolja
---	--------

Process

Beskrivning av raffineringsprocessen	Katalytisk reformering
Kolkedjeintervall	C4–C12
Kokpunktsintervall eller gränsvärden	30 °C till 220 °C

Andra fysikaliska egenskaper, t.ex. viskositet	under 7 mm ² /s vid 40 °C (viskositet)
EG-nummer	273-271-8
CAS-nummer	68955-35-1
EG-namn/CAS-namn	Nafta (petroleum), katalytiskt reformerad
EG-beskrivning/CAS-beskrivning	En sammansatt blandning av kolväten som utvunnits genom destillation av produkter från en katalytisk reformeringsprocess. Den består av kolväten, främst C4 till C12, med ungefärligt kokpunktsintervall från 30 °C till 220 °C (90 °F till 430 °F). Den innehåller en relativt stor andel aromatiska och grenade kolväten. Detta flöde kan innehålla 10 volymprocent bensen eller mer.

2. Uppgifter om sammansättningen

Kända beståndsdelar			
IUPAC-namn	CAS-nummer	EG-nummer	Konc.-intervall (viktprocent)
Bensen	71-43-2	200-753-7	1–10
Toluen	108-88-3	203-625-9	20–25
Xylen	1330-20-7	215-535-7	15–20

7.10.2. Gasoljor (petroleum)

1. Namn och andra identitetsbeteckningar

IUPAC-namn eller andra internationella kemiska namn	Gasoljor (petroleum), tunga atmosfäriska
--	--

Källa

Identifiering eller beskrivning av flödeskälla	Råolja
---	--------

Process

Beskrivning av raffineringsprocessen	Atmosfärisk destillation
Kolkedjeintervall	C7–C35
Kokpunktsintervall eller gränsvärden	121 °C till 510 °C
Andra fysikaliska egenskaper, t.ex. viskositet	under 2 mm ² /s vid 40 °C (viskositet)
EG-nummer CAS-nummer EG-namn/CAS-namn EG-beskrivning/CAS-beskrivning	272-184-2 68783-08-4 Gasoljor (petroleum), tunga atmosfäriska En sammansatt blandning av kolväten som utvunnits genom destillation av produkter av råolja. Den består av kolväten, främst C7 till C35, med ungefärligt kokpunktsintervall från 121 °C till 510 °C (250 °F till 950 °F).

2. Kemisk sammansättning

Uppgifter saknas.

7.11. Enzymer

Med utgångspunkt från vägledningen om särskilda UVCB-ämnen i kapitel 4.3.2.3 ges två exempel på enzymkoncentrat: subtilisin (som identifieras med hjälp av IUBMB-nomenklaturen + andra beståndsdelar) och α -amylas (som identifieras med hjälp av IUBMB-nomenklaturen + produktionsorganismen).

7.11.1. Subtilisin

Enzymprotein	Subtilisin
IUBMB-nummer	3.4.21.62

Namn som tilldelats av IUBMB (Systematiskt namn, enzymnamn, synonymer)	Subtilisin; alkalas; alkalas 0.6L; alkalas 2.5L; ALK-enzym; bacillopeptidas A; bacillopeptidas B; biopraser, ett alkaliskt proteas från <i>Bacillus subtilis</i> ; biopraser AL 15; biopraser APL 30; kolistinas; (se även kommentarer); subtilisin J; subtilisin S41; subtilisin Sendai; subtilisin GX; subtilisin E; osv.
Kommentarer från IUBMB	Subtilisin är ett serinendopeptidas, typexempel på peptidase family S8 . Det innehåller inte några cysteinrester (även om sådana finns i homologa enzymer). Artvarianter innefattar subtilisin BPN' (även subtilisin B, subtilopeptidas B, subtilopeptidas C, Nagarse, Nagarse-proteinas, subtilisin Novo, bakteriellt proteinas Novo) och subtilisin Carlsberg (subtilisin A, subtilopeptidas A, alkalas Novo). Tidigare EC 3.4.4.16 och införd i EC 3.4.21.14. Liknande enzymer tillverkas från olika stammar av <i>Bacillus subtilis</i> och andra <i>Bacillus</i> -arter [1,3].
Reaktion	Hydrolys av proteiner med bred specificitet för peptidbindningar och som är särskilt riktad mot en stor oladdad rest i P1. Hydrolyserar peptidamider.
Reaktionstyp	Hydrolaser Verkar på peptidbindningar (peptidaser) Serinendopeptidaser
EG-nummer	232-752-2
EG-namn	Subtilisin
CAS-nummer	9014-01-1
CAS-namn	Subtilisin
Koncentration av enzymprotein	26 %
Övriga beståndsdelar	

Övriga proteiner, peptider och aminosyror	39 %
Kolhydrater	11 %
Lipider	1 %
Oorganiska salter	23 %
Ytterligare parametrar	
Substrat och produkter	Proteiner eller oligopeptider, vatten peptider

7.11.2. α -amylas

Enzymprotein	α -amylas
IUBMB-nummer	3.2.1.1
Namn som tilldelats av IUBMB (Systematiskt namn, enzymnamn, synonymer)	1,4- α -D-glukan-glukanohydrolas glykogenas α -amylas alfa-amylas endoamylas Taka-amylas A
Kommentarer från IUBMB	Verkar på stärkelse, glykogen och besläktade polysackarider och oligosackarider på ett slumpartat sätt. Reducerande grupper frigörs i α -konfigurationen. Termen α avser den inledande anomera konfigurationen hos den fria sockergrupp som frigörs och inte konfigurationen hos den hydrolyserade bindningen.
Reaktion	Endohydrolys av 1,4- α -D-glukosidbindningar i polysackarider innehållande tre eller flera 1,4- α -bundna D-glukosenheter

Reaktionstyp	hydrolaser glykosidaser glykosidaser, dvs. enzymer som hydrolyserar O- och S-glykosylföreningar glykosylföreningar
EG-nummer	232-565-6
EG-namn	Amylas, α -
CAS-nummer	9000-90-2
Besläktade CAS-nummer	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (alla har raderats)
CAS-namn	Amylas, α -
Koncentration av enzymprotein	37 %
Övriga beståndsdelar	
Övriga proteiner, peptider och aminosyror	30 %
Kolhydrater	19 %
Oorganiska salter	14 %
Ytterligare parametrar	
Substrat och produkter	stärkelse; glykogen; vatten; polysackarid; oligosackarid;

Tillägg I – Vägledningsinstrument

Det här tillägget innehåller en förteckning över webbplatser, databaser och handböcker som kan göra det lättare att hitta lämpliga IUPAC-, CAS- och EG-namn, CAS- och EG-nummer, molekylformler och strukturformler, inklusive Smiles-notation och andra parametrar som behövs för identifiering av ämnen. I tillägget finns inga kommersiella databaser och vägledningsinstrument.

Allmänt		
Ämnesidentifieringsparameter	Källa	Beskrivning av källan
U.S. Department of Health and Human Services	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	En samling databaser och verktyg som hjälper användarna att söka efter kemisk information
Perkin Elmer Informatics	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	En fristående databas som tillhandahåller kemiska strukturer, fysikaliska egenskaper och hyperlänkar till relevant information
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	http://accelrys.com/products/informati cs/	Kemisk programvara; Accord Alphabetical Product Listing (vedertagen alfabetisk produktförteckning)

Namn och andra identitetsbeteckningar

Ämnesidentifieringsparameter	Källa	Beskrivning av källan
IUPAC-namn	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	IUPAC:s officiella webbplats
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	IUPAC:s kemiska nomenklatur och rekommendationer (under ledning av IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Huvudsakliga utgåvor av IUPAC-nomenklatur, förväntad uppdatering 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Huvudsakliga utgåvor av IUPAC-nomenklatur, förväntad uppdatering 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Huvudsakliga utgåvor av IUPAC-nomenklatur, förväntad uppdatering juli 2005.
IUPAC-namn	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Huvudsakliga utgåvor av IUPAC-nomenklatur
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Introduktionsvolym som omfattar alla typer av föreningar
IUPAC-namn	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Kommersiellt datorstött namngivningsprogram som kan vara till hjälp vid namngivning av strukturer av måttlig komplexitet. De finns även gratisprogram för små molekyler (rekommenderade av IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	IUPAC:s nomenklatur för organisk kemi (rekommenderas av IUPAC)

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Fullständig förteckning över godkända trivialnamn och halvsystematiska grundnamn på organiska föreningar
	http://www.chemexper.com/	Målet med ChemExper Chemical Directory är att upprätta en allmän databas över kemikalier med fri åtkomst via internet. Databasen innehåller kemikalier och deras fysikaliska egenskaper. Alla kan lämna och hämta information med hjälp av en webbläsare
IUBMB-nomenklatur	http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/ or http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb/	IUBMB:s databas över kemisk nomenklatur (under ledning av IUBMB)
Övriga namn:	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Färgindex, generiska namn, internationellt färgindex, fjärde onlineutgåvan
	http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp	INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients), officiell webbplats för Personal Care Products Council (amerikansk branschorganisation som kontrollerar skönhets- och hudvårdsprodukter)
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	US EPA:s TSCA-förteckning över ämnen med varierande kolkedjelängder (alkylintervall med hjälp av CX-Y-notation)
Andra identitetsbeteckningar	http://www.cenorm.be	CE-regler, officiella webbplatsen för europeiska CE
EG-nummer	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	Sökning i EINECS, ELINCS, NLP och bilaga I till 67/548/EEG
CAS-nummer	http://www.cas.org	Officiell webbplats, CAS-registret
	http://www.chemistry.org	Officiell webbplats för American Chemical Society

Molekyl- och strukturformel

Ämnesiden tifieringspa rameter	Källa	Beskrivning av källan
Smiles	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html	Fri åtkomst till Smiles-generator
Molekylvikt och Smiles	http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html	Gratisprogrammet ACDChemsSketch (även kommersiellt tillgängligt)
Flera fysikalisk- kemiska egenskape r	http://www2.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ är en serie Windows®-baserade skattningsmodeller för fysikalisk-kemiska egenskaper och för omvandling, spridning och nedbrytning i miljön utvecklade av EPA:s Office of Pollution Prevention Toxics (kontor för förebyggande av föroreningar och giftiga ämnen) och Syracuse Research Corporation (SRC).

Tillägg II – Teknisk vägledning om de enskilda ämnesidentifieringsparametrarna

Informationen i detta tillägg är avsedd för de användare av vägledningsdokumentet som inte känner till de tekniska nomenklaturreglerna, hur olika registernummer används samt hur molekylär och strukturell information, spektraldata osv. ska uttryckas.

Här ges en viss allmän introduktion till området genom att huvudprinciperna sammanfattas och användarna hänvisas till de ursprungliga källorna för att få fullständig information.

Den här översikten är en förenklad version, varken fullständig eller uttömmande och inte tillräckligt utförlig för yrkesanvändare. Den ska under inga omständigheter betraktas som likvärdig med den officiella källan.

1 Namn enligt IUPAC-nomenklaturen eller annan internationell nomenklatur

Vid registreringen ska IUPAC-namnet eller ett annat väldefinierat, internationellt vedertaget namn på ämnet anges.

Ett IUPAC-namn bygger på den internationella kemiska standardnomenklaturen som fastställts av den internationella organisationen IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry (för lämplig hänvisning se tillägg I). IUPAC-nomenklaturen ger möjlighet att namnge kemiska ämnen på ett systematiskt sätt, både organiska och oorganiska ämnen. I IUPAC-nomenklaturen används prefix, suffix och infix för att beskriva typen av funktionella grupper i ämnet samt deras placering.

I exemplet penta-1,3-dien-1-ol är:

prefixet penta-1,3-

infixet **-di** och

suffixet **-ol**

en-är namnets grund, rotnamnet.

Reglerna har utvecklats under flera år och står under konstant utveckling för att man ska kunna hantera nya komponenter med olika typer av molekyler och eventuella motstridigheter eller sammanblandningar som har upptäckts. IUPAC-reglerna kan endast användas för väldefinierade ämnen.

En viss allmän vägledning ges nedan under strukturen för ett IUPAC-namn. Använd den vägledning som ges i kapitel 4 i detta vägledningsdokument för närmare upplysningar.

1.1 Organiska ämnen

Steg 1 Fastställ antalet C-atomer i den längsta sammanhängande kolatomkedjan. Detta antal bestämmer prefixet, den första delen, av rotnamnet:

Antal kolatomer	Rot
1	met-
2	et-
3	prop-
4	but-

5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	okt-
N

Steg 2 Fastställ kedjans mättnadsgrad, kedjans mättnadsgrad bestämmer suffixet, den andra delen, av rotnamnet:

Mättnadsgrad	Bindningar	Suffix
Omättad	Dubbel-Trippel-	-en -yn
Mättad	-	-an

När det gäller flera dubbel- eller trippelbindningar anges antalet bindningar med "mono", "di", "tri" osv. före suffixet.

Penten med 2 dubbelbindningar: pentadien

Steg 3 Sätt ihop prefix, suffix och tillägg med rotnamnet.

Observera: Triviala och halvsystematiska namn som är godkända av IUPAC kan också användas som rotnamn:

Bensen, toluen osv.

Steg 4 Använd nedanstående tabell:

- Fastställ substituenten och/eller funktionella grupper: kol- eller icke-kolinnehållande grupper som är bundna till kolatomkedjan som fastställdes i punkt 1.
- Bestäm rangordningen för substituenterna och/eller de funktionella grupperna.
- Lägg till suffixet för den första substituenten/funktionella gruppen och alla efterföljande sådana i rangordning.
- Lägg till prefixen för de övriga substituenterna och funktionella grupperna i alfabetisk ordning.

Rangordning	Grupp	Formel	Suffix	Prefix
1	Karboxylsyra	R-COOH	-syra	Karboxi
2	Ester	R-CO-O-R	-oat	-

3	Amid	R-CONH ₂	-amid	Karbamoyl
4	Cyanid	R-CN	-nitril	Cyano
5	Aldehyd	R-CHO	-al	Oxo
6	Keton	R-CO-R	-on	Oxo
7	Alkohol	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Tiol	R-SH	-tiol	Sulfanyl
9	Amin	R-NH ₂	-amin	Amino

1.2 Oorganiska ämnen

1.2.1 Namngivning av enkla oorganiska ämnen

Namngivningen av oorganiska ämnen bygger på en uppsättning regler (IUPAC:s Red Book, se hänvisningen i 7.1), av vilka de mest grundläggande visas nedan:

- 1 Enatomiga anjoner namnges med suffixet -id.

O²⁻ benämns oxid

- 2 Vid namngivning av enkla jonföreningar anges katjonen först och därefter anjonen. För katjoner med laddningar >1 skrivs laddningarna med romerska siffror i parenteser direkt efter grundämnets namn:

Cu²⁺ benämns koppar(II)

- 3 Vid namngivning av hydrater anges först jonföreningen följt av ett numeriskt prefix samt -hydrat. De numeriska prefixen är mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, okta-, nona-, deka-:

CuSO₄ · 5H₂O benämns koppar(II) sulfatpentahydrat

Observera: För registreringsändamål betraktas hydrater, och i förekommande fall den vattenfria formen, av ett särskilt metallsalt som "identiska ämnen".

- 4 Oorganiska molekykföreningar namnges med ett prefix (se hydrater) före varje grundämne. Det mer elektronegativa grundämnet placeras sist, med suffixet -id:

CO₂ benämns koldioxid och CCl₄ koltetraklorid

- 5 Syror namnges efter den anjon som bildas när syran löses upp i vatten. Det finns flera möjligheter:

- a Om syran när den löses upp i vatten dissocieras till en anjon med namnet "x"-id, benämns syran hydro-"x"-syra:

hydroklorsyra (saltsyra) bildar en kloridanjon

- b Om syran när den löses upp i vatten dissocieras till en anjon med namnet "x"-at, benämns syran "x"-syra:

klorsyra dissocieras till kloratanjoner i vatten.

- c Om syran när den löses upp i vatten dissocieras till en anjon med namnet "x"-it, benämns syran "x"-syrlighet:

klorsyrlighet dissocieras till kloritanjoner

1.2.2 Namngivning av mineralfaser

Sammansatta mineralfaser innehåller i allmänhet tre eller flera grundämnen i kombination. De flesta av de grundämnena som förekommer kombineras med syre och för att förenkla identifieringen betraktar mineraloger vanligen de sammansatta föreningarna som uppbyggda av oxider, varav en del har basiska och andra sura egenskaper. När det gäller silikater är det exempelvis vanligt att låta dem representeras av antingen summan av ett antal oxider eller som salter av kiseltsyra eller aluminiumkiselhydrer. Följaktligen kan kalciumortosilikat representeras av $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$, en kombination av separata oxider, eller som Ca_2SiO_4 , kalciumsaltet av ortokiseltsyra H_4SiO_4 . Detsamma gäller för andra sammansatta mineraloxider. De benämns med ett prefix före varje oxid (t.ex. Ca_3SiO_5 = trikalciumsilikat = $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$). I vissa industrisektorer har ytterligare förenklingar skett för att förkorta de sammansatta formlerna. När det gäller Portlandcementklinker, förkortas $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ (kalciumortosilikat eller dikalciumsilikat) till C_2S , där C = CaO och S = SiO_2 . När sammansatta mineralfaser ska namnges eller identifieras bör standardtexter inom mineralogi eller från industrin konsulteras.

1.3 Naturprodukter och besläktade komponenter

IUPAC har tagit fram flera regler för systematisk namngivning av naturprodukter. I korthet innebär dessa att för ämnen som extraherats från en naturlig källa är namnet, så långt det är möjligt, grundat på familj, släkte eller art för den organism från vilken ämnet extraherats:

För ett hypotetiskt protein, *Hypothecalia Exemplare*, grundas namnen på *hypothecalia* och/eller *exemplare*, till exempel *Horse Exemplare*

I möjligaste mån ska namnet avspegla den kända eller sannolika fördelningen av naturprodukten. I tillämpliga fall skulle klassen eller ordningen också kunna användas som grund för namngivning av ett ämne som förekommer i ett antal besläktade familjer. Namnen på naturprodukter med okänd struktur ska inte innehålla några av de prefix, suffix och/eller infix som används inom nomenklaturen för organiska ämnen:

Kondensationsprodukt av *Horse exemplare*, *Valarine* adderad till N-änden

Många naturligt förekommande ämnen tillhör väldefinierade strukturklasser, där varje strukturklass kan karakteriseras av en uppsättning moderstrukturer som är närbesläktade, dvs. var och en kan härledas från en grundläggande struktur. De systematiska namnen på dessa naturligt förekommande ämnen och deras derivat kan byggas på namnet på en lämplig grundläggande moderstruktur:

Välkända moderstrukturer är alkaloider, steroider, terpenoider och vitaminer

En grundläggande moderstruktur ska utgöra det grundskelett som är gemensamt för de flesta ämnena i denna klass. Naturligt förekommande ämnen eller derivat namnges efter moderstrukturen med tillägg av prefix, suffix som betecknar

- modifieringar i skelettstrukturen
- utbyte av skelettatomer
- ändringar i det hydreringstillstånd som är underförstått genom moderstrukturens namn
- atomer eller grupper som substituerar väteatomerna i moderstrukturen

- konfigurationer som inte redan är underförstådda genom namnet på moderstrukturen eller som ändrats från dem som är underförstådda:

Tiaminklorid är också känd som vitamin B₁

Om det behövs utförligare information om systematisk namngivning av naturprodukter och besläktade ämnen bör IUPAC konsulteras (se tillägg 1).

1.4 Ämnen för vilka IUPAC-namn inte kan härledas

Om det inte är möjligt att ta fram ett IUPAC-namn för vissa ämnen kan andra internationellt vedertagna nomenklaturer som är speciellt utformade för dessa ämnen användas, t.ex.

- mineraler och malmer, mineralnamn
- oljederivat
- färgindex, generiska namn³
- oljetillsatser
- INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients), namngivning av skönhets- och hudvårdsprodukter⁴
- SDA (Soap and Detergent Association), namngivning av ytaktiva ämnen⁵
- osv.

2 Övriga namn

Alla relevanta namn och/eller allmänna identitetsbeteckningar under vilka ett ämne marknadsförs eller kommer att marknadsföras inom EU (t.ex. handelsnamn) bör lämpligen tas med i samband med registrering inom ramen för Reach. Däribland ingår handelsnamn, synonymer, förkortningar osv.

- <http://www.colour-index.com>, Colour Index International (internationellt färgindex, fjärde onlineutgåvan)
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, officiell webbplats för Personal Care Products Council
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, officiell webbplats för American Cleaning Institute (ACI).³

3 EG-nummer från EINECS, ELINCS eller NLP (EG-registret)

EG-numret, dvs. EINECS-, ELINCS- eller NLP-numret, är ämnets officiella nummer i EU. EG-numret kan erhållas genom officiella publikationer från EINECS, ELINCS och NLP samt från Europeiska kemikaliemyndigheten.

EG-numret är 7-siffrigt och av typen x₁x₂x₃-x₄x₅x₆-x₇. Den första siffran erhålls från den förteckning som ämnet tillhör.

Förteckning	Första siffran i EG-numret
EINECS	2 eller 3
ELINCS	4
NLP	5

4 CAS-nummer, CAS-namn

CAS (The Chemical Abstracts Service), del av ACS (the American Chemical Society), tilldelar ett CAS-namn och CAS-nummer till varje kemikalie som förs in i CAS-registrets databas. Namn och nummer tilldelas i turordning till unika ämnen som identifieras av CAS forskningspersonal. Varje ämne som registreras av Chemical Abstracts Service har ett namn enligt CAS-nomenklaturen, som ACS antar enligt rekommendationer från ACS nomenklaturkommitté (se hänvisningar i tillägg 1).

4.1 CAS-namn

CAS-namnet är det namn som tilldelas av Chemical Abstract Service och skiljer sig från IUPAC-namnet. CAS-nomenklaturen bygger på ett begränsat regelsystem som inte alltid är tillräckligt för att härleda ett ämnes namn. För att erhålla rätt CAS-namn rekommenderas därför i allmänhet att Chemical Abstract Service kontaktas.

I korthet gäller följande grundläggande regler för nomenklaturen:

- En "huvudsaklig" del av ämnet väljs ut som grundenhet eller moderenhet.
- Substituenterna räknas upp efter grundenheten/moderenheten, till vilken det hänvisas som omvänd ordning.
- När det förekommer många substituenten räknas de upp i alfabetisk ordning (inklusive prefix):

o-Xylen-3-ol betecknas som bensen, 1,2-dimetyl, 3-hydroxi

4.2 CAS-nummer

CAS-nummer kan erhållas från Chemical Abstract Service.

CAS-numret består av minst 5 siffror, uppdelat i tre delar, separerade av bindestreck. Den andra delen består alltid av 2 siffror, den tredje delen av 1 siffra:

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

För kontroll av CAS-numret finns en "kontrollsiffra":

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

CAS-numret måste överensstämma med kontrollsiffran.

5 Andra identitetskoder

Andra internationellt erkända identitetskoder kan också anges, t.ex.

- UN-nummer
- färgindexnummer
- färgämnesnummer

6 Molekylformel, strukturformel och Smiles

6.1 Molekylformel

I en molekylformel anges varje typ av grundämne genom sitt kemiska tecken och antalet atomer för varje sådant grundämne som återfinns i en diskret molekyl av ämnet.

Molekylformeln ska anges enligt det (sedvanliga) Hill-systemet och dessutom enligt CAS-systemet, i de fall detta skiljer sig från formeln enligt Hill-systemet.

Vid tillämpning av Hill-systemet utförs följande steg:

1. Identifiera grundämnena och notera de kemiska tecknen.
2. Ordna grundämnena i rätt ordningsföljd:
 - a. Kolinnehållande ämnen:

Varje grundämne anges genom sitt kemiska tecken i följande ordningsföljd:

(1) Kol

(2) Väte

(3) Övriga kemiska tecken i alfabetisk ordning:

Pentan: C₅H₁₂

Penten: C₅H₁₀

Pentanol: C₅H₁₂O

- b. Icke-kolinnehållande ämnen:

Varje grundämne anges i alfabetisk ordning:

Saltsyra: CLH

3. För varje grundämne med ett atomantal >1 ska antalet atomer anges med en nedsänkt siffra efter det kemiska tecknet.
4. Lägg till uppgifter som inte tillhör huvudstrukturen i slutet av molekylformeln, separerade med punkt eller komma:

Natriumbensoat betecknas som C₇H₆O₂, natriumsalt

Kopparsulfatdihydrat betecknas som CuO₄S·2H₂O

Om Hill-metoden inte kan tillämpas på ett ämne ska molekylformeln anges på annat sätt, till exempel som en empirisk formel, en enkel beskrivning av atomerna och det förhållande mellan atomerna som är tillgängligt eller den formel som tillhandahålls av Chemical Abstract Service (se kapitel 4 i vägledningsdokumentet).

6.2 Strukturformel

En strukturformel krävs för att det ska vara möjligt att åskådliggöra molekylernas placering i ämnesstrukturen och deras förhållande till varandra. Strukturformeln ska ange atomernas, jonernas eller gruppernas placering och karaktären hos de bindningar som förenar dem. Däribland ingår isomerism, dvs. cis/trans, kiralitet, enantiomerer osv.

Strukturformeln kan anges i olika format: som en molekylformel och/eller som ett strukturdiagram.

- *Strukturformel som en molekylformel*

1. Skriv ner alla grundämnen gruppvis och i den ordning de uppträder:

n-pentan: CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

2. Varje substituent skrivs inom parentes, direkt efter den atom till vilken den är bunden:

2-metylbutan: CH₃CH(CH₃)CH₂CH₃

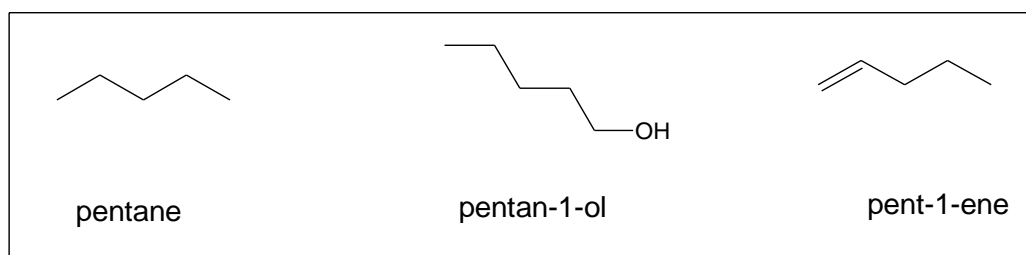
3. När det gäller dubbel- eller trippelbindningar ska de skrivas mellan de grupper av grundämnen som berörs:

pent-1-en: $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

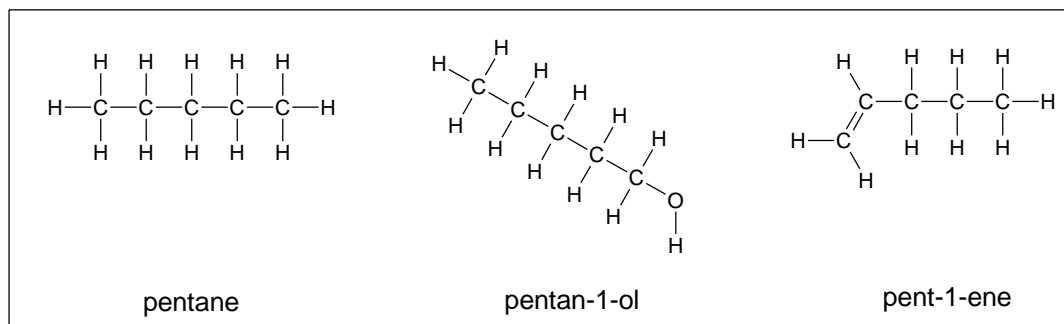
- Strukturformel som ett strukturdiagram

I ett strukturdiagram åskådliggörs grundämnena och bindningarna mellan grundämnena i en tvådimensionell eller tredimensionell bild. Det finns flera metoder:

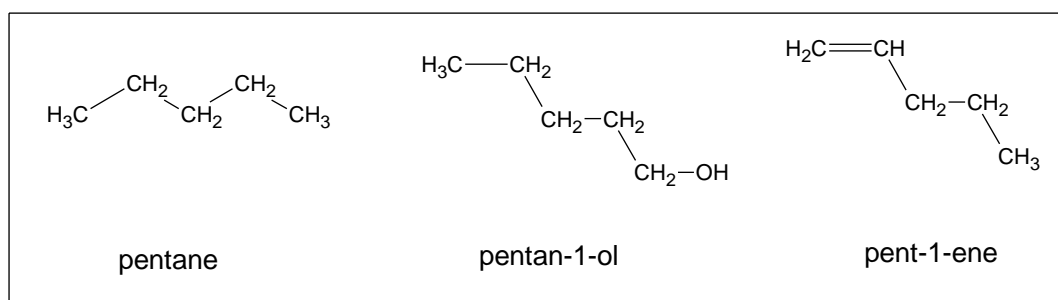
1. Visa alla grundämnen som inte utgörs av kol och visa alla väteatomer som är bundna till grundämnena som inte utgörs av kol.



2. Visa alla grundämnen med namnen angivna.



3. Visa kol- och väteatomer som grupper (t.ex. CH_3), alla icke-kol-grundämnena och alla väteatomer som inte är bundna till kolatomer.



6.3 Smiles-notation

Smiles är en akronym för Simplified Molecular Input Line Entry Specification.³² Det är ett

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.

system för kemiska beteckningar där en molekylär struktur beskrivs av en linjär sträng med tecken. Med standardmässig Smiles är namnet på molekylen synonymt med dess struktur. Indirekt visas en tvådimensionell av bild av molekylstrukturen. Eftersom en tvådimensionell kemisk struktur kan ritas på många olika sätt finns det flera korrekta Smiles-notationer för en molekyl. Utgångspunkten för Smiles är återgivningen av en molekyls valensmodell. Därför är det inte lämpligt att beskriva molekyler som inte kan återges med en valensmodell.

Smiles-notationer består av atomer betecknade med grundämnestecken, bindningar, parenteser, som används för att visa förgrening, och numrering, som används för cykliska strukturer. En Smiles-notation återger en molekylstruktur som en graf, med valfria kirala indikationer. När en Smiles-notation endast återger strukturen i form av bindningar och atomer kallas den för en allmän Smiles. När Smiles-notationen specificerar isotoper och kiralitet kallas den för en isomerisk Smiles.

I korthet bygger Smiles-notationen på flera grundregler:

1. Atomer återges med motsvarande atomsymboler.
2. Alla atomer, förutom väte, specificeras separat:
 - a. Grundämnen som ingår i den "organiska delmängden" B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br och I skrivs utan parenteser och utan bundna H, så länge som antalet H motsvarar det lägsta normala valenstal som överensstämmer med explicita bindningar.

Grundämnen i den "organiska delmängden"	"Lägsta normala valenstal"
B	3
C	4
N	3 och 5
O	2
P	3 och 5
S	2, 4 och 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Grundämnen i den "organiska delmängden" skrivs med parenteser så snart som antalet H inte motsvarar det lägsta normala valenstalet:

Ammoniumkationen betecknas som NH₄⁺

- c. Grundämnen som inte tillhör "den organiska delmängden" skrivs inom parentes och med alla bundna väteatomer visade.

3. Alifatiska atomer skrivs med stora bokstäver och aromatiska atomer med små bokstäver:

bensen betecknas som c1ccccc1 och cyklohexan som C1CCCCC1

4. Väte tas endast med i följande situationer:
- Om väteatomen är laddad, dvs. en proton, [H+].
 - Om väteatomen är bunden till andra väteatomer, dvs. molekylärt väte, [H][H].
 - Om väteatomen är bunden till fler än en atom, t.ex. överbryggande väteatomer.
 - Vid specificering av väteisotoper, t.ex. deuterium ([2H]).
 - Om väteatomen är bunden till en kiral atom.
5. De fyra grundbindningarna visas enligt följande:

Bindningstyp	Smiles-notation
Enkel-	- (behöver inte visas)
Dubbel-	=
Trippel-	#
Aromatisk	Små bokstäver

6. Substituenten visas omgiven av parenteser och direkt efter de atomer till vilka de är bundna:

2-metylbutan betecknas som CC(C)CC

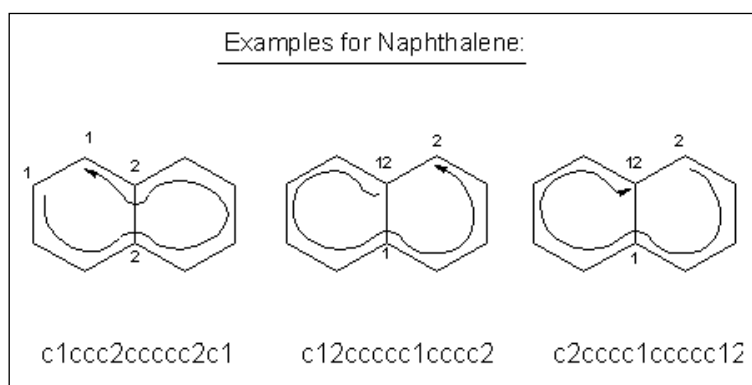
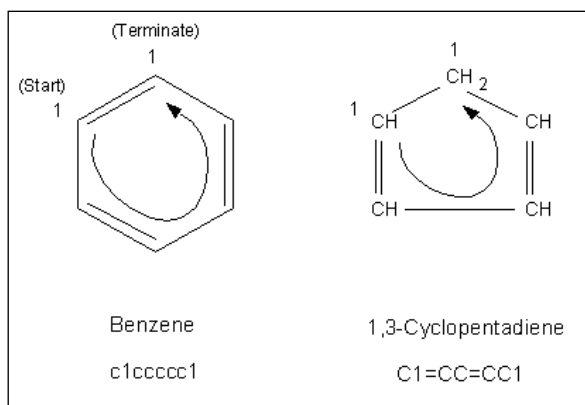
- a Substituenten visas alltid direkt efter de berörda atomerna. De kan inte visas efter en dubbelbindnings- eller trippelbindningssymbol:

Pentansyra betecknas som CCCCC(=O)O

- b. Det är tillåtet med substituenten inom substituenten:

2- (1-metyletyl)butan betecknas som CC(C(C)C)CC

7. För cykliska strukturer används siffrorna 1 till 9 för att ange cykelns start- och slutatom.
- Samma siffra används för att ange varje rings start- och slutatom. Start- och slutatomen måste vara anslutna till varandra.
 - Siffrorna skrivs direkt efter de atomer som används för att indikera start- och slutpositionerna.
 - En start- eller slutatom kan vara förknippad med två siffror i följd.



8. Obundna föreningar betecknas som enskilda strukturer eller joner och åtskiljs med en punkt (.). Angränsande atomer som åtskiljs med en punkt (.) är inte direkt bundna till varandra, t.ex. van der Waals bindning:

Aminopropenhydroklorid betecknas som C=CC(N).HCl

9. Isomera konfigurationer anges genom snedstrecken \ och /. Dessa symboler anger den relativa riktningen mellan två isomera bindningar. (cis = "/>, trans = "\/"). Smiles använder sig av lokal kiralitet vilket innebär att kiraliteten måste anges fullt ut:

cis-1,2-dibrometen betecknas som Br/C=C\Br

trans-1,2-dibrometen betecknas som Br/C=C/Br

10. Enantiomerer eller kiralitet anges med @-symbolen. @-symbolen visar att de efterföljande grannatomerna till den kirala atomen räknas upp i moturs ordning. Om symbolen @@ används räknas atomerna upp medurs. Den kirala atomen och @ visas inom parentes:

2-klor-2-hydroxi-propansyra med

specificerad kiralitet betecknas som C[C@](Cl)(O)C(=O)O

11. Uppgifter om isotoper anges genom att atomsymbolen föregås av ett nummer som anger den relevanta fullständiga atommassan. En atommassa kan endast anges inom parentes.

Kol-13 betecknas som [13C] och syre-18 som [18O]

Det finns flera hjälpmedel (Smiles-generatorer) att tillgå för att bestämma Smiles-notationen (se tillägg 1).

7 Information om optisk aktivitet

Optisk aktivitet står för asymmetriska föreningars förmåga att vrida planpolariserat ljus i olika riktning. Sådana ämnen och deras spegelbilder kallas enantiomerer och har ett eller flera kirala centrum. Även om enantiomerer skiljer sig åt när det gäller geometrisk utformning har de identiska kemiska och fysikaliska egenskaper. Eftersom varje typ av enantiomer har olika inverkan på polariserat ljus kan den optiska aktiviteten användas för att identifiera vilka enantiomerer som förekommer i ett prov och därmed också ämnets renhetsgrad. Rotationens storlek är en inneboende egenskap hos molekylen.

Enantiomerer roterar alltid åt motsatta håll: de polariserar ljuset i samma utsträckning men åt motsatta håll. Enantiomerblandningens optiska aktivitet är därför ett mått på förhållandet mellan de två enantiomererna. En enantiomerblandning i förhållandet 50:50 har en optisk aktivitet på 0.

Den erhållna rotationen beror på koncentrationen, provrörets längd, temperaturen och ljuskällans våglängd.

Optisk aktivitet är därför den parameter som är avgörande för att identifiera ett asymmetriskt ämne och det är den enda parametern som skiljer ämnet från dess spegelbild. Därför ska ämnets optiska aktivitet anges i tillämpliga fall.

Standarden för optisk aktivitet kallas specifik rotation. Den specifika rotationen definieras som den observerade rotationen av ljus vid 5896 Å, med en sträcka på 1 dm och vid en provkoncentration på 1 g/ml. Den specifika rotationen erhålls genom att man dividerar den observerade rotationen med multiplikationsprodukten av sträckan (dm) och koncentrationen (g/ml).

Optisk aktivitet kan mätas med flera olika metoder. De vanligaste är

- optisk rotation, där man mäter rotationen av planpolariserat ljus som passerar genom ett prov,
- cirkulär dikroism, där man mäter ett provs absorption av höger- och vänsterpolariserat ljus.

Om ämnet roterar ljuset till höger (medurs) sägs det vara dextrorotatoriskt och betecknas med ett plustecken. Om ämnet roterar ljuset till vänster (moturs) sägs det vara levorotatoriskt och betecknas med ett minustecken.

8 Molekylvikt eller molekylviktsintervall

Molekylvikten är vikten av en molekyl av ett ämne uttryckt i atommassenheter (u) eller som molmassa (g/mol). Molekylvikten kan beräknas med hjälp av ämnets molekylformel. Molekylvikten är summan av de ingående atomernas atomvikter. För molekyler som vissa proteiner eller odefinierade reaktionsblandningar, för vilka en enda definierad molekylvikt inte kan bestämmas, kan ett molekylviktsintervall anges.

Det finns flera metoder för att bestämma ämnens molekylvikt:

- Vid bestämning av molekylvikter för gasformiga ämnen kan Avogadros lag användas. Den säger att lika volymer av alla (ideala) gaser vid givet tryck och given temperatur innehåller samma antal molekyler.

$$PV = nRT = NkT$$

n = antal mol

R = den allmänna gaskonstanten = 8,3145 J/mol K

N = antal molekyler

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

k = R/NA

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

- För vätskor och fasta ämnen kan molekylvikten bestämmas genom att deras inverkan på smältpunkt, kokpunkt, ångtryck eller osmotiskt tryck för något lösningsmedel uppmäts.
- Masspektrometri, en mycket noggrann mätmetod.
- När det gäller molekyler för komplexa ämnen med höga molekylvikter, t.ex. proteiner eller virus, kan molekylvikterna bestämmas genom mätning av exempelvis sedimentationshastigheten i en ultracentrifug eller genom ljusspridning.
- Det finns flera verktyg med vilkas hjälp man beräknar molekylvikten med utgångspunkt från ett strukturdiagram eller en molekylformel för ämnet (se tillägg 1).

9 Ett ämnes sammansättning

För varje ämne ska ett ämnes sammansättning, innefattande huvudbeståndsdelar, tillsatser och föroreningar, rapporteras enligt de regler och kriterier som beskrivs i kapitel 4 i vägledningens dokumentet.

Varje beståndsdel, tillsats eller förorening måste identifieras på rätt sätt genom angivande av

- namn (IUPAC-namn eller annat internationellt kemiskt namn),
- CAS-nummer (i tillämpliga fall),
- EG-nummer (i tillämpliga fall).

För varje beståndsdel, tillsats eller förorening ska procentandelen anges (företrädesvis uttryckt i vikt eller volym), när så är möjligt, som intervallet i det kommersiella ämnet.

För beståndsdelarna ska den normala procentuella renhetsgraden med övre och undre gränser för typiska kommersiella satser anges. För tillsatser och föroreningar ska den typiska procentuella renhetsgraden eller de övre och undre gränserna anges. Normalt ska summan av de angivna värdena vara 100 %.

10 Spektraldata

Det behövs spektraldata för att bekräfta den struktur som anges för ett ämne med en beståndsdel eller för att bekräfta att en reaktionsblandning inte är en beredning. Det finns flera metoder för upptagning av spektra (spektrum från UV/Vis-spektroskopi, infraröd spektroskopi, kärnmagnetisk resonans eller masspektrometri). Alla metoder är inte lämpliga för alla typer av ämnen. I det här vägledningens dokumentet ges så långt det är möjligt vägledning om vilka spektra som är lämpliga för olika typer av ämnen (ECB, 2004; ECB, 2005).

För flera av de välkända metoderna ska följande uppgifter anges på själva spektrumet eller i bilagor:

Spektrum från UV/Vis-spektroskopi

- Ämnets identitet.
- Lösningsmedel och koncentration.
- Intervall.
- Position (och epsilonvärden) för huvudtoppar.
- Inverkan av syra.
- Inverkan av alkali.

Spektrum från IR-spektroskopi

- Ämnets identitet.
- Medium.
- Intervall.
- Resultat (ange de huvudtoppar som har betydelse för identifieringen, t.ex. för tolkningen av fingeravtrycksområden).

Spektrum från kärnmagnetisk resonans (NMR)

- Ämnets identitet.
- Kärna och frekvens.
- Lösningsmedel.
- I tillämpliga fall, intern eller extern referens.
- Resultat (ange de signaler som har betydelse för identifiering av ämnet och signalerna som motsvarar lösningsmedlet och föroreningarna).
- För ^1H -NMR-spektra ska ett integrationsdiagram bifogas.
- När det gäller svaga NMR-toppar bör intensiteten ökas på höjden och när det gäller komplexa mönster bör de utvidgas.
-

Spektrum från masspektroskopi

- Ämnets identitet.
- Accelerationsspänning.
- Metod för introduktion av provet (direktinsläpp, via GC osv.).
- Joniseringsmetod (elektronjonisering, kemisk jonisering, fältdesorption osv.).
- Molekyljon (M).
- Fragment som har betydelser för identifieringen av ämnet.
- M/z-värden eller utmärkning av de toppar som har betydelse för identifiering av strukturen.
- Komplexa mönster bör utvidgas.

Det är även möjligt att använda andra internationellt vedertagna metoder om de spektraldata som erhålls bekräftar identifieringen av ämnet, t.ex. den inre strukturen. Ett exempel är röntgendiffraktion som kan användas för identifiering av beståndsdelarna av sammansatta mineraloxider och röntgenfluorescens för analys av deras kemiska sammansättning.

Följande allmänna krav måste uppfyllas för att spektra ska vara lätta att förstå och/eller tolka:

- Notera signifikanta våglängder eller andra data i tillämpliga fall.

- Lämna ytterligare uppgifter, t.ex. spektra för utgångsmaterial.
- Ange de lösningsmedel som använts och/eller nödvändiga uppgifter enligt ovan för vissa metoder.
- Lämna in tydliga kopior (istället för original) med skalorna ordentligt utmärkta.
- Lämna uppgifter om vilka koncentrationer av ämnet som har använts.
- Säkerställ att den mest intensiva toppen som tillhör ämnet når fullskalenivå.

11 Högupplösande vätskekromatografi och gaskromatografi

När det är lämpligt beroende på typen av ämne måste ett kromatogram lämnas in för att bekräfta dess sammansättning. Till exempel är det möjligt att bekräfta förekomsten av föroreningar, tillsatser och beståndsdelar i en reaktionsblandning med ett lämpligt kromatogram. De mest välkända metoderna för separation och identifiering av blandningar är gaskromatografi (GC) och högupplösande vätskekromatografi (HPLC). Principen för de två metoderna är att det sker en växelverkan mellan en mobilfas och en stationär fas som leder till att beståndsdelarna i en blandning separeras.

För GC-/HPLC-kromatogrammen gäller att följande uppgifter ska anges på själva kromatogrammet eller i bilagor (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC

- Ämnets identitet.
- Kolonnegenskaper, t.ex. diameter, packning och längd.
- Temperatur, även temperaturintervall i förekommande fall.
- Den rörliga fasens sammansättning, även intervall i förekommande fall.
- Ämnets koncentrationsintervall.
- Detekteringsmetod, t.ex. UV-VIS.
- Resultat (ange de huvudtoppar som har betydelse för identifiering av ämnet).

GC

- Ämnets identitet.
- Kolonnegenskaper, t.ex. diameter, packning och längd.
- Temperatur, även temperaturintervall i förekommande fall.
- Injektionstemperatur.
- Bärgas och bärgastryck.
- Ämnets koncentrationsintervall.
- Detekteringsmetod, t.ex. MS.
- Identifiering av toppar.
- Resultat (ange de huvudtoppar som har betydelse för identifiering av ämnet).

12 Beskrivning av analysmetoderna

Det krävs i enlighet med bilaga VI till Reach att registranten beskriver analysmetoderna och/eller lämnar in litteraturreferenserna till de metoder som används för identifiering av ämnet och/eller i tillämpliga fall, för identifiering av föroreningar och tillsatser. Denna information ska vara så fylig att det är möjligt att reproducera metoderna.

Bilaga III – Ämnesidentifiering och gemensamt inlämnande av data

I huvuddelen av denna vägledning beskrivs de allmänna principer som potentiella registranter behöver följa när de identifierar de specifika ämnen som ska registreras för deras juridiska enhet. Denna bilaga innehåller praktisk vägledning för potentiella registranter om hur principerna för identifiering av ämnen ska tillämpas vid kollektiv definition av ämnesidentiteten och dess omfattning inför den gemensamma registreringen, med tillämpning av Reach-principen "ett ämne, en registrering" (OSOR). Mer information om skyldigheterna vid gemensamt inlämnande och datadelning i allmänhet finns i Vägledning om datadelning på <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

Det är underförstått att samma principer för ämnesidentifiering som ges i själva vägledningen gäller, beroende på ämnestyp, för den enda ämnesidentiteten för gemensam registrering.

I de första punkterna i artikel 11.1 och 19.1 i Reachförordningen föreskrivs att "flera registranter lämnar gemensamt in uppgifter". Dessa bestämmelser kräver närmare bestämt att "när en eller flera tillverkare har för avsikt att i gemenskapen tillverka ett ämne och/eller när en eller flera importörer har för avsikt att importera detta ämne", ska informationen om ämnets egenskaper och dess klassificering "först lämnas in av en registrant som agerar efter överenskommelse med de övriga registranter som givit sitt samtycke (nedan kallad *ledande registrant*)".

Kommissionens genomförandeförordning (EU) 2016/9 om gemensamt inlämnande och utnyttjande av data bekräftar och konsoliderar skyldigheten för flera registranter av samma ämnesidentitet att lämna viss information gemensamt. Konkret kräver gemensamt inlämnande av information att de berörda parterna enas om gränser och tillämpningsområde för ämnesidentiteten. Detta kallas ämnesidentitetsprofil eller SIP (Substance Identity Profile). SIP förväntas innehålla gränserna för det ämne registranterna har enats om att täcka med de data de lämnar in gemensamt. Detta gäller även registranter som kan ha hoppat av från viss information som lämnas in gemensamt.

Överenskommelsen om tillämpningsområdet för den ämnesidentitet registreringen täcker är därmed en förutsättning för ett gemensamt inlämnande. Öppenhet om tillämpningsområdet för denna ämnesidentitet och om de data den hänvisar till är centralt för genomförandet. Följaktligen måste tillämpningsområdet för ämnet eller SIP rapporteras tydligt i den ledande registrantens underlag för alla övriga registranters räkning, samtidigt som alla registranter rapporterar sina uppgifter om sammansättning individuellt.

I figur 2 nedan finns ett enkelt åskådliggörande exempel på ett sätt att fastställa ämnets identitetsprofil för kemikalier som tillverkas i eller importeras till EU av enskilda registranter. Det visar identifiering av ämnet som ska registreras, aggregering av de olika sammansättningarna, framtagning av data och slutligen inlämning i IUCLID-format som ett registreringsunderlag. Exemplet gäller ett enkelt, väldefinierat monokomponentämne som är ett infasningsämne. För mer komplexa ämnen kan processen med att definiera SIP inbegripa återupprepning av stegen 3 och 5 i figuren.

Under diskussionerna mellan potentiella registranter kan SIP-dokumentationen ha formen av exempelvis ett Word-dokument eller Excel-ark där relevant överenskommen information registreras och görs tillgänglig för alla medlemmar och potentiella medlemmar. Vissa branschorganisationer har gjort mallar tillgängliga för SIP som har

använts av många registranter (t.ex. Cefic-mallen³³). Andra har helt enkelt dokumenterat relevant information i ett Word-dokument på webbplatsen för det konsortium som har inrättats för att arbeta med registreringen av det berörda ämnet.

2. Beskriva identitet och tillämpningsområde för ett ämne som motsvarar de data som lämnas in för en registrering

De steg som kan gås igenom av flera registranter när de definierar ämnets identitet motsvarande de data som de lämnar in gemensamt åskådliggörs schematiskt i exemplet i figur 2 (stegen 1 till 4) för enkla, väldefinierade ämnen.

Varje enskild potentiell registrant avgör sina skyldigheter för det han eller hon tillverkar/importerar baserat på definitionen av ämnet i artikel 3.1 och tillämpar de principerna för ämnesidentifiering i denna väglednings huvuddel (stegen 1 och 2 i figur 2).

Varje potentiell registrant kan sedan kontrollera om övriga potentiella registranter har kommit fram till samma "namn och övriga identifierare" (steg 3). Från denna utgångspunkt kan de potentiella registranterna kollektivt tillämpa principerna från denna väglednings huvuddel för att definiera gränserna för den ämnesidentitet som motsvarar de data de har lämnat in gemensamt, dvs. ämnesidentitetsprofilen (SIP) (steg 4).

SIP beskriver på ett allmänt sätt ämnets tillämpningsområde utifrån dess sammansättning (inklusive andra relevanta parametrar, så som morfologi, t.ex. fysisk form, form), dess namn och andra identifierare för vilka de klassificerings- och farodata som har lämnat in gemensamt kan vara relevanta. För att undvika att konkurrenter utesluts från det gemensamma inlämnandet bör definitionen i SIP inte bygga på en överdrivet konservativ strategi.

SIP fastställer det inneboende sambandet mellan ämnesidentiteten och de farodata som ska lämnas in gemensamt. Om den fastställs tillräckligt tidigt kan den underlätta fasen med framtagning/insamling av information när registreringsskyldigheterna ska uppfylls (beskrivs i vägledningen om informationskrav och kemikaliesäkerhetsbedömning, steg 5 i figur 2 nedan) genom att den säkerställer att de data som tas fram eller samlas in täcker in hela ämnesidentiteten.

För mer komplexa ämnet används enligt beskrivningen i avsnitten 4.2.3 och 4.3 i huvuddelen av vägledningen normalt fler parametrar och/eller deskriptorer för sammansättningsinformation (t.ex. en beskrivning av källan/processen) av potentiella registranter i stegen 1–3 och de parametrar man enas om kan sedan inkluderas i SIP (steg 4). I vissa fall kan det även hända att sambandet mellan gränsen för ämnesidentiteten och farodata som lämnas in gemensamt inte blir helt klar förrän en del av eller alla tillgängliga farodata har samlats in. Det kan hända att återupprepningar mellan stegen 3–5 behövs beroende på hur komplex ämnesidentiteten är och vilka data som samlas in i steg 5, t.ex. När vissa sammansättningar innehåller beståndsdelar som utlöser klassificering och märkning och/eller PBT-bedömning. SIP kan innehålla mer än en sammansättningsprofil för att beskriva gränserna för ämnesidentiteten tillräckligt väl.

SIP måste innehålla allmän information som gör det möjligt att avgöra gränserna för den ämnesidentitet som motsvarar gemensamt inlämnade data:

³³ SIP beskrevs ursprungligen i Cefics "Guidance for Lead Registrants" som finns på <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Exempel på SIP utvecklade av registranter med hjälp av denna mall finns t.ex. På Reach-centrets webbplats <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

- ämnets namn,
- andra identifierare (t.ex. CAS-nummer, EG-nummer och strukturinformation och beskrivning, beroende på vad som är relevant) som täcks av alla registranterna för den berörda ämnesidentiteten,
- sammansättningsinformation,
 - identiteterna för beståndsdelar som är relevanta för ämnesidentifieringen och respektive koncentrationsintervall,
 - generisk lista med identiteterna för stabiliseringsmedel som är relevanta för ämnesidentifieringen (och respektive koncentrationsintervall),
 - generisk lista med ytterligare parametrar som är relevanta för ämnestypen (t.ex. källprocessdeskriptorer för vissa UVCB-ämnen).

Det är viktigt att alla gemensamma registranter är överens om de parametrar som definierar gränserna för den ämnesidentitet som täcks av det gemensamma inlämnandet och att dessa parametrar dokumenteras tydligt i SIP. En SIP måste därför ändras eller utöka på begäran av nya potentiella registranter om registranterna samtycker till att en del av eller alla gemensamt inlämnade data även är relevanta för det ämne som tillverkas eller importeras av denna registrant.

SIP får inte leda till att konfidentiell affärsinformation delas mellan registranter eller till att sådan information lämnas ut till tredje parter från det gemensamma inlämnandet. När potentiellt konfidentiell affärsinformation skulle behöva delas av de gemensamma registranterna för en klar definition av SIP kan de överväga att använda en förvaltare, enligt beskrivningen i vägledningen om datadelning.

3. Praktisk vägledning om att dokumentera ämnesidentitetsprofilen

De allmänna principerna för ämnesidentifiering för väldefinierade och UVCB-ämnen beskrivs i vägledningens huvuddel. Nedan finns en del praktisk vägledning om hur dessa principer tillämpas korrekt. I vägledningens huvuddel tas det upp att undantag från allmänna principer är möjliga. Sådana undantag kräver att registranterna kan visa det inneboende sambandet mellan ämnesidentiteten och farodata som lämnas in gemensamt.

3.1 Väldefinierade ämnen

För ett väldefinierat ämne måste principen om ≥ 80 viktprocent för ett monokomponentämne och < 80 %, ≥ 10 % för ett multikomponentämne följas när huvudbeståndsdelarna eller huvudbeståndsdelarna och deras koncentrationsintervall och orenheter definieras. Detta gäller varje enskild registrant och samtliga registranter kollektivt när SIP fastställs. Särskilt de orenhetsprofiler som man kommer överens om för SIP behöver rapporteras. Om SIP inbegriper specifika orenheter som skulle påverka klassificering och märkning och/eller PBT-bedömning måste de registranter som berörs av dessa orenheter överväga dem i datainsamlingsfasen (steg 5). Relevant information för bilaga VII–XI kan lämnas in gemensamt eller separat av dem i enlighet med artikel 11.3 i Reachförordningen (så kallade avhoppsmöjligheter). De koncentrationsvärden som rapporteras ska ta hänsyn till koncentrationsintervallet för hela det gemensamma inlämnandet.

För ämnen som kräver ytterligare parametrar för en entydig identifiering vid registreringen behöver varje registrant följa de principer som beskrivs i avsnitt 4.2.3 i vägledningens huvuddel. Hänsyn ska tas till om variation av dessa parametrar skulle utlösa en anpassning av klassificering eller farodata som lämnats in gemensamt. Motsvarande överväganden kan behöva göras för att fastställa SIP i förhållande till det

gemensamma inlämnandet. Det kan t.ex. vara nödvändigt att i ämnesidentitetsprofilen ta med de parametrar (t.ex. fysisk form och/eller morfologiska egenskaper som porositet, partikelstorlek och partikelform) som kan påverka egenskaper som är relevanta för att avgöra faroprofilen (t.ex. löslighet, reaktivitet och toxicitet vid inandning). Om detta är fallet skulle de generiska intervallen för dessa parametrar som täcks av SIP behöva redovisas öppet (t.ex. intervall för partikelstorlekar som gäller alla registranter och en lista över deras form(er) och deras ytkemier). På så sätt säkerställs det att farodata som lämnas in gemensamt är heltäckande för ämnesidentitetsprofilen.

På motsvarande sätt kan skillnader mellan den kristallina fasen för oorganiska kemikalier utlösa olika överväganden avseende faroprofilen som är specifik för dessa faser (t.ex. kvarts, kristallolit, amorf kisel). Med hänsyn till den möjliga skillnaden i egenskaper mellan de olika faserna måste potentiella registranter av dessa ämnen avgöra om de ska lämna in en gemensam registrering som täcker alla faser, inklusive farodata som är specifika för olika faser, eller lämna in olika gemensamma registreringar för olika faser (dvs. olika ämnesidentiteter). Oavsett vilket skulle de faser som täcks behöva listas i SIP och relevanta data för bilaga VII–XI skulle behöva ta upp alla faser som täcks av registreringen för att säkerställa att data täcker SIP fullständigt.

Det bör noteras att sammansättningar kan ha olika orenhets- och/eller faroprofiler och att dessa skillnader inte nödvändigtvis innebär att sammansättningarna inte går att registrera i samma registrering.

3.2 UVCB-ämnen

För UVCB-ämnen kan identifieringen vara mer problematisk. Därför är det till stor hjälp med öppen dokumentation för att kunna enas om ämnesidentiteten för den gemensamma registreringen. Varje potentiell registrant skulle behöva överväga råden i huvuddelen av denna vägledning individuellt och sedan tillämpa samma principer kollektivt. Lägg märke till att aggregeringen av koncentrationsintervall i SIP kan leda till en profil med ett mycket brett koncentrationsintervall, eventuellt till en punkt där ämnet inte längre kan betraktas som ett enda ämne.

Enligt beskrivningen i huvuddelen är grunden för identifiering av vissa UVCB-ämnen deras källa och den process som används för att tillverka dem i stället för identiteter och koncentrationsintervall för deras beståndsdelar. I dessa fall fungerar andra deskriptorer som ställföreträdare för beståndsdelarnas identiteter och deras respektive koncentrationsintervall. Potentiella registranter kan beskriva tillverkningsprocessen utifrån källa och process i den omfattning som krävs för att identifiera ämnet. Beskrivningen kan innefatta ytterligare parametrar/kännetecknande egenskaper som registranterna beslutar är avgörande för deras ämnesidentitet (se t.ex. **Tabell 5** i vägledningens huvuddel). För den gemensamma registreringen delas deskriptorerna endast i den mån det krävs för att enas om tillämpningsområdet för UVCB-ämnets identitet för registreringen. Potentiella registranter kan följa de principer som beskrivs i vägledningens huvuddel både individuellt och sedan kollektivt. SIP ger därmed en generisk rapportering av parametrar för källan och processen så att den täcker in alla enskilda registranters sammansättningar. Detta åskådliggörs schematiskt i **figur 3**.

För ämnen som identifieras utifrån källa och process gäller så som beskrivs i vägledningens huvuddel att betydande förändringar av källan eller processen sannolikt leder till en annan ämnesidentitet som bör registreras separat. Undantag från den principen skulle kräva att registranterna kan visa att varje kombination av process och källa ger sammansättningar som kan behandlas i samma gemensamma registrering. Mindre variationer av källmaterial och process och/eller processförhållanden kan innefattas i SIP. Registranterna bör enas om att varje kombination av process/källa ger sammansättningar som är lika i den meningen att det är meningsfullt att de omfattas av

samma ämnesidentitet. De bör också se till att farodata är lämpliga för hela det variationsområde som täcks av SIP. Registranterna måste närmare bestämt kunna motivera att de farodata som lämnas in gemensamt är relevanta för alla dessa sammansättningar eller i relevanta fall har anpassats till den information som lämnas för vissa sammansättningar enligt artikel 11.3 i Reachförordningen (avhopp).

För att visa relevansen av de data som lämnas för varje kombination av process och källa behöver kombinationerna dokumenteras öppet i SIP, med angivande av inklusions- och exklusionskriterier som tillämpas för framtida gemensamma registranter.

För andra typer av UVCB-ämnen (se avsnitt 4.3.2 i huvuddelen) kan en kombination av sammansättningsdeskriptorer och ytterligare deskriptorer användas av potentiella registranter efter vad som är relevant. För vissa oljekemikalier varierar t.ex. sammansättningen på grund av att fördelningen av alkylkedjornas längd varierar, och denna längdfördelning kan användas som en ytterligare deskriptor som används i identifieringen. Den strategi forumet för informationsutbyte om ämnet (SIEF) väljer bör dokumenteras öppet i deras SIP.

3.3 Ämnesidentitetsprofil

Alla registranter som lämnar in information gemensamt ansvarar för att enas om vilka parametrar som behövs för deras ämnesidentifiering och för att dokumentera dem öppet i sin motsvarande SIP. Avvikelser eller undantag från de normala principerna för ämnesidentitet som tillämpas kollektivt behöver dokumenteras öppet. Eftersom inklusions- och exklusionskriterier dokumenteras i SIP behöver SIEF se till att de kriterier som används är öppna och att relevanta data i bilaga VII–XI som samlas in och tas fram bevisligen täcker den eller de överenskomna sammansättningsprofilerna.

När potentiella registranter individuellt tar med stabiliseringsmedel enligt artikel 3.1 i sin identitetsprofil behöver deras identiteter och koncentrationsintervall överenskommas och redovisas i SIP.

I datainsamlingsfasen behöver relevansen av det eller de testmaterial som används för att ta fram eller samla in data uppfylla informationskraven i bilaga VII–XI. Motiveringen till slutsatsen att de sammansättningar som täcks av SIP är representativa behöver dokumenteras och inkluderas i den tekniska dokumentationen. Detta är särskilt relevant för komplexa ämnesidentiteter som täcker breda sammansättningsprofiler.

Potentiella registranter kan under datainsamlingen avgöra om deras SIP är alltför bred och inte passar för gemensamt inlämnande av faroinformation som är representativ för ämnesidentiteten. I så fall kan de potentiella registranterna bestämma sig för att dela upp SIEF-forumet till två eller fler ämnen³⁴. Varje ämne får då sin egen SIP och sitt eget gemensamma inlämnande av faroinformation som ska vara specifikt representativ för den ämnesidentiteten. Skälen till att viss faroinformation inte var representativ för vissa av ämnesidentitetens parametrar behöver dokumenteras öppet i SIP för varje separat registrering. I denna fas kan de olika potentiella registranterna dessutom avgöra att sammansättningsprofilerna behöver förfinas ytterligare utifrån beståndsdelar och/eller orenheter som utlöser klassificering och märkning, PBT-bedömning osv.

För potentiella registranter som har för avsikt att ansluta sig till andra potentiella registranter som redan har enats om en SIP men ännu inte har lämnat in registreringen gäller att de behöver överväga om deras ämnesidentitetsinformation ligger inom

³⁴ Överväganden om EINECS roll när ämnesidentiteten fastställs enligt Reach finns i det CARACAL-dokument som man enades om vid det fjärde mötet för behöriga myndigheter för införandet av Reach och CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 "Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)".

ramarna för aktuell SIP. Om inte behöver de diskutera och komma överens med potentiella registranter om dessa antingen behöver utöka sitt tillämpningsområde för profilen så att den nya medlemmens ämne kan ingå eller enas om att dennes ämne inte ligger inom tillämpningsområdet.

En anpassning av SIP skulle krävas om det ämne som ska registreras av den potentiella registranten har specifika parametrar för ämnesidentiteten som kan innebära att den faroinformation som lämnats in gemensamt inte längre blir representativ och att det därför krävs en särskild motivering (t.ex. en specifik orenhet, ett annat sammansättningsförhållande, en annan fas, en annan partikelstorlek osv.). För öppenhetens skull ska denna parameter anges i SIP.

I enskilda fall kan potentiella och befintliga registranter enas om att de farodata som har lämnats in gemensamt i grunden inte är representativa för den potentiella registrantens ämne på grund av avvikande parametrar för ämnesidentiteten som inte ligger inom de överenskomna SIP-gränserna. I så fall ska den potentiella registranten lämna in en separat registrering, antingen tillsammans med andra registranter med en ämnesidentitet som inbegriper denna parameter, eller individuellt om det inte skulle finnas några andra registranter av samma ämnesidentitet.

4. Rapportera ämnesidentitetsprofilen i registreringsunderlaget

När de potentiella registranterna har samlat in/tagit fram alla data som krävs enligt bilaga VII–XI för deras ämne (dvs. steg 5 i **figur 2**) är datapaketet klart att rapportera i IUCLID-format i underlagen för inlämning till Echa (dvs. steg 6 i **figur 2**). För rapportering av SIP i IUCLID-format ska namnet och andra identifierare, sammansättningsinformationen och andra parametrar rapporteras på relevant sätt i IUCLID-avsnitten 1.1 och 1.2.

Ämnesidentitetsprofil	Rapporterad i IUCLID
namn och andra identifierare	avsnitt 1.1. i alla underlag
sammansättningsinformation och andra parametrar efter vad som är relevant	avsnitt 1.2 i den ledande registrantens underlag

SIP-namnet och andra identifierare rapporteras i avsnitt 1.1. i alla underlag. Den ledande registranten rapporterar sammansättningsinformationen för SIP och andra relevanta parametrar i avsnitt 1.2 av sitt underlag i form av en "gränssammansättning för ämnet"³⁵. Den ledande registranten måste också lämna in alla relevanta bilaga VII–XI-data i avsnitten 4–14 (om det inte finns några motiverade avhoppsmöjligheter för ett eller flera informationskrav) för alla registranters räkning.

Alla registranter (inklusive den ledande) rapporterar i avsnitt 1.2 i sitt eget underlag den specifika sammansättningsinformationen för ämnet som deras respektive juridiska enhet tillverkar eller importerar. Detta innebär att den ledande registranten rapporterar både sammansättningsinformationen för SIP och sammansättningsinformationen för sin egen enhet i avsnitt 1.2 i sitt underlag medan alla övriga registranter rapporterar sin egen specifika sammansättningsinformation. Varje standardregistrering måste också innefatta

³⁵ Instruktioner om hur man anger "boundary composition of the substance" finns i manualen "Hur man sammanställer registrerings- och PPORD-underlag" på <http://echa.europa.eu/manuals>.

relevant analytisk information i avsnitt 1.4 i IUCLID.

Varje registrant bör visa att sammansättningsinformationen som han eller hon tillverkar eller importerar täcks av SIP enligt rapporten i "gränssammansättningen" och i sin tur täcks av de bilaga VII–XI-data som lämnas i den ledande registrantens underlag (i frånvaro av motiverade avhoppsmöjligheter).

Tekniska instruktioner om hur sammansättning ska rapporteras i IUCLID-format finns i IUCLID-manualerna (<http://echa.europa.eu/manuals>).

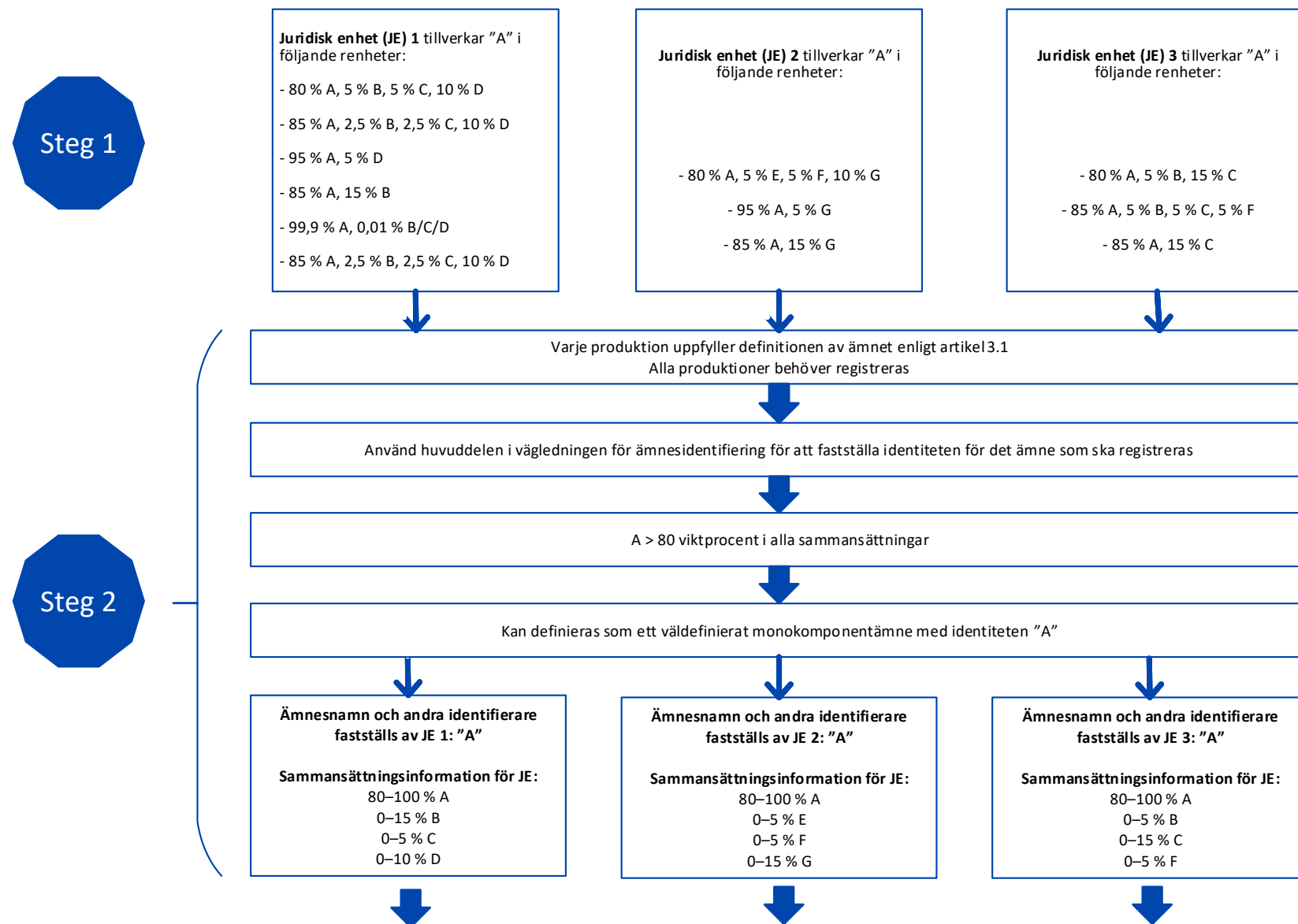
5. Övergångsbestämmelser mellan IUCLID 5 och 6

Det fanns inga fält i IUCLID 5 för öppen rapportering av sammansättningsinformationen för SIP i avsnitt 1.2 i den ledande registrantens underlag. Vissa ledande registranter hade lämnat denna information med hjälp av etiketter för att ange att informationen hänförde sig till SIP.

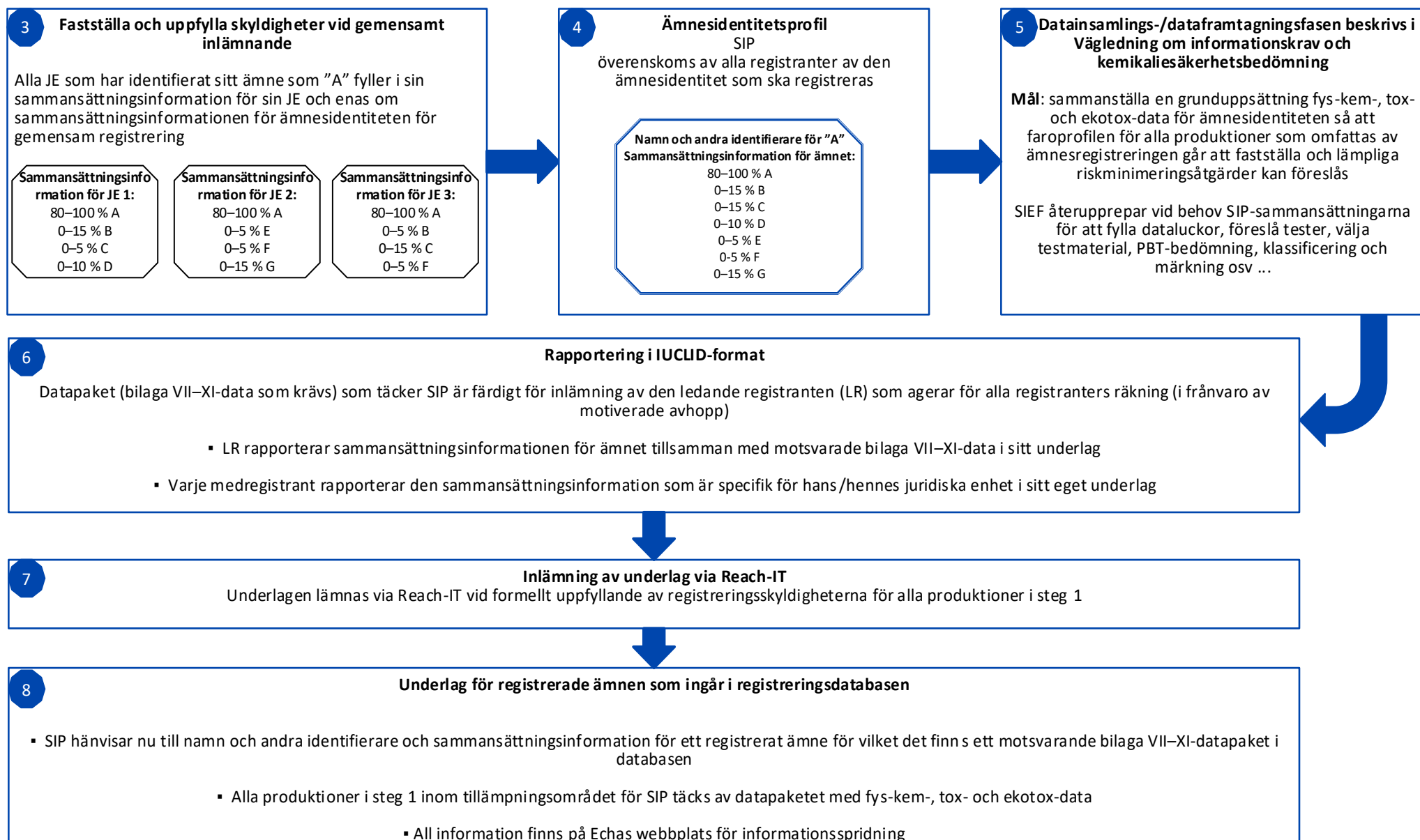
I IUCLID 6 går det att rapportera denna information på ett öppet och systematiskt sätt. Tekniska detaljer finns i relevant IUCLID-manual.

Dokumentet "Transition to the new IT tools – how to prepare" (finns på <http://echa.europa.eu/manuals>) om hur man förbereder sig för övergången till de nya IT-verktygen, som innehåller detaljerad information och övergångsbestämmelser för ledande registranter som har lämnat sina underlag i IUCLID 5 men lämnar uppdateringar i IUCLID 6 och måste ta med sammansättningsinformationen för ämnesidentiteten i avsnitt 1.2, finns på Echas webbplats.

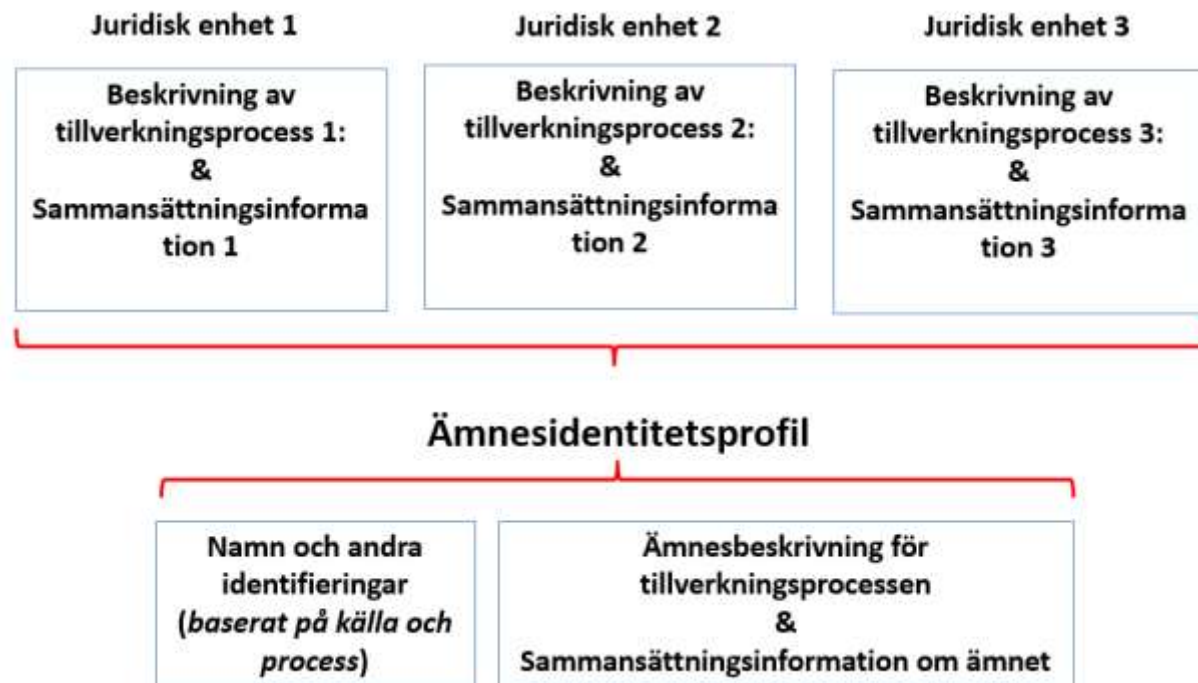
Figur 2 (nästa sida): En schematisk översikt över de steg potentiella registranter behöver ta från det att de har fastställt sina registreringsskyldigheter (1) till dess att de definierar sin SIP för sin enda ämnesidentitet (4) och slutligen lämnar in sina registreringar och uppfyller sina formella skyldigheter att registrera sina ämnen (8).



Not till figuren: Ämnesidentiteten är ett enkelt monokomponentämne för att det ska vara lättare att visualisera stegen. För mer komplexa ämnen är stegen desamma men ytterligare element och/eller ställföreträdare för sammansättningsinformationen kan behöva användas för att definiera ämnesidentiteten. Processen med att definiera SIP kan också innebära återupprepningar mellan stegen 3 och 5.



Figur 3: Åskådliggörande schema för definition av en SIP (steg 4 i figur 2) för ett ämne av UVCB-typ som identifierats baserat på deskriptorer för källa och process från enskilda juridiska enheters beskrivningar av källa och process.



EUROPEISKA KEMIKALIEMYNDIGHETEN
BOX 400, FI-00121 HELSINGFORS, FINLAND
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://echa.europa.eu)