

ORIENTAMENTI

Orientamenti all'identificazione e alla denominazione delle sostanze in ambito REACH e CLP

Dicembre 2023
Versione 3.0



AVVERTENZA LEGALE

Il presente documento ha lo scopo di aiutare gli utenti a conformarsi agli obblighi previsti dai regolamenti REACH e CLP. Tuttavia, si ricorda agli utenti che i testi dei regolamenti REACH e CLP sono gli unici veri riferimenti giuridici e che le informazioni contenute nel presente documento non costituiscono un parere legale. L'uso di dette informazioni rientra nell'esclusiva responsabilità dell'utente. L'Agenzia europea per le sostanze chimiche declina ogni responsabilità in relazione al possibile uso delle informazioni contenute nel presente documento.

Orientamenti all'identificazione e alla denominazione delle sostanze in ambito REACH e CLP

Riferimento: ECHA-23-H-07-EN
Numero cat.: ED-09-23-444-IT-N
ISBN: 978-92-9468-322-9
DOI: 10.2823/064171
Data di pubblicazione: dicembre 2023
Lingua: IT

© Agenzia europea per le sostanze chimiche, 2023
Copertina © Agenzia europea per le sostanze chimiche

Per inviare eventuali osservazioni o domande relative al presente documento, utilizzare il modulo per la richiesta di informazioni (citando il riferimento e la data di pubblicazione). Il modulo per la richiesta di informazioni è reperibile alla pagina Contatti dell'ECHA all'indirizzo:

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

Agenzia europea per le sostanze chimiche

Indirizzo postale: Casella postale 400, 00121 Helsinki, Finlandia

Sede: Telakkakatu 6, 00150 Helsinki, Finlandia

PREFAZIONE

Il presente documento descrive come denominare e identificare una sostanza in ambito REACH e CLP. Fa parte di una serie di documenti d'orientamento redatti con lo scopo di assistere tutte le parti interessate nella fase preparatoria, in vista dell'adempimento degli obblighi a essi incombenti ai sensi dei regolamenti REACH e CLP. Questi documenti contengono istruzioni dettagliate relative a una serie di processi fondamentali in ambito REACH e CLP nonché a taluni metodi scientifici e/o tecnici specifici che le industrie o le autorità devono utilizzare conformemente alle disposizioni di tali regolamenti.

I documenti d'orientamento sono stati redatti e discussi nell'ambito dei progetti di attuazione del regolamento REACH (RIP), sotto la guida dei servizi della Commissione europea, e con la partecipazione di tutte le parti interessate: gli Stati membri, l'industria e le organizzazioni non governative. I documenti d'orientamento possono essere reperiti sul sito web dell'Agenzia europea per le sostanze chimiche (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Altri documenti d'orientamento verranno pubblicati su questo sito web una volta ultimati o aggiornati.

CRONOLOGIA DEL DOCUMENTO

Versione	Commento	Data
Versione 1	Prima edizione	Giugno 2007
Versione 1.1	<p>Rettifica:</p> <ul style="list-style-type: none"> - nel titolo del documento e nei titoli dei capitoli è stato aggiunto un riferimento al regolamento CLP [regolamento (CE) n. 1272/2008 del 16 dicembre 2008]; - è stato aggiunto del testo allo scopo di chiarire il campo di applicazione del documento d'orientamento. Il testo ridondante è stato eliminato in tutto il documento; - nel corpo del testo è stato fatto riferimento, quando appropriato, al regolamento CLP; - in tutto il documento il termine «TGD» è stato sostituito con «documento d'orientamento»; - in tutto il documento il termine «preparato» è stato sostituito con «miscela»; - in tutto il documento il termine «voce» è stato sostituito con «sezione»; - in tutto il documento il termine «preregistrazione» è stato sostituito con «preregistrazione (tardiva)»; - sono state inserite le abbreviazioni AAS e CLP ed eliminate le abbreviazioni RIP e TGD; - sono state modificate le descrizioni di lega, inventario CE e IUCLID; sono state introdotte le definizioni di numero CE, numero in elenco, miscela e sostanza notificata; è stata eliminata la definizione di »preparato«; - la sezione 3.2 è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti; - la sezione 3.3 è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti in relazione agli obblighi derivanti dal CLP; - nella sezione 4.2.2.1 è stata cambiata la modalità di presentazione dei costituenti: anziché in base alla percentuale di concentrazione, è in ordine alfabetico, in modo che la composizione correlata non possa essere dedotta dall'ordine d'elenco; 	Novembre 2011 (solo in inglese)

	<ul style="list-style-type: none"> - nella sezione 4.2.3.1 il termine reticolo è stato sostituito con cristallo; - la sezione 4.3.1.2.3 è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti; - nella sezione 5 è stato incluso un riferimento ai manuali per la presentazione dei dati – Parte 18: «Come segnalare l'identità di una sostanza in IUCLID 5 per la registrazione ai sensi del regolamento REACH»; - la sezione 5 è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti; - nella sezione 6 la descrizione del termine preregistrazione è stata sostituita con quella di preregistrazione (tardiva); - sono stati aggiornati collegamenti ipertestuali interrotti nell'appendice 1; - la sezione 4.3 dell'appendice 2 è stata eliminata in quanto i suoi contenuti possono essere reperiti sul sito web pertinente. 	
Versione 1.2	<p>Rettifica</p> <p>La definizione di «sostanza soggetta a un regime transitorio» è stata adeguata alla definizione del regolamento (CE) n. 1907/2006 così come introdotta dal regolamento (CE) n. 1354/2007 del Consiglio e dalla rettifica, GU L 36, 5.2.2009, p. 84 (1907/2006).</p> <p>NB: Le modifiche della versione 1.1 e 1.2 sono consolidate in una singola versione tradotta 1.2 per le lingue diverse dall'inglese.</p>	Marzo 2012
Versione 1.3	<p>Rettifica</p> <p>Sono state inserite nel capitolo 7.6 due formule di struttura mancanti.</p>	Febbraio 2014
Versione 1.4	<p>Rettifica:</p> <ul style="list-style-type: none"> - è stato conferito un nuovo formato al documento che è in linea con l'attuale identità dell'agenzia; - è stato eliminato il capitolo 8 che forniva istruzioni tecniche basate su una versione non aggiornata di IUCLID; - è stata corretta nella sezione 7.5 la descrizione della cristobalite e del quarzo ed è stato eliminato il riferimento alla direttiva 2000/30/CE; 	Giugno 2016

	<ul style="list-style-type: none"> - sono stati eliminati i riferimenti al capitolo 8 e ai manuali per la presentazione dei dati ed è stato aggiunto un riferimento ai nuovi manuali ECHA; - è stata rimossa l'appendice III e le informazioni sono state spostate nella tabella della cronologia del documento; - sono stati corretti i collegamenti interrotti ai siti web e gli errori editoriali. 	
Versione 2.0	<p>Aggiornamento parziale limitato a:</p> <ul style="list-style-type: none"> - aggiunta della nuova appendice III con la descrizione del concetto di profilo di identità della sostanza; - aggiunta di nuovo testo nel capitolo 1 per introdurre la nuova appendice III; - correzione dei refusi e degli errori editoriali. 	Dicembre 2016
Versione 2.1	<p>Rettifica a fini di correzione di errori tipografici nel testo ed errori nelle informazioni sulla composizione negli esempi della figura 2 dell'appendice III.</p>	Maggio 2017
Versione 3.0	<p>Aggiornamento volto a:</p> <ul style="list-style-type: none"> - allineare il testo alle modifiche introdotte dal regolamento (UE) 2022/477 della Commissione del 24 marzo 2022; - eliminare i riferimenti alla preregistrazione (tardiva); - correggere i refusi e gli errori editoriali; - aggiungere i collegamenti alle pagine di supporto dell'ECHA e alle domande e risposte; - eliminare l'appendice III, paragrafo 5 sulla transizione da IUCLID 5 a IUCLID 6. 	Dicembre 2023

Indice

1. GENERALE	9
1.1. Obiettivi	9
1.2. Ambito d'applicazione.....	10
1.3. Struttura del documento d'orientamento.....	11
2. DEFINIZIONI E ABBREVIAZIONI	12
2.1. Abbreviazioni	12
2.2. Definizioni.....	14
3. REQUISITI PER L'IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE NEI REGOLAMENTI REACH E CLP	18
3.1. Definizione di sostanza	18
3.2. Identificatori numerici	18
3.2.1. Inventario CE	18
3.2.2. Numeri in elenco.....	20
3.3. Requisiti per l'identificazione delle sostanze nei regolamenti REACH e CLP	20
4. ORIENTAMENTI ALL'IDENTIFICAZIONE E ALLA DENOMINAZIONE DELLE SOSTANZE IN AMBITO REACH E CLP	24
4.1. Introduzione	24
4.2. Sostanze dalla composizione ben definita.....	30
4.2.1. Sostanze mono-componente	31
4.2.2. Sostanze multi-componente	34
4.2.3. Sostanze con composizione chimica definita e altri identificatori principali	37
4.3. Sostanze UVCB.....	39
4.3.1. Indicazioni generali sulle sostanze UVCB.....	39
4.3.2. Tipi specifici di sostanze UVCB	48
5. CRITERI PER VERIFICARE SE LE SOSTANZE SONO IDENTICHE	57
6. IDENTITÀ DELLA SOSTANZA ALL'INTERNO DELLA RICHIESTA	63
7. ESEMPI	64
7.1. Perossidicarbonato di dietile.....	64
7.2. ZOLIMIDINA	65
7.3. Miscela di isomeri	65
7.4. Aroma AH	69
7.5. Minerali	75
7.6. Olio essenziale di Lavandin grosso	78
7.7. Olio di crisantemo e relativi isomeri isolati	84

7.8. Fenolo, isopropilato, fosfato	88
7.9. Composti di ammonio quaternario.....	89
7.10. Sostanze derivate dal petrolio.....	93
7.10.1. Corrente per la miscelazione della benzina (C4-C12)	93
7.10.2. Gasoli (petrolio)	94
7.11. Enzimi	95
7.11.1. Subtilisina	95
7.11.2. α -amilasi.....	97
APPENDICE I – MATERIALE DI SUPPORTO	99
APPENDICE II – ORIENTAMENTI TECNICI IN BASE AL PARAMETRO DI IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE	103
APPENDICE III – IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE E TRASMISSIONE COMUNE DEI DATI	120

Indice delle tabelle

Tabella 1: Abbreviazioni	12
Tabella 2: Definizioni	14
Tabella 3: parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito dell'allegato VI, punto 2, del regolamento REACH	22
Tabella 4.: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze simili ben definite.....	25
Tabella 5: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze UVCB	26

Indice delle figure

Figura 1: legenda ai capitoli e alle appendici del documento d'orientamento per ottenere indicazioni adeguate relative ai diversi tipi di sostanze	29
Figura 2 (pagina successiva): panoramica schematica dei passaggi che i dichiaranti potenziali seguono per determinare i propri obblighi di registrazione (1), per definire il proprio SIP per l'identità di un'unica sostanza (4) e infine per presentare le proprie registrazioni adempiendo formalmente agli obblighi di registrazione delle proprie sostanze (8).	126
Figura 3: schema illustrativo della definizione di un SIP (passaggio 4 della figura 2) per una sostanza UVCB identificata in base ai descrittori di fonte e di processo dalle descrizioni della fonte e del processo delle singole entità giuridiche.	129

1. Generale

Il regolamento REACH [regolamento (CE) n. 1907/2006] stabilisce un sistema per la registrazione, la valutazione, l'autorizzazione e la restrizione delle sostanze chimiche e istituisce l'Agenzia europea per le sostanze chimiche (ECHA) responsabile dell'attuazione del regolamento stesso. ⁽¹⁾

Il regolamento CLP [regolamento (CE) n. 1272/2008] è il nuovo regolamento europeo relativo alla classificazione, all'etichettatura e all'imballaggio delle sostanze chimiche e delle miscele. ⁽²⁾ La legislazione introduce, in tutta l'UE, un nuovo sistema per la classificazione e l'etichettatura delle sostanze chimiche sulla base del Sistema mondiale armonizzato delle Nazioni Unite (UN GHS).

Il regolamento REACH si concentra sulle sostanze. Per poter garantire che i processi collegati al regolamento REACH funzionino in modo adeguato, risulta essenziale un'identificazione corretta e inequivocabile delle sostanze. Il presente documento d'orientamento sull'identificazione e la denominazione delle sostanze è finalizzato a supportare l'industria, gli Stati membri e l'Agenzia europea per le sostanze chimiche.

Esso si basa sull'esperienza acquisita in materia di identificazione delle sostanze nell'ambito della precedente normativa sulle sostanze chimiche (direttiva 67/548/CEE e direttiva 98/8/CEE). Tuttavia, le attuali prassi relative all'identificazione delle sostanze a norma del regolamento REACH e del regolamento relativo alla classificazione, etichettatura e imballaggio delle sostanze e delle miscele (CLP) costituiscono la base per il perfezionamento di questi orientamenti. In aggiunta, ove necessario, sono stati presi in considerazione anche approcci derivanti da altri regimi normativi relativi alle sostanze chimiche in vigore al di fuori dell'Unione europea.

Il documento creato ad hoc comprende orientamenti specifici per differenti tipi di sostanze.

Il presente documento d'orientamento trova applicazione nell'identificazione e denominazione delle sostanze disciplinate ai sensi dei regolamenti REACH e CLP.

1.1. Obiettivi

L'obiettivo del presente documento è quello di fornire orientamenti ai fabbricanti e agli importatori in merito alla registrazione e alla dichiarazione dell'identità di una sostanza nell'ambito dei regolamenti REACH e CLP. Il documento offre orientamenti sulla modalità di denominazione di una sostanza, elemento chiave nell'identificazione della sostanza. Fornisce inoltre indicazioni per stabilire se le sostanze possano essere considerate identiche nel contesto del regolamento REACH e del regolamento CLP e come il principio «una sostanza, una registrazione» (OSOR) possa essere attuato definendo il «profilo di identità della sostanza» (SIP). L'identificazione di sostanze identiche, che può rientrare nello stesso SIP, è importante ai fini delle richieste, della condivisione dei dati, della trasmissione comune dei

¹ Regolamento (CE) n. 1907/2006 del Parlamento europeo e del Consiglio, del 18 dicembre 2006, concernente la registrazione, la valutazione, l'autorizzazione e la restrizione delle sostanze chimiche (REACH), che istituisce un'Agenzia europea per le sostanze chimiche, che modifica la direttiva 1999/45/CE e che abroga il regolamento (CEE) n. 793/93 del Consiglio e il regolamento (CE) n. 1488/94 della Commissione, nonché la direttiva 76/769/CEE del Consiglio e le direttive 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE e 2000/21/CE della Commissione («REACH»).

⁽²⁾ Regolamento (CE) n. 1272/2008 del Parlamento europeo e del Consiglio, del 16 dicembre 2008, relativo alla classificazione, all'etichettatura e all'imballaggio delle sostanze e delle miscele che modifica e abroga le direttive 67/548/CEE e 1999/45/CE e che reca modifica al regolamento (CE) n. 1907/2006 (testo rilevante ai fini SEE) («CLP»).

dati, della notifica all'inventario delle classificazioni e delle etichettature nonché dell'armonizzazione della stessa classificazione ed etichettatura.

È opportuno che l'identificazione delle sostanze sia condotta da esperti del settore. Per i soggetti del settore che hanno maturato poca esperienza nell'ambito dell'identificazione delle sostanze, in appendice al presente documento d'orientamento sono fornite ulteriori indicazioni sui parametri di identificazione.

Inoltre, nel presente documento d'orientamento sono elencati alcuni link a strumenti di supporto alla caratterizzazione e al controllo dell'identità chimica di una sostanza.

Ulteriori precise indicazioni su come inserire le informazioni sull'identità della sostanza in IUCLID, nell'ambito di processi differenti ai sensi dei regolamenti REACH e CLP, sono fornite nei manuali ECHA, disponibili all'indirizzo web <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Ambito d'applicazione

Ai sensi dell'articolo 1 del regolamento REACH, il regolamento riguarda la fabbricazione, l'importazione, l'immissione sul mercato e l'uso di sostanze in quanto tali e in quanto componenti di miscele e articoli. La regolamentazione di miscele e articoli in quanto tali non rientra nell'ambito di applicazione del regolamento REACH.

A norma dell'articolo 10 del regolamento REACH, ai fini della registrazione è necessario che l'identità della sostanza sia registrata utilizzando i parametri specificati nella sezione 2 dell'allegato VI del regolamento REACH (cfr. Tabella 3). Parametri simili (come indicato nelle sezioni da 2.1 a 2.3.4 dell'allegato VI del regolamento REACH) sono necessari anche per la registrazione dell'identità di una sostanza ai fini della notifica a norma dell'articolo 40, paragrafo 1, del CLP. Il presente documento d'orientamento è incentrato sull'adeguata identificazione delle sostanze che rientrano nella definizione legale di sostanza fornita dai regolamenti REACH e CLP e fornisce una serie di indicazioni sui parametri per l'identificazione delle sostanze riportati nella sezione 2 dell'allegato VI al regolamento REACH. Le informazioni fornite sull'identità delle sostanze devono essere sufficienti per consentirne l'identificazione. Uno o più parametri di identificazione delle sostanze possono essere omessi se non è tecnicamente possibile o non sembra necessario, dal punto di vista scientifico, fornire le informazioni richieste. Le motivazioni di tali omissioni devono essere indicate in modo chiaro e basate su una giustificazione scientifica.

L'approccio da utilizzare per l'identificazione di una sostanza dipende dal tipo della stessa. Pertanto, l'utilizzatore del presente documento d'orientamento viene indirizzato a capitoli specifici in base ai differenti tipi di sostanze.

Gli inventari CE utilizzati nel quadro della direttiva 67/548/CEE (EINECS, ELINCS e l'elenco NLP) costituiscono strumenti importanti ai fini dell'identificazione delle sostanze. Nel capitolo 3.2 sono fornite indicazioni sul ruolo di questi inventari nell'ambito del regolamento REACH.

Le sostanze che rientrano nell'ambito di applicazione dei regolamenti REACH e CLP (e di conseguenza del presente documento) sono di norma il risultato di reazioni chimiche che costituiscono parte del processo di fabbricazione delle sostanze stesse e possono contenere costituenti multipli distinti. Fra le sostanze, secondo le definizioni di cui ai regolamenti REACH e CLP, sono comprese anche quelle derivate chimicamente o isolate da materiali presenti in natura in quanto tali, che possono comprendere un singolo elemento o una singola molecola (per esempio metalli puri o determinati minerali) oppure diversi costituenti (per esempio oli essenziali, metalline che si formano quando vengono separati i minerali metallici dei metalli solforosi). Tuttavia, le sostanze regolamentate da altre normative comunitarie sono, in certi casi, esentate dalla registrazione a norma del regolamento REACH (cfr. articolo 2 del REACH). Anche le sostanze elencate nell'allegato IV del regolamento REACH e le sostanze rispondenti

a determinati criteri di cui all'allegato V del regolamento REACH sono esentate dall'obbligo di registrazione. Si noti che, sebbene una sostanza possa essere esentata dalla registrazione, ciò non significa necessariamente che sia esentata dalle disposizioni di cui ad altri titoli del regolamento REACH o al regolamento CLP.

Il regolamento REACH prevede che i dichiaranti di una stessa sostanza si riuniscano per concordare la trasmissione comune di determinate informazioni sulla medesima (principio OSOR) ⁽³⁾. L'attuazione di tale principio richiede chiarezza sul modo in cui il dichiarante ha definito l'ambito del proprio SIP.

1.3. Struttura del documento d'orientamento

Il capitolo 1 contiene informazioni di base quali gli obiettivi e l'ambito di applicazione del presente documento d'orientamento, mentre nel capitolo 2 possono essere reperite le abbreviazioni e le definizioni utilizzate. Le informazioni inerenti al quadro normativo per l'identificazione delle sostanze in REACH, per esempio la definizione e le prescrizioni in materia di informazione delle sostanze presenti nel testo legale, sono riportate nel capitolo 3.

Nel capitolo 4 sono forniti orientamenti pratici all'identificazione e denominazione delle sostanze.

- Il capitolo 4.1 descrive la differenziazione fra sostanze «ben definite» e sostanze «non ben definite»; all'interno di questi due macrogruppi possono essere distinti differenti tipi di sostanze grazie a orientamenti specifici volti alla loro identificazione. In questo capitolo è riportata una legenda in forma di diagramma allo scopo di condurre l'utente al capitolo in cui potrà trovare indicazioni relative allo specifico tipo di sostanza.
- Nei capitoli successivi sono fornite indicazioni specifiche per ciascun tipo di sostanza, sotto forma di insieme di norme corredato di spiegazioni ed esempi.

Il capitolo 5 contiene indicazioni volte a stabilire se le sostanze possano essere considerate o meno identiche. Il capitolo 6 offre indicazioni sull'identità delle sostanze nell'ambito del processo di richiesta.

Inoltre, il capitolo 7 presenta alcuni esempi dettagliati, preparati sulla base degli orientamenti pratici indicati nel capitolo 4.

Nell'appendice I sono elencati alcuni link a strumenti a supporto della caratterizzazione e del controllo dell'identità chimica di una sostanza.

Nell'appendice II sono fornite ulteriori informazioni di base relative ai parametri d'identificazione delle singole sostanze utilizzati nel processo d'identificazione delle stesse, quali le norme per la nomenclatura, i numeri CE e CAS, le notazioni relative alla formula molecolare e strutturale e i metodi analitici.

L'appendice III contiene informazioni sul concetto di SIP, sulla rilevanza per gli obblighi di trasmissione comune e sulle modalità di definizione e comunicazione della SIP stessa.

⁽³⁾ Informazioni dettagliate sulla condivisione della trasmissione comune dei dati sulla stessa sostanza sono fornite nella *Guida alla condivisione dei dati*.

2. Definizioni e abbreviazioni

2.1. Abbreviazioni

Nella Tabella 1 sono elencate e chiarite le principali abbreviazioni utilizzate nel presente documento d'orientamento.

Tabella 1: Abbreviazioni

Abbreviazione	Significato
AAS	Spettroscopia ad assorbimento atomico
AISE	Associazione internazionale dei saponi, detergenti e prodotti di manutenzione
CAS	Chemical Abstracts Service
CE	Commissione europea
CLP	Regolamento (CE) n. 1272/2008 relativo alla classificazione, all'etichettatura e all'imballaggio delle sostanze e delle miscele
EINECS	Inventario europeo delle sostanze chimiche esistenti a carattere commerciale
ELINCS	Lista europea delle sostanze chimiche notificate
ENCS	Sostanze chimiche nuove ed esistenti (Giappone)
ESIS	Sistema europeo di informazione sulle sostanze chimiche
GC	Gascromatografia
GHS	Sistema mondiale armonizzato
HPLC	Cromatografia liquida ad alta prestazione
InChI	Identificatore internazionale delle sostanze chimiche IUPAC
INCI	Nomenclatura internazionale degli ingredienti cosmetici
IR	Infrarossi
ISO	Organizzazione internazionale per la standardizzazione
IUBMB	Unione internazionale di biochimica e biologia molecolare
IUCLID	Banca dati internazionale di informazione chimica uniforme
IUPAC	Unione internazionale della chimica pura e applicata
NLP	No Longer Polymer (ex polimero)
p/p	Peso/peso
ppm	Parti per milione
REACH	Registrazione, valutazione, autorizzazione e restrizione delle sostanze chimiche

RMN	Risonanza magnetica nucleare
SIEF	Forum per lo scambio di informazioni sulle sostanze
SIP	Profilo di identità della sostanza
SM	Spettroscopia di massa
SMILES	Simplified molecular input line entry specification
TSCA	Legge per il controllo delle sostanze tossiche (USA)
UE	Unione europea
UV/VIS	Ultravioletti/visibili
UVCB	Sostanze di composizione sconosciuta o variabile, prodotti di una reazione complessa o materiali biologici
XRD	Diffrazione ai raggi X
XRF	Fluorescenza ai raggi X

2.2. Definizioni

Nella Tabella 2 sono elencate e descritte le principali definizioni adottate nel presente documento d'orientamento.

Queste definizioni tengono conto delle definizioni usate nel regolamento REACH e nel regolamento CLP. Per questo motivo alcuni termini sono definiti in maniera diversa rispetto a quando usati nella direttiva 67/548/CEE.

Tabella 2: Definizioni

Definizione	Descrizione
Additivo	Una sostanza che è stata intenzionalmente aggiunta per stabilizzare la sostanza ⁽⁴⁾ .
Articolo*	Un oggetto al quale, durante la produzione, viene data una forma, una superficie o un disegno specifici che determinano la sua funzione in misura più elevata di quanto non lo faccia la sua composizione chimica.
Componente	Sostanza aggiunta intenzionalmente per formare una miscela.
Costituente	Ogni singola specie presente in una sostanza che può essere caratterizzata dalla sua identità chimica unica.
Costituente principale	Un costituente, che non è un additivo o un'impurezza, in una sostanza che costituisce una parte significativa di tale sostanza ed è pertanto usato nella denominazione e nell'identificazione dettagliata della sostanza.
Fabbricazione*	La produzione o l'estrazione di sostanze allo stato naturale.
Impronta cromatografica	Rappresentazione della composizione di una sostanza a partire dalla distribuzione caratteristica dei costituenti in un cromatogramma analitico.
Impurezza	Un costituente indesiderato presente in una sostanza allo stato di fabbricazione. Può avere origine dai materiali di partenza oppure essere il risultato di reazioni secondarie o incomplete durante il processo di fabbricazione. Benché sia presente nella sostanza finale, tale costituente non è stato aggiunto intenzionalmente.

⁽⁴⁾ In altri settori un additivo può avere anche altre funzioni, per esempio regolatore del pH o agente colorante. Tuttavia, nel regolamento REACH e nel presente TGD (documento tecnico di orientamento) un additivo è un agente stabilizzante.

Inventario CE	Sebbene non definito in termini legali dal regolamento REACH, l'inventario CE è costituito dai tre elenchi europei indipendenti e giuridicamente approvati delle sostanze presenti nei precedenti quadri normativi UE delle sostanze chimiche: EINECS, ELINCS ed elenco NLP (ex polimeri). Le voci presenti nell'inventario CE sono costituite da una denominazione chimica e un numero (nome CE e numero CE), un numero CAS, una formula molecolare (se disponibile) e una descrizione (per alcuni tipi di sostanze).
IUCLID	L'IUCLID (International Uniform Chemical Information Database, Banca dati internazionale di informazione chimica uniforme) è una banca dati e un sistema di gestione per l'amministrazione dei dati sulle sostanze chimiche.
Lega*	Un materiale metallico, omogeneo su scala macroscopica, composto da due o più elementi combinati in modo tale da non poter essere facilmente separati con processi meccanici. Le leghe sono considerate miscele speciali.
Miscela*	Miscela o soluzione costituita da due o più sostanze.
Monomero*	Una sostanza in grado di formare legami covalenti con una sequenza di molecole aggiuntive, uguali o diverse, nelle condizioni della pertinente reazione di formazione del polimero utilizzata per quel particolare processo.
Numero CE	Il numero CE è l'identificatore numerico delle sostanze nell'inventario CE.
Numero in elenco	Numero assegnato dall'Agenzia. Numero attribuito automaticamente da REACH-IT. Viene applicato a tutte le presentazioni valide in entrata (per esempio PPORD, richieste, registrazioni, notifiche di classificazione ed etichettatura).
Polimero*	Una sostanza le cui molecole sono caratterizzate dalla sequenza di uno o più tipi di unità monomeriche. Tali molecole devono essere distribuite su una gamma di pesi molecolari in cui le differenze di peso molecolare siano principalmente attribuibili a differenze nel numero di unità monomeriche. Un polimero comprende: (a) una maggioranza ponderale semplice di molecole contenenti almeno tre unità monomeriche aventi un legame covalente con almeno un'altra unità monomerica o altro reagente; (b) meno di una maggioranza ponderale semplice di molecole dello stesso peso molecolare. Nel contesto di questa definizione, per «unità monomerica» s'intende la forma sottoposta a reazione di un monomero in un polimero.

Sostanza intermedia*	<p>Una sostanza fabbricata, consumata o utilizzata per essere trasformata, mediante un processo chimico, in un'altra sostanza (in seguito denominata <i>sintesi</i>):</p> <p>(a) <u>sostanza intermedia non isolata</u>, una sostanza intermedia che durante la sintesi non è intenzionalmente rimossa (tranne che per il prelievo di campioni) dalle apparecchiature in cui la sintesi ha luogo. Tali apparecchiature comprendono il recipiente di reazione con i suoi accessori e le apparecchiature attraverso cui la sostanza o le sostanze passano durante un processo a flusso continuo o a lotti, nonché le tubazioni mediante cui la sostanza o le sostanze sono trasferite da un recipiente a un altro in cui si produce la fase successiva della reazione; non comprendono invece il serbatoio o altri recipienti in cui la sostanza o le sostanze sono conservate dopo essere state fabbricate;</p> <p>(b) <u>sostanza intermedia isolata in sito</u>, una sostanza intermedia che non presenta le caratteristiche che definiscono una sostanza intermedia non isolata e nel caso in cui la fabbricazione della sostanza intermedia e la sintesi di una o più altre sostanze derivate da essa avvengano nello stesso sito, gestito da una o più persone giuridiche;</p> <p>(c) <u>sostanza intermedia isolata trasportata</u>, una sostanza intermedia che non presenta le caratteristiche che definiscono una sostanza intermedia non isolata e che è trasportata tra altri siti o fornita ad altri siti.</p>
Sostanza mono-componente	Come regola generale, una sostanza, definita dalla sua composizione, in cui un costituente principale è presente in una concentrazione minima pari all'80 % (p/p).
Sostanza multi-componente	Come regola generale, una sostanza, definita dalla sua composizione, in cui più di un costituente principale è presente in una concentrazione ≥ 10 % (p/p) e < 80 % (p/p).
Sostanza non modificata chimicamente*	Una sostanza la cui struttura chimica rimane immutata, anche se è stata sottoposta a un processo o trattamento chimico o una trasformazione mineralogica fisica, ad esempio al fine di rimuovere le impurezze.
Sostanza notificata*	Una sostanza per la quale è stata presentata una notifica e che potrebbe essere immessa sul mercato a norma della direttiva 67/548/CEE.
Sostanza presente in natura*	Una sostanza presente in natura in quanto tale, non lavorata o lavorata solo con mezzi manuali, meccanici o gravitazionali, per dissoluzione in acqua, per flottazione, per estrazione con acqua, per distillazione a vapore o per riscaldamento unicamente per eliminare l'acqua, o estratta dall'aria con qualsiasi mezzo.

Sostanza*	Un elemento chimico e i suoi composti, allo stato naturale od ottenuti per mezzo di un processo di fabbricazione, compresi gli additivi necessari a mantenerne la stabilità e le impurezze derivanti dal procedimento utilizzato, ma esclusi i solventi che possono essere separati senza compromettere la stabilità della sostanza o modificarne la composizione.
-----------	--

* Definizioni in conformità dell'articolo 3 del regolamento REACH.

3. Requisiti per l'identificazione delle sostanze nei regolamenti REACH e CLP

I regolamenti REACH e CLP comprendono una definizione di sostanza; inoltre, REACH elenca i parametri per l'identificazione delle sostanze (allegato VI, sezione 2) che devono essere compresi per identificare le sostanze ai fini della registrazione.

Il presente capitolo riporta la definizione delle sostanze nei regolamenti REACH e CLP (capitolo 3.1), fornisce orientamenti generali all'uso dell'inventario CE derivante dai precedenti quadri normativi sulle sostanze chimiche (capitolo 3.2) e offre ulteriori informazioni di base sui requisiti in materia di identificazione delle sostanze derivanti da REACH (capitolo 3.3).

3.1. Definizione di sostanza

L'articolo 3, paragrafo 1, del regolamento REACH e l'articolo 2, paragrafo 7, del regolamento CLP forniscono la seguente definizione:

Sostanza: un elemento chimico e i suoi composti, allo stato naturale od ottenuti per mezzo di un processo di fabbricazione, compresi gli additivi necessari a mantenerne la stabilità e le impurezze derivanti dal procedimento utilizzato, ma esclusi i solventi che possono essere separati senza compromettere la stabilità della sostanza o modificarne la composizione.

La definizione di sostanza fornita nei regolamenti REACH e CLP è identica alla definizione di sostanza adottata nell'ambito della settima modifica della direttiva sulle sostanze pericolose (direttiva 92/32/CEE recante modifica della direttiva 67/548/CEE). In entrambi i casi la definizione va oltre il puro composto chimico identificato da una singola struttura molecolare. La definizione della sostanza include diversi costituenti come le impurezze.

3.2. Identificatori numerici

3.2.1. Inventario CE

Esistono tre inventari distinti che erano stati istituiti dal precedente quadro normativo per le sostanze: l'inventario europeo delle sostanze chimiche esistenti a carattere commerciale (EINECS), la lista europea delle sostanze chimiche notificate (ELINCS) e la lista dei «No-Longer Polymer» (ex polimeri, NLP).

Le sostanze presenti sul mercato europeo tra il 1° gennaio 1971 e il 18 settembre 1981 sono elencate nell'inventario europeo delle sostanze chimiche esistenti a carattere commerciale

(EINECS) ⁽⁵⁾, ⁽⁶⁾, ⁽⁷⁾.

Questo inventario comprende circa 100 000 sostanze identificate da una denominazione chimica (e da una descrizione nel caso di determinati tipi di sostanze), da un numero CAS e da un numero a sette cifre chiamato numero EINECS. I numeri EINECS cominciano sempre per 2 o 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Le sostanze dichiarate all'EINECS sono sottoposte a una fase di verifica in virtù della quale viene giustificata l'ammissione della sostanza nell'inventario.

Le sostanze notificate e immesse sul mercato dopo il 18 settembre 1981 sono elencate nella Lista europea delle sostanze chimiche notificate (ELINCS)⁶. Questo inventario (la «lista») comprende tutte le sostanze notificate fino al 31 maggio 2008 conformemente alla direttiva 67/548/CEE e relative modifiche. Tali sostanze sono dette «nuove sostanze», in quanto al 18 settembre 1981 non erano ancora state immesse sul mercato comunitario. La Commissione europea, dopo una revisione condotta dalle autorità competenti degli Stati membri (MSCA), attribuiva un numero ELINCS a ciascuna sostanza. Contrariamente all'EINECS, l'ELINCS non comprende un numero CAS fra le sue voci ma piuttosto il numero di notifica attribuito dalla MSCA, il nome commerciale (se disponibile), la classificazione e la denominazione IUPAC per le sostanze classificate. I numeri ELINCS sono anch'essi numeri a sette cifre che però iniziano sempre per 4 (4xx-xxx-x).

I polimeri sono stati esonerati dall'obbligo di notifica all'EINECS e sono stati sottoposti a una speciale normativa nell'ambito della direttiva 67/548/CEE ⁽⁸⁾, ⁽⁹⁾. Il termine «polimero» è stato ulteriormente definito nella settima modifica della direttiva 67/548/CEE (direttiva 92/32/CEE). In seguito all'attuazione di tale definizione, alcune sostanze che venivano considerate polimeri, conformemente alle norme EINECS che prevedevano l'obbligo di notifica, *non* erano più considerate polimeri ai sensi della settima modifica. Poiché tutte le sostanze che non sono elencate nell'EINECS erano soggette a notifica, tutte le sostanze «*No-Longer Polymers*» (NLP, ex polimeri) teoricamente dovrebbero essere state notificate. Tuttavia, il Consiglio dei ministri ha chiarito che per questo tipo di sostanze, gli ex polimeri, non è richiesta una notifica retroattiva. Alla Commissione è stato richiesto di redigere un elenco di No-Longer Polymers (elenco NLP). Le sostanze da includere in questo elenco erano quelle presenti sul mercato UE tra il 18 settembre 1981 (data dell'entrata in vigore della direttiva 79/831/CEE, sesta modifica della direttiva 67/548/CEE) e il 31 ottobre 1993 (data di entrata in vigore della direttiva 92/32/CEE, settima modifica della direttiva 67/548/CEE) e che soddisfacevano il requisito secondo cui erano considerate polimeri ai sensi delle regole di notifica relative all'EINECS ma che non erano più considerate polimeri in base alla settima modifica. L'elenco NLP non è esaustivo. Le sostanze presenti nell'elenco NLP sono identificate mediante una denominazione chimica, un numero CAS e un numero a sette cifre chiamato

⁽⁵⁾ EINECS si basa sull'inventario ECOIN (**E**uropean **C**ore **I**nventory) a cui l'industria può presentare una dichiarazione supplementare sulle sostanze (secondo i criteri per la dichiarazione delle sostanze per EINECS). ECOIN è stato creato fondendo diversi elenchi di sostanze chimiche che si presumeva fossero presenti sul mercato europeo (per esempio TSCA). L'EINECS è stato pubblicato il 15 giugno 1990 e comprende più di 100 000 sostanze. Nel corso d'uso dell'inventario sono stati identificati diversi errori (errori di stampa, per esempio denominazioni chimiche, formule o numeri di registrazione CAS errati). Per tale ragione il 1° marzo 2002 è stata pubblicata una correzione.

⁽⁶⁾ Versione non riservata del manuale sulle decisioni per l'applicazione del sesto e del settimo emendamento alla direttiva 67/548/CEE (direttive 79/831/CEE e 92/32/CEE) dell'Ufficio europeo delle sostanze chimiche (2005). EUR 20519 EN. Versione aggiornata del giugno 2005.

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

⁽⁸⁾ Notifica di nuove sostanze chimiche a norma della direttiva 67/548/CEE concernente la classificazione, l'imballaggio e l'etichettatura delle sostanze pericolose dell'Ufficio europeo delle sostanze chimiche (2003). Elenco NLP (No Longer Polymer). 20853 000 EUR.

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

numero NLP. Un numero NLP inizia sempre per 5 (5xx-xxx-x).

Questi tre elenchi di sostanze, EINECS, ELINCS e NLP, sono collettivamente denominati inventario CE. Ogni sostanza in questo inventario ha un numero CE assegnato dalla Commissione europea (cfr. informazioni dettagliate sul numero CE nell'appendice II).

Informazioni su queste sostanze sono disponibili nel sito web dell'Agenzia europea per le sostanze chimiche (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>) che gestisce e pubblica anche un inventario delle sostanze registrate (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

L'inventario CE può essere utilizzato da fabbricanti e importatori come strumento per reperire il numero CE della propria sostanza.

3.2.2. Numeri in elenco

Nell'impostare il sistema REACH-IT, l'ECHA ha ritenuto vantaggiosa l'attribuzione automatica di un numero alle sostanze di tutte le presentazioni in entrata tecnicamente complete (preregistrazioni, PPORD, richieste, registrazioni, notifiche di classificazione ed etichettatura, ecc.) per le quali non era specificato un numero CE (cfr. criteri di attribuzione dei numeri in elenco di cui in seguito). Questo, da un punto di vista tecnico, ha facilitato la gestione, la successiva elaborazione e l'identificazione delle sostanze presenti in dette trasmissioni. I cosiddetti «numeri in elenco» hanno lo stesso formato numerico utilizzato per i numeri EINECS, ELINCS e NLP, ma a differenza di questi iniziano con cifre differenti.

I numeri in elenco hanno il formato numerico in comune con le voci EINECS, ELINCS e NLP. La maggior parte dei numeri in elenco e l'identificazione delle sostanze a essi ricollegata non sono mai state sottoposte a una verifica volta a stabilirne la correttezza e la validità o a controllare se le indicazioni descritte in questo documento d'orientamento siano state rispettate.

È necessario sottolineare che alla stessa sostanza possono essere attribuiti numeri in elenco differenti qualora per essa siano utilizzati identificatori diversi (per esempio il nome). Di conseguenza, è anche possibile che venga assegnato un numero in elenco a una sostanza elencata nell'EINECS, nell'ELINCS o nell'NLP. Ciò può accadere se nella presentazione all'ECHA tramite REACH-IT viene utilizzata una denominazione di sostanza diversa da quella che figura nell'inventario CE.

I numeri in elenco possono iniziare, ad esempio, per 6, 7, 8 o 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

È importante notare che, per alcune voci EINECS, la descrizione di una sostanza risulta relativamente ampia e si potrebbe considerare che essa contenga potenzialmente l'identità di più di una sostanza in conformità dell'articolo 3, paragrafo 1, del regolamento REACH. In questi casi, il dichiarante potenziale è invitato a descrivere la sostanza in questione più precisamente (per esempio tramite il nome IUPAC e altri identificatori disponibili). Il dichiarante deve comunque indicare a quale voce EINECS appartiene la sostanza. In questi casi, l'Agenzia europea per le sostanze chimiche deciderà se sia appropriato o meno assegnare un nuovo numero in elenco alla sostanza in questione.

3.3. Requisiti per l'identificazione delle sostanze nei regolamenti REACH e CLP

In conformità del regolamento REACH, quando è richiesta una registrazione questa deve includere informazioni sull'identificazione della sostanza come specificato al punto 2 dell'allegato VI. Queste informazioni devono essere adeguate e sufficienti a consentire l'identificazione di ogni sostanza. Se non è tecnicamente possibile, o non sembra scientificamente necessario, fornire informazioni su uno o più parametri per l'identificazione

della sostanza, i motivi devono essere dichiarati chiaramente come indicato nella nota 1 dell'allegato VI.

Allo stesso modo, in conformità del regolamento CLP, quando è richiesta la produzione di una notifica (articolo 40 del regolamento CLP) questa deve includere informazioni sull'identificazione della sostanza come specificato nei punti da 2.1 a 2.3.4 dell'allegato VI del regolamento REACH. Queste informazioni devono essere adeguate a consentire l'identificazione di ogni sostanza. Se non è tecnicamente possibile, o non sembra scientificamente necessario, fornire informazioni su uno o più parametri per l'identificazione della sostanza, i motivi devono essere dichiarati chiaramente come indicato nella nota 1 dell'allegato VI.

Una panoramica dei parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito dell'allegato VI del regolamento REACH è fornita nella Tabella 3.

Tabella 3: parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito dell'allegato VI, punto 2, del regolamento REACH

Parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito dell'allegato VI, punto 2, del regolamento REACH	
2.	<p>IDENTIFICAZIONE DELLA SOSTANZA</p> <p><i>Per ogni sostanza le informazioni fornite dovranno essere sufficienti a identificare ciascuna sostanza. Se non è tecnicamente possibile o non sembra necessario, dal punto di vista scientifico, fornire informazioni su uno o più dei punti elencati di seguito, occorre indicarne chiaramente la ragione.</i></p>
2.1	Denominazione e qualsiasi altro identificatore di ogni sostanza
2.1.1	<i>Denominazione o denominazioni nella nomenclatura IUPAC. Se non disponibile, altra o altre denominazioni chimiche internazionali</i>
2.1.2	<i>Altre denominazioni (nome corrente, nome commerciale, abbreviazione)</i>
2.1.3	<i>Numero CE, ossia il numero EINECS, ELINCS o NLP, o il numero assegnato dall'Agenzia (se disponibile e appropriato)</i>
2.1.4	<i>Numero e nome CAS (se disponibili)</i>
2.1.5	<i>Altro codice d'identità, come il numero doganale (se disponibile)</i>
2.2	Informazioni relative alla formula molecolare e strutturale o alla struttura cristallina di ogni sostanza
2.2.1	<i>Formula molecolare e formula di struttura (compresa la notazione SMILES e altra rappresentazione, se disponibile) e descrizione della o delle strutture cristalline</i>
2.2.2	<i>Informazioni sull'attività ottica e sul rapporto tipico degli (stereo)isomeri (se applicabili e appropriate)</i>
2.2.3	<i>Peso molecolare o intervallo di peso molecolare</i>
2.3.	Composizione di ogni sostanza
2.3.1	<i>Grado di purezza (%), se applicabile</i>

2.3.2	<p><i>Denominazioni dei costituenti e delle impurezze.</i></p> <p><i>Nel caso di una sostanza di composizione sconosciuta o variabile, di prodotti di reazioni complesse o di materiali biologici (UVCB):</i></p> <ul style="list-style-type: none"><i>– denominazioni dei costituenti presenti in concentrazione $\geq 10\%$;</i><i>– denominazioni dei costituenti noti presenti in concentrazione $< 10\%$;</i><i>– per i costituenti che non possono essere identificati singolarmente, descrizione dei gruppi di costituenti in base alla natura chimica;</i><i>– descrizione dell'origine o della fonte e del processo di fabbricazione.</i>
2.3.3	<p><i>Concentrazione tipica e intervallo di concentrazione (in percentuale) dei costituenti, dei gruppi di costituenti che non possono essere identificati singolarmente e delle impurezze come specificato al punto 2.3.2</i></p>
2.3.4	<p><i>Denominazioni, concentrazione tipica e intervallo di concentrazione (in percentuale) degli additivi</i></p>
2.3.5	<p><i>Tutti i dati analitici qualitativi specifici necessari all'identificazione della sostanza, quali i dati ultravioletti, infrarossi, della risonanza magnetica nucleare, dello spettro di massa o di diffrazione</i></p>
2.3.6	<p><i>Tutti i dati analitici quantitativi specifici necessari all'identificazione della sostanza, quali i dati cromatografici, titrimetrici, di analisi elementare o di diffrazione</i></p>
2.3.7	<p><i>Descrizione dei metodi analitici o riferimenti bibliografici appropriati che sono necessari all'identificazione della sostanza (comprese l'identificazione e la quantificazione dei suoi costituenti e, se del caso, delle sue impurezze e degli additivi). La descrizione comprende i protocolli sperimentali seguiti e l'interpretazione pertinente dei risultati di cui ai punti da 2.3.1 a 2.3.6. Queste informazioni devono essere sufficienti a consentire la riproduzione dei metodi.</i></p>
2.5	<p>Ogni altra informazione disponibile e pertinente che consente di identificare la sostanza</p>

4. Orientamenti all'identificazione e alla denominazione delle sostanze in ambito REACH e CLP

4.1. Introduzione

Le norme per l'identificazione e la denominazione sono diverse per i vari tipi di sostanze. Per motivi pratici, il presente documento d'orientamento è strutturato in modo che, per ogni tipo di sostanza, l'utente sia direttamente guidato al capitolo in cui sono fornite le indicazioni appropriate. A tale scopo, di seguito sono fornite alcune spiegazioni sui diversi tipi di sostanze e infine una legenda per trovare il capitolo appropriato.

L'identificazione delle sostanze dovrebbe essere basata quanto meno sui parametri d'identificazione elencati nell'allegato VI, punto 2, del regolamento REACH (cfr. Tabella 3). Pertanto qualunque sostanza deve essere identificata mediante una combinazione dei parametri identificativi appropriati:

- il nome IUPAC e/o altro nome e altri identificatori, per esempio numero CAS, numero CE (allegato VI, punto 2.1);
- le informazioni molecolari e strutturali (allegato VI, punto 2.2);
- la composizione chimica (allegato VI, punto 2.3).

Una sostanza viene identificata completamente dalla sua composizione chimica, vale a dire dall'identità chimica e dal contenuto di ciascun suo costituente. Sebbene tale identificazione diretta possa essere possibile per la maggior parte di esse, per determinate sostanze ciò non è fattibile o non adeguato nell'ambito di applicazione dei regolamenti REACH e CLP. In tali casi, sono richieste informazioni sull'identificazione delle sostanze diverse o aggiuntive.

Pertanto, le sostanze possono essere suddivise in due gruppi principali:

1. «sostanze ben definite»: sostanze con una composizione qualitativa e quantitativa definita che possono essere adeguatamente identificate sulla base dei parametri di identificazione di cui all'allegato VI, sezione 2, del regolamento REACH;
2. «sostanze UVCB»: sostanze di composizione sconosciuta o variabile, prodotti di una reazione complessa o materiali biologici. Tali sostanze non possono essere sufficientemente identificate mediante i parametri suddetti.

La variabilità della composizione delle sostanze ben definite è specificata dal limite superiore e inferiore dell'intervallo o degli intervalli di concentrazione del costituente o dei costituenti principali. Per le sostanze UVCB la variabilità è relativamente ampia e/o scarsamente prevedibile.

Si conviene che potranno presentarsi alcuni casi al limite tra sostanze ben definite (prodotti di reazione con molti componenti, ciascuno rientrante in un'ampia gamma di costituenti) e sostanze UVCB (prodotti di reazione con composizione variabile e difficilmente prevedibile). È responsabilità del dichiarante identificare una sostanza nel modo più appropriato.

Le regole per l'identificazione e la denominazione di «sostanze ben definite» con un solo costituente principale sono diverse da quelle per le «sostanze ben definite» con uno o più costituenti principali. A fronte della varietà dei tipi di sostanze classificabili tra le sostanze «UVCB», vengono descritte regole diverse per l'identificazione e la denominazione.

Nella

Tabella 4. e Tabella 5, gli identificatori principali sono elencati per diversi esempi dei vari tipi di sostanze. Questi esempi sono raggruppati in modo che le similitudini e le differenze per l'identificazione delle sostanze siano facilmente riconosciute.

Tabella 4. Le tabelle Tabella 5 non costituiscono un elenco completo di tutti i possibili tipi di sostanze. Questo raggruppamento di sostanze con regole di identificazione e denominazione non deve essere considerato come un sistema di categorizzazione ufficiale per le sostanze ma come

un aiuto pratico per applicare adeguatamente le regole specifiche e per trovare le indicazioni appropriate all'interno del presente documento d'orientamento.

Tabella 4.: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze simili ben definite

Caratteristiche comuni	Esempi o casi rappresentativi	Identificatori principali
Sostanze ben definite in base alla composizione chimica [capitolo 4.2.]	Sostanze mono-componente, per es. - benzene (95%) - nichel (99%) [capitolo 4.2.1]	Composizione chimica: un costituente principale $\geq 80\%$: - Identità chimica del costituente principale (denominazione chimica, numero CAS, numero CE, ecc.) - Concentrazione tipica e limite superiore e inferiore
	Sostanze multi-componente, per es. prodotti di reazione definiti quali Massa di reazione del 2-, 3- e 4-clorotoluene (30 % ciascuno) [capitolo 4.2.2]	Composizione chimica: una miscela (massa di reazione) dei costituenti principali ciascuno fra $\geq 10 - < 80\%$: - Identità chimica di ciascun costituente principale - Concentrazioni tipiche e limite superiore e inferiore relativi a ciascun costituente e alla massa di reazione stessa
	Sostanze definite da altri parametri, oltre che dalla composizione chimica, per es. grafite e diamante [capitolo 4.2.3]	Composizione chimica come sostanza mono-componente o multi-componente E Altri parametri fisici o di caratterizzazione: per es. cristallomorfologia, composizione minerale (geologica), ecc.

Tabella 5: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze UVCB

Caratteristiche comuni	Esempi o casi rappresentativi	Identificatori principali			
		Fonte	Processo	Altri identificatori	
Sostanze UVCB (sostanze di composizione sconosciuta o variabile, prodotti di una reazione complessa o materiali biologici) [capitolo 4.3]	Materiali biologici (B)	Estratti di materiali biologici, per es. fragranze naturali, oli naturali, coloranti naturali e pigmenti	- Specie vegetale o animale e famiglia - Parte di pianta/animale	- Estrazione - Frazionamento, concentrazione, isolamento, purificazione, ecc. - <u>Derivazione (*)</u> *	- Composizione nota o generica - Impronte cromatografiche e di altro tipo - Riferimento alle norme - Indice dei colori (Colour Index)
		Macromolecole biologiche complesse, per es. enzimi, proteine, frammenti di DNA o RNA, ormoni, antibiotici			- Indice standard degli enzimi - Codice genetico - Configurazione stereochimica - Proprietà fisiche - Funzione/attività - Struttura - Sequenza di aminoacidi
	Prodotti di fermentazione, antibiotici, biopolimeri, enzimi, vinacce (prodotti di fermentazione dello zucchero), soforolipidi, ecc.	- Mezzo di coltura - Microrganismi applicati	- Fermentazione - Isolamento di prodotti - Fasi di purificazione	- Tipo di prodotti: per es. antibiotici, biopolimeri, proteine, ecc. - Composizione nota	
Sostanze chimiche o minerali con composizione scarsamente	Miscele di reazione con composizione scarsamente prevedibile e/o variabile	Materiali di partenza	<u>Tipo di reazione chimica</u> , per es. esterificazione, alchilazione, idrogenazione	- Composizione nota - Impronte cromatografiche e di altro tipo - Riferimento alle norme	

	definita, complessa o variabile (UVC)	- Frazioni o distillati, per es. sostanze petrolifere - Argilla, per es. bentonite - Catrami	- Greggio - Carbone/torba - Gas minerali - Minerali	- Frazionamento, distillazione - <u>Conversione di frazioni</u> - Processi fisici - Residui	- Intervalli dei limiti massimi - Intervallo di lunghezza della catena - Rapporto aromatici/alifatici - Composizione nota - Indice standard
		Concentrati o fusi, per es. minerali metallici o residui di vari processi di fusione o metallurgici, per es. scorie	Minerali metallici	- Fusione - Trattamento al calore - Processi metallurgici vari	- Composizione nota o generica - Concentrazione di metalli

(*) I processi sottolineati indicano la sintesi di nuove molecole

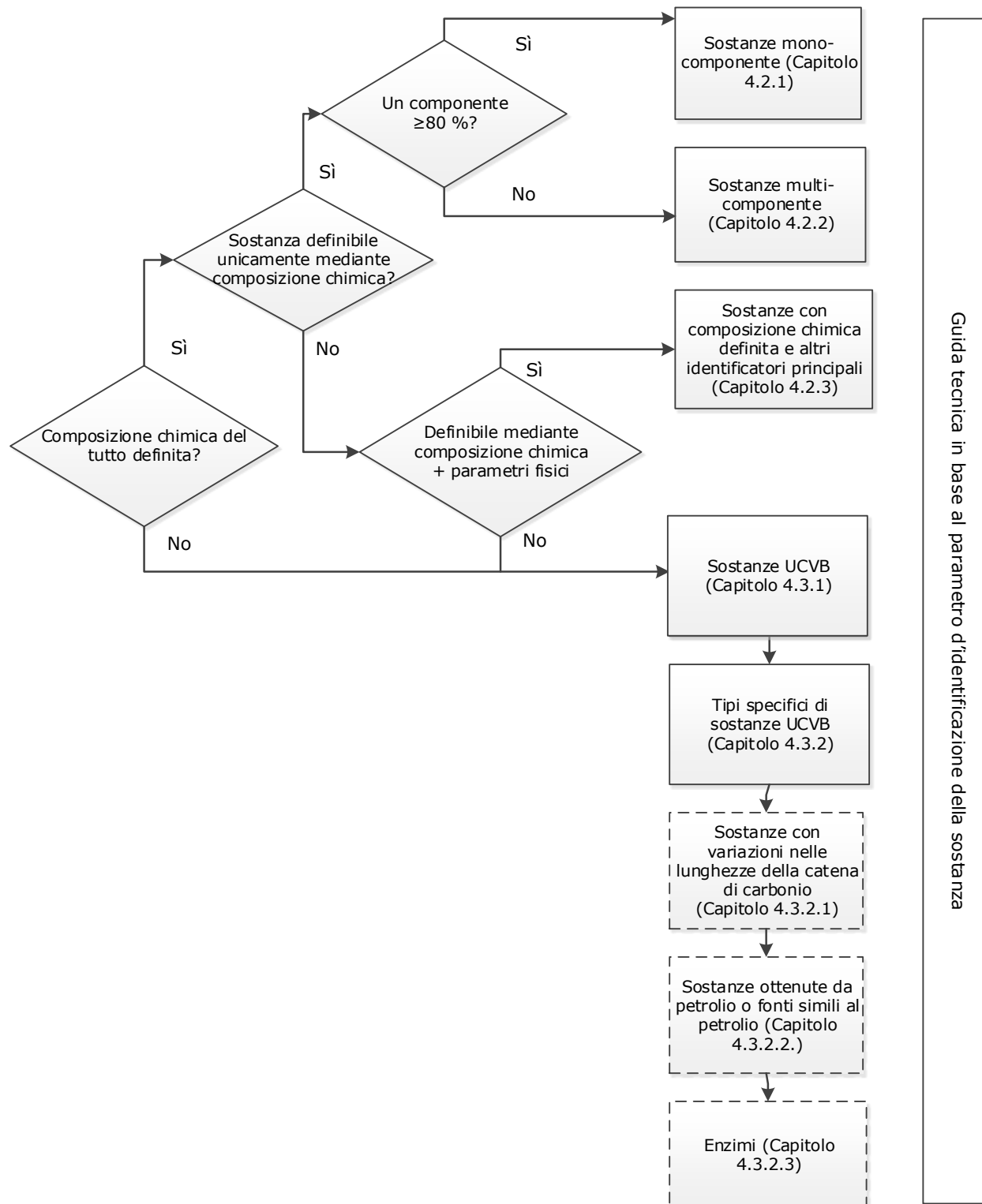
Il presente capitolo è diviso in sottocapitoli che contengono indicazioni specifiche per l'identificazione dei vari tipi di sostanze. Una legenda ai capitoli appropriati è fornita nella Figura 1.

La legenda nella Figura 1 è basata su criteri che sono «regole empiriche». Il dichiarante ha la responsabilità di selezionare il capitolo più appropriato e di registrare l'identità della sostanza in linea con le regole e i criteri relativi a quel tipo di sostanza.

La regola di base è che le sostanze siano definite per quanto possibile dalla composizione chimica e dall'identificazione dei costituenti. Solo se ciò non è tecnicamente possibile si dovrebbero utilizzare altri identificatori, come specificato per i vari tipi di sostanze UVCB.

Se il dichiarante si scosta dalle regole e dai criteri di identificazione delle sostanze di cui al presente documento d'orientamento, ne deve fornire una giustificazione. L'identificazione delle sostanze dovrebbe essere trasparente, affidabile e assicurare la coerenza.

Figura 1: legenda ai capitoli e alle appendici del documento d'orientamento per ottenere indicazioni adeguate relative ai diversi tipi di sostanze



Occorre fornire una descrizione dei metodi analitici e/o dei riferimenti bibliografici appropriati per l'identificazione della sostanza e, se appropriato, per l'identificazione delle impurezze e degli additivi (REACH, allegato VI, punti 2.3.5, 2.3.6 e 2.3.7). Queste informazioni dovrebbero essere sufficienti a consentire la riproduzione dei metodi. Quando si applicano tecniche analitiche dovrebbero essere forniti anche i risultati tipici.

4.2. Sostanze dalla composizione ben definita

Le sostanze dalla composizione chimica ben definita sono denominate secondo il o i costituenti principali. Per alcuni tipi di sostanze la sola composizione chimica non è sufficiente per la caratterizzazione. In questi casi alcuni parametri fisici aggiuntivi relativi alle strutture chimiche devono essere aggiunti all'identificazione della sostanza.

Come regola generale, si dovrebbe mirare a coprire la composizione al 100 % e ciascun costituente richiede una specifica chimica completa, incluse le informazioni strutturali. Per le sostanze che sono definite dalla loro composizione chimica, si fa una distinzione tra:

- costituente principale: un costituente, che non è un additivo o un'impurezza, di una sostanza, che costituisce una parte significativa di tale sostanza ed è pertanto usato nella denominazione e nell'identificazione dettagliata della sostanza;
- impurezza: un costituente indesiderato presente in una sostanza prodotta. Esso può avere origine dai materiali di partenza oppure essere il risultato di reazioni secondarie o incomplete durante il processo di produzione. Benché siano presenti nella sostanza finale, le impurezze non sono state aggiunte intenzionalmente;
- additivo: una sostanza che è stata intenzionalmente aggiunta per stabilizzare la sostanza.

Tutti i costituenti (a eccezione degli additivi) che non sono il o i costituenti principali della sostanza mono-componente o di una sostanza multi-componente sono considerati impurezze. Sebbene in alcuni settori sia prassi generale usare il termine «tracce», nel presente documento d'orientamento è usato solo il termine «impurezza».

I differenti costituenti hanno differenti requisiti di identificazione:

- i costituenti principali contribuiscono alla denominazione della sostanza e ciascun costituente principale deve essere identificato con precisione;
- le impurezze non contribuiscono alla denominazione della sostanza, ma ogni impurezza deve essere identificata con precisione;
- gli additivi contribuiscono alla composizione della sostanza (ma non alla designazione) e andrebbero sempre identificati con precisione.
- L'identificazione precisa dei costituenti principali, delle impurezze e degli additivi deve consistere in una denominazione IUPAC, una denominazione chimica, una formula strutturale, un numero CE e un numero CAS, se disponibile.

Sono usate alcune convenzioni per distinguere tra sostanze mono-componente e multi-componente:

- una sostanza mono-componente è una sostanza in cui un costituente è presente in una concentrazione pari almeno all'80 % (p/p) e che contiene fino al 20 % (p/p) di impurezze.

Una sostanza mono-componente è denominata secondo il costituente principale;

- una sostanza multi-componente è composta da diversi costituenti principali presenti in concentrazioni generalmente ≥ 10 % e < 80 % (p/p).

Essa viene denominata come «massa di reazione» di due o più componenti principali.

Le regole sopra menzionate sono intese solo come indicazione. Si accettano scostamenti se può essere fornita una motivazione plausibile.

Normalmente, le impurezze presenti in una concentrazione $\geq 1\%$ dovrebbero essere specificate. Tuttavia, le impurezze pertinenti ai fini della classificazione e/o della valutazione PBT⁽¹⁰⁾ devono sempre essere specificate, indipendentemente dalla concentrazione. Come regola generale, le informazioni sulla composizione dovrebbero essere completate al 100%.

Gli additivi, come intesi nei regolamenti REACH e CLP e nel presente documento d'orientamento, sono agenti necessari per preservare la stabilità della sostanza. Pertanto gli additivi sono un costituente essenziale della sostanza e vengono presi in considerazione per il bilancio di massa. Tuttavia, al di fuori della definizione di cui al regolamento REACH e al presente documento d'orientamento, la dicitura «additivo» è usata anche per le sostanze aggiunte intenzionalmente con altre funzioni, per esempio i regolatori di pH o gli agenti coloranti. Queste sostanze aggiunte intenzionalmente non fanno parte della sostanza in quanto tale e pertanto non sono prese in considerazione per il bilancio di massa.

Le miscele, secondo la definizione dei regolamenti REACH e CLP, sono miscele intenzionali di sostanze e di conseguenza non devono essere considerate sostanze multi-componente.

Indicazioni specifiche sulle sostanze mono-componente e sulle sostanze multi-componente sono disponibili rispettivamente nei capitoli 4.2.1 e 4.2.2. Per le sostanze che richiedono informazioni aggiuntive (per esempio determinati minerali), sono disponibili orientamenti nel capitolo 4.2.3.

4.2.1. Sostanze mono-componente

Una sostanza mono-componente è una sostanza definita mediante la sua composizione quantitativa, in cui un costituente principale è presente in una concentrazione almeno dell'80 % (p/p).

Convenzione per la denominazione

Una sostanza mono-componente è denominata in funzione del costituente principale. In linea di principio, il nome dovrebbe essere attribuito in lingua inglese secondo le regole di nomenclatura IUPAC (cfr. appendice I). In aggiunta si possono fornire altre designazioni accettate a livello internazionale.

Identificatori

Una sostanza mono-componente è identificata dalla denominazione chimica e da tutti gli altri identificatori disponibili (compresa la formula molecolare e strutturale o la struttura cristallina) del costituente principale. Devono essere identificate eventuali impurezze e/o additivi della sostanza mono-componente. Devono essere fornite le concentrazioni e gli intervalli di concentrazione tipici del costituente principale, delle impurezze e/o degli additivi. Tutte queste informazioni devono essere corroborate da dati analitici.

Esempio				
Costituente principale	Contenuto (%)	Impurezze	Contenuto (%)	Identità della sostanza
m-xilene	91	o-xilene	5	m-xilene
o-xilene	87	m-xilene	10	o-xilene

⁽¹⁰⁾ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i relativi criteri possono essere reperite nella Guida alle prescrizioni in materia di informazione e alla valutazione della sicurezza chimica, capitolo R.11: Valutazione PBT.

Normalmente, il costituente principale è presente in concentrazione > 80 % e deve essere specificato per intero mediante tutti i suddetti parametri. La somma delle concentrazioni tipiche del costituente principale e delle impurezze deve essere pari al 100 %. Le impurezze presenti in una concentrazione > 1 % devono essere specificate mediante denominazione e identificatori. Le impurezze che sono pertinenti ai fini della classificazione e/o della valutazione PBT ⁽¹¹⁾ devono sempre essere specificate dagli stessi identificatori, indipendentemente dalla loro concentrazione.

Per la corretta applicazione della regola dell'80 %, sostanze aggiunte intenzionalmente come regolatori del pH o agenti coloranti non devono essere incluse nel bilancio di massa.

La «regola dell'80 %» è stata applicata per la notifica di nuove sostanze (direttiva 67/548/CEE) ed è applicabile in ambito REACH. Tuttavia gli scostamenti da questa regola devono essere giustificati. Possibili esempi di scostamento giustificato sono:

- se il costituente principale è < 80 % ma si può dimostrare che la sostanza ha proprietà fisico-chimiche simili e lo stesso profilo di pericolo di altre sostanze mono-componente con la stessa identità che soddisfano la regola dell'80 %;
- l'intervallo di concentrazioni del costituente principale e delle impurezze si sovrappone al criterio dell'80 % e il costituente principale è solo occasionalmente ≤ 80 %

Esempi

Sost.	Costituente principale	Contenuto superiore (%)	Contenuto tipico (%)	Contenuto inferiore (%)	Impurezza	Contenuto superiore (%)	Contenuto tipico (%)	Contenuto inferiore (%)	Identità della sostanza
1	o-xilene	90	85	65	m-xilene	35	15	10	o-xilene
2	o-xilene m-xilene	90 35	85 15	65 10	p-xilene	5	4	1	o-xilene

In base agli intervalli di concentrazione del costituente principale e delle impurezze, le sostanze 1 e 2 possono essere considerate come un multi-componente dei due costituenti principali, o-xilene e m-xilene, o come sostanze mono-componente. La decisione in tal caso è di considerare entrambe come sostanze mono-componente e ciò è da ricondurre al fatto che l'o-xilene è tipicamente presente in concentrazioni > 80 %.

Informazioni analitiche

Devono essere forniti dati qualitativi sufficienti per confermare l'identità dei costituenti e delle impurezze di una sostanza mono-componente. Per confermare l'identità della sostanza possono risultare adatti numerosi metodi spettroscopici, in particolare la spettroscopia di assorbimento UV/visibile (UV/VIS), la spettroscopia a infrarossi (IR), la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (RMN) e la spettroscopia di massa (MS). Per le sostanze inorganiche o organiche e/o metallico-organiche rilevabili/misurabili mediante la struttura cristallina, nella maggior parte dei casi è preferibile l'uso della diffrazione a raggi X (XRD).

Per confermare la composizione della sostanza devono essere forniti metodi quantitativi, ad esempio tecniche cromatografiche quali la gascromatografia (GC) o la cromatografia liquida ad alta prestazione (HPLC), abbinate a una tecnica di rivelazione. Per le sostanze inorganiche possono essere più adatte la diffrazione a raggi X (XRD), la fluorescenza a raggi X (XRF), la spettroscopia di assorbimento atomico (AAS), la spettroscopia di emissione ottica al plasma ad accoppiamento induttivo (ICP-OES) o la spettrometria di massa al plasma ad

¹¹ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i relativi criteri possono essere reperite negli Guida alle prescrizioni in materia di informazione e alla valutazione della sicurezza chimica, capitolo R.11: Valutazione PBT.

accoppiamento induttivo (ICP-MS) Se del caso, si devono usare anche altre tecniche valide di separazione dei costituenti.

La descrizione dei metodi analitici deve includere i protocolli sperimentali seguiti e l'interpretazione dei risultati riportati.

I metodi analitici sono soggetti a continui progressi e miglioramenti. Pertanto è responsabilità del dichiarante presentare dati analitici appropriati.

4.2.2. Sostanze multi-componente

Una sostanza multicomponente è una sostanza, definita dalla sua composizione quantitativa, in cui più di un costituente principale è presente in un intervallo di concentrazione compreso tra $\geq 10\%$ (p/p) e $< 80\%$ (p/p). Una sostanza multi-componente è il risultato di un processo di fabbricazione ⁽¹²⁾.

Il regolamento REACH richiede la registrazione di una sostanza così come prodotta. Se una sostanza multi-componente è fabbricata, tale sostanza multi-componente deve essere registrata ⁽¹³⁾ ⁽¹⁴⁾. Si deve decidere caso per caso in che misura le diverse fasi di produzione della sostanza sono contemplate nella definizione di «fabbricazione». Non occorre testare la sostanza in quanto tale se il profilo di pericolo della sostanza può essere sufficientemente descritto mediante le informazioni relative ai singoli costituenti.

Convenzione per la denominazione

Una sostanza multi-componente è denominata come una massa di reazione dei costituenti principali della sostanza in quanto tale, ossia non dei materiali di partenza necessari per produrla. Il formato generico è: «Massa di reazione di [nomi dei costituenti principali]». Si raccomanda che i nomi dei costituenti vengano presentati in ordine alfabetico e che siano separati dalla congiunzione «e». Solo i costituenti principali tipicamente $\geq 10\%$ contribuiscono alla denominazione. In linea di principio, i nomi dovrebbero essere attribuiti in lingua inglese secondo le regole di nomenclatura IUPAC. In aggiunta si possono fornire altre designazioni accettate a livello internazionale.

Identificatori

Una sostanza multi-componente è identificata dalla denominazione chimica e da tutti gli altri identificatori disponibili della sostanza in quanto tale, nonché dall'identità chimica dei costituenti (compresa la formula molecolare e strutturale o la struttura o le strutture cristalline). Devono essere identificate eventuali impurezze e/o additivi della sostanza multi-componente. Devono essere fornite le concentrazioni e gli intervalli di concentrazione tipici dei costituenti, delle impurezze e/o degli additivi. Tutte queste informazioni devono essere corroborate da dati analitici.

Esempio				
Costituenti principali	Contenuto (%)	Impurezza	Contenuto (%)	Identità della sostanza
o-xilene m-xilene	50 45	p-xilene	5	Massa di reazione dell'm-xilene e dell'o-xilene

Per le sostanze multi-componente la composizione chimica è nota e più di un costituente principale è pertinente ai fini dell'identificazione della sostanza. Inoltre, la composizione chimica della sostanza è prevedibile, così come i valori e gli intervalli tipici. I costituenti principali devono essere specificati completamente mediante tutti i parametri pertinenti. La somma delle concentrazioni tipiche dei costituenti principali ($\geq 10\%$) e delle impurezze ($<$

⁽¹²⁾ La differenza tra miscela e sostanza multi-componente risiede nel fatto che una miscela viene ricavata mischiando due o più sostanze, senza che avvenga una reazione chimica, mentre una sostanza multicomponente è il risultato di una reazione chimica.

⁽¹³⁾ Il regolamento REACH prevede che alcune sostanze siano esentate dall'obbligo di registrazione (per esempio, le sostanze riportate in elenco nell'allegato IV).

⁽¹⁴⁾ Questo approccio non può essere applicato ad alcune specifiche sostanze come i minerali (cfr. capitolo 7.5 per maggiori dettagli).

10 %) deve essere pari al 100 %.

Per la corretta identificazione di una sostanza multi-componente, le sostanze aggiunte intenzionalmente (ad es. regolatori del pH o agenti coloranti) non devono essere incluse nel bilancio di massa.

Le impurezze presenti in una concentrazione ≥ 1 % devono essere specificate mediante la denominazione e tutti gli identificatori disponibili. Le impurezze che sono pertinenti ai fini della classificazione e/o della valutazione PBT devono sempre essere specificate dagli stessi identificatori, indipendentemente dalla loro concentrazione.

Esempio								
Costituente principale	Contenuto superiore (%)	Contenuto tipico (%)	Contenuto inferiore (%)	Impurezza	Contenuto superiore (%)	Contenuto tipico (%)	Contenuto inferiore (%)	Identità della sostanza
anilina	90	75	65	fenantrene	5	4	1	Massa di reazione di anilina e naftalene
naftalina	35	20	10					

In base alle regole di cui al presente documento d'orientamento, questa è una sostanza multi-componente. Sebbene l'intervallo di un costituente sia > 80 %, ciò accade solo occasionalmente e la composizione tipica è < 80 %.

Ogniqualvolta un costituente principale di una sostanza multi-componente è ≥ 80 % o < 10 % (p/p), deve essere fornita una giustificazione di tale scostamento. Un possibile esempio di scostamento giustificato è:

- il costituente è solo occasionalmente $\geq 80\%$ o $< 10\%$.

Per esempio, una sostanza contiene due costituenti, uno all'85 % e l'altro al 10 %, e il resto è rappresentato da impurezze. Entrambi i costituenti contribuiscono e sono essenziali per l'effetto tecnico desiderato della sostanza. In questo caso, nonostante un costituente sia presente a una concentrazione $> 80\%$, la sostanza può essere descritta come una sostanza a due costituenti.

Informazioni analitiche

Devono essere forniti dati qualitativi sufficienti a confermare l'identità dei costituenti e delle impurezze di una sostanza mono-componente. Per confermare l'identità della sostanza possono risultare adatti numerosi metodi spettroscopici, in particolare la spettroscopia di assorbimento UV/visibile (UV/VIS), la spettroscopia a infrarossi (IR), la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (RMN) e la spettroscopia di massa (MS). Per le sostanze inorganiche o organiche e/o metallico-organiche rilevabili/misurabili mediante la struttura cristallina, nella maggior parte dei casi è preferibile l'uso della diffrazione a raggi X (XRD).

Per confermare la composizione della sostanza devono essere forniti metodi quantitativi, ad esempio tecniche cromatografiche quali la gascromatografia (GC) o la cromatografia liquida ad alta prestazione (HPLC), abbinate a una tecnica di rivelazione. Per le sostanze inorganiche possono essere più adatte la diffrazione a raggi X (XRD), la fluorescenza a raggi X (XRF), la spettroscopia di assorbimento atomico (AAS), la spettroscopia di emissione ottica al plasma ad accoppiamento induttivo (ICP-OES) o la spettrometria di massa al plasma ad accoppiamento induttivo (ICP-MS). Se del caso, si devono usare anche altre tecniche valide di separazione dei costituenti.

La descrizione dei metodi analitici deve includere i protocolli sperimentali seguiti e

l'interpretazione dei risultati riportati.

I metodi analitici sono soggetti a continui progressi e miglioramenti. Pertanto è responsabilità del dichiarante presentare dati analitici appropriati.

Registrazione di singoli costituenti di una sostanza multi-componente

In generale, la registrazione dell'identità delle sostanze ai fini della registrazione dovrebbe seguire l'approccio applicato alle sostanze multi-componente (vale a dire registrazione della sostanza multi-componente). Scostandosi da tale approccio, si possono registrare singoli costituenti, qualora ciò sia giustificabile. La possibilità di scostarsi dal caso standard per identificare (e potenzialmente registrare) sostanze tramite i loro singoli costituenti è data quando:

- non c'è alcuna riduzione nelle prescrizioni in materia di informazione;
- esistono dati sufficienti a giustificare l'approccio della registrazione dei singoli costituenti, ossia l'approccio non dovrebbe normalmente esigere ulteriori sperimentazioni (su animali vertebrati) rispetto all'approccio standard;
- la registrazione dei singoli costituenti determina una situazione di maggiore efficienza (vale a dire consente di evitare numerose registrazioni di sostanze composte dagli stessi costituenti);
- sono fornite le informazioni sulla composizione delle singole masse di reazione.

Non si dovrebbe abusare della flessibilità offerta per aggirare i requisiti relativi ai dati. Nel caso per esempio di 1 200 tonnellate l'anno (tpa) di una sostanza multi-componente «(C + D)», con una composizione di 50 % C e 50 % D, questo approccio porterebbe a due registrazioni con le seguenti informazioni:

sostanza C

- tonnellaggio 600
- prescrizioni relative ai dati da soddisfare per >1000 tonnellate (allegato X)

Sostanza D

- Tonnellaggio 600
- Prescrizioni relative ai dati da soddisfare per >1000 tonnellate (allegato X)

Questo approccio deve essere associato alla prescrizione del REACH di sommare volumi della stessa sostanza per entità giuridica. La proposta è di stabilire le prescrizioni relative ai dati come segue:

- sommare tutti i volumi dei singoli costituenti (secondo le quantità nella sostanza);
- fare riferimento al volume massimo di una sostanza contenente quel costituente.

Le prescrizioni in materia di informazione dovrebbero essere stabilite in base al risultato più elevato. Per la dichiarazione dei tonnelli, si dovrebbe prendere in considerazione il risultato della somma del tonnellaggio di ogni singolo costituente. Di seguito sono forniti esempi semplificati volti a illustrare l'attuazione pratica di questo approccio.

Esempio 1

La sostanza multi-componente «C+D+E» è il risultato di un processo nell'ambito di un'unica entità giuridica, da cui risultano differenti sostanze:

- sostanza 1: 50 % C, 25 % D e 25 % E, 1 100 tpa
- sostanza 2: 50 % C e 50 % D, 500 tpa

Anche in questo caso il prodotto di reazione è il punto iniziale: le due sostanze dovrebbero essere registrate come sostanze multi-componente. Se si segue l'approccio della registrazione

dei singoli costituenti ⁽¹⁵⁾, si dovrebbe applicare quanto segue:

La dichiarazione della sostanza D in questo caso sarà:

- tonnellaggio: $(25 \% * 1\ 100) + (50 \% * 500) = 525$ tpa

La determinazione delle prescrizioni in materia di informazione si basa sulla prescrizione più stringente. In questo caso: >1 000 tpa, poiché il tonnellaggio totale della sostanza multi-componente «C+D+E» è superiore a 1 000 tpa.

NB: In questo esempio le sostanze C ed E dovrebbero essere registrate di conseguenza.

Esempio 2

La sostanza multi-componente «G+H+I» è il risultato di un processo nell'ambito di un'unica entità giuridica, da cui risultano differenti sostanze:

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

Dichiarazione della sostanza G:

- tonnellaggio: $(65 \% * 90) + (60 \% * 90) = 112,5$ tpa

La determinazione delle prescrizioni in materia di informazione si basa sulla prescrizione più stringente. In questo caso: >100 tpa, poiché il tonnellaggio totale del costituente G è superiore a 100 tpa.

NB: In questo esempio le sostanze H e I dovrebbero essere registrate di conseguenza.

Oltre alla definizione delle prescrizioni in materia di informazione menzionate, un'altra considerazione è il numero di nuovi studi (su animali vertebrati) che devono essere condotti. Prima di decidere una strategia, il dichiarante potenziale deve considerare se esistono studi sufficienti (su animali vertebrati) e se la flessibilità proposta porterà a un numero maggiore o minore di nuove sperimentazioni (su animali vertebrati). Si dovrebbe scegliere la strategia che evita nuove sperimentazioni (su animali vertebrati).

In caso di dubbio il percorso standard per riportare l'identità della sostanza ai fini della registrazione dovrebbe sempre essere l'identificazione della sostanza così come è fabbricata.

4.2.3. Sostanze con composizione chimica definita e altri identificatori principali

Alcune sostanze (per esempio i minerali inorganici) che possono essere identificate mediante la loro composizione chimica devono essere ulteriormente specificate tramite identificatori aggiuntivi per poter attribuire loro un'identificazione. Queste sostanze possono essere sostanze mono-componente o sostanze multi-componente ma, in aggiunta ai parametri identificativi delle sostanze di cui ai capitoli precedenti, richiedono altri identificatori principali per registrare l'identità della sostanza in modo inequivocabile.

Esempi

Alcuni minerali non metallici (da fonti naturali o realizzati dall'uomo) con strutture uniche necessitano anche della morfologia e della composizione minerale per un'identificazione inequivocabile della sostanza. Un esempio è il caolino (CAS 1332-58-7) composto da

⁽¹⁵⁾ L'esempio è inteso solo a illustrare la determinazione delle prescrizioni in materia di informazione e la registrazione dei volumi. Non indica se l'approccio è giustificabile in questo caso.

caolinite, silicato di potassio e alluminio, feldspato e quarzo.

Indicazioni sull'adempimento degli obblighi REACH specifici per le sostanze in «nanoforme» sono fornite nell'*Appendice per le nanoforme da applicare alla Guida alla registrazione e all'identificazione delle sostanze* ⁽¹⁶⁾. Le indicazioni riportate riguardano specifiche problematiche dei nanomateriali correlate all'identificazione e alla caratterizzazione di nanoforme.

Convenzione per la denominazione

In linea di principio si deve seguire la stessa convenzione per la denominazione utilizzata per le sostanze mono-componente (cfr. capitolo 4.2.1) o per le sostanze multi-componente (cfr. capitolo 4.2.2).

Relativamente ai minerali inorganici, per i costituenti si possono utilizzare i nomi mineralogici. Per esempio, l'apatite è una sostanza multi-componente composta da un gruppo di minerali di fosfato, solitamente indicati come idrossiapatite, fluoroapatite e cloroapatite, denominati così a causa delle elevate concentrazioni di ioni OH⁻, F⁻ o Cl⁻, rispettivamente, nel cristallo. La formula della miscela delle tre specie più comuni è Ca₅(PO₄)₃(OH, F, Cl). Un altro esempio è l'aragonite, una delle strutture cristalline speciali del carbonato di calcio.

Identificatori

Queste sostanze sono identificate e denominate in base alle regole relative alle sostanze mono-componente (cfr. capitolo 4.2.1) o alle sostanze multi-componente (cfr. capitolo 4.2.2). Gli altri parametri identificativi principali specifici da aggiungere dipendono dalla sostanza. Esempi di altri identificatori principali possono essere la composizione elementare con dati spettrali, la struttura cristallina rivelata dalla diffrazione a raggi X (XRD), i picchi di assorbimento degli infrarossi, l'indice di rigonfiamento, la capacità di scambio cationico o altre proprietà fisiche e chimiche.

Per i minerali è importante combinare i risultati della composizione elementare con i dati spettrali, per identificarne la composizione mineralogica e la struttura cristallina. Quanto sopra è quindi confermato dalle proprietà fisico-chimiche caratteristiche quali la struttura cristallina (rivelata dalla diffrazione a raggi X), la forma, la durezza, la capacità di rigonfiamento, la densità e/o l'area superficiale.

Esempi di identificatori principali aggiuntivi specifici possono essere forniti per i minerali specifici, in quanto i minerali hanno proprietà fisico-chimiche caratteristiche che consentono il completamento della loro identificazione, per esempio: bassissima durezza per il talco, capacità di rigonfiamento della bentonite, forme della diatomite, altissima densità della barite e area superficiale (assorbimento di azoto).

Informazioni analitiche

Il criterio principale è che devono essere fornite tutte le informazioni necessarie per confermare la struttura della sostanza. Devono essere fornite le stesse informazioni analitiche presentate per le sostanze mono-componente (cfr. capitolo 4.2.1) o per le sostanze multi-componente (cfr. capitolo 4.2.2).

⁽¹⁶⁾ Appendice per le nanoforme da applicare alla Guida alla registrazione e all'identificazione delle sostanze, disponibile alla pagina <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

4.3. Sostanze UVCB

Le sostanze dalla composizione sconosciuta o variabile, i prodotti di reazioni complesse o i materiali biologici⁽¹⁷⁾,⁽¹⁸⁾,⁽¹⁹⁾, chiamati anche sostanze UVCB, non possono essere sufficientemente identificati dalla loro composizione chimica poiché:

- il numero di costituenti è relativamente elevato e/o
- la composizione è, in misura significativa, sconosciuta e/o
- la variabilità della composizione è relativamente elevata o scarsamente prevedibile.

Di conseguenza, le sostanze UVCB richiedono altri tipi di dati ai fini dell'identificazione, oltre a quanto si conosce sulla loro composizione chimica.

Dalla Tabella 5 si può vedere che gli identificatori principali per i vari tipi di sostanze UVCB sono correlati alla fonte della sostanza e al processo usato; oppure appartengono a un gruppo di «altri identificatori principali» (per esempio «impronte cromatografiche o di altro tipo»). Il numero e il tipo di identificatori indicati nella Tabella 5 rappresentano un'illustrazione della variabilità dei tipi e non devono essere considerati come una panoramica completa. Quando la composizione chimica per esempio di un prodotto di reazioni complesse o di una sostanza di origine biologica è nota, la sostanza dovrebbe essere identificata come sostanza mono-componente o multi-componente, a seconda del caso. Se una sostanza viene definita come UVCB ne consegue che nessuna modifica rilevante relativa alla materia di origine o al processo potrà condurre alla formazione di una sostanza diversa che dovrebbe essere nuovamente registrata. Se una miscela di reazione è identificata come una «sostanza multi-componente», la sostanza può derivare da una fonte differente e/o da processi differenti nella misura in cui la composizione della sostanza finale rimane entro l'intervallo specificato. Pertanto una nuova registrazione non sarebbe richiesta.

Indicazioni generiche sulle sostanze UVCB sono disponibili nel capitolo 4.3.1, mentre orientamenti specifici sulle sostanze con variazioni nelle lunghezze della catena di carbonio, sulle sostanze ottenute dal petrolio o da fonti simili al petrolio e agli enzimi, come tipi specifici di sostanze UVCB, sono disponibili nel capitolo 4.3.2.

4.3.1. Indicazioni generali sulle sostanze UVCB

Il presente capitolo del documento d'orientamento fornisce indicazioni generiche sulle modalità di utilizzo di determinati identificatori principali, oltre ai parametri identificativi delle sostanze del regolamento REACH, allegato IV (punto 2), per identificare sostanze UVCB.

Informazioni sulla composizione chimica

Le sostanze UVCB non possono essere specificate in modo univoco mediante la denominazione IUPAC dei costituenti, in quanto non tutti i costituenti possono essere identificati, oppure possono essere specificate genericamente ma con una mancanza di specificità dovuta alla variabilità della composizione esatta. A causa dell'assenza di differenziazione tra costituenti e impurezze, i termini «costituenti principali» e «impurezze» non devono essere considerati rilevanti per le sostanze UVCB.

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

⁽¹⁸⁾ Registrazione all'inventario TSCA (Toxic Substances Control Act) dell'EPA statunitense (2005-B) per l'associazione di due o più sostanze: prodotti di una reazione complessa.

⁽¹⁹⁾ Registrazione all'inventario TSCA (Toxic Substances Control Act) dell'EPA statunitense (2005-D) per sostanze chimiche di composizione sconosciuta o variabile, prodotti di una reazione complessa o materiali biologici: sostanze UVCB.

Tuttavia, se conosciute, occorre fornire la composizione chimica e l'identità dei costituenti. Spesso la descrizione della composizione può essere fornita in modo più generico, per esempio «acidi grassi lineari C8-C16» o «etossilati di alcol con alcoli C10-C14 e 4-10 unità di etossilato». Inoltre, le informazioni sulla composizione chimica possono essere fornite sulla base di norme o campioni di riferimento ben noti e in molti casi si possono usare in aggiunta indici e codici esistenti. Altre informazioni generiche sulla composizione possono consistere nelle cosiddette «impronte», vale a dire, per esempio, immagini cromatografiche o spettrali che presentano un modello di distribuzione di picco caratteristico.

Per una sostanza UVCB, tutti i costituenti presenti in concentrazioni $\geq 10\%$ e tutti gli altri costituenti noti presenti in concentrazioni $< 10\%$ devono essere specificati con una denominazione IUPAC in lingua inglese, con le concentrazioni tipiche e gli intervalli di concentrazione.

Inoltre, se disponibile, è necessario fornire per ogni costituente un identificatore numerico (numero CAS e/o numero CE o numero in elenco).

I costituenti che non possono essere identificati singolarmente sono descritti in gruppi in base alla natura chimica. In questo caso, occorre specificare per ogni gruppo almeno una denominazione chimica, la concentrazione tipica e l'intervallo di concentrazione. Inoltre, se disponibili, si devono fornire informazioni molecolari e strutturali.

I costituenti pertinenti ai fini della classificazione e/o della valutazione PBT ⁽²⁰⁾ della sostanza devono sempre essere identificati dagli stessi identificatori, indipendentemente dalla loro concentrazione.

I costituenti sconosciuti che non contribuiscono alla classificazione devono essere identificati, se possibile, mediante una descrizione generica della loro natura chimica. Gli additivi devono essere specificati per intero in modo simile a quello descritto per le sostanze ben definite.

Parametri di identificazione principali: nome, fonte e processo

Dato che la composizione chimica da sola non è sufficiente ai fini dell'identificazione, la sostanza deve in genere essere identificata tramite la sua denominazione, la sua origine o fonte e una descrizione del processo di fabbricazione. Anche altre proprietà della sostanza possono essere importanti identificatori, come identificatori generici pertinenti (per esempio il punto di ebollizione) o come identificatori fondamentali per gruppi specifici di sostanze (per esempio l'attività catalitica per gli enzimi).

1. Convenzione per la denominazione

In generale il nome di una sostanza UVCB è una combinazione di fonte e processo secondo il seguente schema generale: prima la fonte poi il processo o i processi.

- Una sostanza derivata da fonti biologiche è identificata dal nome della specie.
- Una sostanza derivata da fonti non biologiche è identificata dai materiali iniziali.
- I processi sono identificati dal tipo di reazione chimica in caso di sintesi di nuove molecole, o come un tipo di fase di raffinazione, per esempio estrazione, frazionamento, concentrazione, o come residuo.

⁽²⁰⁾ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i relativi criteri possono essere reperite nella Guida alle prescrizioni in materia di informazione e alla valutazione della sicurezza chimica, capitolo R.11: Valutazione PBT.

Esempi	
Numero CE	Nome CE
296-358-2	Lavanda, <i>Lavandula hybrida</i> , est., acetilata
307-507-9	Lavanda, <i>Lavandula latifolia</i> , est., solforizzata, sale di palladio

Nel caso dei prodotti di reazione, nell'inventario CE sono stati usati schemi diversi, per esempio

- EINECS: materiale di partenza principale, prodotto/i di reazione di altro/i materiale/i di partenza
- ELINCS: prodotto/i di reazione del/i materiale/i di partenza

Esempi	
Numero CE	Nome CE
232-341-8	Acido nitroso, prodotti di reazione con 4-metil-1,3-benzenediammina idrocloruro
263-151-3	Acidi grassi, cocco, prodotti di reazione con dietilentriammina
400-160-5	Prodotti di reazione di acidi grassi di tallolio, dietanolammina e acido borico
428-190-4	Prodotto di reazione di: 2,4-diammino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-il)etil]-1,3,5-triazina e acido cianurico

Nel presente documento d'orientamento, il formato generico del nome del prodotto o dei prodotti di reazione è «Prodotto di reazione di [nomi dei materiali di partenza]». In linea di principio, i nomi dovrebbero essere attribuiti in lingua inglese secondo le regole di nomenclatura IUPAC. In aggiunta si possono fornire altre designazioni accettate a livello internazionale. Si raccomanda di sostituire la parola «reazione» nel nome con il tipo specifico di reazione descritta in modo generico, per esempio esterificazione o formazione di sali ecc. (cfr. indicazioni nelle quattro sottoclassi specifiche delle UVCB di seguito).

2. Fonte

La fonte può essere suddivisa nei due gruppi di seguito riportati.

2.1. Fonti di natura biologica

Le sostanze di origine biologica devono essere definite dal genere, dalla specie e della famiglia, per esempio *Pinus cembra*, *Pinaceae* significa *Pinus* (genere), *cembra* (specie), *Pinaceae* (famiglia), e dal ceppo o tipo genetico, se pertinenti. Se appropriato, si dovrebbe indicare anche il tessuto o la parte dell'organismo usati per l'estrazione della sostanza, per esempio midollo osseo, pancreas oppure tronco, semi o radici.

Esempi	
Numero CE	Nome CE
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, est. Descrizione CE Estratti e loro derivati fisicamente modificati come tinture, concrete, assolute, oli essenziali, oleoresine, terpeni, frazioni prive di terpeni, distillati, residui ecc., ottenuti da Saccharomyces cerevisiae, Saccharomycelaceae.
296-350-9	Arnica mexicana, est. Descrizione CE Estratti e loro derivati fisicamente modificati come tinture, concrete, assolute, oli essenziali, oleoresine, terpeni, frazioni prive di terpeni, distillati, residui ecc., ottenuti da Arnica mexicana, Compositae.

2.2. Fonti chimiche o minerali

Nel caso dei prodotti di reazioni chimiche, i materiali di partenza devono essere descritti con la loro denominazione IUPAC in lingua inglese. Le fonti minerali devono essere descritte in termini generici per esempio minerali di fosfato, bauxite, caolino, gas minerale, carbone, torba.

3. Processo

I processi sono identificati dal tipo di reazione chimica in caso di sintesi di nuove molecole, o come un tipo di fase di raffinazione, per esempio estrazione, frazionamento, concentrazione, o come residuo di una raffinazione.

Per alcune sostanze, per esempio i derivati chimici, il processo deve essere descritto come una combinazione di raffinazione e sintesi.

3.1 Sintesi

Tra i materiali di partenza si verifica una determinata reazione chimica o biochimica da cui deriva la sostanza. Alcuni esempi sono: reazione di Grignard, solfonazione, separazione enzimatica mediante proteasi o lipasi, ecc.; anche molte reazioni di derivazione appartengono a questo tipo.

Per le sostanze sintetizzate recentemente, per le quali non si può indicare la composizione chimica, i materiali di partenza sono l'identificatore principale insieme alla specifica della reazione, cioè il tipo di reazione chimica. Il tipo di reazione chimica è indicativo delle molecole che si prevede siano presenti nella sostanza. Esistono diversi tipi di reazione chimica finale: idrolisi, esterificazione, alchilazione, clorurazione, ecc. Poiché ciò fornisce solo informazioni generiche sulle possibili sostanze prodotte, in molti casi per una caratterizzazione e identificazione piena della sostanza sarà necessaria anche un'impronta cromatografica.

Esempi	
Numeri CE	Nome CE
294-801-4	Olio di semi di lino, epossidato, prodotti di reazione con tetraetilenepentammina
401-530-9	Prodotto di reazione di (2-idrossi-4-(3-propenossi)benzofenone e trietossisilano) con (prodotto di idrolisi di silice e metiltrimetossisilano)

3.2 Raffinazione

La raffinazione può essere applicata in molti modi a sostanze di origine naturale o minerale in cui l'identità chimica dei costituenti non è modificata ma è modificata la concentrazione dei costituenti, per esempio la lavorazione a freddo di tessuto vegetale seguita da estrazione con alcol.

La raffinazione può essere ulteriormente definita in processi quali l'estrazione. L'identificazione della sostanza dipende dal tipo di processo:

- per sostanze derivate mediante metodi fisici, per esempio raffinazione o frazionamento, devono essere specificati l'intervallo soglia e il parametro della frazione (per esempio: dimensione molecolare, lunghezza della catena, punto di ebollizione, intervallo di volatilità, ecc.);
- per sostanze derivate mediante concentrazione, per esempio prodotti da processi metallurgici, precipitati centrifugati, residui di filtrazione, ecc., si deve specificare la fase di concentrazione insieme alla composizione generica della sostanza risultante rispetto al materiale di partenza;

Esempi	
Numero CE	Nome CE
408-250-6	Concentrato di composti di organotungsteno (prodotti di reazione di esacloruro di tungsteno con 2-metilpropan-2-olo, nonilfenolo e pentan-2,4-dione)

- per i residui di una reazione specifica, per esempio scorie, catrami e frazioni pesanti, il processo deve essere descritto insieme alla composizione generica della sostanza risultante;

Esempi	
Numero CE	Nome CE
283-659-9	Stagno, residui di fusione Descrizione CE Sostanza risultante dall'uso e dalla produzione di stagno e delle sue leghe ottenuta da fonti primarie e secondarie, incluse sostanze intermedie vegetali riciclate. È costituita principalmente da composti di stagno e può contenere altri metalli non ferrosi residui e relativi composti.
293-693-6	Farina di soia, residuo d'estraz. delle proteine

Descrizione CE
Sottoprodotto contenente principalmente carboidrati, prodotto mediante estrazione etanolica di semi di soia sgrassati.

- per gli estratti, si devono indicare il metodo di estrazione, il solvente usato per l'estrazione e altre condizioni pertinenti (per esempio temperatura/intervallo di temperatura);
- per la lavorazione combinata, oltre alle informazioni sulla fonte si deve specificare ogni fase del processo (in modo generico). Questa lavorazione combinata è particolarmente pertinente nel caso di derivazioni chimiche.

Esempi:

- una pianta è prima sottoposta a estrazione, quindi l'estratto è distillato e la frazione distillata dell'estratto vegetale è usata per la derivazione chimica. La sostanza risultante può essere ulteriormente purificata. Il prodotto purificato può infine essere ben definito mediante la sua composizione chimica e non occorre identificare la sostanza come UVCB. Se il prodotto deve ancora essere considerato come UVCB, la lavorazione combinata può essere descritta come un «derivato chimico purificato di una frazione distillata dell'estratto vegetale»;
- se l'ulteriore lavorazione di un estratto include solo la derivazione fisica, la composizione cambierà ma senza la sintesi intenzionale di nuove molecole. Ciononostante, la variazione della composizione risulta in una sostanza differente, per esempio un distillato o un precipitato dell'estratto vegetale;
- per la produzione di prodotti derivati del petrolio, la derivazione chimica e il frazionamento sono spesso usati in combinazione. Per esempio, la distillazione del petrolio seguita da cracking genera una frazione del materiale di partenza e anche nuove molecole. Pertanto, in tal caso, entrambi i tipi di processi dovrebbero essere identificati oppure il distillato dovrebbe essere specificato come il materiale di partenza del cracking. In particolare ciò si applica ai derivati del petrolio che risultano spesso da una combinazione di processi. Tuttavia, per l'identificazione delle sostanze derivate dal petrolio, si può usare un sistema specifico separato (vedere capitolo 4.3.2.2).

Poiché un derivato chimico di un estratto non contiene gli stessi costituenti dell'estratto originale, esso deve essere considerato come una sostanza diversa. Questa regola può avere come conseguenza il fatto che l'identificazione mediante nome e descrizione si scosti dal nome e dalla descrizione EINECS precedenti. Al momento della creazione dell'inventario EINECS, gli estratti ottenuti da processi diversi, solventi diversi e anche i derivati fisici o chimici erano spesso contemplati da un'unica voce. Tuttavia in REACH queste sostanze dovrebbero essere registrate come sostanze separate.

4. Altri parametri per l'identificazione delle sostanza

Oltre alla denominazione chimica, alla fonte e alla specifica del processo, una sostanza UVCB dovrebbe includere tutte le altre informazioni pertinenti prescritte dall'allegato VI, punto 2 del regolamento REACH.

Specialmente per tipi specifici di sostanze UVCB possono essere pertinenti altri parametri identificativi. Ulteriori identificatori possono includere:

- descrizione generica della composizione chimica;
- impronta cromatografica o altri tipi di impronta;
- materiale di riferimento (per es. ISO);
- parametri fisico-chimici (per es. punto di ebollizione);
- numero del Colour Index;

- numero AISE.

Indicazioni specifiche sulle regole e sui criteri concernenti l'uso del nome, della fonte e delle informazioni sul processo per l'identificazione delle sostanze UVCB sono incluse in seguito per vari tipi di fonti e processi. Nei paragrafi seguenti sono descritti quattro sottotipi di sostanze UVCB come una combinazione di fonti biologiche o chimiche/minerali e di processi (sintesi o raffinazione).

UVCB sottotipo 1, in cui la fonte è biologica e il processo è una sintesi

Le sostanze di natura biologica possono essere modificate in una lavorazione (bio)chimica per generare costituenti che non erano presenti nel materiale di partenza, per esempio derivati chimici di estratti vegetali o prodotti del trattamento enzimatico degli estratti. Per esempio, le proteine possono essere idrolizzate mediante proteasi per generare oligopeptidi o la cellulosa del legno può essere carbossilata per ottenere carbossimetilcellulosa (CMC).

Anche i prodotti della fermentazione possono appartenere a questo sottotipo di UVCB. Per esempio la vinaccia è un prodotto della fermentazione dello zucchero che, rispetto allo zucchero, contiene molti costituenti diversi. Quando i prodotti della fermentazione sono ulteriormente purificati, le sostanze possano infine diventare completamente identificabili attraverso la loro composizione chimica e non dovrebbero più essere identificate come sostanze UVCB.

Gli enzimi sono un gruppo speciale di sostanze che può essere ricavato mediante estrazione e ulteriore raffinazione da una fonte di origine biologica. Sebbene la fonte e il processo possano essere specificati dettagliatamente, ciò non genera informazioni specifiche sull'enzima. Per queste sostanze si deve utilizzare un sistema specifico di classificazione, denominazione e identificazione (cfr. capitolo 4.3.2.3).

Per l'identificazione della sostanza, si deve indicare la fase di processo finale e/o qualsiasi altra fase di processo che sia pertinente ai fini dell'identificazione della sostanza.

Una descrizione del processo chimico deve essere una descrizione generica del tipo di processo (esterificazione, idrolisi alcalina, alchilazione, clorurazione, sostituzione, ecc.) insieme alle condizioni di processo pertinenti.

Una descrizione del processo biochimico può essere una descrizione generica della reazione catalizzata, insieme al nome dell'enzima catalizzante la reazione.

Per le sostanze prodotte mediante fermentazione o colture (tissutali) di specie si devono indicare la specie di fermentazione, il tipo e le condizioni generali di fermentazione (a lotti o a flusso continuo, aerobica, anaerobica, anossica, temperatura, pH, ecc.), unitamente alle eventuali ulteriori fasi di processo applicate per isolare i prodotti della fermentazione, per esempio centrifugazione, precipitazione, estrazione, ecc. Se queste sostanze sono ulteriormente raffinate, ciò può risultare in una frazione, un concentrato o un residuo. Tali sostanze ulteriormente elaborate sono identificate con la specifica aggiuntiva delle ulteriori fasi di processo.

UVCB sottotipo 2, in cui la fonte è chimica o minerale e il processo è una sintesi

Le sostanze UVCB ottenute da fonti chimiche o minerali, derivate tramite un processo in cui sono sintetizzate nuove molecole, sono «prodotti di reazione». Esempi di prodotti di reazioni chimiche sono i prodotti dell'esterificazione, dell'alchilazione o della clorurazione. Le reazioni biochimiche mediante applicazione di enzimi isolati sono tipi speciali di reazioni chimiche. Tuttavia, se si applica una via biochimica complessa di sintesi usando microrganismi completi, è preferibile considerare la sostanza risultante come un prodotto della fermentazione e identificarla tramite il processo di fermentazione e le specie di fermentazione piuttosto che tramite i materiali di partenza (vedere UVCB sottotipo 4).

Non tutti i prodotti di reazione dovrebbero automaticamente essere specificati come UVCB. Se un prodotto di reazione può essere sufficientemente definito tramite la composizione chimica (includendo una certa variabilità), si dovrebbe preferire l'identificazione come sostanza multi-componente (cfr. capitolo 4.2.2). Solo quando la composizione del prodotto di reazione non è sufficientemente nota o è scarsamente prevedibile, la sostanza dovrebbe essere identificata come una sostanza UVCB («prodotto di reazione»). L'identificazione di un prodotto di reazione si basa sui materiali di partenza della reazione e sul processo di reazione (bio)chimica in cui la sostanza è generata.

Esempi		
Numero CE	Nome EINECS	Numero CAS
294-006-2	Acido nonandioico, prodotti di reazione con 2-ammino-2-metil-1-propanolo	91672-02-5
294-148-5	Formaldeide, prodotti di reazione con glicole dietilenico e fenolo	91673-32-4

Un identificatore principale dei prodotti di reazione è la descrizione del processo di fabbricazione. Per l'identificazione delle sostanze si deve indicare la fase finale del processo o quella più pertinente. La descrizione del processo chimico deve essere una descrizione generica del tipo di processo (per esempio esterificazione, idrolisi alcalina, alchilazione, clorurazione, sostituzione, ecc.) insieme alle condizioni di processo pertinenti. Un processo biochimico deve essere descritto dal tipo di reazione, insieme al nome dell'enzima catalizzante la reazione.

UVCB sottotipo 3, in cui la fonte è biologica e il processo è una raffinazione

Le sostanze UVCB di origine biologica, risultanti da un processo di raffinazione in cui non si generano intenzionalmente nuove molecole possono essere per esempio: estratti, frazioni di un estratto, concentrati di un estratto, estratto purificato o residui di processo di sostanze di origine biologica.

Non appena l'estratto è ulteriormente lavorato, la sostanza non è più identica all'estratto ma è un'altra sostanza che appartiene a un altro sottotipo UVCB, per esempio una frazione o un residuo di un estratto. Queste sostanze devono essere specificate con parametri di lavorazione aggiuntivi (ulteriori). Se l'estratto è modificato in reazioni chimiche o biochimiche che generano nuove molecole (derivati), l'identificazione della sostanza avviene usando le indicazioni specificate per UVCB sottotipo 2 o il capitolo 4.2 per una sostanza ben definita.

Questa differenziazione degli estratti ulteriormente lavorati può avere come conseguenza che il nuovo nome e la nuova descrizione differiscano da quelli nell'inventario EINECS. Al momento della creazione dell'inventario, tale differenziazione non è stata fatta ed è possibile che tutti i tipi di estratti ottenuti con solventi diversi e ulteriori fasi di processo siano stati inseriti sotto un'unica voce.

Il primo identificatore principale di questo sottotipo di sostanza UVCB è rappresentato dalla famiglia, dal genere e dalla specie dell'organismo da cui la sostanza ha origine. Se appropriato, si dovrebbe indicare il tessuto o la parte dell'organismo usati per l'estrazione della sostanza, per esempio midollo osseo, pancreas oppure tronco, semi o radici. Per le sostanze di origine microbiologica si devono definire il ceppo e il tipo genetico della specie.

Se la sostanza UVCB è derivata da una specie diversa, sarà considerata come una sostanza diversa, anche se la composizione chimica potrebbe essere simile.

Esempi	
Numero CE	Nome EINECS
290-977-1	Estratto di campeggio ossidato (Haematoxylon campechianum) Descrizione CE Questa sostanza è identificata nel Colour Index dal Colour Index Constitution Number, C.I. 75290 ossidato.
282-014-9	Estratti pancreatici, deproteinati

Il secondo identificatore principale è la lavorazione della sostanza, per esempio il processo di estrazione, il processo di frazionamento, purificazione o concentrazione o il processo che influenza la composizione del residuo. Pertanto, dalla raffinazione di estratti ottenuti con processi diversi, per esempio usando solventi diversi o fasi di purificazione diverse, risulteranno sostanze diverse.

Quante più fasi sono applicate per la raffinazione, tanto più facile risulterà definire la sostanza mediante la sua composizione chimica. In tal caso, diversi tipi di fonti o diverse modifiche dei processi non portano automaticamente a una sostanza diversa.

Un parametro identificativo principale delle sostanze di origine biologica è la descrizione dei processi pertinenti. Per gli estratti, il processo di estrazione deve essere descritto fino al livello di dettaglio pertinente per l'identità della sostanza. Si deve specificare almeno il solvente usato.

Quando ulteriori fasi di processo sono usate per la fabbricazione della sostanza, come il frazionamento o la concentrazione, si deve descrivere la combinazione delle fasi di processo pertinenti, per esempio la combinazione di estrazione e frazionamento compresi gli intervalli di soglia.

UVCB sottotipo 4, in cui la fonte è chimica o minerale e il processo è una raffinazione

Le sostanze di origine non biologica, cioè che sono o hanno origine da minerali, minerali metallici, carbone, gas naturale e petrolio greggio, o altre materie prime per l'industria chimica, e che risultano dalla lavorazione senza reazioni chimiche intenzionali, possono essere frazioni (purificate), concentrati o residui di tali processi.

Il carbone e il petrolio greggio sono usati nei processi di distillazione o gassificazione per produrre un'ampia varietà di sostanze, per esempio sostanze derivate dal petrolio e gas combustibili, ecc., e anche residui quali catrami e scorie. Molto spesso un prodotto distillato o altrimenti frazionato è immediatamente sottoposto a ulteriore lavorazione, anche mediante reazioni chimiche. In tali casi l'identificazione della sostanza deve seguire le indicazioni fornite nel caso di UVCB sottotipo 2, in quanto il processo è più rilevante della fonte.

Per le sostanze derivate dal petrolio si usa un sistema di identificazione speciale (cfr. capitolo 4.3.2.2). Le sostanze contemplate da tale sistema includono frazioni e prodotti di reazioni chimiche.

Altre sostanze in UVCB sottotipo 4 possono includere minerali metallici, concentrati di minerali metallici e scorie contenenti quantità variabili di metalli che possono essere estratti mediante lavorazione metallurgica.

I minerali come la bentonite o il carbonato di calcio possono essere lavorati per esempio

mediante dissoluzione acida e/o precipitazione chimica o in colonne a scambio ionico. Quando la composizione chimica è definita per intero, i minerali dovrebbero essere identificati secondo le indicazioni fornite nella parte appropriata del capitolo 4.2. Se i minerali sono lavorati unicamente mediante metodi meccanici, per esempio mediante triturazione, setacciatura, centrifugazione, flottazione e così via, essi continuano a essere considerati gli stessi minerali estratti dalla miniera. I minerali che sono prodotti attraverso un processo di fabbricazione possono, ai fini dell'identificazione ⁽²¹⁾, essere considerati uguali ai loro equivalenti naturali purché la composizione sia simile e il profilo di tossicità identico.

Un parametro identificativo principale delle sostanze di origine non biologica è la descrizione della fase o delle fasi di processo pertinenti.

Per le frazioni, il processo di frazionamento deve essere descritto con i parametri e l'intervallo soglia della frazione isolata, insieme a una descrizione delle fasi di processo precedenti, se del caso.

Per la fase di concentrazione si deve indicare il tipo di processo, per esempio evaporazione, precipitazione ecc., e il rapporto tra la concentrazione iniziale e la concentrazione finale dei costituenti principali, in aggiunta alle informazioni sulla fase o sulle fasi di processo precedenti.

Un parametro identificativo principale dei residui di origine non biologica è la descrizione del processo da cui il residuo ha origine. Il processo può essere qualsiasi reazione fisica che genera residui, per esempio processo di purificazione, frazionamento, concentrazione.

Informazioni analitiche

Le sostanze UVCB comprendono tipi di sostanze molto diversi tra loro, che differiscono per parametri quali la fonte e il processo di fabbricazione. Di conseguenza devono essere presentati metodi analitici adeguati a fornire informazioni sulla composizione della sostanza UVCB, che variano da caso a caso. Inoltre, le informazioni su come utilizzare tali metodi sono soggette a continui sviluppi e miglioramenti. È quindi responsabilità del dichiarante presentare dati analitici appropriati, al fine di fornire le migliori informazioni possibili per consentire l'identificazione della sostanza.

Per la caratterizzazione delle sostanze UVCB si possono utilizzare diversi metodi qualitativi; tra gli esempi vi sono la spettrometria di assorbimento UV/Vis, la spettrometria a infrarossi e di massa, la risonanza magnetica nucleare e la diffrazione a raggi X.

Per caratterizzare la composizione della sostanza devono essere forniti dati quantitativi quali i cromatogrammi o i dati di diffrazione, che possono essere utilizzati come impronta.

La descrizione dei metodi analitici deve includere i protocolli sperimentali seguiti e l'interpretazione dei risultati riportati.

4.3.2. Tipi specifici di sostanze UVCB

La presente sezione fornisce orientamenti su gruppi specifici di sostanze UVCB: sostanze con variazioni nella lunghezza della catena di carbonio (4.3.2.1), sostanze ottenute dal petrolio o fonti simili al petrolio (4.3.2.2) ed enzimi (4.3.2.3).

4.3.2.1 Sostanze con variazioni nelle lunghezze della catena di carbonio

Questo gruppo di sostanze UVCB comprende le sostanze a catena alchilica lunga con variazioni

⁽²¹⁾ Lo stesso approccio per l'identificazione dei minerali presenti in natura o prodotti chimicamente non significa necessariamente che siano uguali le prescrizioni legali (per es. esenzioni dalla registrazione).

nella lunghezza della catena di carbonio, per esempio paraffine e olefine. Queste sostanze sono derivate da grassi o oli naturali o sono prodotte sinteticamente. I grassi naturali hanno origine da piante o da animali. Le sostanze con catena di carbonio lunga derivate dalle piante hanno solitamente solo catene con numero pari di atomi di carbonio mentre le sostanze con catena di carbonio lunga ottenute da fonti animali includono anche (alcune) catene con numero dispari di atomi di carbonio. Le sostanze con catena di carbonio lunga prodotte sinteticamente possono comprendere l'intera gamma di catene di carbonio, con numero di atomi sia pari sia dispari.

Identificatori e convenzione per la denominazione

Il gruppo comprende sostanze i cui singoli costituenti hanno una caratteristica strutturale comune: uno o più gruppi alchilici a catena lunga cui è spesso legato un gruppo funzionale. I costituenti differiscono fra loro per quanto concerne una o più delle seguenti caratteristiche dei gruppi di catene alchiliche:

- lunghezza della catena di carbonio (numero di carbonio);
- saturazione;
- struttura (lineare o ramificata);
- posizione del gruppo funzionale.

L'identità chimica dei costituenti può essere descritta sufficientemente e denominata sistematicamente usando i tre descrittori seguenti:

- il **descrittore alchilico** che descrive il numero di atomi di carbonio nelle catene di carbonio del gruppo o dei gruppi alchilici;
- il **descrittore della funzionalità** che identifica il gruppo funzionale della sostanza, per esempio ammina, ammonio, acido carbossilico;
- il **descrittore del sale**, il catione/anione di qualsiasi sale, per esempio sodio (Na^+), carbonato (CO_3^{2-}), cloruro (Cl^-).

Descrittore alchilico

- In generale, il descrittore alchilico C_{x-y} si riferisce a catene alchiliche lineari sature comprendenti tutte le catene di lunghezza da x ad y, per esempio C_{8-12} corrisponde a C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} e C_{12} .
- Si deve indicare se il descrittore alchilico si riferisce solo a catene alchiliche pari o dispari, per esempio C_{8-12} (numeri pari)
- Si deve indicare se il descrittore alchilico si riferisce (anche) a catene alchiliche ramificate, per esempio C_{8-12} (ramificate) o C_{8-12} (lineari e ramificate)
- Si deve indicare se il descrittore alchilico si riferisce (anche) a catene alchiliche insature, per esempio C_{12-22} (C_{18} insatura)
- Una distribuzione di lunghezze di catene alchiliche ristretta non ne copre una più ampia e viceversa, per esempio C_{10-14} non corrisponde a C_{8-18}
- Il descrittore alchilico può anche riferirsi alla fonte delle catene alchiliche, per esempio cocco o sego. Tuttavia la distribuzione della lunghezza delle catene di carbonio deve corrispondere a quella della fonte.

Il sistema di cui sopra dovrebbe essere usato per descrivere sostanze con variazioni nelle lunghezze delle catene di carbonio. Non è adatto per sostanze ben definite che possono essere identificate mediante una struttura chimica definita.

Le informazioni sul descrittore alchilico, il descrittore della funzionalità e il descrittore del sale sono la base per la denominazione di questo tipo di sostanze UVCB. Inoltre, informazioni sulla fonte e sul processo possono essere utili per identificare la sostanza con maggiore precisione.

Esempi		
Descrittori		Nome
Descrittore alchilico Descrittore della funzionalità Descrittore del sale	lunghezze delle catene alchiliche C ₁₀₋₁₈ acidi grassi (acido carbossilico) sali di cadmio	acidi grassi (C ₁₀₋₁₈) sali di cadmio
Descrittore alchilico Descrittore della funzionalità Descrittore del sale	di-C ₁₀₋₁₈ -alchil-dimetil dimetil ammonio	cloruro di di-C ₁₀₋₁₈ -alchil-dimetilammonio
Descrittore alchilico Descrittore della funzionalità Descrittore del sale	trimetil segolachil ammonio cloruro	cloruro di trimetil-segoalchil-ammonio

4.3.2.2 Sostanze ottenute da petrolio o fonti simili a petrolio

Le sostanze ottenute dal petrolio (sostanze derivate dal petrolio) o da fonti simili al petrolio (per esempio carbone) sono sostanze dalla composizione molto complessa e variabile o parzialmente indefinita. Nel presente capitolo le sostanze derivate dal petrolio sono usate per mostrare come identificare questo tipo specifico di sostanza UVCB. Tuttavia lo stesso approccio potrebbe essere applicato ad altre sostanze ottenute da fonti simili al petrolio quali il carbone.

I materiali di partenza usati nell'industria della raffinazione del petrolio possono essere petrolio greggio o qualsiasi corrente di raffineria specifica ottenuta da uno o più processi. La composizione dei prodotti finali dipende dal petrolio greggio usato per la fabbricazione (in quanto la composizione del petrolio greggio varia in funzione del luogo d'origine) e dai successivi processi di raffinazione. Pertanto si verifica una variazione naturale, indipendente dal processo, nella composizione delle sostanze derivate dal petrolio¹⁶.

1. Convenzione per la denominazione

Per l'identificazione delle sostanze derivate dal petrolio si raccomanda di assegnare la denominazione in base a un sistema di nomenclatura stabilito (22). Tale denominazione è costituita solitamente dal processo di raffinazione, dalla fonte della corrente e dalla composizione o dalle caratteristiche generali. Se la sostanza contiene > 5 % (p/p) di idrocarburi ad anelli aromatici condensati di 4-6 elementi, queste informazioni devono essere incluse nella descrizione. Per le sostanze derivate dal petrolio con un numero EINECS si deve usare il nome indicato nell'inventario CE.

(22) US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Addendum I all'elenco di sostanze chimiche candidate. Termini generali che contemplano le correnti dei processi di raffineria del petrolio. US EPA, Ufficio per le sostanze tossiche, Washington DC 20460.

2. Identificatori

I termini e le definizioni per l'identificazione delle sostanze derivate dal petrolio in genere includono la fonte della corrente, il processo di raffineria, la composizione generale, il numero di atomi di carbonio, l'intervallo di ebollizione o altre caratteristiche fisiche appropriate, e il tipo di idrocarburo predominante²².

Si dovrebbero indicare i parametri identificativi dell'allegato IV, sezione 2 del regolamento REACH. Si riconosce che le sostanze derivate dal petrolio sono fabbricate in base a specifiche di prestazione piuttosto che a specifiche relative alla composizione. Pertanto, caratteristiche quali il nome, l'intervallo di lunghezza della catena di carbonio, il punto di ebollizione, la viscosità, i valori soglia e altre proprietà fisiche sono in genere più utili delle informazioni sulla composizione per identificare la sostanza a base di petrolio nel modo più chiaro possibile.

Sebbene la composizione chimica non sia l'identificatore principale delle sostanze UVCB, si devono indicare tutti i costituenti in una concentrazione $\geq 10\%$ e i costituenti noti in una concentrazione $< 10\%$ e la composizione deve essere descritta in termini generici, ad esempio intervallo di peso molecolare, alifatici o aromatici, grado di idrogenazione e altre informazioni essenziali. Anche i gruppi di costituenti che non possono essere identificati singolarmente devono essere descritti con gli stessi parametri. Inoltre, qualsiasi altro costituente a una concentrazione inferiore che influisca sulla classificazione di pericolo deve essere identificato con nome e concentrazione tipica.

4.3.2.3 Enzimi

Gli enzimi sono per lo più prodotti dalla fermentazione di microrganismi ma occasionalmente sono di origine vegetale o animale. Il concentrato enzimatico liquido risultante dalla fermentazione o dall'estrazione e dalle successive fasi di purificazione contiene, oltre all'acqua, la proteina enzimatica attiva e altri costituenti compresi i residui della fermentazione, cioè proteine, peptidi, aminoacidi, carboidrati, lipidi e sali inorganici.

La proteina enzimatica e gli altri costituenti derivanti dal processo di fermentazione o di estrazione, ma escludendo l'acqua che può essere separata senza influire sulla stabilità della proteina enzimatica o senza modificarne la composizione, ai fini dell'identificazione dovrebbero essere considerati come la sostanza.

La sostanza enzimatica tipicamente contiene il 10-80 % (p/p) di proteina enzimatica. Gli altri costituenti variano percentualmente e dipendono dall'organismo di produzione usato, dal mezzo di fermentazione e dai parametri operativi del processo di fermentazione nonché dalla purificazione a valle applicata, ma la composizione sarà tipicamente compresa entro gli intervalli indicati nella tabella seguente.

Proteina enzimatica attiva	10-80 %
Altre proteine + peptidi e aminoacidi	5-55 %
Carboidrati	3-40 %
Lipidi	0-5 %
Sali inorganici	1-45 %
Totale	100 %

La sostanza enzimatica dovrebbe essere considerata come una «sostanza UVCB» a causa

della sua variabilità e della composizione parzialmente sconosciuta. La proteina enzimatica dovrebbe essere considerata come un costituente della sostanza UVCB. Gli enzimi altamente purificati possono essere identificati come sostanze dalla composizione ben definita (mono-componente o multi-componente) e dovrebbero essere identificati di conseguenza.

In EINECS, l'identificatore principale degli enzimi è l'attività catalitica. Gli enzimi sono elencati come voci generiche senza ulteriore specificazione o con voci specifiche indicanti l'organismo sorgente o il substrato.

Esempi		
Numero CE	Nome EINECS	Numero CAS
278-547-1	Proteinasi, Bacillus, neutra	76774-43-1
278-588-5	Proteinasi, Aspergillus, neutra	77000-13-6
254-453-6	Elastasi (pancreas porcino)	39445-21-1
262-402-4	Mannanasi	60748-69-8

Uno studio sugli enzimi commissionato dalla Commissione europea proponeva di identificare gli enzimi in base al sistema internazionale per la nomenclatura degli enzimi, IUBMB (Unione internazionale di biochimica e biologia molecolare).⁽²³⁾ Questo approccio è stato adottato nel presente documento d'orientamento e consentirà un'identificazione più sistematica, dettagliata e completa degli enzimi rispetto a EINECS.

1. Convenzione per la denominazione

Gli enzimi sono denominati secondo le convenzioni di nomenclatura IUBMB.

Il sistema di classificazione IUBMB fornisce un unico numero a quattro cifre per ciascun tipo di enzima e funzione catalitica (per es. 3.2.1.1 per l' α -amilasi)⁽²⁴⁾. Ogni numero può comprendere enzimi di origine e sequenza di aminoacidi variabili ma la funzionalità enzimatica è identica. Il nome e il numero della nomenclatura IUBMB dovrebbero essere usati per l'identificazione della sostanza. La nomenclatura IUBMB classifica gli enzimi in sei gruppi principali:

- 1. Ossidoreduttasi
- 2. Trasferasi
- 3. Idrolasi
- 4. Liasi
- 5. Isomerasi
- 6. Ligasi

⁽²³⁾ UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Raccolta di informazioni sugli enzimi. Relazione finale. Cooperazione fra la Federal Environment Agency Austria e l'Inter-University Research Center for Technology, Work and Culture (IFF/IFZ). Contratto n. B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

⁽²⁴⁾ I termini «numero CE» (\equiv numero della Commissione per l'enzima) e «numero IUBMB» sono spesso usati come sinonimi. Per evitare fraintendimenti si raccomanda di usare il termine «numero IUBMB» per il codice a quattro cifre dell'IUBMB.

Il seguente esempio è fornito per illustrare una voce secondo la nomenclatura IUBMB:

CE 3.4.22.33

Nome accettato: bromelina del frutto

Reazione: idrolisi delle proteine con un'ampia specificità per i legami peptidici. Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec è un buon substrato sintetico ma non agisce su Z-Arg-Arg-NHMec (*cf.* bromelina del gambo)

Altre denominazioni: bromelina del succo; ananasi; bromelasi; bromelina; extranasi; bromelina del succo; pinasi; enzima dell'ananas; traumanasi; bromelina del frutto FA2

Commenti: dalla pianta dell'ananas, *Ananas comosus*. Scarsamente inibita dalla cistatina di pollo. Un'altra cisteina endopeptidasi, con un'azione simile sui piccoli substrati molecolari, la pinguinaina (precedentemente CE 3.4.99.18), è ottenuta dalla pianta relativa, *Bromelia pinguin*, ma la pinguinaina differisce dalla bromelina del frutto in quanto è inibita dalla cistatina di pollo [4]. ⁽²⁵⁾ Nella famiglia di peptidasi C1 ⁽²⁶⁾ (famiglia della papaina). Precedentemente CE 3.4.22.5 e inclusa in CE 3.4.22.4, numero di registrazione CAS: 9001-00-7

Link ad altre banche dati

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

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

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

Riferimenti generali

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

Yamada, F., Takahashi, N. e 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. e 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]

Esempi per la classificazione degli enzimi secondo il sistema IUBMB

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

Le proteasi sono numerate secondo i criteri riportati di seguito.

3. **Idrolasi**

3.4 **Agenti sui legami peptidici (peptidasi), con sottoclassi:**

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

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

3.4.1	α -aminoacil-peptide idrolasi (ora in CE 3.4.11)
3.4.2	Peptidil-amino-acido idrolasi (ora in CE 3.4.17)
3.4.3	Dipeptide idrolasi (ora in CE 3.4.13)
3.4.4	Peptidil peptide idrolasi (ora riclassificate in CE 3.4)
3.4.11	Aminopeptidasi
3.4.12	Peptidilamino-acido idrolasi o Acilamino-acido idrolasi (ora riclassificate in 3.4)
3.4.13	Dipeptidasi
3.4.14	Dipeptidil-peptidasi e tripeptidil-peptidasi
3.4.15	Peptidil-dipeptidasi
3.4.16	Carbossipeptidasi tipo serina
3.4.17	Metallocarbossipeptidasi
3.4.18	Carbossipeptidasi tipo cisteina
3.4.19	Omega peptidasi
3.4.21	Serina endopeptidasi
Inoltre sono identificati ulteriori enzimi specifici:	
3.4.21.1	chimotripsina
3.4.21.2	chimotripsina C
3.4.21.3	metridina
3.4.21.4	tripsina
3.4.21.5	trombina
3.4.21.6	fattore di coagulazione Xa
3.4.21.7	plasmina
3.4.21.8	ora coperta da CE 3.4.21.34 e CE 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidasi
3.4.21.10	acrosina
3.4.21.11	ora coperta da CE 3.4.21.36 e CE 3.4.21.37

3.4.21.12	12 a-litica endopeptidasi
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Endopeptidasi dal meccanismo catalitico sconosciuto

Esempi da EINECS con numero IUBMB aggiunto

Numero CE	Nome EINECS	Numero CAS	Numero IUBMB
278-547-1	Proteinasi, Bacillus, neutra	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisina	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cellulasi	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identificatori

Le sostanze enzimatiche sono identificate mediante la proteina enzimatica che le contiene (nomenclatura IUBMB) e gli altri costituenti ottenuti tramite fermentazione. Oltre alla proteina enzimatica, gli specifici costituenti non sono solitamente presenti in concentrazioni superiori all'1 %. Se le identità di questi costituenti specifici non sono note, possono essere indicate in un approccio per gruppi (cioè proteine, peptidi, aminoacidi, carboidrati, lipidi e sali inorganici). Tuttavia, devono essere indicati i singoli costituenti se le loro identità sono note, oppure se la loro concentrazione è pari o superiore al 10 % o se sono pertinenti ai fini della classificazione ed etichettatura e/o della valutazione PBT ⁽²⁷⁾.

Proteine enzimatiche

Le proteine enzimatiche nel concentrato dovrebbero essere identificate mediante

- numero IUBMB
- nomi forniti dall'IUBMB (nome sistematico, nomi degli enzimi, sinonimi)
- osservazioni formulate dall'IUBMB
- reazione e tipo di reazione
- numero e nome CE, se del caso
- numero e nome CAS, se disponibili

La reazione indotta dall'enzima dovrebbe essere specificata. Tale reazione è definita dall'IUBMB.

Esempio

⁽²⁷⁾ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i relativi criteri possono essere reperite nella Guida alle prescrizioni in materia di informazione e alla valutazione della sicurezza chimica, capitolo R.11: Valutazione PBT.

.alfa.-amilasi: polisaccaride contenente unità di glucosio con legami .alfa.-(1-4) + H₂O = maltooligosaccaridi; endoidrolisi dei legami 1,4-.alfa.-d-glucosidici in polisaccaridi contenenti tre o più unità di d-glucosio con legami 1,4-.alfa.

In base alla classe dell'enzima si deve assegnare un tipo di reazione, che può essere ossidazione, riduzione, eliminazione, addizione o un nome di reazione.

Esempio

.alfa.-amilasi: idrolisi del legame O-glicosidico (endoidrolisi).

Costituenti diversi dalle proteine enzimatiche

Dovrebbero essere identificati tutti i costituenti presenti in concentrazioni $\geq 10\%$ (p/p) o pertinenti ai fini della classificazione ed etichettatura e/o della valutazione PBT ⁽²⁸⁾. L'identità dei costituenti in quantità minore al 10 % può essere indicata come gruppo chimico. Devono essere indicati le loro concentrazioni o gli intervalli di concentrazione tipici, cioè:

- (glico)proteine
- peptidi e aminoacidi
- carboidrati
- lipidi
- materiale inorganico (per es. cloruro di sodio o altri sali inorganici)

Se non è possibile identificare sufficientemente gli altri costituenti di un concentrato enzimatico dovrebbe essere indicato il nome dell'organismo di produzione (genere e ceppo o tipo genetico se pertinente) come per altre sostanze UVCB di origine biologica.

Se disponibili, si possono fornire parametri aggiuntivi, per esempio parametri funzionali (vale a dire valori ottimali e intervalli di pH o temperatura), parametri cinetici (cioè attività specifica o numero di turnover), ligandi, substrati e prodotti e co-fattori.

⁽²⁸⁾ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e sui limiti di concentrazione pertinenti possono essere reperite nella sezione per la valutazione della sicurezza chimica del RIP 3.2 TGD sulla valutazione PBT

5. Criteri per verificare se le sostanze sono identiche

Per verificare se le sostanze di diversi fabbricanti/importatori possono essere considerate o meno identiche si devono rispettare alcune regole. Le regole che sono state applicate per EINECS dovrebbero essere considerate come una base comune per identificare e denominare una sostanza e quindi trovare un potenziale co-dichiarante per tale particolare sostanza^{5, 6, 16 (29), (30)}. Le sostanze che non sono considerate uguali possono, comunque, essere ritenute strutturalmente correlate facendo ricorso al giudizio di un esperto. La condivisione dei dati può, in ogni caso, essere possibile per tali sostanze se scientificamente giustificata. Tuttavia, questo argomento non è l'oggetto del presente documento ed è trattato negli *Orientamenti alla condivisione dei dati*.

- Si dovrebbe applicare la regola « $\geq 80\%$ » per le sostanze mono-componente nonché la definizione di sostanze multi-componente.

Non si fa alcuna differenziazione tra grado tecnico, puro o analitico delle sostanze. Ciò significa che la sostanza «identica» può avere un profilo di purezza/impurezza differente a seconda del suo grado. Tuttavia, le sostanze ben definite dovrebbero normalmente contenere il costituente o i costituenti principali e le uniche impurezze consentite sono quelle derivanti dal processo di produzione (per i dettagli cfr. capitolo 4.2) e gli additivi che sono necessari per stabilizzare le sostanze stesse.

- Ai fini della registrazione le forme idrate e anidre dei composti devono essere considerate come la stessa sostanza.

Esempi			
Nome e formula	Numero CAS	Numero CE	Regola
Solfato di rame (Cu · H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Sale di acido solforico e rame(2+) (1:1), pentaidrato (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Questa sostanza è contemplata da una registrazione della sua forma anidra (numero CE: 231-847-6)

Le forme idrate e anidre hanno diversi nomi chimici e diversi numeri CAS.

- Gli acidi o le basi e i loro sali devono essere considerati come sostanze diverse.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
201-186-8	Acido peracetico	Questa sostanza non deve

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

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

	$C_2H_4O_3$	essere considerata identica per es. al suo sale sodico (EINECS 220-624-9)
220-624-9	Glicolato di sodio $C_2H_4O_3 \cdot Na$	Questa sostanza non deve essere considerata identica al suo acido corrispondente (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-Cloroanilina C_6H_6ClN	Questa sostanza non deve essere considerata identica per es. a 2-cloroanilina bromidrato (1:1) ($C_6H_6ClN \cdot HBr$)

- I singoli sali (per es. sodio o potassio) devono essere considerati come sostanze diverse.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
208-534-8	Benzoato di sodio $C_7H_5O_2 \cdot Na$	Questa sostanza non deve essere considerata identica per es. al sale di potassio (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Benzoato di potassio $C_7H_5O_2 \cdot K$	Questa sostanza non deve essere considerata identica per es. al sale di sodio (EINECS 208-534-8)

- Le catene alchiliche ramificate o lineari devono essere considerate come sostanze diverse.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
295-083-5	Acido fosforico, dipentilestere, ramificato e lineare	Questa sostanza non deve essere considerata identica alle sue singole sostanze acido fosforico, dipentilestere, ramificato o acido fosforico, dipentilestere, lineare

- I gruppi ramificati devono essere menzionati in quanto tali nella denominazione. Le sostanze contenenti gruppi alchilici senza alcuna ulteriore informazione coprono solo le catene lineari non ramificate, se non diversamente specificato.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
306-791-1	Acidi grassi, C12-16	Solo le sostanze con gruppi alchilici lineari e non ramificati sono considerate sostanze identiche
279-420-3	Alcoli, C12-14	
288-454-8	Ammine, C12-18- alchilmatile	

- Le sostanze con gruppi alchilici con termini aggiuntivi quali iso, neo, ramificato ecc. non devono essere considerate uguali alle sostanze senza la stessa specifica.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
266-944-2	Gliceridi, C ₁₂₋₁₈ Questa sostanza è identificata dal nome della sostanza SDA: C12-C18 trialchil gliceride e dal numero identificativo SDA: 16-001-00	Questa sostanza non deve essere considerata uguale a C ₁₂₋₁₈ -iso Sostanza con catene alchiliche sature ramificate in qualsiasi posizione

- Senza specifiche esplicite, si deve ritenere che le catene alchiliche negli acidi o negli alcoli ecc. rappresentino solo catene sature. Le catene insature devono essere specificate come tali e sono considerate sostanze diverse.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
200-313-4	Acido stearico, puro C18H36O2	Questa sostanza non deve essere considerata uguale all'acido oleico, puro, C18H34O2 (EINECS 204- 007-1)

- Sostanze con centri chirali

Una sostanza con uno stereocentro può esistere nelle forme destra e sinistra (enantiomeri). In assenza di indicazioni contrarie, si assume che una sostanza sia una miscela (racemica) uguale delle due forme.

Esempi		
--------	--	--

Numero CE	Nome	Regola
201-154-3	2-cloropropan-1-olo	I singoli enantiomeri (R)-2-cloropropan-1-olo e (S)-2-cloropropan-1-olo non sono considerati uguali a questa voce

I racemi sono considerati come sostanze multi-componente. Se una sostanza è stata arricchita con una singola forma enantiomerica, si applicano le regole per le sostanze mono o multi-componenti; in altri termini, a seconda degli intervalli di concentrazione degli isomeri, la sostanza è una sostanza mono o multi-componente.

Le sostanze con molteplici stereocentri possono esistere in 2^n forme (dove «n» è il numero di stereocentri). Queste diverse forme possono avere diverse proprietà fisico-chimiche, tossicologiche e/o ecotossicologiche e dovrebbero essere considerate sostanze differenti.

- Catalizzatori inorganici

I catalizzatori inorganici sono considerati miscele. Ai fini dell'identificazione, i metalli componenti o i composti metallici devono essere considerati come sostanze singole (senza specifica d'uso).

Esempi		
	Nome	Regola
	Catalizzatore ossido di cobalto-ossido di alluminio	Dovrebbe essere identificato separatamente come: - ossido di cobalto II - ossido di cobalto III - ossido di alluminio - ossido di cobalto e alluminio

- I concentrati enzimatici con lo stesso numero IUBMB possono essere considerati come la stessa sostanza, nonostante l'uso di diversi organismi di produzione, purché le proprietà pericolose non differiscano significativamente e giustifichino la stessa classificazione.

Sostanze multi-componente

La direttiva 67/548/CEE disciplinava l'immissione delle sostanze sul mercato. Il metodo di produzione della sostanza non era importante. Pertanto una sostanza multi-componente immessa sul mercato era coperta dall'inventario EINECS se *tutti* i singoli costituenti erano elencati nell'inventario stesso; per esempio la miscela isomerica difluorobenzene era coperta dalle voci EINECS 1,2-difluorobenzene (206-680-7), 1,3-difluorobenzene (206-746-5) e 1,4-difluorobenzene (208-742-9) sebbene la miscela isomerica stessa non fosse elencata in EINECS.

Il regolamento REACH invece prescrive la registrazione della sostanza fabbricata. Si deve decidere caso per caso in che misura le diverse fasi durante la produzione della sostanza sono coperte dalla definizione di «fabbricazione» (per es. diverse fasi di purificazione o

distillazione). Se si produce una sostanza multi-componente questa deve essere registrata (a meno che non sia coperta da registrazione dei singoli costituenti, cfr. capitolo 4.2.2.4); per esempio, se si produce la miscela isomerica difluorobenzene si deve registrare «difluorobenzene» come miscela isomerica. Tuttavia, per le sostanze multi-componente non occorre testare la sostanza in quanto tale se il profilo di pericolo della stessa può essere sufficientemente descritto dalle informazioni sui singoli costituenti. Se i singoli isomeri 1,2-difluorobenzene, 1,3-difluorobenzene e 1,4-difluorobenzene sono prodotti e miscelati in seguito, si devono registrare i singoli isomeri e la miscela isomerica è considerata come una miscela.

Una sostanza multi-componente con i costituenti principali A, B e C non deve essere considerata uguale a una sostanza multi-componente con i costituenti principali A e B o come una massa di reazione di A, B, C e D.

- Una sostanza multi-componente non è considerata uguale a una sostanza con solo un sottogruppo dei singoli costituenti.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
207-205-6	2,5-difluorotoluene	Queste due sostanze non sono considerate uguali alla loro miscela isomerica difluorotoluene poiché queste due sostanze sono solo un sottogruppo di tutti i possibili isomeri.
207-211-9	2,4-difluorotoluene	

- La registrazione di una sostanza multi-componente non copre i singoli costituenti.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
208-747-6	1,2-dibromoetilene	Questa sostanza descrive una miscela di isomeri cis e trans. Le singole sostanze (1Z)-1,2-dibromoetilene e (1E)-1,2-dibromoetilene non sono coperte dalla registrazione della miscela isomerica.

Sostanze UVCB

- Una sostanza UVCB con una distribuzione ristretta dei costituenti non è considerata uguale a una sostanza UVCB con una composizione più ampia e viceversa.

Esempi

Numero CE	Nome	Regola
288-450-6	Ammine, C12-18-alchil, acetati	Le sostanze «ammine, C12-14-alchil, acetati» o «ammine, C12-20-alchil, acetati» o «ammine, dodecil (C12-alchil), acetati» o le sostanze con solo catene alchiliche pari non sono considerate uguali a questa sostanza

- Una sostanza caratterizzata da una specie/genere non è considerata uguale a una sostanza isolata da un'altra specie/genere.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
296-286-1	Digliceridi, di olio di girasole	Questa sostanza non è considerata uguale a digliceridi, di soia (EINECS: 271-386-8), né a digliceridi, di sego (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Olio di semi di lino, epossidato	Questa sostanza non è considerata uguale all'olio di semi di lino, ossidato (EINECS: 272-038-8), né all'olio di semi di lino, maleato (EINECS: 268-897-3), né all'olio di ricino, epossidato (non elencato in EINECS).

- Un estratto purificato o un concentrato è considerato come una sostanza diversa dall'estratto.

Esempi		
Numero CE	Nome	Regola
232-299-0	Olio di colza Estratti e loro derivati fisicamente modificati. Sono costituiti principalmente da gliceridi degli acidi grassi erucico, linoleico ed oleico (Brassica napus, Cruciferae).	La sostanza «acido (Z)-docos-13-enoico (acido erucico)» è un costituente della sostanza «olio di colza». L'acido erucico non è considerato uguale all'olio di colza in quanto è isolato come una sostanza pura dall'olio di colza; l'acido erucico dispone della propria voce EINECS (204-011-3). Una miscela isolata di acido palmitico, acido oleico, acido linoleico, acido linolenico, acido erucico e acido eicosenoico non è considerata uguale all'olio di colza in quanto questi costituenti non rappresentano l'olio nella sua interezza.

6. Identità della sostanza all'interno della richiesta

Nel capitolo 4 del presente documento d'orientamento sono fornite indicazioni sull'identificazione e la denominazione delle sostanze. Queste indicazioni dovrebbero essere seguite per determinare se le sostanze possono essere considerate uguali ai fini dei regolamenti REACH e CLP. Questo aspetto viene approfondito di seguito per la richiesta relativa a sostanze.

Ai sensi dell'articolo 4, tutti i fabbricanti o gli importatori possono, pur mantenendo la piena responsabilità del rispetto dei loro obblighi derivanti dal regolamento REACH, nominare un rappresentante terzo per tutte le procedure contemplate dal titolo III che prevedono contatti con altri fabbricanti o importatori.

Per tutte le sostanze i dichiaranti potenziali hanno il dovere, prima di effettuare la registrazione, di accertarsi presso l'Agenzia se è già stata presentata una registrazione per la stessa sostanza (articolo 26 del regolamento REACH). La richiesta deve comprendere:

- l'identità del potenziale dichiarante come specificato al punto 1 dell'allegato IV, del regolamento REACH con l'eccezione dei siti d'uso;
- l'identità della sostanza, come specificato nel punto 2 dell'allegato VI, del regolamento REACH;
- quali prescrizioni in materia di informazioni richiederebbero la conduzione da parte del dichiarante potenziale di nuovi studi su animali vertebrati;
- quali prescrizioni in materia di informazioni richiederebbero da parte del dichiarante potenziale la conduzione di altri nuovi studi.

Il dichiarante potenziale dovrebbe fornire l'identità e il nome della sostanza in conformità delle regole definite nel capitolo 4 del presente documento d'orientamento.

L'Agenzia stabilisce se la stessa sostanza è stata precedentemente registrata. Anche questo deve avvenire applicando le regole definite nel capitolo 4 del presente documento d'orientamento. Il risultato è ricomunicato al dichiarante potenziale ed eventuali dichiaranti precedenti o altri dichiaranti potenziali vengono informati in merito.

Maggiori informazioni sul processo di richiesta possono essere reperite nella *Guida alla condivisione dei dati* e sulla pagina web dell'ECHA dedicata all'indirizzo:

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

7. Esempi

Gli esempi riportati nelle pagine seguenti sono intesi unicamente a illustrare in che modo l'utilizzatore potrebbe lavorare con le indicazioni fornite nel presente documento d'orientamento. Non presentano alcun precedente relativo agli obblighi derivanti dal regolamento REACH.

Sono inclusi gli esempi seguenti:

- «perossidicarbonato di dietile» è un esempio di una sostanza mono-componente comprendente un solvente che agisce anche come agente stabilizzante (cfr. capitolo 7.1);
- «zolimidina» è un esempio di una sostanza che potrebbe essere identificata come una sostanza mono-componente o come una sostanza multi-componente (cfr. capitolo 7.2);
- una «miscela di isomeri» formata durante la reazione di fabbricazione è inclusa come esempio di una sostanza multi-componente (cfr. capitolo 7.3). Tale sostanza era precedentemente coperta dalle voci EINECS relative ai singoli isomeri;
- «aroma AH» è un esempio di una sostanza prodotta in diverse qualità, che può essere descritta come una massa di reazione di cinque costituenti con intervalli di concentrazione (capitolo 7.4). Rappresenta anche un esempio di scostamento giustificato dalle soglie dell'80 % e del 10 %;
- «minerali» non metallici, inclusa la montmorillonite come esempio di una sostanza ben definita che richiede una caratterizzazione fisica aggiuntiva, sono inclusi nel capitolo 7.5;
- un «olio essenziale di lavanda» è un esempio di una sostanza UVCB ottenuta da piante (capitolo 7.6);
- «olio di crisantemo e relativi isomeri isolati» è un esempio di una sostanza UVCB di origine biologica che è sottoposta a ulteriore lavorazione (capitolo 7.7);
- «fenolo, isopropilato, fosfato» è un esempio di una sostanza UVCB variabile che non può essere completamente definita (capitolo 7.8);
- «composti di ammonio quaternario» sono esempi di sostanze con variazioni nella lunghezza della catena di carbonio (capitolo 7.9);
- nel capitolo 7.10 sono inclusi due esempi di «sostanze derivate dal petrolio», una corrente per la miscelazione della benzina e gasoli;
- nel capitolo 7.11 figurano due esempi su come identificare gli enzimi laccasi e amilasi.

7.1. Perossidicarbonato di dietile

La sostanza «perossidicarbonato di dietile» (CE 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) è prodotta come soluzione al 18 % in isododecano (CE 250-816-8, CAS 31807-55-3). L'isododecano agisce anche come agente stabilizzante contro le proprietà esplosive. La concentrazione massima possibile che garantisce una manipolazione in sicurezza della sostanza è una soluzione al 27 %.

In che modo la sostanza sopra descritta dovrebbe essere identificata e denominata per la registrazione?

Secondo la definizione di sostanza nel regolamento REACH, si devono escludere i solventi che possono essere separati senza influire sulla stabilità della sostanza o senza modificarne la composizione. Poiché, nel caso suddetto, l'isododecano agisce anche come agente stabilizzante e non può essere totalmente separato a causa delle proprietà esplosive della sostanza, l'isododecano deve essere considerato come un additivo e non solo come un solvente. Tuttavia la sostanza dovrebbe ancora essere considerata come una sostanza mono-componente. Pertanto, la sostanza dovrebbe essere registrata come la soluzione alla massima concentrazione di isododecano che garantisce la manipolazione in sicurezza:

perossidicarbonato di dietile (limite superiore di concentrazione: 27 %). L'isodecano dovrebbe essere registrato sotto «Additivi» e dovrebbe esserne specificata la funzione di stabilizzante.

7.2. ZOLIMIDINA

La soluzione metanolica fabbricata contiene «zolimidina» (CE 214-947-4; CAS 1222-57-7, C₁₄H₁₂N₂O₂S) e «imidazolo» (CE 206-019-2; CAS 288-32-4, C₃H₄N₂). Dopo la rimozione del solvente «metanolo» e l'ottimizzazione del processo di fabbricazione, la sostanza presenta ancora un ampio intervallo di purezza di 74 - 86 % zolimidina e 4-12 % imidazolo.

In che modo la sostanza sopra descritta dovrebbe essere identificata e denominata per la registrazione?

Secondo la definizione di sostanza nel regolamento REACH, si devono escludere i solventi che possono essere separati senza influire sulla stabilità della sostanza o senza modificarne la composizione. Come nel caso suddetto, il metanolo può essere separato senza difficoltà; si deve registrare la sostanza priva di solvente.

In generale, una sostanza è considerata una sostanza mono-componente se un costituente principale è presente in concentrazioni ≥ 80 %. Una sostanza è considerata una sostanza multi-componente se più di un costituente principale è ≥ 10 % e < 80 %. L'esempio suddetto è un caso limite, in quanto i valori di soglia sono superati. Quindi la sostanza potrebbe essere considerata come una sostanza mono-componente «zolimidina» o come una sostanza multi-componente, una massa di reazione di «zolimidina» e «imidazolo».

In tali casi limite, la concentrazione tipica dei costituenti principali della sostanza potrebbe essere usata per decidere come descrivere al meglio tale sostanza, per esempio:

- (1) (1) se la concentrazione tipica della zolimidina è del 77 % e dell'imidazolo è dell'11 %, si raccomanda di considerare la sostanza una massa di reazione di zolimidina e imidazolo;
- (2) (2) se la concentrazione tipica della zolimidina è dell'85 % e dell'imidazolo è del 5 %, si raccomanda di considerare la sostanza come una sostanza mono-componente «zolimidina».

7.3. Miscela di isomeri

La sostanza in questione è una miscela (massa di reazione) di due isomeri formati durante la reazione di fabbricazione. I singoli isomeri erano riportati in EINECS. La direttiva 67/548/CEE disciplinava l'immissione delle sostanze sul mercato. Poiché il metodo di produzione della sostanza non era significativo, la miscela era coperta dalle voci EINECS dei due singoli isomeri. Il regolamento REACH richiede la registrazione delle sostanze fabbricate. Si deve decidere caso per caso in che misura le diverse fasi durante la produzione della sostanza sono contemplate nella definizione di «fabbricazione». Se la miscela isomerica è registrata come una sostanza multi-componente (seguendo le indicazioni del capitolo 4.2.2), non occorre testare la sostanza in quanto tale, se il profilo di pericolo della sostanza può essere sufficientemente descritto dalle informazioni sui singoli costituenti.

1. Nome e altri identificatori

Esempi	
Denominazione IUPAC o altra denominazione chimica internazionale (della sostanza)	Massa di reazione di 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo e 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo
Altre denominazioni (della sostanza)	2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo Massa di reazione di etanolo, 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- e acqua Composto isomerico di etanolo, 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- (9CI)
Numero CE (della sostanza) Nome CE Descrizione CE	Non esiste alcun numero CE per la sostanza, in quanto la miscela di isomeri non è stata riportata per l'EINECS. Tuttavia la sostanza era coperta dalle voci EINECS dei costituenti (279-502-9, 279-501-3).
Numero CAS (della sostanza) Nome CAS	non disponibile non disponibile
Numero CE (costituente A) Nome CE Descrizione CE	279-502-9 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo /
Numero CE (costituente B) Nome CE Descrizione CE	279-501-3 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo /
Numero CAS (costituente A) Nome CAS	80584-89-0 Etanolo, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-
Numero CAS (costituente B) Nome CAS	80584-88-9 Etanolo 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-
Altro codice identificativo Riferimento	Numero ENCS 5-5917

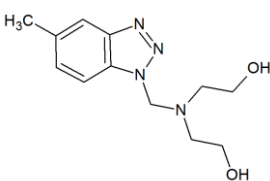
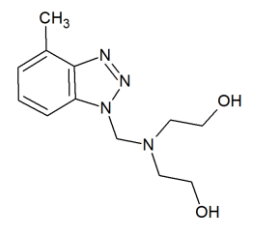
2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

Costituenti principali						
	Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol. metodo di Hill	Conc. tipica (%p/p)	Intervallo di conc. (%p/p)
A	Etanolo, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	Etanolo 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Costituenti principali	
	Altre denominazioni
A	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo
B	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo

Costituenti principali		
	Nome CE	Descrizione CE
A	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo	/
B	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo	/

Costituenti principali		
	Nome CAS	Numero CAS
A	Etanolo 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0
B	Etanolo 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9

Costituenti principali			
	Formula molecolare metodo CAS	Formula strutturale	Codice SMILES
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Costituenti principali		
	Peso molecolare [g mol ⁻¹]	Intervallo di peso molecolare
A	250	/
B	250	/

7.4. Aroma AH

L'aroma AH consiste di gamma (iso-alfa) metilionone e dei suoi isomeri. Viene prodotto in tre diverse qualità (qualità A, B e C), che differiscono nel rapporto degli isomeri.

La tabella seguente fornisce una panoramica della composizione delle diverse qualità.

Composizione delle diverse qualità dell'aroma AH				
Intervallo di concentrazione [%]	Qualità A	Qualità B	Qualità C	Intervalli generali
gamma (iso-alfa) metilionone	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (iso-beta) metilionone	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa-n-metilionone	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma-n-metilionone	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0,5-4
beta-n-metilionone	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15	0,5-15
pseudometiliononi	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3	0,5-3

Esistono diverse opzioni per l'identificazione della sostanza:

- la qualità A contiene almeno l'80 % dell'isomero gamma (iso-alfa) metil ionone e potrebbe quindi essere considerata come una sostanza mono-componente basata sull'isomero gamma (iso-alfa) metil ionone con gli altri isomeri come impurezze.
- Le qualità B e C contengono meno dell'80 % dell'isomero gamma (iso-alfa) metilionone e ≥ 10 % degli altri isomeri. Pertanto potrebbero essere considerate come sostanze multi-componente:
 - qualità B: una massa di reazione di gamma (iso-alfa) metilionone (65-75 %) e alfa-n-metilionone (10-20 %) con gli altri isomeri come impurezze.
 - qualità C: una massa di reazione di gamma (iso-alfa) metilionone (50-60 %) e alfa-n-metilionone (20-30 %) con gli altri isomeri come impurezze.

La composizione è variabile e a volte un isomero è presente in concentrazioni ≥ 10 % (pertanto normalmente denominato costituente principale) e a volte < 10 % (pertanto normalmente denominato impurezza).

Sarebbe possibile registrare le diverse qualità separatamente. Ciò implicherebbe tre registrazioni. Tuttavia il read-across dei dati può essere giustificato.

In alternativa si può considerare:

- una registrazione come sostanza mono-componente con due sotto-qualità. In questo caso le sotto-qualità deviano dalla regola dell'80 % (cfr. capitolo 4.2.1);
- una registrazione come massa di reazione definita di 5 isomeri (sostanza multi-componente). In questo caso alcuni isomeri (costituenti principali) si scostano dalla soglia del 10 % che distingue i costituenti principali dalle impurezze (cfr. capitolo 4.2.2);
- una registrazione come massa di reazione definita in cui la variabilità della composizione è coperta dall'intero intervallo di ogni isomero.

Può essere importante considerare che;

- le tre qualità hanno proprietà fisico-chimiche uguali o molto simili;
- le tre qualità hanno scenari di uso ed esposizione simili;
- tutte le qualità hanno la stessa classificazione ed etichettatura di pericolo e i contenuti delle schede di sicurezza e delle relazioni sulla sicurezza sono identici;
- i dati sulla sperimentazione disponibili (e le sperimentazioni future) coprono la variabilità delle tre qualità.

In questo esempio è descritta l'identificazione della sostanza come una massa di reazione definita di 5 isomeri (sostanza multi-componente). Occorre una giustificazione per lo scostamento dalla regola dell'80 % (cfr. capitolo 4.2.1) e dalla soglia del 10 % (definizione di sostanza multi-componente, cfr. capitolo 4.2.2). Siccome ogni qualità è prodotta in quanto tale, la composizione di ciascuna delle tre qualità deve essere specificata nel fascicolo di registrazione. Tuttavia, in condizioni formali potrebbero essere necessarie almeno due registrazioni: (1) gamma (iso-alfa) metilionone e (2) massa di reazione di gamma (iso-alfa) metilionone e alfa-n-metilionone.

Identificazione della sostanza

L'aroma AH è prodotto in tre diverse qualità (A, B e C) con la stessa composizione qualitativa ma con composizione quantitativa diversa. Tutte e tre le qualità sono descritte in un solo fascicolo di registrazione per una sostanza multi-componente. Sebbene ciò implichi che la definizione non è applicata rigorosamente, la registrazione come sostanza multi-componente è giustificata poiché 1) i dati di sperimentazione disponibili coprono la variabilità delle tre qualità; 2) le tre qualità hanno proprietà fisico-chimiche molto simili; 3) tutte le qualità hanno la stessa classificazione ed etichettatura di pericolo (pertanto le schede di sicurezza sono identiche) e 4) le tre qualità hanno scenari di uso ed esposizione simili (pertanto relazioni sulla sicurezza chimica simili).

1. Nome e altri identificatori

Denominazione IUPAC o altra denominazione chimica internazionale	Massa di reazione di 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)but-3-en-2-one; 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)but-3-en-2-one; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)pent-1-en-3-one; 1-(6,6-metil-2-metilenecicloesen-1-il)pent-1-en-3-one; 1-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)pent-1-en-3-one
Altre denominazioni	Metilionone Gamma Qualità A Metilionone Gamma Qualità B Metilionone Gamma Qualità C
Numero CE	non disponibile
Nome CE	/
Descrizione CE	/

Numero CAS	non disponibile
Nome CAS	/

2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

In teoria sono possibili enantiomeri aggiuntivi. Tuttavia sono stati analizzati i seguenti isomeri:

Costituenti principali						
	Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol. metodo di Hill	Conc. minima (%p/p)	Conc. massima (%p/p)
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)but-3-en-2-one	127-51-5	204-846-3	C14H22O	50	85
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)but-3-en-2-one	79-89-0	201-231-1	C14H22O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
D	1-(6,6-metil-2-metilenecicloesen-1-il)pent-1-en-3-one	non disponibile	non disponibile	C14H22O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

Costituenti principali	
Altre denominazioni	
A	alfa-iso-metilionone; gamma metilionone

B	beta-iso-metilionone; delta metilionone
C	alfa-n-metilionone
D	gamma-n-metilionone
E	beta-n-metilionone

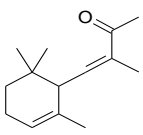
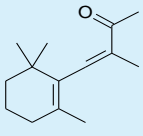
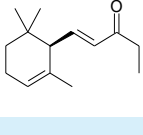
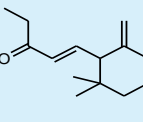
Costituenti principali

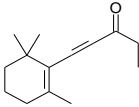
	Nome CE	Descrizione CE
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)-3-buten-2-one	/
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)-3-buten-2-one	/
C	[<i>R-(E)</i>]-1-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il))pent-1-en-3-one	/
D	1-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)pent-1-en-3-one	/
E	1-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)pent-1-en-3-one	/

Costituenti principali

	Nome CAS	Numero CAS
A	3-buten-2-one, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)-	127-51-5
B	3-buten-2-one, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)-	79-89-0
C	1-penten-3-one, 1-[(1 <i>R</i>)-2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il]-, (1 <i>E</i>)-	127-42-4
D	non disponibile	non disponibile
E	1-penten-3-one, 1-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)-	127-43-5

Costituenti principali		
	Altro codice identificativo	Riferimento
A	2714 07.036	FEMA Registro UE delle sostanze aromatizzanti
B	07.041	Registro UE delle sostanze aromatizzanti
C	2711 07.009	FEMA Registro UE delle sostanze aromatizzanti
D	non disponibile	non disponibile
E	2712 07.010	FEMA Registro UE delle sostanze aromatizzanti

Costituenti principali			
	Formula molecolare Metodo CAS	Formula strutturale	Codice SMILES
A	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
B	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
C	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>
D	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem>

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

Costituenti principali

	Peso molecolare/gmol ⁻¹	Intervallo di peso molecolare
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Informazioni sulla composizione – impurezze e additivi

Impurezze

	Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol.	Conc. tipica (%p/p)	Intervallo di conc. (%p/p)
F						
numero di impurezze non specificate: concentrazione totale di impurezze non specificate:				11 (pseudometilioni) 0,5 – 3 %p/p		

Additivi

	Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol.	Conc. tipica (%p/p)	Intervallo di conc. (%p/p)
G	Idrossitoluene butilato (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05 – 0,15

4. Informazioni sulle diverse qualità

Di seguito sono indicati gli intervalli dei cinque costituenti principali nelle tre diverse qualità:

Intervallo di concentrazione [%]	Qualità A	Qualità B	Qualità C
gamma (iso-alfa) metilionone	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (iso-beta) metilionone	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alfa-n-metilionone	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma-n-metilionone	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4
beta-n-metilionone	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15
pseudometiliononi	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Minerali

Un minerale è definito come una combinazione di costituenti inorganici che si trovano nella crosta terrestre, con una serie caratteristica di composizioni chimiche, forme cristalline (da altamente cristalline ad amorfe) e proprietà fisico-chimiche.

I minerali sono esentati dalla registrazione se soddisfano la definizione di sostanza presente in natura (*articolo 3, paragrafo 39* del regolamento REACH) e se non sono chimicamente modificati (*articolo 3, paragrafo 40* del regolamento REACH). Ciò si applica a minerali la cui struttura chimica rimane immutata, anche se è stata soggetta a un processo o trattamento chimico o trasformazione mineralogica fisica, per esempio al fine di rimuovere le impurezze.

Mentre alcuni minerali possono essere descritti unicamente mediante la loro composizione chimica (cfr. capitolo 4.2.1 e 4.2.2 per le sostanze mono-componente e multi-componente), per altri la sola composizione chimica non è sufficiente a identificare in modo univoco tali sostanze (cfr. capitolo 4.2.3).

Contrariamente ad altre sostanze mono- o multi-componente, l'identificazione di molti minerali deve basarsi sulla composizione chimica e sulla struttura interna (rivelata per esempio mediante diffrazione a raggi X), poiché queste insieme rappresentano l'essenza del minerale e ne determinano le proprietà fisico-chimiche.

Come per altre sostanze multi-componente, il numero CAS del minerale deve essere usato come parte dell'identificazione (cioè combinazione di costituenti inorganici). I numeri CAS dei costituenti inorganici (come definiti tramite mineralogia sistematica) sono usati per descrivere i diversi costituenti. In caso di produzione di un singolo costituente inorganico (una sostanza mono-componente), il numero CAS della sostanza dovrebbe essere usato per l'identificazione della sostanza. Per esempio:

- il minerale caolino (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) è fondamentalmente composto da caoliniti primarie e secondarie (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), che sono argille alluminosilicate idrate.

Nel caso in cui il caolino sia sottoposto a un processo di raffinazione per produrre un unico costituente del caolone, per esempio caoliniti, il numero CAS/EINECS della sostanza sarebbe EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- il minerale bentonite (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) che è descritto in EINECS come «un'argilla colloidale che consiste principalmente di montmorillonite» contiene in elevate proporzioni il costituente inorganico montmorillonite (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) ma non solo.

Nel caso sia prodotta montmorillonite pura (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), il numero CAS da usare per identificare la sostanza è quello della montmorillonite.

Si deve sottolineare che la bentonite (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) e la montmorillonite (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) non sono considerate come la stessa sostanza.

In conclusione, un minerale è generalmente denominato in base al suo componente o ai suoi componenti inorganici in combinazione. Possono essere considerate sostanze mono-componente o multi-componente (indicazioni generali nei capitoli 4.2.1 e 4.2.2). Alcuni minerali non possono essere descritti unicamente dalla loro composizione chimica, ma richiedono caratterizzazione fisica o parametri di lavorazione aggiuntivi per essere identificati a sufficienza (cfr. capitolo 4.2.3). Alcuni esempi sono forniti nella seguente tabella.

Esempi di minerali

Nome	CAS	EINECS	Descrizione aggiuntiva
Cristobalite	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (sistema cristallino: cubico/tetragonale)
Quarzo	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (sistema cristallino: trigonale/esagonale)
Diatomite	61790-53-2	-	Nota anche come kieselgur e celite Descrizione: solido siliceo tenero composto da scheletri di piccole piante acquatiche preistoriche. Contiene principalmente silice.
Dolomite	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Minerali del gruppo dei feldspati	68476-25-5	270-666-7	Una sostanza inorganica che è il prodotto di reazione di una calcinazione ad alta temperatura in cui ossido di alluminio, ossido di bario, ossido di calcio, ossido di magnesio, ossido di silicio e ossido di stronzio in quantità variabili sono omogeneamente e ionicamente interdificati per formare una matrice cristallina.
Talco	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Vermiculite	1318-00-9	-	(Mg _{0,33} [Mg ₂₋₃ (Al ₀₋₁ Fe ₀₋₁) ₀₋₁](Si _{2,33-3,33} Al _{0,67-1,67})(OH) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O)

Informazioni analitiche prescritte per i minerali

Composizione elementare	La composizione chimica fornisce una panoramica generale della composizione del minerale indipendentemente dal numero di costituenti e dalle loro proporzioni nel minerale. Per convenzione la composizione chimica è espressa per ossidi.
Dati spettrali (XRD o equivalente)	La XRD o altre tecniche possono identificare i minerali in base alla loro struttura cristallografica. Dovrebbero essere indicati i picchi XRD caratteristici o adeguati dati alternativi che identificano il minerale, unitamente a una breve descrizione del metodo analitico o a riferimenti bibliografici.
Proprietà fisico-chimiche tipiche	I minerali hanno proprietà fisico-chimiche caratteristiche che consentono di completarne l'identificazione, per es. <ul style="list-style-type: none"> - bassissima durezza - capacità di rigonfiamento - forme della diatomite (microscopio ottico) - densità molto elevata - area superficiale (assorbimento di azoto)

7.6. Olio essenziale di Lavandin grosso

Gli oli essenziali sono sostanze ottenute da piante. Pertanto possono anche essere caratterizzati come sostanze botanicamente derivate.

In generale, le sostanze botanicamente derivate sono sostanze naturali complesse ottenute lavorando una pianta o le sue parti mediante un trattamento quale estrazione, distillazione, pressatura, frazionamento, purificazione, concentrazione o fermentazione. La composizione di queste sostanze varia in funzione del genere, della specie, delle condizioni di crescita e del periodo di raccolta delle fonti, nonché delle tecniche di processo applicate.

Gli oli essenziali potrebbero essere definiti dai loro costituenti principali come consueto per le sostanze multi-componente. Tuttavia, gli oli essenziali possono essere formati da diverse centinaia di costituenti, che possono variare considerevolmente in funzione di molti fattori (per esempio genere, specie, condizioni di crescita, periodo di raccolta, processi usati). Pertanto, una descrizione dei costituenti principali spesso non è sufficiente per descrivere queste sostanze UVCB. Gli oli essenziali dovrebbero essere descritti tramite la pianta di origine e il processo di trattamento, come indicato nel capitolo 4.3.1 (usando UVCB sottotipo 3).

In molti casi, per gli oli essenziali sono disponibili norme industriali (per molti oli essenziali anche norme ISO-). Si possono fornire anche informazioni sulle norme. Tuttavia, l'identificazione della sostanza dovrebbe essere basata sulla sostanza così come fabbricata.

L'esempio sottostante descrive «l'olio essenziale di Lavandin grosso», per cui è disponibile una norma ISO (ISO 8902-1999).

1. Nomi e altri identificatori

Fonte

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

Processo

Descrizione dei processi di reazione (bio)chimica usati per la fabbricazione della sostanza:

Distillazione in vapore acqueo di fiori di *Lavandula hybrida grosso* (Lamiaceae) e successiva separazione dell'acqua dall'olio essenziale.

La successiva separazione è un processo fisico spontaneo, che solitamente ha luogo in un separatore (un «pallone») il quale consente il facile isolamento dell'olio separato. La temperatura in questo stadio del processo di distillazione è di circa 40 °C.

Nome

Denominazione IUPAC o altra denominazione chimica internazionale	Olio essenziale di <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
Numero CE Nome CE Descrizione CE	297-385-2 Lavanda, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , est. Estratti e loro derivati fisicamente modificati come tinture, concrete, assolute, oli essenziali, oleoresine, terpeni, frazioni prive di terpeni, distillati, residui, ecc., ottenuti da <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae (31).
Numero CAS Nome CAS	93455-97-1 Lavanda, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , est.

³¹ «Labiatae» e «Lamiaceae» sono sinonimi.

2. Informazioni sulla composizione – costituenti noti

Costituenti noti					
	Denominazione chimica CE CAS IUPAC Altro	Numero CE CAS	Formula mol. di Hill	Conc. tipica % (p/p)	Intervallo di conc. % (p/p)
A	CE linalil acetato CAS 1,6-ottadien-3-olo, 3,7- dimetil-, acetato IUPAC 3,7-dimetil otta-1,6-dien-3-il acetato	CE 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
B	CE linalolo CAS 1,6-ottadien-3-olo, 3,7- dimetil- IUPAC 3,7-dimetil otta-1,6-dien-3- olo	CE 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24 – 35
C	CE Bornan-2-one CAS Biciclo[2.2.1] eptan-2-one, 1,7,7-trimetil- IUPAC 1,7,7-Trimetilbiciclo[2.2.1]- 2-eptanone Altro canfora	CE 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
D	CE Cineolo CAS 2-ossabicyclo [2.2.2]ottano, 1,3,3-trimetil- IUPAC 1,3,3-trimetil-2- ossabicyclo[2.2.2]ottano Altro 1,8-cineolo	CE 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7

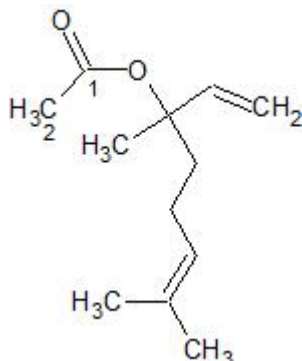
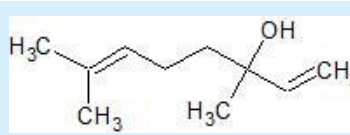
E	<p>CE P-ment-1-en-4-olo</p> <p>CAS 3-cicloesen-1-olo, 4-metil-1-(1-metiletil)-</p> <p>IUPAC 1-(1-metiletil)-4-metil-3-cicloesen-1-olo</p> <p>Altro terpinen-4-olo</p>	<p>CE 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5-5
F	<p>CE 2-isopropenil-5-metiles-4-enil acetato</p> <p>CAS 4-esen-1-olo, 5-metil-2-(1-metiletenil)-, acetato</p> <p>IUPAC 2-(1-metiletenil)-5-metiles-4-en-1-olo</p> <p>Altro (±)-lavandulolo acetato</p>	<p>CE 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5-3
G	<p>CE DL-borneolo</p> <p>CAS Biciclo[2.2.1]eptan-2-olo, 1,7,7-trimetil-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetilbiciclo[2.2.1]eptan-2-olo</p> <p>Altro borneolo</p>	<p>CE 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5-3
H	<p>CE Cariofillene</p> <p>CAS Biciclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimetil-8-metilene-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metilenebiciclo[7.2.0]undec-4-ene</p> <p>Altro trans-beta-cariofillene</p>	<p>CE 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1-2,5
I	<p>CE (E)-7,11-dimetil-3-metilenedodeca-1,6,10-triene</p> <p>CAS 1,6,10-dodecatriene, 7,11-dimetil-3-metilene-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-dimetil-3-metilene-1,6,10-dodecatriene</p> <p>Altro trans-beta-farnesene</p>	<p>CE 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2-2

J	CE (R)-p-menta-1,8-diene CAS cicloesen, 1-metil-4-(1-metiletenil)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-metil-4-(1-metiletenil)cicloesene Altro limonene	CE 227-813-5 CAS 5989-27-5	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5-1,5
K	CE 3,7-dimetilotta-1,3,6-triene CAS 1,3,6-ottatriene, 3,7-dimetil- IUPAC 3,7-dimetilotta-1,3,6-triene Altro cis-beta-ocimene	CE 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5-1,5

Costituenti noti ≥ 10 %

Costituenti noti		
	Nome CE	Descrizione CE
A	linalil acetato C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	linalolo C ₁₀ H ₁₈ O	

Costituenti noti		
	Nome CAS	Numeri CAS correlati
A	linalil acetato C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linalolo C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Costituenti noti			
	Formula molecolare Metodo CAS	Formula strutturale	Codice SMILES
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Costituenti noti		
	Peso molecolare	Intervallo di peso molecolare
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Olio di crisantemo e relativi isomeri isolati

Un'azienda produce un olio di crisantemo che è estratto dopo aver tritato fiori e foglie di *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae con un solvente contenente una miscela di acqua/etanolo (1:10). Dopo l'estrazione il solvente è rimosso e l'estratto «puro» è ulteriormente raffinato per ottenere l'olio di crisantemo finale.

Inoltre, due isomeri sono isolati dall'estratto come una massa di reazione di:

Jasmolina I

(acido ciclopropancarbossilico, 2,2-dimetil-3-(2-metil-1-propenil)-, (1S)-2-metil-4-osso-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciclopenten-1-il estere, (1R,3R)-; numero CAS 4466-14-2), e

Jasmolina II

(acido ciclopropancarbossilico, 3-[(1E)-3-metossi-2-metil-3-osso-1-propenil]-2,2-dimetil-, (1S)-2-metil-4-osso-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciclopenten-1-il estere, (1R,3R)-; numero CAS 1172-63-0

Inoltre, l'azienda ha deciso di sintetizzare anche la massa di reazione isomerica della jasmolina I e II.

L'azienda pone le seguenti domande.

1. Come identificare l'olio di crisantemo ai fini della registrazione?
2. La massa di reazione degli isomeri isolati di jasmolina I e II è coperta dalla registrazione dell'olio?
3. La miscela sintetizzata dei due isomeri può essere considerata uguale alla miscela degli isomeri isolati dall'olio di crisantemo?

1. Come identificare l'olio di crisantemo ai fini della registrazione?

L'olio di crisantemo è considerato una sostanza UVCB che non può essere sufficientemente identificata attraverso la sua composizione chimica (per indicazioni dettagliate cfr. capitolo 4.3). Altri parametri identificativi, come la fonte e il processo, sono essenziali. L'olio di crisantemo è di natura biologica e deve essere identificato attraverso la specie e la parte dell'organismo da cui è ottenuto e attraverso il processo di raffinazione (estrazione con solvente). Tuttavia, la composizione chimica e l'identità dei costituenti devono essere indicate per quanto note.

Le informazioni riportate di seguito sono considerate necessarie per identificare sufficientemente la sostanza.

Nome della sostanza	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; olio ottenuto da fiori e foglie tritati mediante estrazione con acqua:etanolo (1:10)
Fonte	
Genere, specie, sottospecie	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae
Parte della pianta usata per l'olio	Fiori e foglie

Processo				
Metodo di fabbricazione	Triturazione seguita da estrazione			
Solvente usato per l'estrazione	Acqua:etanolo (1:10)			
Informazioni sulla composizione – costituenti noti in % (p/p)				
Nome del costituente	Numero CE	Numero CAS	Min %	Max %
Piretrina I: 2-metil-4-osso-3-(penta-2,4-dienil)ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-crisantemato	204-455-8	121-21-1	30	38
Piretrina II: 2-metil-4-osso-3-(penta-2,4-dienil)ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)-2,2-dimetilciclopropancarbossilato	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerina I: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-ossociclopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerina II: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-ossociclopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)ciclopropano carbossilato	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolina I: 2-metil-4-osso-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	nessuno	4466-14-2	4	10

Jasmolina II: 2-metil-4-osso-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	nessuno	1172-63-0	4	10
Inoltre la sostanza contiene fino a 40 costituenti inferiori all'1 %.				

Si può anche considerare di identificare la sostanza come una sostanza multi-componente ben definita con sei costituenti principali (massa di reazione di piretrina I, piretrina II, cinerina I, cinerina II, jasmolina I e jasmolina II).

La sostanza sarebbe considerata una «sostanza presente in natura» se il processo di fabbricazione fosse esclusivamente «triturazione» e sarebbe esentata dall'obbligo di registrazione a meno che non rispondesse ai criteri per la classificazione come pericolosa secondo la direttiva 67/548/CEE.

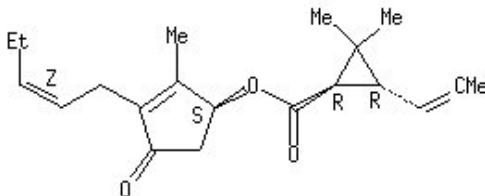
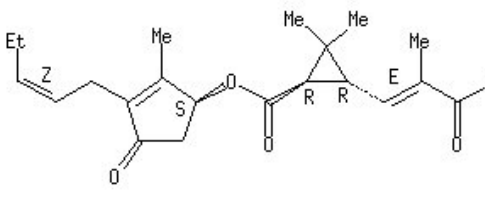
2. La massa di reazione degli isomeri isolati jasmolina I e II è coperta dalla registrazione dell'olio?

La massa di reazione degli isomeri isolati jasmolina I e II non è coperta dalla registrazione dell'«olio di *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae», in quanto i singoli costituenti non sono contemplati dall'intera sostanza UVCB e viceversa. La massa di reazione di jasmolina I e II è considerata una sostanza diversa.

La massa di reazione di jasmolina I e II può essere considerata una sostanza multi-componente (per indicazioni approfondite, cfr. capitolo 4.2.3) con due costituenti principali.

Le informazioni riportate di seguito sono considerate necessarie per identificare sufficientemente la sostanza.

Denominazione IUPAC della sostanza	Massa di reazione di 2-metil-4-osso-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropancarbossilato e (2-metil-4-osso-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)ciclopropancarbossilato)			
Altra denominazione	Massa di reazione di jasmolina I e jasmolina II			
Purezza della sostanza	95 – 98 % (p/p)			
Informazioni sulla composizione – costituenti principali in % (p/p)				
Nome del costituente	Numero CE	Numero CAS	Min %	Max %

Jasmolina I: 2-metil-4-osso-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	nessuno	4466-14-2	40	60
Formola molecolare				
Formola strutturale Peso molecolare			$C_{22}H_{30}O_5$ $M = 374 \text{ g/mol}$	
Jasmolina II: 2-metil-4-osso-3-(pent-2-enil)ciclopent-2-en-1-il [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	nessuno	1172-63-0	35	65
Formola molecolare				
Formola strutturale Peso molecolare			$C_{21}H_{30}O_3$ $M = 374 \text{ g/mol}$	

3. La miscela sintetizzata (massa di reazione) dei due isomeri può essere considerata uguale alla miscela degli isomeri isolati dall'olio di crisantemo?

Per le sostanze chimicamente ben definite, che sono sufficientemente descritte mediante i loro costituenti, non è rilevante se la sostanza è isolata da un estratto o sintetizzata mediante un processo chimico. Pertanto la massa di reazione sintetizzata di jasmolina I e jasmolina II può essere considerata uguale alla miscela di isomeri isolata dal *Chrysanthemum*, anche se derivata da processi di fabbricazione differenti, purché la purezza della miscela e l'intervallo di concentrazione dei costituenti principali siano gli stessi.

4. Conclusioni

Sono identificate due sostanze:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; olio ottenuto da fiori e foglie tritati mediante estrazione con acqua:etanolo (1:10)
2. Massa di reazione degli isomeri jasmolina I e jasmolina II, indipendente dal processo di fabbricazione della sostanza.

Se le sostanze suddette fossero usate *solo* nei prodotti fitosanitari e nei biocidi, sarebbero considerate registrate a norma del REACH (*articolo 15*).

7.8. Fenolo, isopropilato, fosfato

Il fenolo, isopropilato, fosfato (3:1) è una sostanza UVCB in cui la variabilità dell'entità isopropilata non può essere completamente definita.

1. Nome e altri identificatori

Denominazione IUPAC o altra denominazione chimica internazionale	Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1)
Altre denominazioni	Fenolo, isopropilato, fosfato Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1) (basato su un rapporto mol 1:1 propilene / fenolo)
Numero CE Nome CE Descrizione CE	273-066-3 Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1) /
Numero CAS Nome CAS	68937-41-7 Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1)

2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

Costituenti principali					
Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol. metodo di Hill	Conc. tipica (%p/p)	Intervall o di conc. (%p/p)
Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Non specificata		

Costituenti principali	
Nome CE	Descrizione CE
Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1)	/
Nome CAS	Numero CAS
Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1)	68937-41-7

7.9. Composti di ammonio quaternario

Un'azienda sintetizza le seguenti sostanze:

Sostanza A

Composti di ammonio quaternario, di-C₁₀₋₁₈-alchildimetil, cloruri

Numero CE 294-392-2

Numero CAS 91721-91-4

Distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio:

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 %

Sostanza B

Composti di ammonio quaternario, dicocco alchildimetil, cloruri

Numero CE 263-087-6

Numero CAS 61789-77-3

La composizione esatta di questa sostanza non è nota all'azienda.

Sostanza C

Bromuro di didodecildimetilammonio

Sostanza D

Cloruro di didodecildimetilammonio

Sostanza E

La sostanza E è fabbricata come massa di reazione del bromuro di didodecildimetilammonio e del cloruro di didodecildimetilammonio (massa di reazione delle sostanze C e D)

Sostanza F

Composti di ammonio quaternario, di-C₁₄₋₁₈-alchildimetilammonio, cloruri

Numero CE 268-072-8

Numero CAS 68002-59-5

Distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio:

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

Sostanza G

Composti di ammonio quaternario, di-C₄₋₂₂-alchildimetil, cloruri

Distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio (un singolo apice indica un doppio legame; un doppio apice indica un triplo legame):

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

Finora l'azienda usa solo la sostanza B (composti di ammonio quaternario, dicocco alchildimetil cloruri, numero CE 263-087-6 e numero CAS 61789-77-3) per la denominazione poiché è la più adatta per tutte le sostanze (da A a G). L'azienda vorrebbe sapere se è possibile coprire tutte le sostanze (da A a G) con la sola registrazione della sostanza B.

1. Osservazioni generali

Gli idrocarburi (paraffine, olefine) derivati da grassi e oli o da sostituti sintetici sono identificati dalla distribuzione della loro catena di carbonio o dalla loro origine (descrittore alchilico), da un gruppo funzionale (descrittore della funzionalità), per esempio ammonio, e dall'anione/catione (descrittore del sale), per esempio cloruro. La distribuzione della catena di carbonio, per esempio C₈₋₁₈, si riferisce a

saturi

lineari (non ramificati)

tutti i numeri di atomi di carbonio inclusi (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈) in cui una distribuzione limitata non ne copre una più ampia e viceversa.

Altrimenti dovrebbe essere indicato nel modo seguente:

insaturi (C₁₆ insaturi)

ramificati (C₁₀ ramificati)

numeri pari (C₁₂₋₁₈ numeri pari)

Le catene di carbonio descritte dalla fonte devono comprendere la distribuzione presente alla fonte, per esempio sego alchil ammine.

Le sego alchil ammine sono al 99 % ammine alchiliche a catena lineare primaria con la seguente distribuzione della lunghezza della catena di carbonio (Ullmann, 1985) [un singolo apice indica un doppio legame; un doppio apice indica un triplo legame]:

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

2. Come identificare le sostanze ai fini della registrazione?

Ogni sostanza è confrontata con la sostanza B (usata finora per la denominazione) al fine di decidere se le due sostanze possono essere considerate uguali.

Confronto tra le sostanze A e B

La seguente distribuzione delle lunghezze delle catene può essere trovata per «cocco» della sostanza B (Ullmann, 1985) [un singolo apice indica un doppio legame; un doppio apice indica un triplo legame]:

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

Quindi la distribuzione delle lunghezze delle catene della sostanza A si scosta dalla distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio della sostanza B «cocco». Poiché le composizioni qualitativa e quantitativa delle due sostanze si scostano significativamente, non possono essere considerate uguali.

Confronto tra le sostanze B e C

La sostanza B «Composti di ammonio quaternario, dicocco alchilidimetil, cloruri» descrive una miscela di costituenti con catene di carbonio di differenti lunghezze (da C₆ a C₁₈ pari, lineari, sature e insature), mentre la sostanza C descrive solo un costituente con una sola catena di lunghezza definita e satura (C₁₂) e con un anione differente (bromuro). Pertanto, la sostanza C non può essere considerata uguale alla sostanza B.

Confronto tra le sostanze B e D

La sostanza B «Composti di ammonio quaternario, dicocco alchilidimetil, cloruri» descrive una miscela di costituenti con catene di carbonio di differenti lunghezze (da C₆ a C₁₈ pari, lineari, sature e insature), mentre la sostanza D descrive un costituente con una sola catena di lunghezza definita e satura (C₁₂) e con lo stesso anione (cloruro). Le sostanze B e D hanno nomi diversi e non possono essere considerate uguali, in quanto un singolo costituente non è coperto da una miscela contenente un determinato costituente e viceversa.

Confronto tra le sostanze B ed E

La sostanza E è una miscela delle sostanze C e D. Entrambe hanno una catena satura di lunghezza C₁₂ ma anioni diversi (bromuro e cloruro). La sostanza B «Composti di ammonio quaternario, dicocco alchilidimetil, cloruri» descrive una miscela di costituenti con catene di carbonio di differenti lunghezze (da C₆ a C₁₈ pari, lineari, sature e insature) e il cloruro come anione. Tuttavia, la sostanza E è descritta solo dalla catena di carbonio di lunghezza C₁₂ con il bromuro come anione aggiuntivo. Pertanto le sostanze B ed E non possono essere considerate uguali. Di conseguenza per la sostanza E è necessaria una registrazione separata.

Confronto tra le sostanze B e F

La sostanza F «Composti di ammonio quaternario, di-C₁₄₋₁₈-alchilidimetilammonio, cloruri» è una miscela di costituenti con catene di carbonio di diverse lunghezze (da C₁₄ a C₁₈ pari e

dispari, lineari e sature). La sostanza F differisce nella composizione e nell'intervallo della distribuzione della catena di carbonio rispetto alla sostanza B. La sostanza F ha una distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio ristretta e in aggiunta le catene di carbonio C₁₅ e C₁₇. Pertanto le sostanze B e F non possono essere considerate uguali.

Confronto tra le sostanze B ed G

Le sostanze B e G sembrano essere molto simili, poiché la distribuzione delle catene di carbonio è quasi nello stesso intervallo. Tuttavia, la sostanza G include anche le catene di carbonio di lunghezza C₄, C₂₀ e C₂₂. La distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio della sostanza G comprende un intervallo più ampio di quello della sostanza B. Pertanto le sostanze B ed G non possono essere considerate uguali.

3. Conclusioni

Gli idrocarburi (paraffine, olefine) possono essere considerati come la stessa sostanza solo quando tutti e tre i descrittori (alchilico, funzionalità e sale) sono uguali.

Nell'esempio precedente i descrittori sono sempre diversi l'uno dall'altro. Pertanto le sostanze non possono essere coperte dalla sola registrazione della sostanza B.

7.10. Sostanze derivate dal petrolio

Usando le indicazioni per le sostanze UVCB specifiche riportate nel capitolo 4.3.2, sono inclusi due esempi.

7.10.1. Corrente per la miscelazione della benzina (C4-C12)

1. Nome e altri identificatori

Nome

Denominazione IUPAC o altra denominazione chimica internazionale	Nafta (petrolio), da reforming catalitico
---	---

Fonte

Identificazione o descrizione della fonte della corrente	Petrolio grezzo
---	-----------------

Processo

Descrizione del processo di raffineria	Processo di reforming catalitico
Intervallo del carbonio	C4-C12

Intervallo o limiti massimi del punto di ebollizione	Da 30 °C a 220 °C
Altre proprietà fisiche, per es. viscosità	Inferiore a 7 mm ² /s a 40 °C (viscosità)
Numero CE Numero CAS Nome CE/Nome CAS Descrizione CE/Descrizione CAS	273-271-8 68955-35-1 Nafta (petrolio), da reforming catalitico Una combinazione complessa di idrocarburi ottenuta con la distillazione di prodotti provenienti da un processo di reforming catalitico. È costituita da idrocarburi con un numero di atomi di carbonio prevalentemente nell'intervallo C4-C12 e con punto di ebollizione approssimativamente nell'intervallo 30 °C-220 °C (90 °F-430 °F). Contiene una percentuale relativamente alta di idrocarburi aromatici e a catena ramificata. Questa corrente può contenere il 10 % o più di benzene in volume.

2. Informazioni sulla composizione

Costituenti noti			
Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Intervallo di conc. (%p/p)
Benzene	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluene	108-88-3	203-625-9	20-25
Xilene	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Gasoli (petrolio)

1. Nome e altri identificatori

Denominazione IUPAC o altra denominazione chimica internazionale	Gasoli (petrolio), pesanti, distillazione atmosferica
---	---

Fonte

Identificazione o descrizione della fonte della corrente	Petrolio grezzo
---	-----------------

Processo

Descrizione del processo di raffineria	Distillazione atmosferica
Intervallo del carbonio	C7-C35
Intervallo o limiti massimi del punto di ebollizione	Da 121 °C a 510 °C
Altre proprietà fisiche, per es. viscosità	20 mm ² /s a 40 °C (viscosità)
Numero CE Numero CAS Nome CE/Nome CAS Descrizione CE/Descrizione CAS	272-184-2 68783-08-4 Gasoli (petrolio), pesanti, distillazione atmosferica Una combinazione complessa di idrocarburi ottenuta per distillazione del petrolio grezzo. È costituita da idrocarburi con numero di atomi di carbonio prevalentemente nell'intervallo C7-C35, e punto di ebollizione approssimativamente nell'intervallo 121 °C-510 °C (250 °F-950 °F).

2. Composizione chimica

Nessuna informazione disponibile.

7.11. Enzimi

Usando le indicazioni per le sostanze UVCB specifiche riportate nel capitolo 4.3.2.3, sono inclusi due esempi per i concentrati enzimatici: subtilisina (identificata mediante nomenclatura IUBMB + altri costituenti) e α -amilasi (identificata mediante nomenclatura IUBMB + organismo di produzione)

7.11.1. Subtilisina

Proteina enzimatica	Subtilisina
Numero IUBMB	3.4.21.62
Denominazioni fornite dall'IUBMB (Nome sistemico, nome dell'enzima, sinonimi)	Subtilisina; alcalasi; alcalasi 0,6L; alcalasi 2,5L; enzima ALK; bacillopeptidasi A; bacillopeptidasi B; bioprasi, proteinasi alcalina da <i>Bacillus subtilis</i> ; bioprasi AL 15; bioprasi APL 30; colistinasi; (cfr. anche commenti); subtilisina J; subtilisina S41; subtilisina Sendai; subtilisina GX; subtilisina E; ecc.
Osservazioni formulate dall'IUBMB	La subtilisina è una serina endopeptidasi, esempio tipico della famiglia di peptidasi S8 . Non contiene alcun residuo di cisteina (sebbene questi si trovino in enzimi omologhi). Le varianti della specie includono la subtilisina BPN' (anche subtilisina B, subtilo-peptidasi B, subtilo-peptidasi C, Nagarse, proteinasi Nagarse, subtilisina Novo, proteinasi batterica Novo) e la subtilisina Carlsberg (subtilisina A, subtilo-peptidasi A, alcalasi Novo). Precedentemente CE 3.4.4.16 e inclusa in CE 3.4.21.14. Enzimi simili sono prodotti da vari ceppi di <i>Bacillus subtilis</i> e altre specie di <i>Bacillus</i> [1,3]
Reazione	Idrolisi delle proteine con un'ampia specificità per i legami peptidici, e una preferenza per un grande residuo senza carica in P1. Idrolizza peptidi ammidici
Tipo di reazione	Idrolasi; azione sui legami peptidici (peptidasi); serina endopeptidasi
Numero CE	232-752-2
Nome CE	Subtilisina
Numero CAS	9014-01-1
Nome CAS	Subtilisina
Concentrazione della proteina enzimatica	26 %

Altri costituenti	
Altre proteine, peptidi e aminoacidi	39 %
Carboidrati	11 %
Lipidi	1 %
Sali inorganici	23 %
Ulteriori parametri	
Substrati e prodotti	proteine od oligopeptidi, acqua peptidi

7.11.2. α -amilasi

Proteina enzimatica	α-amilasi
Numero IUBMB	3.2.1.1
Denominazioni fornite dall'IUBMB (Nome sistemico, nome dell'enzima, sinonimi)	1,4- α -D-glucano glucanoidrolasi; glicogenasi; α -amilasi; alfa-amilasi; endoamilasi; Taka-amilasi A
Osservazioni formulate dall'IUBMB	Agisce su amido, glicogeno e polisaccaridi e oligosaccaridi correlati in maniera causale; gruppi riducenti sono liberati nella configurazione α . Il termine « α » si riferisce alla configurazione anomerica iniziale del gruppo di zucchero libero rilasciato e non alla configurazione del legame idrolizzato.
Reazione	Endoidrolisi dei legami 1,4- α -D-glucosidici in polisaccaridi contenenti tre o più unità di D-glucosio con legami 1,4- α

Tipo di reazione	idrolasi; glicosidasi; glicosidasi, cioè enzimi che idrolizzano composti O-glicosilati ed S-glicosilati
Numero CE	232-565-6
Nome CE	Amilasi, α -
Numero CAS	9000-90-2
Numeri CAS correlati	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319- 50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (tutti cancellati)
Nome CAS	Amilasi, α -
Concentrazione della proteina enzimatica	37 %
Altri costituenti	
Altre proteine, peptidi e aminoacidi	30 %
Carboidrati	19 %
Sali inorganici	14 %
Ulteriori parametri	
Substrati e prodotti	amido; glicogeno; acqua; polisaccaride; oligosaccaride

Appendice I – Materiale di supporto

La presente appendice include un elenco di siti web, banche dati e manuali che possono risultare utili nell'individuazione dei nomi IUPAC, CAS e CE, dei numeri CAS e CE, delle formule molecolari e strutturali appropriati, compresa la notazione SMILES e altri parametri necessari per l'identificazione delle sostanze. Non sono stati inclusi banche dati e strumenti orientativi commerciali.

Generale		
Parametro di identificazione della sostanza	Fonte	Descrizione della fonte
Dipartimento della sanità e servizi sociali degli Stati Uniti	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Famiglia di banche dati e strumenti per aiutare gli utilizzatori nella ricerca di informazioni chimiche
Perkin Elmer Informatics	https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	Banca dati gratuita che fornisce strutture chimiche, proprietà fisiche e collegamenti ipertestuali a informazioni pertinenti
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Software chimico; elenco alfabetico dei prodotti Accord

Nome e altri identificatori		
Parametro di identificazione della sostanza	Fonte	Descrizione della fonte
Denominazione IUPAC	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	Sito web IUPAC ufficiale
	https://iupac.qmul.ac.uk/	Nomenclatura chimica e raccomandazioni IUPAC (sotto l'autorità di IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC, aggiornamento previsto nel 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC, aggiornamento previsto nel 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC, aggiornamento previsto a luglio 2005.
Denominazione IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Volume introduttivo in cui sono contemplati tutti i tipi di composti

Denominazione IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/raw_nom/	Programma computerizzato commerciale di denominazione che può essere molto utile per denominare strutture di moderata complessità. Disponibile anche in forma gratuita per piccole molecole (raccomandato da IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Nomenclatura IUPAC di chimica organica (raccomandato da IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Elenco completo dei nomi approvati trascurabili e semi-sistematici dei composti organici
	http://www.chemexper.com/	La Directory chimica ChemExper ha lo scopo di creare una banca dati comune e gratuitamente accessibile sulle sostanze chimiche su Internet. Questa banca dati contiene sostanze chimiche con le loro caratteristiche fisiche. Chiunque può presentare informazioni sulle sostanze chimiche e recuperare informazioni con un browser web
Nomenclatura IUBMB	https://iubmb.qmul.ac.uk/	Banca dati IUBMB sulla nomenclatura biochimica (sotto l'autorità dell'IUBMB)
Altre denominazioni	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Nomi generici Colour Index, Colour Index Internazionale, Quarta Edizione Online
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (Nomenclatura internazionale degli ingredienti cosmetici), sito web ufficiale del Personal Care Products Council
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	EPA statunitense Sostanze contenenti lunghezze delle catene di carbonio variabili (intervalli alchilici utilizzando la notazione CX-Y)

Altri identificatori	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	Norme CE, sito CE europeo ufficiale
Numero-CE	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	Inventario CE: ricerca su EINECS, ELINCS, NLP e <i>allegato I</i> di 67/548/CEE
Numero CAS	http://www.cas.org	Sito web ufficiale del servizio di registrazione CAS
	http://www.chemistry.org	Sito web ufficiale della American Chemical Society

Formula molecolare e strutturale

Parametro di identificazione della sostanza	Fonte	Descrizione della fonte
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html	Generatore gratuito di SMILES
Peso molecolare e SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, in forma gratuita (disponibile anche commercialmente)
Numerosi parametri fisico-chimici	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface	La EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ è una suite basata su Windows® sulle proprietà fisico/chimiche e i modelli di stima del destino ambientale sviluppata dall'Office of Pollution Prevention Toxics dell'EPA e dalla Syracuse Research Corporation (SRC).
Supporto aggiuntivo su sostanze specifiche	Domande e risposte – ECHA Assistenza specifica per settore per l'identificazione delle sostanze – ECHA	Il sito web dell'ECHA e la sezione «domande e risposte» forniscono assistenza sugli approcci per la denominazione e la caratterizzazione di sostanze specifiche.

Appendice II – Orientamenti tecnici in base al parametro di identificazione delle sostanze

Le informazioni contenute nella presente appendice sono destinate agli utilizzatori del documento che non hanno familiarità con le regole tecniche di nomenclatura, l'uso dei vari numeri di registro e le regole di notazione per le informazioni molecolari e strutturali, i dati spettrali, ecc.

Forniscono un'introduzione generale sintetizzando i principi più importanti e guida l'utilizzatore alle fonti originali per informazioni più complete.

Questa panoramica è una versione semplificata, non completa né esaustiva, e non è sufficientemente dettagliata per gli utilizzatori professionali. Non dovrebbe in alcun caso essere considerata equivalente alla fonte ufficiale.

1 Nome/i nella nomenclatura IUPAC o altra nomenclatura internazionale

Per la registrazione, si deve indicare la denominazione IUPAC inglese o un altro nome ben definito e accettato a livello internazionale della sostanza.

Una denominazione IUPAC si basa sulla nomenclatura chimica standard internazionale definita dall'organizzazione internazionale IUPAC, l'Unione internazionale di chimica pura e applicata (per riferimenti adatti cfr. appendice 1). La nomenclatura IUPAC è un metodo sistematico per la denominazione delle sostanze chimiche, sia organiche che inorganiche. Nella nomenclatura IUPAC si usano prefissi, suffissi e infissi per descrivere tipo e posizione dei gruppi funzionali nella sostanza.

penta-1,3-dien-1-olo, in questo esempio:

il prefisso è **penta-1,3-**

l'infisso è **-di** e

il suffisso è **-olo**

en- è la base del nome, la radice.

L'insieme di regole è stato messo a punto nel corso di diversi anni e cambia continuamente per far fronte a nuovi componenti con diversità molecolari e ai possibili conflitti o confusioni che sono stati identificati. Le regole definite da IUPAC possono essere usate solo per sostanze ben definite.

Di seguito sono fornite indicazioni generali sulla struttura di una denominazione IUPAC. Per un supporto dettagliato, usare le indicazioni fornite nel capitolo 4 del presente documento d'orientamento.

1.1 Sostanza organica

Passaggio 1 Identificare il numero di atomi di C nella catena continua più lunga degli atomi di carbonio; questo numero determina il prefisso, la prima parte, della radice:

Numero di atomi di carbonio	Radice
1	met-
2	et-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	es-
7	ept-
8	ott-
N

Passaggio 2 Determinare la saturazione della catena; la saturazione della catena determina il suffisso, la seconda parte, della radice:

Saturazione	Legami	Suffisso
Insaturo	Doppio Triplo	-ene -in
Saturo	-	-ano

In caso di legami doppi o tripli multipli, il numero di legami è indicato con «mono», «di», «tri», ecc. prima del suffisso:

pentene con 2 legami doppi: pentadiene

Passaggio 3 Combinare prefisso, suffisso e aggiunte alla radice

Nota bene: per la radice, si possono usare anche nomi comuni e semi-sistematici approvati da IUPAC:

benzene, toluene, ecc.

Passaggio 4 Usare la tabella seguente:

- identificare sostituenti e/o gruppi funzionali: gruppi di carbonio o non di carbonio legati alla catena di atomi di carbonio identificata in 1;
- determinare l'ordine di precedenza dei sostituenti e/o dei gruppi funzionali;
- aggiungere il suffisso del primo sostituito/gruppo funzionale e di quelli eventualmente successivi secondo l'ordine di precedenza;

- aggiungere il prefisso degli altri sostituenti e gruppi funzionali in ordine alfabetico.

Precedenza	Gruppo	Formula	Suffisso	Prefisso
1	Acido carbossilico	R-COOH	acido -oico	Carbossi
2	Esteri	R-CO-O-R	-oato	-
3	Ammide	R-CONH ₂	-ammide	Carbamoil
4	Cianuro	R-CN	-nitrile	Ciano
5	Aldeide	R-CHO	-ale	Osso
6	Chetone	R-CO-R	-one	Osso
7	Alcol	R-OH	-olo	Idrossil
8	Tiolo	R-SH	-tiolo	Sulfanil
9	Ammina	R-NH ₂	-ammino	Ammino

1.2 Sostanza inorganica

1.2.1 Denominazione di sostanze inorganiche semplici

La denominazione delle sostanze inorganiche si basa su una serie di regole (libro rosso IUPAC, cfr. riferimento in 7.1), le più basilari delle quali sono riportate di seguito.

- 1 Gli anioni ad atomo singolo sono indicati con il suffisso -ido:

O²⁻ è ossido

- 2 I composti ionici semplici sono denominati con il catione seguito dall'anione. Per i cationi con cariche >1, le cariche sono scritte con numeri romani tra parentesi immediatamente dopo il nome dell'elemento:

Cu²⁺ è rame(II)

- 3 Gli idrati sono denominati con il composto ionico seguito da prefisso numerico e -idrato. I prefissi numerici sono mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, esa-, epta-, otta-, nona-, deca-:

CuSO₄ 5H₂O è «rame(II) solfato pentaidrato»

Nota bene: ai fini della registrazione, le forme idrate e, quando applicabile, la forma anidra di un particolare sale metallico sono considerate «sostanze identiche».

- 4 I composti molecolari inorganici sono denominati con un prefisso (cfr. idrati) prima di ciascun elemento. L'elemento più elettronegativo è scritto per ultimo, con un suffisso -uro:

CO₂ è diossido di carbonio e CCl₄ è tetracloruro di carbonio.

- 5 Gli acidi sono denominati in base all'anione formato quando l'acido è disciolto in acqua. Ci sono diverse possibilità:

- a se, quando disciolto in acqua, l'acido si dissocia in un anione con il nome di

«x»-uro, l'acido è denominato acido idro-»x»-ico:

l'acido idroclorico forma un anione cloruro.

b se, quando disciolto in acqua, l'acido si dissocia in un anione con il nome di «x»-ato, l'acido è denominato acido »x»-ico:

in acqua l'acido clorico si dissocia in anioni clorato.

c se, quando disciolto in acqua, l'acido si dissocia in un anione con il nome nella forma di «x»-ito, l'acido è denominato acido »x»-oso:

l'acido cloroso si dissocia in anioni clorito.

1.2.2 Denominazione delle fasi mineralogiche

Le fasi mineralogiche complesse in genere contengono tre o più elementi in combinazione. La maggior parte degli elementi presenti è associata a ossigeno e, per semplificare l'identificazione, i composti più complessi sono solitamente considerati dai mineralogisti come formati da ossidi, alcuni dei quali basici e altri acidi. Per esempio, nel caso dei silicati è consueto rappresentarli come la somma di un dato numero di ossidi o come sali di acido silicico, o acidi alluminosilicici. Di conseguenza, l'ortosilicato di calcio può essere rappresentato come $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$, una combinazione di ossidi separati o come Ca_2SiO_4 , il sale di calcio dell'acido ortosilicico H_4SiO_4 . Lo stesso si applica ad altri ossidi minerali complessi: essi possono essere denominati con un prefisso prima di ogni ossido (per es. Ca_3SiO_5 = silicato tricalcico = $3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$). In alcuni settori industriali è stata introdotta un'ulteriore semplificazione per abbreviare le formule dei composti. Per esempio nel caso del clinker di cemento di Portland, $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ (ortosilicato di calcio o silicato dicalcico) è abbreviato in C_2S , dove C = CaO ed S = SiO_2 . Si consiglia di fare riferimento a testi mineralogici o industriali standard per denominare o identificare fasi mineralogiche complesse.

1.3 Prodotti naturali e relativi componenti

Per i prodotti naturali, la IUPAC ha messo a punto numerose regole per la denominazione sistematica. In breve ciò significa che per le sostanze estratte da una fonte naturale il nome si basa, ogniqualvolta sia possibile, sul nome della famiglia, del genere o della specie dell'organismo da cui la sostanza è stata estratta:

per un'ipotetica proteina *Hypothecalia Exemplare*, i nomi si basano su *hypothecalia* e/o *exemplare*, per esempio *Horse Exemplare*

Se possibile, il nome dovrebbe riflettere la distribuzione nota o probabile del prodotto naturale. Se appropriato, si possono anche usare la classe o l'ordine come base per il nome della sostanza presente in numerose famiglie correlate. Il nome di prodotti naturali dalla struttura ignota non dovrebbe contenere alcuno dei prefissi, suffissi e/o infissi usati nella nomenclatura organica:

prodotto di condensazione di *Horse exemplare*, Valarine aggiunta a N-terminale

Molte sostanze presenti in natura appartengono a classi strutturali ben definite, ciascuna delle quali può essere caratterizzata da una serie di strutture originali che sono strettamente correlate, vale a dire che ciascuna può essere derivata da una struttura fondamentale. Il nome sistematico di tali sostanze presenti in natura e dei loro derivati può basarsi sul nome della struttura originale fondamentale appropriata:

strutture originali note sono alcaloidi, steroidi, terpenoidi e vitamine

Una struttura originale fondamentale dovrebbe riflettere lo scheletro di base comune alla maggior parte delle sostanze in quella classe. Le sostanze presenti in natura o i loro derivati sono denominati in base alla struttura originale, aggiungendo prefissi, suffissi o infissi che denotano:

- modifiche alla struttura scheletrica;
- sostituzione di atomi scheletrici;
- variazioni nello stato di idrogenazione comportate dal nome della struttura originale;
- atomi o gruppi che sostituiscono gli atomi di idrogeno della struttura originale;
- configurazioni non già comportate dal nome della struttura originale, o variate rispetto a quelle comportate.

Il cloruro di tiamina è anche noto come vitamina B₁

Per informazioni più dettagliate sulla denominazione sistematica dei prodotti naturali e delle sostanze correlate, contattare la IUPAC (cfr. appendice 1).

1.4 Denominazione IUPAC impossibile da derivare

Se non è possibile derivare una denominazione IUPAC per determinate sostanze, si può usare un'altra nomenclatura riconosciuta a livello internazionale, specifica per tali sostanze, quali:

- minerali e minerali metallici; nomi mineralogici;
- sostanze derivate dal petrolio;
- nomi generici Colour Index ³;
- additivi del petrolio;
- INCI (Nomenclatura internazionale degli ingredienti cosmetici) ⁴;
- nomi SDA (Associazione per la fabbricazione di saponi e detersivi) per i tensioattivi ⁵;
- eccetera.

2 Altre denominazioni

Tutti i nomi pertinenti e/o gli identificatori pubblici in tutte le lingue in cui una sostanza è o sarà commercializzata nell'UE (per esempio nomi commerciali) sono utili da includere per la registrazione in ambito REACH. Sono inclusi nomi commerciali, sinonimi, abbreviazioni, ecc.

- <http://www.colour-index.com>, Colour Index Internazionale, quarta edizione online
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, sito web ufficiale del Personal Care Products Council
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, sito ufficiale dell'American Cleaning Institute (ACI).

3 Numero CE da EINECS, ELINCS o NLP (inventario CE)

Il numero CE, ossia EINECS, ELINCS o NLP, è il numero ufficiale della sostanza all'interno dell'Unione europea. Il numero CE si può ottenere dalle pubblicazioni ufficiali di EINECS, ELINCS ed NLP e dell'Agenzia europea per le sostanze chimiche.

Il numero CE consiste di 7 cifre del tipo x₁x₂x₃-x₄x₅x₆-x₇. La prima cifra è definita dall'elenco a cui la sostanza appartiene:

Elenco	Prima cifra del numero CE
EINECS	2 o 3
ELINCS	4
NLP	5

4 Nome CAS e numero CAS

Il Chemical Abstracts Service (CAS), una divisione dell'American Chemical Society (ACS), assegna un nome e un numero CAS a ogni sostanza chimica che entra nella banca dati del registro CAS. I nomi e i numeri sono assegnati in ordine sequenziale a sostanze uniche identificate dagli scienziati CAS. Ogni sostanza registrata presso il Chemical Abstracts Service ha un nome secondo la nomenclatura CAS, che l'ACS adotta dopo le raccomandazioni del comitato ACS sulla nomenclatura (cfr. riferimenti nell'appendice 1).

4.1 Nome CAS

Il nome CAS è il nome attribuito dal Chemical Abstracts Service e differisce dal nome IUPAC. La nomenclatura CAS si basa su una serie limitata di criteri che non sono sempre sufficienti per derivare il nome di una sostanza. Pertanto in genere si raccomanda di contattare il Chemical Abstracts Service per ottenere il nome CAS corretto.

In breve, le regole di nomenclatura di base sono:

- una parte «principale» della sostanza è scelta per fungere da intestazione o parte primaria;
- i sostituenti sono elencati dopo l'intestazione/parte primaria, cui si fa riferimento in ordine inverso;
- quando sono presenti più sostituenti, questi sono elencati in ordine alfabetico (prefissi inclusi):

o-xilene-3-olo è benzene, 1,2-dimetil, 3-idrossi,

4.2 Numero CAS

I numeri CAS possono essere ottenuti dal Chemical Abstracts Service.

Il numero CAS consiste di un minimo di 5 cifre, divise in tre parti separate da trattini. La seconda parte consiste sempre di 2 cifre, la terza parte di 1 cifra,

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

Per controllare un numero CAS, è disponibile una «somma di controllo»:

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

Il numero CAS deve essere corretto in base alla somma di controllo.

5 Altri codici identificativi

Possono essere forniti anche altri codici identificativi riconosciuti a livello internazionale, quali:

- numero doganale;
- numero ONU;
- numero del Colour Index;
- numero di tintura.

6 Formula molecolare, formula strutturale e SMILES

6.1 Formula molecolare

Una formula molecolare identifica ciascun tipo di elemento dal suo simbolo chimico e identifica il numero di atomi di ciascuno di tali elementi trovati in una determinata molecola della sostanza.

Le formule molecolari dovrebbero essere indicate secondo il sistema Hill (tradizionale) e, inoltre, secondo il sistema CAS quando questo differisca dalla formula del sistema Hill.

Per applicare il metodo Hill si possono seguire le seguenti fasi:

1. identificare gli elementi ed elencare i simboli chimici;
2. disporre gli elementi nell'ordine corretto:
 - a. Sostanze contenenti carbonio:
ogni elemento è menzionato secondo il suo simbolo chimico, nella seguente sequenza:
 - (1) carbonio;
 - (2) idrogeno;
 - (3) altri simboli degli elementi in ordine alfabetico:
pentano: C₅H₁₂
pentene: C₅H₁₀
pentanolo: C₅H₁₂O
 - b. Sostanze non contenenti carbonio:
ogni elemento è indicato in ordine alfabetico:

acido idroclorico: ClH

3. Per ogni elemento, quando il numero di atomi è > 1, indicare il numero di atomi come pedice dei simboli chimici;

4. Aggiungere informazioni che non sono correlate alla struttura principale alla fine della formula molecolare, separate da un punto o da una virgola:

il benzoato di sodio è C₇H₆O₂, sale di sodio

il solfato di rame diidrato è CuO₄S.2H₂O

Nel caso in cui il metodo Hill non possa essere applicato ad una sostanza specifica, la formula molecolare dovrebbe essere indicata in modo diverso, per esempio come formula empirica, una semplice descrizione degli atomi e del rapporto degli atomi disponibili, o secondo la formula fornita dal Chemical Abstracts Service (cfr. capitolo 4 del documento d'orientamento).

6.2 Formula strutturale e descrizione della struttura cristallina

La formula strutturale serve a visualizzare la disposizione delle molecole all'interno della sostanza e il loro rapporto reciproco. La formula strutturale dovrebbe indicare la posizione degli atomi, ioni o gruppi e la natura dei loro legami. Ciò include anche isomeria, cioè cis/trans, chiralità, enantiomeri, ecc.

La formula strutturale può essere indicata in diversi modi: in forma di una formula molecolare e/o in forma di un diagramma strutturale.

- *Formula strutturale sotto forma di formula molecolare*

1. Trascrivere tutti gli elementi per gruppi e in ordine di apparizione:

n-pentano: CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

2. Ogni sostituente è scritto tra parentesi, direttamente dopo l'atomo a cui è collegato:

2-metilbutano: CH₃CH(CH₂)CH₂CH₃

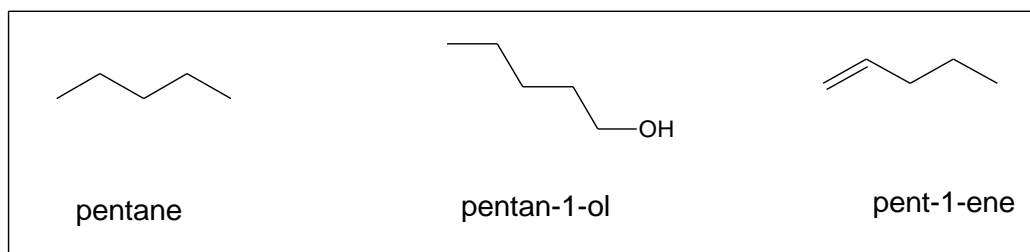
3. In caso di doppi o tripli legami, indicarli tra i gruppi di elementi interessati:

pent-1-ene: CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

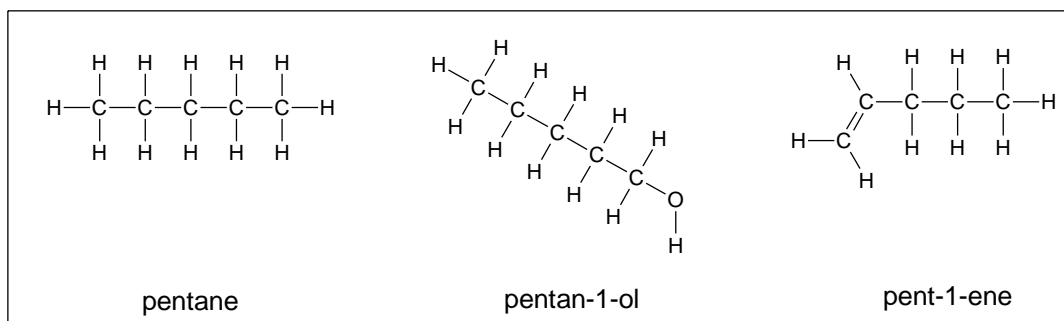
- *Formula strutturale sotto forma di diagramma strutturale*

In un diagramma strutturale, gli elementi e i legami tra gli elementi sono visualizzati in un'immagine 2D o 3D. Esistono diversi metodi:

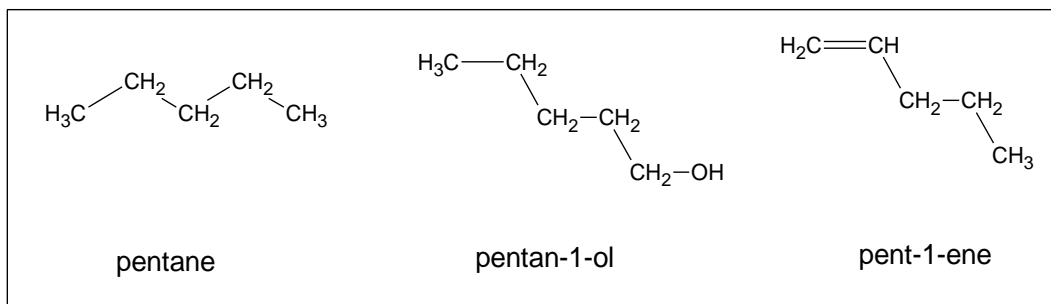
1. mostrare tutti gli elementi diversi dal carbonio e l'idrogeno attaccato agli elementi diversi dal carbonio;



2. mostrare tutti gli elementi per nome;



3. mostrare il carbonio e l'idrogeno come gruppi (per es. CH₃), tutti gli elementi diversi dal carbonio e tutti gli idrogeni non legati al carbonio.

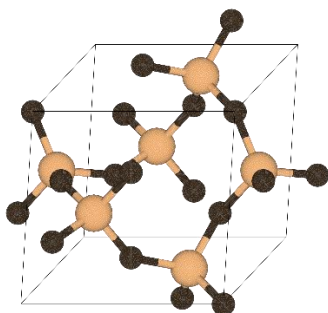


- Formula strutturale sotto forma di formula molecolare

1. Fornire la formula molecolare:

SiO₂

2. fornire una struttura cristallina della sostanza



3. fornire il nome mineralogico e/o cristallografico in base al sistema cristallino ⁽³²⁾ e alla classe cristallina:

α-quarzo [*β*-quarzo] / **sistema cristallino**: trigonale - esagonale, **classe cristallina**:
trigonale-trapezoedro 3 2

6.3 Notazione SMILES

SMILES è l'acronimo di Simplified Molecular Input Line Entry Specification. ⁽³³⁾ Si tratta di un sistema di notazione chimica usato per rappresentare una struttura molecolare mediante una stringa lineare di simboli. Con SMILES standard, il nome di una molecola è sinonimo della sua struttura: mostra indirettamente un'immagine bidimensionale della struttura molecolare. Dato che una struttura chimica bidimensionale può essere disegnata in vari modi, esistono numerose notazioni SMILES corrette per un'unica molecola. La base della notazione SMILES è la rappresentazione di un modello di valenza di una molecola; pertanto non è opportuna per descrivere molecole che non possono essere rappresentate da un modello di valenza.

³² cubico/tetragonale/ortorombico/romboedrico (o trigonale)/esagonale/monoclino/triclino

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

Le notazioni SMILES sono costituite da atomi, designati mediante simboli elementari, legami, parentesi, usate per mostrare ramificazioni, e numeri, usati per strutture cicliche. Una notazione SMILES indica una struttura molecolare sotto forma di grafico con indicazioni chirali opzionali. Una notazione SMILES che descriva la struttura solo in termini di legami e atomi è chiamata SMILES generica; una notazione SMILES scritta con specifiche isotopiche e chirali è anche nota come SMILES isomerica.

In breve la notazione SMILES si basa su diverse regole di base:

1. gli atomi sono rappresentati dai loro simboli atomici;
2. ogni atomo, ad eccezione dell'idrogeno, è specificato in modo indipendente;
 - a. gli elementi nel «sottogruppo organico» B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I sono scritti senza parentesi e senza H attaccati, nella misura in cui il numero di H è conforme alla valenza o alle valenze normali minime, coerente con i legami espliciti:

Elemento nel «sottogruppo organico»	«Valenza normale minima»
B	3
C	4
N	3 e 5
O	2
P	3 e 5
S	2, 4 e 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. gli elementi nel «sottogruppo organico» sono scritti fra parentesi non appena il numero di H non è conforme alla valenza normale minima:

il catione di ammonio è NH₄⁺

- c. gli elementi diversi da quelli nel «sottogruppo organico» sono scritti fra parentesi mostrando l'eventuale idrogeno legato.

3. Gli atomi alifatici sono immessi in lettere maiuscole; gli atomi aromatici in lettere minuscole:

il benzene è c1ccccc1 e il cicloesano è C1CCCCC1

4. L'idrogeno è incluso solo nelle seguenti situazioni:
- idrogeno con carica, cioè un protone, [H+];
 - idrogeni collegati ad altri idrogeni, cioè idrogeno molecolare, [H][H];
 - idrogeni collegati ad altro rispetto a un altro atomo, per es. ponti di idrogeno;
 - specifiche dell'idrogeno isotopico, per es. deuterio ([2H]);
 - se l'idrogeno è collegato ad un atomo chirale.
5. I quattro legami base sono illustrati come segue:

Tipo di legame	Notazione SMILES
Singolo	- (non occorre mostrarlo)
Doppio	=
Triplo	#
Aromatico	Lettere minuscole

6. I sostituenti sono mostrati tra parentesi, immediatamente dopo gli atomi a cui sono collegati:

il 2-metilbutano è CC(C)CC

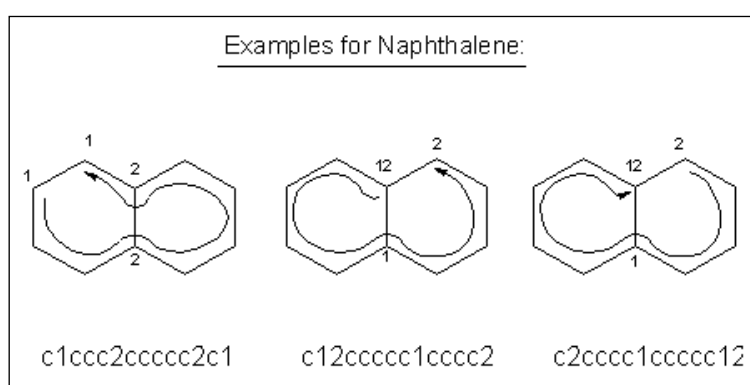
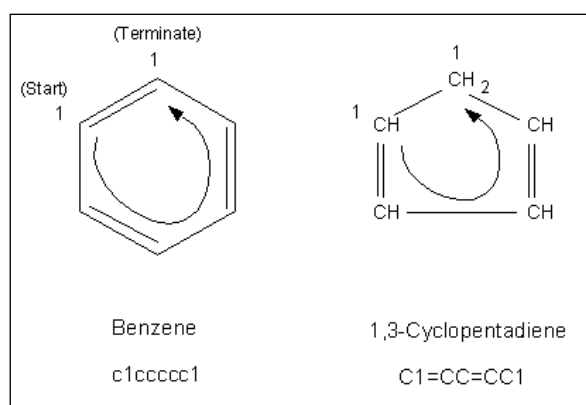
- I sostituenti sono sempre mostrati immediatamente dopo gli atomi pertinenti; non possono seguire il simbolo di un doppio o triplo legame:

l'acido pentanoico è CCCCC(=O)O

- Sono ammessi sostituenti all'interno di sostituenti:

il 2-(1-metiletil)butano è CC(C(C)C)CC

7. Per le strutture cicliche, i numeri da 1 a 9 sono usati per indicare l'atomo iniziale e finale del ciclo.
- Lo stesso numero è usato per indicare l'atomo iniziale e finale di ogni anello. L'atomo iniziale e quello finale devono essere collegati tra loro.
 - I numeri sono immessi immediatamente dopo gli atomi usati per indicare le posizioni iniziali e finali.
 - Un atomo iniziale o finale può essere associato a due numeri consecutivi.



8. I composti scollegati sono designati come strutture individuali o ioni separati da un punto («.»). Gli atomi adiacenti separati da un punto («.») non sono direttamente collegati tra loro, per es. nel caso del legame di Van der Waals:

l'idrocloruro di aminopropene è C=CC(N).HCl

9. La configurazione isomerica è specificata dai caratteri «barra» «\» e «/». Questi simboli indicano la direzione relativa tra due legami isomerici. (cis =«/ \», trans = «/ /»). Le SMILES usano la chiralità locale, il che significa che la chiralità deve essere specificata per intero:

il cis-1,2-dibromoetene è Br/C=C\Br

il trans-1,2-dibromoetene è Br/C=C/Br

10. Gli enantiomeri o la chiralità sono specificati dal simbolo «@». Il simbolo «@» indica che i vicini seguenti dell'atomo chirale sono elencati in senso antiorario. Se è usato il simbolo «@@», gli atomi sono elencati in senso orario. L'atomo chirale e il simbolo «@» sono mostrati tra parentesi:

**l'acido 2-cloro-2-idrossipropanoico con
chiralità specificata è C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)**

11. Le specifiche isotopiche sono indicate anteponendo al simbolo atomico un numero uguale alla massa atomica integrale pertinente. Una massa atomica può essere specificata solo tra parentesi:

il carbonio-13 è [13C] e l'ossigeno-18 è [18O]

Per la determinazione della notazione SMILES, sono disponibili numerosi strumenti (generatori SMILES) (cfr. appendice 1).

7 Informazioni sull'attività ottica

L'attività ottica è la capacità delle sostanze asimmetriche di ruotare l'orientamento della luce polarizzata nel piano. Tali sostanze, e le loro immagini speculari, sono note come enantiomeri e hanno uno o più centri chirali. Sebbene differiscano nella disposizione geometrica, gli enantiomeri possiedono proprietà chimiche e fisiche identiche. Poiché ogni tipo di enantiomero influisce sulla luce polarizzata in modo differente, si può usare l'attività ottica per identificare quale enantiomero è presente in un campione e, di conseguenza, anche la purezza della sostanza. L'ampiezza della rotazione è una proprietà intrinseca della molecola.

Gli enantiomeri hanno sempre rotazioni opposte: polarizzano la luce in egual misura ma in direzioni opposte. L'attività ottica di una miscela di enantiomeri è pertanto un'indicazione del rapporto tra i due enantiomeri. Una miscela 50-50 di enantiomeri ha un'attività ottica pari a 0.

La rotazione osservata dipende dalla concentrazione, dalla lunghezza del tubo campione, dalla temperatura e dalla lunghezza d'onda della sorgente di luce.

L'attività ottica è, pertanto, il parametro che identifica una sostanza asimmetrica ed è l'unico parametro per distinguere una sostanza dalla sua immagine speculare. Quindi, se possibile, l'attività ottica della sostanza dovrebbe essere indicata.

Lo standard dell'attività ottica è chiamato rotazione specifica. La rotazione specifica è definita come la rotazione osservata della luce a 5896 angstrom, con una lunghezza del percorso di 1 dm e a una concentrazione del campione di 1 g/ml. La rotazione specifica è la rotazione osservata divisa per la lunghezza del percorso (dm) e la concentrazione (g/ml).

L'attività ottica può essere misurata mediante numerosi metodi differenti, i più comuni dei quali sono:

- rotazione ottica, in cui viene misurata la rotazione del piano di polarizzazione di un fascio di luce che viene fatto passare attraverso il campione;
- dicroismo circolare, in cui viene misurato l'assorbimento di luce polarizzata destra e sinistra attraverso un campione.

Se la sostanza produce una rotazione della luce verso destra (senso orario) è chiamata destrogira ed è designata con un segno +. Se fa ruotare la luce verso sinistra (senso antiorario), è chiamata levogira ed è designata con un segno -.

8 Peso molecolare o intervallo di peso molecolare

Il peso molecolare è il peso di una molecola di una sostanza espresso in unità di massa atomica (amu) o come massa molare (g/mole). Il peso molecolare può essere calcolato dalla formula molecolare della sostanza: è la somma dei pesi atomici degli atomi che costituiscono la molecola. Per molecole quali determinate proteine o miscele di reazione non definite, per le quali non è possibile determinare un unico peso molecolare, è possibile indicare un intervallo di peso molecolare.

Per determinare il peso molecolare delle sostanze si possono usare molti metodi.

- Per determinare i pesi molecolari di sostanze gassose, si può usare la legge di Avogadro la quale dichiara che, in date condizioni di temperatura e pressione, un dato volume di gas contiene un numero specifico di molecole del gas.

$$PV = nRT = NkT$$

n = numero di moli

R = costante universale dei gas = 8,3145 J/mol K

N = numero di molecole

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

k = R/NA

NA = numero d'Avogadro = $6,0221 \times 10^{23}$ /mol

- Per le sostanze liquide e solide, il peso molecolare può essere stabilito determinandone gli effetti sul punto di fusione, il punto di ebollizione, la pressione di vapore o la pressione osmotica di un solvente.
- Spettrometria di massa, un metodo di misurazione altamente accurato.
- Per le molecole di sostanze complesse ad elevato peso molecolare, come le proteine o i virus, i pesi molecolari possono essere determinati misurando, per esempio, la velocità di sedimentazione in un'ultracentrifuga o mediante fotometria a luce diffusa.
- Sono disponibili diversi strumenti per calcolare il peso molecolare sulla base di un diagramma strutturale o di una formula molecolare della sostanza (cfr. appendice 1).

9 Composizione della sostanza

Per ogni sostanza, si deve riportare la composizione della sostanza come combinazione di costituenti principali, additivi e impurezze in conformità delle regole e dei criteri descritti nel capitolo 4 del presente documento d'orientamento.

Ogni costituente, additivo o impurezza deve essere opportunamente identificato mediante:

- nome (denominazione IUPAC o, se non disponibile, altra denominazione accettata a livello internazionale);
- numero CAS (se disponibile);
- numero CE (se disponibile);
- tutti gli altri identificatori disponibili.

Per ogni costituente, gruppo di costituenti, additivo o impurezza deve essere indicata la concentrazione tipica in percentuale nei lotti commerciali (preferibilmente in peso o in volume), ove possibile. I valori indicati devono sommarsi dando il 100 %. Devono essere sempre indicati i limiti di concentrazione superiore e inferiore, come intervallo nella sostanza commerciale.

10 Dati spettrali

I dati spettrali sono necessari per confermare la struttura indicata per una sostanza mono-componente o per confermare che una miscela di reazione non è un preparato. Per gli spettri si possono usare numerosi metodi (ultravioletti, infrarossi, risonanza magnetica nucleare o spettro di massa). Non tutti i metodi sono adatti per tutti i tipi di

sostanze. Quando possibile, il documento fornirà indicazioni sugli spettri appropriati da includere per i diversi tipi di sostanze (ECB, 2004; ECB, 2005).

Per molti dei metodi noti si devono indicare le informazioni seguenti sullo spettro stesso o in allegati.

Spettro ultravioletto-visibile (UV-VIS)

- identità della sostanza;
- solvente e concentrazione;
- intervallo;
- posizione (e valori epsilon) dei picchi principali;
- effetto di acidi;
- effetto di alcali.

Spettro ottenuto con spettroscopia a infrarossi (IR)

- identità della sostanza;
- mezzo;
- intervallo;
- risultati (indicare i picchi principali importanti per l'identificazione, per es. interpretazione dell'area delle impronte).

Spettro ottenuto con spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (RMN)

- identità della sostanza;
- nucleo e frequenza;
- solvente;
- se del caso, riferimento interno o esterno;
- risultati (indicare i segnali importanti per l'identificazione della sostanza e i segnali corrispondenti al solvente e alle impurezze);
- per spettri ^1H NMR si deve fornire la curva di integrazione;
- l'intensità di picchi RMN deboli deve essere aumentata verticalmente e i modelli complessi espansi.

Spettro ottenuto con spettroscopia di massa (MS)

- identità della sostanza;
- tensione di accelerazione;
- metodo di caricamento (inserimento diretto, tramite GC, ecc.);
- modalità di ionizzazione (impatto elettronico, ionizzazione chimica, desorbimento di campo, ecc.);
- lo ione molecolare (M);
- frammenti significativi per l'identificazione della sostanza;
- valori M/z o assegnazioni di picchi importanti per l'identificazione della struttura;
- i modelli complessi dovrebbero essere espansi.

Spettro ottenuto con spettroscopia di massa con diffrazione a raggi X (XRD)

- Identità della sostanza;
- tensione;
- corrente;
- fonte di raggi X ed eventuali riferimenti bibliografici che consentano l'identificazione delle fasi cristalline presenti nella sostanza

Nel caso in cui il metodo XRD venga utilizzato per l'identificazione e la quantificazione delle fasi cristalline o amorfe presenti nella sostanza, sono necessari almeno i seguenti requisiti:

- descrizione dei metodi di perfezionamento e degli standard interni utilizzati;
- valore del fattore di merito che riflette la corrispondenza tra il modello dello schema di diffrazione e quello dello schermo di riferimento;
- schema misurato e scala per il valore del fattore di merito (ad es. 0-1 o 0-100).

Si possono usare anche altri metodi riconosciuti a livello internazionale se i dati spettrali confermano l'identificazione della sostanza, per es. la struttura interna.

I seguenti requisiti generali sono necessari per una chiara comprensione e/o interpretazione degli spettri:

- descrivere la preparazione del campione;
- annotare lunghezze d'onda o altri dati significativi se del caso;
- fornire informazioni ulteriori, per es. spettri dei materiali di partenza;
- indicare il solvente usato e/o altri dettagli essenziali come indicato sopra per alcuni metodi;
- fornire copie chiare (piuttosto che gli originali) con scale opportunamente marcate;
- fornire informazioni sulle concentrazioni delle sostanze usate;
- assicurare che i picchi più intensi relativi alla sostanza si avvicinino al valore a scala piena.

11 Cromatografia liquida ad alta prestazione, gascromatografia

Quando appropriato per il tipo di sostanza, si deve fornire un cromatogramma per confermarne la composizione. Per esempio, un cromatogramma appropriato confermerà l'esistenza di impurezze, additivi e costituenti di una miscela di reazione. I due metodi più conosciuti per la separazione e l'identificazione delle miscele sono la gascromatografia (GC) e la cromatografia liquida ad alta prestazione (HPLC). I due metodi si basano sull'interazione di una fase mobile con una fase stazionaria, portando alla separazione dei costituenti di una miscela.

Per i cromatogrammi GC/HPLC, si dovrebbero indicare le informazioni seguenti sul cromatogramma stesso o in allegati (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC

- identità della sostanza;
- proprietà della colonna, come diametro, impaccamento, lunghezza;
- temperatura, anche intervallo di temperature se usato;
- composizione della fase mobile, anche intervallo se usato;
- intervallo di concentrazione della sostanza;
- metodo di visualizzazione, per es. UV-VIS;
- risultati (indicare i picchi principali importanti per l'identificazione della sostanza);

GC

- identità della sostanza;
- proprietà della colonna, come diametro, impaccamento, lunghezza;
- temperatura, anche intervallo di temperature se usato;
- temperatura di iniezione;
- gas di trasporto e pressione del gas di trasporto;
- intervallo di concentrazione della sostanza;
- metodo di visualizzazione, per es. MS;

- identificazione dei picchi;
- risultati (indicare i picchi principali importanti per l'identificazione della sostanza).

12 Descrizione dei metodi analitici

L'*allegato IV* del regolamento REACH prevede che il dichiarante descriva i metodi analitici e/o fornisca riferimenti bibliografici dei metodi usati per l'identificazione della sostanza e, se del caso, per l'identificazione di impurezze e additivi. Queste informazioni dovrebbero essere sufficienti a consentire la riproduzione dei metodi.

Appendice III – Identificazione delle sostanze e trasmissione comune dei dati

La parte centrale dei presenti orientamenti delinea i principi generali che i dichiaranti potenziali devono seguire nell'identificare le sostanze specifiche della loro entità legale da registrare. Questa appendice fornisce ai dichiaranti potenziali orientamenti pratici su come applicare i principi per l'identificazione delle sostanze nel definire collettivamente l'identità e l'ambito dell'identità della sostanza per la trasmissione comune secondo il principio «Una sostanza – una registrazione» (OSOR) del regolamento REACH. Maggiori informazioni sugli obblighi di trasmissione comune e sul processo di condivisione dei dati in generale sono fornite nella Guida alla condivisione dei dati disponibile all'indirizzo <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

È implicito che gli stessi principi di identificazione delle sostanze indicati negli orientamenti di base sono applicabili, in base al tipo di sostanza, per l'identità di una sostanza ai fini della registrazione comune.

In effetti, le prime parti dell'articolo 11, paragrafo 1, e dell'articolo 19, paragrafo 1, del regolamento REACH impongono l'obbligo della «trasmissione comune di dati da parte di più dichiaranti». Più specificamente, tali disposizioni prevedono che «qualora uno o più fabbricanti e/o importatori intendano fabbricare e/o importare nella Comunità una sostanza» le informazioni relative alle proprietà della sostanza e alla sua classificazione siano presentate «in primo luogo da un solo dichiarante che agisce con il consenso degli altri dichiaranti (in seguito denominato «il dichiarante capofila»)».

Il regolamento di esecuzione (UE) 2016/9 della Commissione sulla trasmissione comune di dati e sulla condivisione dei dati ribadisce e consolida l'obbligo per i diversi dichiaranti dell'identità della stessa sostanza di effettuare la trasmissione comune di determinati dati. In pratica, per la trasmissione comune di informazioni le parti interessate devono concordare i limiti e la portata dell'identità della sostanza. Questo aspetto è noto come profilo di identità della sostanza o SIP. Nel SIP occorre specificare i limiti della sostanza che i dichiaranti hanno concordato di includere nei dati presentati nella trasmissione comune. Ciò riguarda anche i dichiaranti che possono aver optato per l'esclusione da alcune informazioni presentate nella trasmissione comune.

Pertanto, l'accordo sulla portata dell'identità della sostanza oggetto della registrazione è un prerequisito per la trasmissione comune. La trasparenza sulla portata dell'identità di una sostanza e sui dati a cui si riferisce è fondamentale per l'attuazione. Di conseguenza, la portata della sostanza o del SIP deve essere indicata in termini chiari nel fascicolo del dichiarante capofila per conto di tutti gli altri dichiaranti, mentre tutti i dichiaranti riportano le loro informazioni sulla composizione individualmente.

Un semplice esempio illustrativo di come stabilire il profilo di identità della sostanza per le sostanze chimiche prodotte/importate nell'UE da singoli dichiaranti è riportato schematicamente nella

Figura 2 in basso. La figura illustra l'identificazione della sostanza da registrare, l'aggregazione delle diverse composizioni, la generazione dei dati e infine la presentazione in formato IUCLID in un fascicolo di registrazione. L'esempio è quello di una semplice sostanza mono-componente ben definita. Per le sostanze più complesse, il processo di definizione del SIP può comportare delle ripetizioni tra i passaggi 3 e 5 della figura.

Durante le discussioni tra potenziali dichiaranti, la documentazione del SIP può assumere la forma, ad esempio, di un documento Word o di un foglio Excel in cui le informazioni pertinenti concordate vengono registrate e rese disponibili a tutti i membri e ai membri potenziali. Alcune associazioni industriali hanno messo a disposizione dei modelli per la documentazione del SIP, già utilizzati da molti dichiaranti (ad esempio il modello

Cefic)³⁴). Altri hanno semplicemente riportato le informazioni pertinenti in un documento Word o sulla pagina web di un consorzio istituito per lavorare alla registrazione della sostanza in questione.

2. Definire l'identità e la portata di una sostanza corrispondenti ai dati presentati per la registrazione

I passaggi che possono essere seguiti da più dichiaranti potenziali per definire l'identità della sostanza corrispondente ai dati che presentano nella trasmissione comune sono illustrati in modo schematico nell'esempio riportato nella

Figura 2 (passaggi da 1 a 4) per sostanze semplici e ben definite.

Ogni singolo dichiarante potenziale determina i propri obblighi per ciò che produce/importa sulla base della definizione di sostanza di cui all'articolo 3, paragrafo 1, e applicando i principi di identificazione delle sostanze spiegati nella parte centrale dei presenti orientamenti (passaggi 1 e 2 della

Figura 2).

Ogni dichiarante potenziale può quindi verificare se altri dichiaranti potenziali hanno raggiunto lo stesso «nome e altri identificatori» (passaggio 3). Da questo punto di partenza i dichiaranti potenziali possono applicare collettivamente i principi della parte centrale dei presenti orientamenti per definire i limiti dell'identità della sostanza corrispondente ai dati che presentano nella trasmissione comune, ossia il profilo di identità della sostanza (passaggio 4).

Questo SIP descrive in modo generico la portata della sostanza in termini di informazioni sulla sua composizione (compresi altri parametri pertinenti come la morfologia, ad esempio la forma fisica, la forma), la sua denominazione e altri identificatori per i quali i dati di classificazione e di pericolo presentati nella trasmissione comune saranno rilevanti. La definizione del SIP non deve adottare un approccio eccessivamente conservativo per evitare di escludere i concorrenti dalla trasmissione comune.

Questo SIP stabilisce il legame intrinseco tra l'identità della sostanza e i dati di pericolo da presentare nella trasmissione comune. Se istituito con sufficiente anticipo, può facilitare la fase di generazione/raccolta di informazioni durante il processo di adempimento degli obblighi di registrazione (delineati nella Guida alle prescrizioni in materia di informazione e alla valutazione della sicurezza chimica; passaggio 5 della

Figura 2 che segue), al fine di garantire che i dati generati o raccolti coprano l'intera portata dell'identità della sostanza.

Come indicato nelle sezioni 4.2.3 e 4.3 degli orientamenti di base, per le sostanze più complesse, i parametri e/o i descrittori aggiuntivi per le informazioni sulla composizione (ad esempio, la descrizione della fonte/processo) sono normalmente utilizzati dai dichiaranti potenziali nelle fasi 1-3 e quelli concordati possono poi essere inclusi nel SIP (passaggio 4). In alcuni casi, il legame tra il limite dell'identità della sostanza e i dati di pericolo presentati nella trasmissione comune può diventare del tutto chiaro solo dopo che sono stati raccolti una parte o tutti i dati di pericolo disponibili. Le fasi da 3 a 5 possono essere ripetute secondo necessità, in funzione della complessità dell'identità della sostanza

³⁴ Il SIP è stato originariamente descritto negli «Orientamenti per dichiaranti capofila» del Cefic, disponibili all'indirizzo <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/> Esempi di SIP elaborati dai dichiaranti utilizzando questo modello sono reperibili, ad esempio, sul sito web di REACHcentrum <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

e dei dati raccolti nel passaggio 5, ad esempio quando alcune composizioni includono costituenti che comportano la classificazione e l'etichettatura e/o la valutazione PBT. Il SIP può includere più di un profilo di composizione per descrivere adeguatamente i limiti dell'identità della sostanza.

Il SIP deve fornire informazioni generiche che consentano di determinare i limiti dell'identità della sostanza corrispondente ai dati presentati congiuntamente:

- nome della sostanza;
- altri identificatori (ad es. CAS, CE, informazioni molecolari e strutturali, descrizione, se pertinente) di tutti i vari dichiaranti dell'identità della sostanza in questione;
- informazioni sulla composizione:
 - identità dei costituenti rilevanti per l'identificazione della sostanza e rispettivi intervalli di concentrazione,
 - elenco generico delle identità degli stabilizzanti rilevanti per l'identificazione della sostanza (e i rispettivi intervalli di concentrazione, se applicabili),
 - elenco generico dei parametri aggiuntivi rilevanti per il tipo di sostanza (ad esempio, descrittori della fonte/processo per alcune sostanze UVCB)

È importante che i parametri che definiscono i limiti dell'identità della sostanza oggetto della trasmissione comune siano concordati da tutti i dichiaranti congiunti e siano chiaramente documentati nel SIP. Può essere quindi necessario modificare o estendere un SIP su richiesta di un nuovo potenziale dichiarante, se vi è accordo sul fatto che parte o tutti i dati presentati nella trasmissione comune sono rilevanti anche per la sostanza prodotta o importata da tale dichiarante.

Il SIP non deve comportare la condivisione di informazioni commerciali riservate tra i dichiaranti o la divulgazione di tali informazioni a terzi rispetto alla trasmissione comune. Nel caso in cui i dichiaranti della trasmissione comune debbano condividere informazioni commerciali potenzialmente riservate per definire chiaramente il SIP, possono prendere in considerazione l'utilizzo di un fiduciario, come indicato nella Guida alla condivisione dei dati.

3. Orientamenti pratici sulla documentazione del profilo di identità della sostanza

I principi generali dell'identificazione delle sostanze ben definite e delle sostanze UVCB sono delineati negli orientamenti di base. Di seguito sono riportate alcune indicazioni pratiche su come applicare collettivamente tali principi. Gli orientamenti di base prevedono la possibilità di derogare ai principi generali. A tal fine i dichiaranti devono essere in grado di dimostrare il legame intrinseco tra l'identità della sostanza e i dati di pericolo presentati nella trasmissione comune.

3.1 Sostanze ben definite

Per una sostanza ben definita, occorre seguire il principio $\geq 80\%$ (p/p) per l'identificazione di una sostanza mono-componente e il principio $< 80\%$, $\geq 10\%$ per l'identificazione di una sostanza multi-componente nel definire i costituenti principali, i relativi intervalli di concentrazione e le impurezze. Questo vale per ogni singolo registrante e per tutti i vari registratori collettivamente al momento di determinare il SIP. In particolare, nel SIP dovranno essere comunicati i profili delle impurezze concordati. Se il SIP include impurezze specifiche che avrebbero un impatto sulla classificazione e sull'etichettatura e/o sulla valutazione PBT, i dichiaranti interessati da tali impurezze dovranno tenerne conto nel passaggio di raccolta dei dati (passaggio 5). Le informazioni pertinenti di cui agli allegati da VII a XI possono essere presentate congiuntamente o

separatamente, conformemente all'articolo 11, paragrafo 3, del regolamento REACH (le cosiddette opzioni di esclusione). I valori di concentrazione da riportare devono tenere conto dell'intervallo di concentrazione in tutta la trasmissione comune.

Per le sostanze che richiedono parametri aggiuntivi per registrare in modo inequivocabile l'identificazione della sostanza, ogni dichiarante dovrà seguire i principi delineati nel capitolo 4.2.3 della parte centrale dei presenti orientamenti. Occorre valutare se la variabilità di questi parametri possa comportare un adattamento, se necessario, della classificazione o dei dati di pericolo presentati nella trasmissione comune. Ai fini della determinazione del SIP in relazione alla trasmissione comune, si possono applicare considerazioni analoghe. Ad esempio, può essere necessario includere nel profilo di identità della sostanza quei parametri (ad esempio, la forma fisica e/o i parametri morfologici come la porosità, le dimensioni delle particelle, la forma delle particelle) che possono avere un impatto sulle proprietà rilevanti per la determinazione del profilo di pericolosità (ad esempio, la solubilità, la reattività, la tossicità per inalazione, ecc.). In questo caso, gli intervalli generici di questi parametri inclusi nel SIP devono essere forniti in modo trasparente (ad esempio, intervalli di dimensioni delle particelle applicabili a tutti i dichiaranti ed elenco delle loro forme e della chimica di superficie). In questo modo si garantisce la completezza dei dati di pericolo presentati nella trasmissione comune in relazione al SIP.

Analogamente, le differenze nella fase cristallina delle sostanze chimiche inorganiche possono dare origine a diverse considerazioni sul profilo di pericolo specifiche per queste fasi (ad esempio, quarzo, cristobolite, silice amorfa). Tenendo conto delle possibili differenze nelle proprietà delle varie fasi, spetta ai dichiaranti potenziali di queste sostanze valutare se presentare un'unica trasmissione comune che comprenda tutte le fasi, compresi i dati di pericolo specifici per le diverse fasi, o se presentare diverse trasmissioni comuni per le diverse fasi (cioè per le diverse identità delle sostanze). In entrambi i casi, le fasi contemplate dovranno essere elencate nel SIP e i dati pertinenti degli allegati da VII a XI dovranno riguardare tutte le fasi oggetto della trasmissione, garantendo così che i dati riguardino l'intera portata del SIP.

Occorre rilevare che le composizioni possono avere diversi profili di impurezza e/o di pericolo e queste differenze non significano necessariamente che tali composizioni non possano essere registrate nella stessa trasmissione.

3.2 Sostanze UVCB

Per le sostanze UVCB, l'identificazione può essere più impegnativa e per questo motivo una documentazione trasparente è molto utile per concordare l'identità della sostanza per la trasmissione comune. Ogni dichiarante potenziale dovrà considerare individualmente i consigli contenuti nella parte centrale dei presenti orientamenti e poi applicare collettivamente gli stessi principi. È opportuno rilevare che l'aggregazione degli intervalli di concentrazione nel SIP potrebbe portare a un profilo con intervalli di concentrazione molto ampi, forse fino al punto da non poter più essere considerato come una sola sostanza.

Come indicato negli orientamenti di base, la base per l'identificazione di alcune sostanze UVCB è rappresentata dalla fonte e dal processo utilizzato nella loro produzione piuttosto che direttamente dall'identità e dagli intervalli di concentrazione dei loro costituenti. In questi casi, altri descrittori fungono da sostituti delle identità dei costituenti e dei rispettivi intervalli di concentrazione. I dichiaranti potenziali possono descrivere il processo di fabbricazione in termini di fonte e processo nella misura necessaria per identificare la sostanza. La descrizione può includere qualsiasi parametro/elemento caratterizzante aggiuntivo che i dichiaranti decidono essere rilevante per l'identità della sostanza (cfr. ad

esempio la Tabella 5 negli orientamenti di base). Ai fini della trasmissione comune, le descrizioni sono condivise solo se necessario per concordare la portata dell'identità della sostanza UVCB da registrare. I dichiaranti potenziali possono seguire i principi delineati negli orientamenti di base sia singolarmente che collettivamente. Il SIP comporta quindi una comunicazione generica dei parametri della fonte e del processo, in modo da coprire l'intera gamma delle composizioni dei singoli dichiaranti. Nella Figura 3 è riportato uno schema illustrativo.

Per le sostanze identificate in base alla fonte e al processo, come delineato negli orientamenti di base, qualsiasi modifica significativa della fonte o del processo potrebbe condurre a una diversa identità della sostanza, che dovrebbe essere registrata separatamente. Derogare a questo principio significherebbe che i dichiaranti possono dimostrare che ogni combinazione di processo/fonte produce composizioni che possono essere trattate nella stessa trasmissione comune. Il SIP può tenere conto di piccole variazioni nei materiali di partenza e nel processo e/o nelle condizioni di processo. I dichiaranti devono concordare che ogni combinazione di processo/fonte produce composizioni simili al punto che è logico considerarle come un'unica identità di sostanza e assicurarsi che i dati di pericolo siano adeguati per l'intera area di variazione del SIP. Più specificamente, i dichiaranti devono essere in grado di giustificare che la serie di dati sui pericoli oggetto della trasmissione comune è pertinente per tutte queste composizioni o è adattata, se del caso, con informazioni presentate separatamente per composizioni specifiche ai sensi dell'articolo 11, paragrafo 3, del regolamento REACH (esclusione).

Per dimostrare la rilevanza dell'insieme di dati per ogni combinazione di processo/fonte, queste combinazioni devono essere riportate in modo trasparente nel SIP per documentare i criteri di inclusione/esclusione applicati per i dichiaranti comuni attuali e futuri.

Per altri tipi di UVCB (cfr. capitolo 4.3.2 degli orientamenti di base), i dichiaranti potenziali possono utilizzare una combinazione di descrittori della composizione e aggiuntivi, a seconda dei casi. Ad esempio, per alcuni prodotti oleochimici, la composizione è variabile a causa della variabilità della distribuzione della lunghezza della catena alchilica dei costituenti, e la distribuzione della lunghezza della catena alchilica può essere un descrittore aggiuntivo utilizzato per l'identificazione. L'approccio adottato dal SIEF dovrebbe essere documentato in modo trasparente nel suo SIP.

3.3 Profilo di identità della sostanza

È responsabilità di tutti i dichiaranti che utilizzano la trasmissione comune di dati concordare i parametri necessari per l'identificazione delle loro sostanze e documentarli in modo trasparente nel rispettivo SIP. Gli scostamenti o le deroghe ai normali principi di identità delle sostanze, presi collettivamente, dovranno essere documentati in modo trasparente. Poiché il SIP documenta i criteri di inclusione/esclusione, il SIEF dovrebbe garantire che i criteri applicati siano trasparenti e che i dati pertinenti di cui agli allegati da VII a XI raccolti/generati coprano in modo dimostrabile tutti i profili di composizione concordati.

Se i dichiaranti potenziali includono individualmente nel loro profilo di identità gli additivi stabilizzanti di cui all'articolo 3, paragrafo 1, la loro identità e gli intervalli di concentrazione devono essere concordati e riportati in modo trasparente nel SIP.

Nella fase di raccolta dei dati è necessario considerare la pertinenza dei materiali di prova utilizzati per generare/raccogliere dati e soddisfare così le prescrizioni in materia di informazione di cui agli allegati da VII a XI. La motivazione delle conclusioni sulla loro rappresentatività per le composizioni oggetto del SIP dovrà essere documentata e inclusa

nel fascicolo tecnico. Questo aspetto sarà particolarmente importante per le identità di sostanze complesse che prevedono ampi profili di composizione.

Durante la raccolta dei dati, i dichiaranti potenziali possono stabilire che il loro SIP è eccessivamente ampio e non è adatto ai fini della trasmissione comune di dati sui pericoli che siano rappresentativi dell'identità della sostanza in questione. In tal caso, i dichiaranti potenziali possono decidere di dividere il SIEF per trattare separatamente due o più sostanze ⁽³⁵⁾. Ogni sostanza avrebbe quindi un proprio SIP e una propria trasmissione comune di informazioni sui pericoli, che devono essere specificamente rappresentative dell'identità di detta sostanza. Le ragioni per cui alcune informazioni sui pericoli non sono rappresentative per alcuni parametri dell'identità della sostanza devono essere documentate in modo trasparente nel SIP per ciascuna registrazione separata. In questa fase, i rispettivi dichiaranti potenziali possono anche stabilire che i profili di composizione debbano essere ulteriormente perfezionati in base ai costituenti e/o alle impurezze che comportano la classificazione e l'etichettatura, la valutazione PBT, ecc.

Per i dichiaranti potenziali che intendono unirsi ad altri dichiaranti potenziali che hanno già concordato un SIP ma non hanno ancora presentato la registrazione, i primi dovranno valutare se le informazioni sull'identità della loro sostanza rientrano nei limiti del SIP. In caso contrario, dovranno discutere e concordare con i dichiaranti potenziali la necessità di ampliare la portata del profilo per includere il nuovo membro o di concordare che non vi rientra.

Un adattamento del SIP sarebbe necessario se la sostanza che il dichiarante potenziale deve registrare ha parametri specifici di identità della sostanza che possono alterare la rappresentatività delle informazioni di pericolo presentate nella trasmissione comune e quindi richiedono una giustificazione specifica (ad esempio, un'impurezza specifica, un diverso rapporto di composizione, una fase diversa, una diversa dimensione delle particelle, ecc.). Per motivi di trasparenza, tale parametro dovrà essere specificato nel SIP.

In singoli casi, i dichiaranti potenziali ed esistenti possono concordare che i dati di pericolo presentati nella trasmissione comune non sono fondamentalmente rappresentativi della sostanza del dichiarante potenziale a causa dello scostamento dei parametri di identità della sostanza, che non rientrano nei limiti del SIP concordati. In tal caso, il dichiarante potenziale dovrà presentare una registrazione separata insieme ad altri dichiaranti con un'identità di sostanza che comprende tale parametro, oppure singolarmente se non vi sono altri dichiaranti per la stessa identità di sostanza.

4. Comunicazione del profilo di identità della sostanza nel fascicolo di registrazione

Quando i dichiaranti potenziali hanno raccolto/generato tutti i dati richiesti dagli allegati da VII a XI per la loro sostanza (vale a dire il passaggio 5 della

Figura 2), il pacchetto di dati è pronto per essere riportato in formato IUCLID nei fascicoli da presentare all'Agenzia (vale a dire il passaggio 6 della

Figura 2). Per riportare il SIP in formato IUCLID, la denominazione e gli altri identificatori,

⁽³⁵⁾ Le considerazioni sul ruolo dell'EINECS nello stabilire l'identità delle sostanze in ambito REACH sono contenute nel documento CARACAL concordato in occasione della quarta riunione delle autorità competenti per i regolamenti REACH e CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev. 2 «Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)» [Identità della sostanza e formazione del SIEF (il ruolo dell'EINECS)].

Le informazioni sulla composizione e gli altri parametri pertinenti sono riportati nelle sezioni 1.1 e 1.2 di IUCLID.

Profilo di identità della sostanza	Riferimento in IUCLID
Nome e altri identificatori	Sezione 1.1 di tutti i fascicoli
Informazioni sulla composizione e altri parametri, se pertinenti	Sezione 1.2 del fascicolo del dichiarante capofila

La denominazione e altri identificatori del SIP sono riportati nella sezione 1.1 di tutti i fascicoli. Il dichiarante capofila riporta le informazioni sulla composizione e altri parametri del SIP pertinenti nella sezione 1.2 del proprio fascicolo sotto forma di «composizione limite della sostanza»⁽³⁶⁾. Il dichiarante capofila deve inoltre presentare tutti i dati pertinenti di cui agli allegati da VII a XI nelle sezioni 4-14 (in assenza di esclusioni giustificate per una o più prescrizioni in materia di informazione) per conto di tutti i dichiaranti.

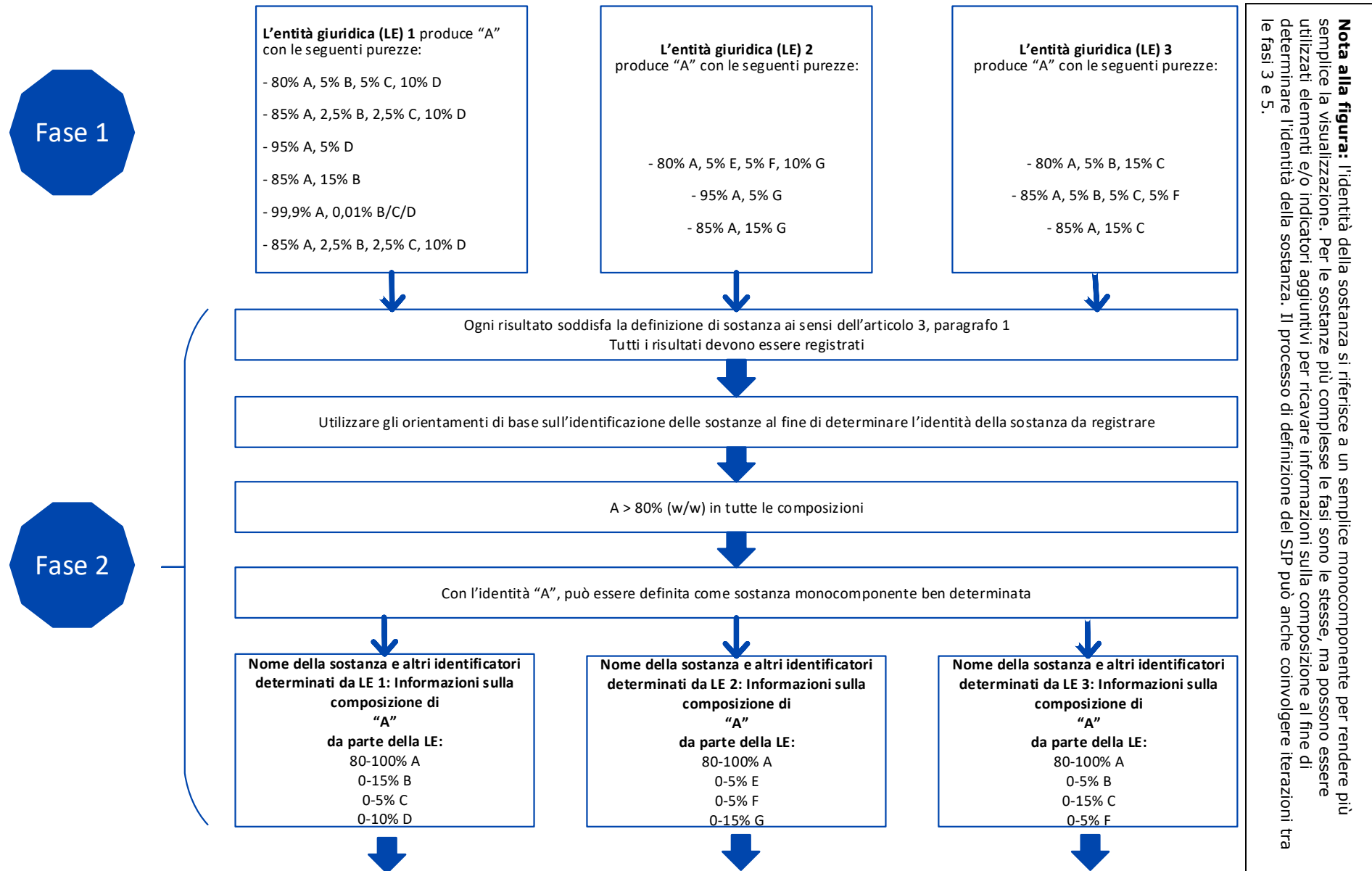
Ogni dichiarante (compreso il dichiarante capofila) riporta nella sezione 1.2 del proprio fascicolo le informazioni sulla composizione della sostanza che la propria entità giuridica fabbrica o importa specificamente. Ciò significa che il dichiarante capofila riporta sia le informazioni sulla composizione del SIP sia quelle relative alla propria entità giuridica nella sezione 1.2 del proprio fascicolo, mentre tutti gli altri dichiaranti riportano le proprie informazioni specifiche sulla composizione. Ogni registrazione standard deve inoltre includere le informazioni analitiche pertinenti nella sezione 1.4 di IUCLID.

Ogni dichiarante deve dimostrare che le informazioni sulla composizione delle sostanze che fabbrica o importa specificamente sono incluse nel SIP come riportato nella «composizione limite» e sono incluse nei dati di cui agli allegati da VII a XI presentati nel fascicolo del dichiarante capofila (in assenza di esclusioni giustificate).

Le istruzioni tecniche su come riportare le informazioni sulla composizione in formato IUCLID sono disponibili nei manuali IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

Figura 2 (pagina successiva): panoramica schematica dei passaggi che i dichiaranti potenziali seguono per determinare i propri obblighi di registrazione (1), per definire il proprio SIP per l'identità di un'unica sostanza (4) e infine per presentare le proprie registrazioni adempiendo formalmente agli obblighi di registrazione delle proprie sostanze (8).

⁽³⁶⁾ È possibile reperire istruzioni su come immettere la «composizione limite della sostanza» nel manuale dal titolo «Come preparare i fascicoli PPORD e di registrazione» disponibile all'indirizzo <http://echa.europa.eu/manuals>.



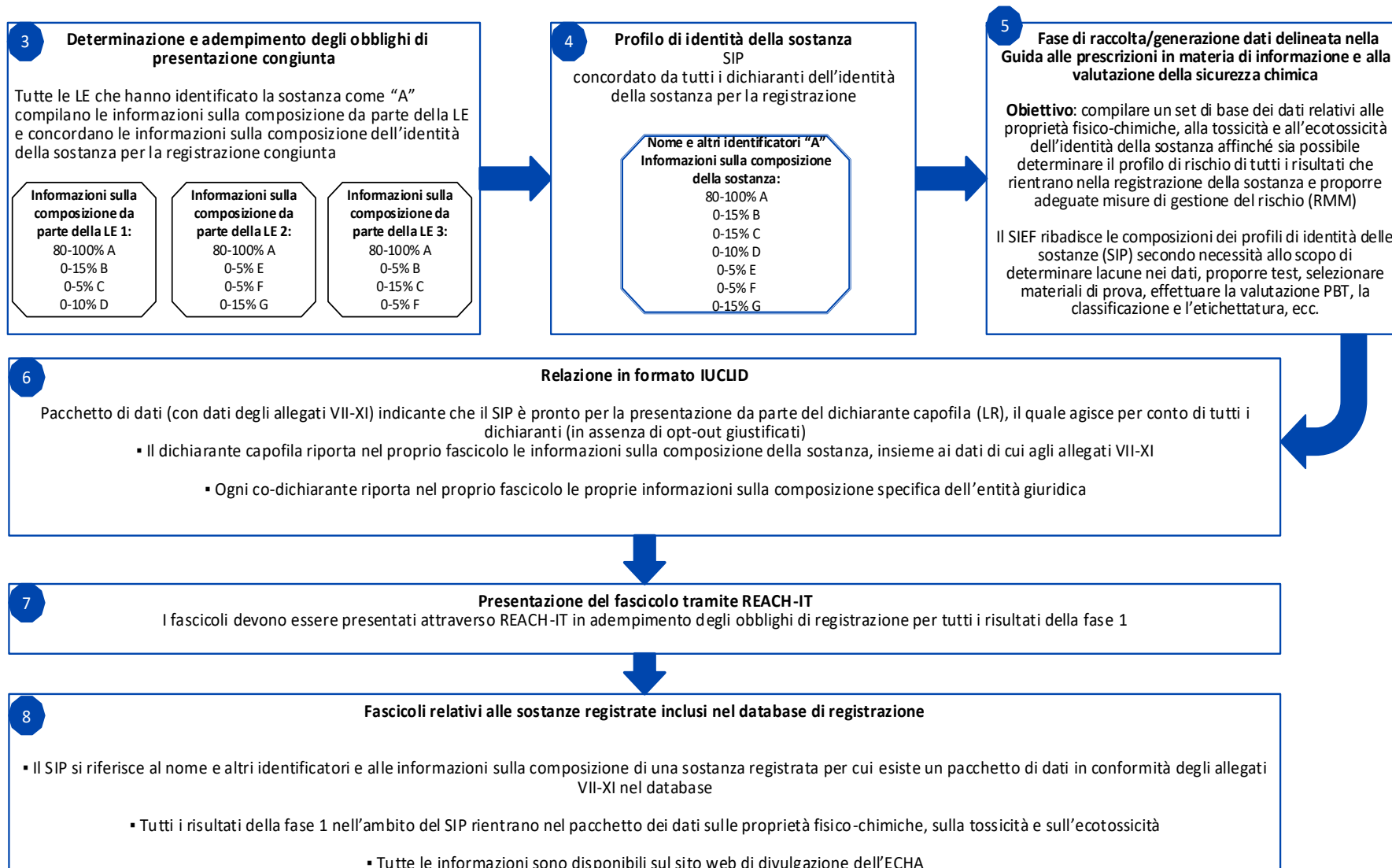
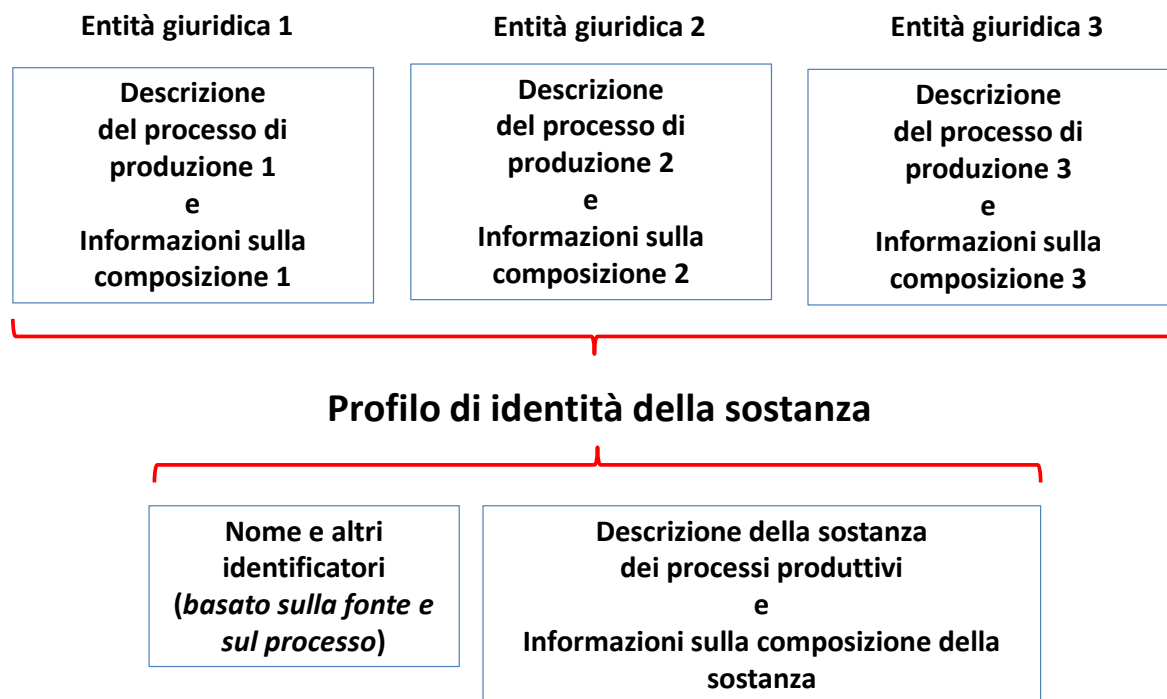


Figura 3: schema illustrativo della definizione di un SIP (passaggio 4 della figura 2) per una sostanza UVCB identificata in base ai descrittori di fonte e di processo dalle descrizioni della fonte e del processo delle singole entità giuridiche.



AGENZIA EUROPEA PER LE SOSTANZE CHIMICHE
CASELLA POSTALE 400, FI-00121 HELSINKI, FINLANDIA
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://echa.europa.eu)