

JUHENDID

Ainete REACH- ja CLP-määruse kohase identifitseerimise ja nimetamise juhend

Detsember 2023
Versioon 3.0



ÕIGUSTEAVE

Juhendi eesmärk on aidata kasutajatel täita oma REACH- ja CLP-määrusest tulenevaid kohustusi. Ainsad autentset õiguslikud alused on REACH- ja CLP-määrus ning käesolev dokument ei ole õiguslikult samaväärne teave. Teabe kasutamise eest vastutab ainuisikuliselt selle kasutaja. Euroopa Kemikaaliamet ei vastuta dokumendis sisalduva teabe kasutamise eest.

Ainete REACH- ja CLP-määruse kohase identifitseerimise ja nimetamise juhend

Viide: ECHA-23-H-07-ET
Kataloogi Number: ED-09-23-444-ET-N
ISBN: 978-92-9468-310-6
DOI: 10.2823/87416
Avaldamisaeg: Detsember 2023
Keel: ET

© Euroopa Kemikaaliamet, 2023
Esikaas © Euroopa Kemikaaliamet

Kui teil on käesoleva dokumendi kohta küsimusi või tähelepanekuid, saate need esitada teabenõude vormil (märkige dokumendi viide ja avaldamisaeg). Teabenõude vorm on ECHA veebilehel kontaktandmete jaotises:

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

Euroopa Kemikaaliamet

Postiaadress: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Soome
Külastusaadress: Telakkakatu 6, 00150 Helsinki, Soome

EESSÕNA

Käesolevas dokumendis kirjeldatakse, kuidas ainet REACH- ja CLP-määruse kohaselt nimetada ja identifitseerida. Juhend kuulub juhendisarja, mille eesmärk on aidata kõigil sidusrühmadel täita REACH- ja CLP-määrusega kehtestatud kohustusi. Dokumendid sisaldavad üksikasjalikke juhendeid REACH- ja CLP-määruse mitmesuguste oluliste menetluste ning teaduslike ja/või tehniliste meetodite kohta, mida tootjad või ametiasutused peavad kasutama REACH- ja CLP-määruse nõuete täitmiseks.

Juhendid koostati ja arutati läbi REACH-rakendusprojektide raames Euroopa Komisjoni teenistuste juhtimisel ning kaasatud olid kõik asjaomased sidusrühmad: liikmesriigid, tootjad ja vabaühendused. Juhendeid saab alla laadida Euroopa Kemikaaliameti veebilehelt (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Täiendavad juhendid avaldatakse veebilehel pärast nende valmimist või ajakohastamist.

DOKUMENDI MUUDATUSED

Version	Selgitus	Aeg
Version 1	Esmaväljaanne	Juuni 2007
Version 1.1	<p>Parandus</p> <ul style="list-style-type: none"> - Pealkirja ja peatükkide pealkirjadesse lisati viide CLP-määrusele (16. detsembri 2008. aasta määrus (EÜ) nr 1272/2008). - Lisati tekst, mis selgitab juhendi reguleerimisala. Kogu dokumendist kustutati liigne tekst. - Kogu teksti lisati asjakohased viited CLP-määrusele. - Termin „tehniline juhend“ (TGD) asendati kogu tekstis terminiga „juhend“. - Termin „valmistis“ asendati kogu dokumendis terminiga „segu“. - Termin „punkt“ asendati kogu dokumendis terminiga „jaotis“. - Termin „eelregistreerimine“ asendati kogu dokumendis terminiga „(hiline) eelregistreerimine“. - Lisati lühendid AAS ja CLP; lühendid RIP ja TGD kustutati. - Muudeti sulami, EÜ loetelu, IUCLIDi kirjeldusi. Lisati EÜ numbri, loetelunumbri, segu ja teatatud aine määratlused. Termini „valmistis“ määratlus kustutati. - Jaotis 3.2 toimetati, et täpsustada sisu. - Jaotis 3.3 toimetati, et täpsustada CLP-kohustustega seotud sisu. - Jaotises 4.2.2.1 muudeti koostisosade esitamise viisi, esitades neid mitte protsendilise kontsentratsiooni, vaid tähestikulises järjestuses, nii et suhtelist koostist ei saa tuletada loetelu järjestuse alusel. - Jaotises 4.2.3.1 asendati termin „kristallivõre“ terminiga „kristall“. - Jaotis 4.3.1.2.3 toimetati, et täpsustada sisu. - Jaotises 5 lisati viide andmete esitamise käsiraamatu osale 18 „Kuidas esitada REACH-registreerimisel aine olemust IUCLID 5-s“. 	November 2011 (ainult inglise keeles)

	<ul style="list-style-type: none">- Jaotis 5 vaadati läbi, et täpsustada sisu.- Jaotises 6 asendati termin „eelregistreerimine“ terminiga „(hiline) eelregistreerimine“.- 1. liites uuendati mittetöötavaid linke.- Kustutati 2. liite jaotis 4.3, sest selle sisu on asjakohasel veebilehel.	
Versioon 1.2	<p>Parandus</p> <p>Faasiaine määratlus ühtlustati määrusega (EÜ) nr 1354/2007 ja määruse (EÜ) nr 1907/2006 ELT L 36 (5.2.2009) lk 84 avaldatud parandusega muudetud määruses (EÜ) nr 1907/2006 oleva määratlusega.</p> <p>NB! Versioonide 1.1 ja 1.2 muudatused on konsolideeritud samasse versiooni 1.2, mis tõlgitakse muudesse keeltesse kui inglise keelde.</p>	Märts 2012
Versioon 1.3	<p>Parandus</p> <p>Peatükki 7.6 lisati kaks puuduvat struktuurivalemit.</p>	Veebruar 2014
Versioon 1.4	<p>Parandus</p> <ul style="list-style-type: none">- Dokument kujundati ümber nii, et see on kooskõlas ameti kasutatava sümboolikaga.- Kustutati peatükk 8, mis sisaldas IUCLIDI vananenud versioonil põhinevaid tehnilisi juhendeid.- Parandati jaotises 7.5 kristobaliidi ja kvartsi kirjeldust ning jäeti välja viide direktiivile 2000/30/EÜ.- Kustutati viited peatükile 8 ja andmete esitamise käsiraamatutele ning lisati viide uutele ECHA käsiraamatutele.- Kustutati III lisa ja teave sisestati dokumendi muudatuste tabelisse.- Parandati mittetöötavad veebilehe lingid ja toimetamisvead.	Juuni 2016
Versioon 2.0	<p>Osaline ajakohastamine piirdub järgmisega:</p> <ul style="list-style-type: none">- Lisati uus III lisa koos aine identifitseerimisandmete profiili kontseptsiooni kirjeldusega.- Lisati uus tekst peatükki 1, et tutvustada uut III lisa.- Parandati trüki- ja toimetamisvead.	Detsember 2016

Versioon 2.1	Parandati trükivead tekstis ja vead III lisa joonise 2 näidete koostise teabes.	Mai 2017
Versioon 3.0	Uuendus: <ul style="list-style-type: none">- viidi kooskõlla komisjoni 24. märtsi 2022. aasta määrusega (EL) 2022/477 tehtud muudatustega.- Eemaldati viited (hilisele) eelregistreerimisele- Parandati trüki- ja toimetamisvead- Lisati lingid ECHA tugilehetedele ning küsimustele ja vastustele- Kustutati III lisa punkt 5 (üleminek IUCLID 5-lt IUCLID 6-le)	Detsember 2023

Sisukord

1. ÜLDIST	9
1.1. Eesmärgid	9
1.2. Reguleerimisala	10
1.3. Juhendi ülesehitus	11
2. MÕISTED JA LÜHENDID	12
2.1. Lühendid	12
2.2. Mõisted	14
3. AINE IDENTIFITSEERIMISE NÕUDED REACH- JA CLP-MÄÄRUSES.....	17
3.1. Aine määratlus	17
3.2. Numbrilised identifikaatorid.....	17
3.2.1. EÜ loetelu	17
3.2.2. Loetelunumbrid.....	18
3.3. Aine identifitseerimise nõuded REACH-määruses ja CLP-määruses	19
4. AINE IDENTIFITSEERIMISE JA NIMETAMISE JUHISED REACH-MÄÄRUSES JA CLP- MÄÄRUSES.....	22
4.1. Sissejuhatus	22
4.2. Täpselt määratletud koostisega ained.....	28
4.2.1. Ühe koostisosaga ained	29
4.2.2. Mitme koostisosaga ained	31
4.2.3. Määratletud keemilise koostisega ained ja muud peamised identifikaatorid.....	34
4.3. UVCB-ained	35
4.3.1. UVCB-ainete üldjuhised	36
4.3.2. UVCB-ainete eritüübid	44
5. AINETE SAMASUSE KONTROLLIMISE KRITEERIUMID	53
6. AINE IDENTIFITSEERIMISANDMED PÄRINGUS	59
7. NÄITED.....	60
7.1. Dietüülperoksüdikarbonaat	60
7.2. SOLIMIDIIN	60
7.3. Isomeerisegu	61
7.4. Lõhnaaine AH.....	65
7.5. Mineraalid.....	71
7.6. Hübridlavendli eeterlik õli.....	74
7.7. Krüsanteemiõli ja sellest eraldatud isomeerid	80
7.8. Fenool, isopropüülitud, fosfaat.....	84

7.9. Kvaternaarsed ammooniumühendid	85
7.10. Naftasaadused	89
7.10.1. Bensiini seguvoog (C4-C12)	89
7.10.2. Gaasiõlid (nafta)	90
7.11. Ensüümid	91
7.11.1. Subtilisiin	91
7.11.2. α -amülaas	93
I LISA – ABIMATERJALID	95
II LISA. TEHNILINE JUHEND AINE IDENTIFITSEERIMISPARAMEETRITE JÄRGI	99
III LISA. AINE IDENTIFITSEERIMINE JA ANDMETE ÜHINE ESITAMINE	115

Tabelid

Tabel 1. Lühendid	12
Tabel 2. Määratlused	14
Tabel 3. REACH-määruse VI lisa punktis 2 loetletud aine identifitseerimisparameetrid	20
Tabel 4: Sarnaste täpselt määratletud ainete eri tüüpide näidete põhiidentifikaatorite rühmitamine	23
Tabel 5. UVCB-ainete eri tüüpide näidete põhiidentifikaatorite rühmitamine	24

Joonised

Joonis 1: Juhendi vajaliku peatüki ja lisa leidmine mitmesuguste ainetüüpide korral	27
Joonis 2 (järgmine leht): Skemaatiline ülevaade sellest, mida potentsiaalsed registreerijad teevad alates 1) registreerimiskohustuste tuvastamisest ja 4) aine identifitseerimisandmete profiili määramisest kuni 8) registreerimisdokumentide esitamiseni nende ainete registreerimiskohustuste ametlikuks täitmiseks	121
Joonis 3: Näitlik skeem UVCB-aine identifitseerimisandmete profiili (4. etapp joonisel 2) määratlemiseks UVCB-aine korral, mis on identifitseeritud allika ja protsessi deskriptorite järgi juriidilise isiku individuaalsest allikast, ning protsessi kirjeldused.	124

1. Üldist

REACH-määrusega (määrus (EÜ) nr 1907/2006) loodi kemikaalide registreerimise, hindamise, autoriseerimise ja piiramise süsteem ning asutati määruse rakendamiseks Euroopa Kemikaaliamet (ECHA).¹

CLP-määrus (määrus (EÜ) nr 1272/2008) on keemiliste ainete ja segude klassifitseerimise, märgistamise ja pakendamise uus Euroopa määrus.² Määrusega kehtestati Euroopa Liidus kemikaalide liigitamise ja märgistamise uus süsteem, mis põhineb ÜRO üldisel ühtlustatud süsteemil (ÜRO GHS).

REACH-määrus käsitleb aineid. REACH-protsesside korraliku toimimise tagamiseks on äärmiselt oluline identifitseerida ained õigesti ja üheselt. Ainete identifitseerimise ja nimetamise juhendi eesmärk on toetada tööstust, liikmesriike ja Euroopa Kemikaaliametit.

Käesolev juhend tugineb ainete identifitseerimise kogemusele, mis on saadud varasema üldise kemikaaliõigusakti (direktiiv 67/548/EMÜ ja direktiiv 98/8/EMÜ) raames. Juhendi sõnastus lähtub siiski aine identifitseerimisandmete esitamise praegusest tavast, nagu seda sätestavad REACH-määrus ja CLP-määrus. Samuti on arvesse võetud ka väljaspool Euroopa Liitu kasutatavate kemikaaliprogrammide asjakohaseid lähenemisviise.

Juhendis on mitme ainetüübi kohta konkreetsed juhised.

Juhendi kasutuseesmärk on selgitada, kuidas identifitseerida ja nimetada REACH- ja CLP-määrusega reguleeritavaid aineid.

1.1. Eesmärgid

Juhendi eesmärk on selgitada tootjatele ja importijatele, kuidas REACH- ja CLP-määruse kontekstis registreerida ja teatada aine identifitseerimisandmeid. Juhendi üks olulisimaid elemente on selgitus, kuidas ainet nimetada. Samuti antakse selles juhiseid selle kohta, kas aineid võib REACH-määruse ja CLP-määruse kontekstis käsitada samadena ning kuidas saab rakendada põhimõtet „üks aine, üks registreering“, määratledes aine identifitseerimisandmete profiili. Sama aine identifitseerimisandmete profiiliga hõlmatud ainete samasuse identifitseerimine on oluline päringute esitamisel, andmete jagamisel, andmete ühisel esitamisel, klassifitseerimis- ja märgistusandmiku teate esitamisel ning klassifitseerimise ja märgistuse ühtlustamisel.

Soovitav on, et aineid identifitseeriks tööstusettevõtete eksperdid. Tööstuse nendele esindajatele, kellel on ainete identifitseerimisel vähe kogemusi, on juhendi lisas identifitseerimise üksikasjalikumad lisajuhendid.

Juhendis on ka veebilingid asjaomastele vahenditele, millega saab iseloomustada ja kontrollida aine keemilisi identifitseerimisandmeid.

¹ Euroopa Parlamendi ja nõukogu määrus (EÜ) nr 1907/2006, 18. detsember 2006, mis käsitleb kemikaalide registreerimist, hindamist, autoriseerimist ja piiramist (REACH) ning millega asutatakse Euroopa Kemikaaliamet, muudetakse direktiivi 1999/45/EÜ ja tunnistatakse kehtetuks nõukogu määrus (EMÜ) nr 793/93 ja komisjoni määrus (EÜ) nr 1488/94 ning samuti nõukogu direktiiv 76/769/EMÜ ja komisjoni direktiivid 91/155/EMÜ, 93/67/EMÜ, 93/105/EÜ ja 2000/21/EÜ

² Euroopa Parlamendi ja nõukogu määrus (EÜ) nr 1272/2008, 16. detsember 2008, mis käsitleb ainete ja segude klassifitseerimist, märgistamist ja pakendamist ning millega muudetakse direktiive 67/548/EMÜ ja 1999/45/EÜ ja tunnistatakse need kehtetuks ning muudetakse määrust (EÜ) nr 1907/2006

Üksikasjalikud juhised, kuidas sisestada aine identifitseerimisandmeid IUCLIDI mitmesuguste REACH- ja CLP-tegevuste korral, on ECHA käsiraamatutes aadressil <http://echa.europa.eu/manuals..>

1.2. Reguleerimisala

REACH-määruse artikli 1 kohaselt käsitleb määrus ainete või segude ja toodete koostises esinevate ainete tootmist, importimist, turuleviimist ja kasutamist. Segusid ja tooteid kui selliseid REACH-määrus ei reguleeri.

Kooskõlas REACH-määruse artikliga 10 tuleb aine registreerimiseks dokumenteerida aine identifitseerimisandmed vastavalt REACH-määruse VI lisa punkti 2 parameetritele (vt Tabel 3). CLP-määruse artikli 40 lõike 1 kohaselt teatamise eesmärgil aine identifitseerimisandmete esitamiseks tuleb lähtuda samadest parameetritest (mida sätestatakse REACH-määruse VI lisa punktides 2.1–2.3.4). Juhendis käsitletakse REACH- ja CLP-määruse reguleerimisalasse kuuluvate ainete asjakohast identifitseerimist ning selgitatakse, kuidas kasutada aine REACH-määruse VI lisa punkti 2 identifitseerimisparameetreid. Aine identifitseerimisandmed peavad olema aine tuvastamiseks piisavad. Aine identifitseerimise parameetreid võib välja jätta, kui see ei ole tehniliselt võimalik või kui ilmneb, et teaduslikult ei ole vaja nõutud teavet esitada. Väljajätmise põhjused tuleb selgelt esitada ja need peavad olema teaduslikult põhjendatud.

Aine identifitseerimine sõltub aine tüübist. Seetõttu käsitletakse mitmes peatükis konkreetseid ainetüüpe.

EÜ loetelud, mida kasutatakse direktiivi 67/548/EMÜ raames (EINECS-, ELINCS- ja NLP-loetelu) on aine identifitseerimisel olulised vahendid. Nende REACH-rolli selgitatakse peatükis 3.2.

REACH- ja CLP-määruse (ning järelilikult ka käesoleva juhendi) reguleerimisalasse kuuluvad ained on tavaliselt aine tootmisel toimuvate keemiliste reaktsioonide saadused, mis võivad sisaldada mitut koostisosat. REACH- ja CLP-määruse määratluse kohased ained on muu hulgas ka keemiliselt saadud või looduslikest materjalidest eraldatud ained, mis võivad koosneda samast elemendist või molekulist (nt puhtad metallid või teatud mineraalid) või mitmest koostisosast (nt eeterlikud õlid, sulfiidsete metallimaakide sulatamisel tekkiv metalli ja sulfiidi sulam). Muude ühenduse õigusaktidega reguleeritavad ained on paljudel juhtudel siiski REACH-registreerimiskohustusest vabastatud (vt REACH-määruse artikkel 2). Samuti on registreerimiskohustusest vabastatud REACH-määruse IV lisa loetletud ained ja ained, mis vastavad REACH-määruse V lisa sätestatud teatud kriteeriumidele. NB! Kuigi aine võib olla registreerimiskohustusest vabastatud, ei tähenda see tingimata, et aine on vabastatud muude REACH-määruse jaotiste või CLP-määruse nõuetest.

REACH-määruse kohaselt nõutakse, et sama aine registreerijad lepiksid ühiselt kokku, et esitada ühiselt teatud teavet aine kohta (põhimõtte „üks aine, üks registreering“)³. Põhimõtte rakendamiseks on vaja selgust, kuidas registreerija on määratlenud oma aine identifitseerimisandmete profiili ulatuse.

³ Üksikasjalik teave sama ainet käsitlevate andmete ühise esitamise kohta on esitatud *andmete jagamise juhendis*.

1.3. Juhendi ülesehitus

Taustteave, nagu juhendi eesmärgid ja ulatus, on esitatud peatükis 1 ning kasutatud lühendid ja mõisted peatükis 2. Aine REACH-määruse alusel identifitseerimise raamistiku, nt aine määratluse ja nõutava teabe asjakohane teave on peatükis 3.

Aine identifitseerimise ja nimetamise praktilised juhendid on peatükis 4.

- Peatükis 4.1 kirjeldatakse, mis eristab täpselt määratletud ja täpselt määratlemata aineid; kummaski põhirühmas on alarühmi, millel on oma konkreetsed aine identifitseerimise juhendid. Esitatud on juhtskeem, et kasutaja saaks leida aine identifitseerimisjuhendite asjakohase peatüki.
- Järgmistes peatükkides esitatakse iga ainetüübi kohta identifitseerimiseeskirjade ja näidetega konkreetsed juhendid.

Peatükis 5 selgitatakse, kuidas kontrollida, kas aineid saab käsitada samadena. Peatükis 6 selgitatakse, kuidas esitada aine identifitseerimisandmeid päringumenetluses.

Peatükis 7 esitatakse peatüki 4 praktiliste juhendite kohta üksikasjalikud kasutusnäited.

I lisas on veebilingid asjakohastele vahenditele, millega saab aine identifitseerimisandmeid iseloomustada ja kontrollida.

II lisas on rohkem taustteavet aine konkreetsete identifitseerimisparameetrite, näiteks nomenklatuurieeskirjade, EÜ ja CAS-numbrite, molekul- ja struktuurivalemi kirjutusviisi ning analüütiliste meetodite kohta.

III lisas on teave aine identifitseerimisandmete profiili kontseptsiooni, ühise esitamise kohustuste asjakohasuse ning selle määratlemise ja esitamise kohta.

2. Mõisted ja lühendid

2.1. Lühendid

Juhendis kasutatud peamised lühendid koos selgitustega: Tabel 1

Tabel 1. Lühendid

Lühend	Tähendus
AAS	aatomabsorptsioonspektroskoopia
AISE	Rahvusvaheline Seebi-, Pesemisvahendite ja Majapidamistarvete Tootjate Ühendus
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	määrus (EÜ) nr 1272/2008, mis käsitleb ainete ja segude klassifitseerimist, märgistamist ja pakendamist
EINECS	Euroopa olemasolevate kaubanduslike ainete loetelu
EK	Euroopa Komisjon
EL	Euroopa Liit
ELINCS	Euroopa uute keemiliste ainete loetelu
ENCS	olemasolevad ja uued keemilised ained (Jaapan)
ESIS	Euroopa keemiliste ainete infosüsteem
Gaasikromatograafia	gaasikromatograafia
GHS	üldine ühtlustatud süsteem
HPLC	kõrgsurve-vedelikkromatograafia
InChI	IUPACi rahvusvaheline keemiline identifikaator
INCI	rahvusvaheline kosmeetikavahendite koostisainete nomenklatuur
IR	infrapuna-
ISO	Rahvusvaheline Standardiorganisatsioon
IUBMB	Rahvusvaheline Biokeemia ja Molekulaarbioloogia Liit
IUCLID	rahvusvaheline unifitseeritud kemikaaliteabe andmebaas
IUPAC	Rahvusvaheline Puhta Keemia ja Rakenduskeemia Liit
LR	massispektroskoopia
massi-%	massiprotsent
NLP	endine polümeer
NMR	tuumamagnetresonants

ppm	miljondik
REACH-määrus	kemikaalide registreerimine, hindamine, autoriseerimine ja piiramine
SIEF	aineteabe vahetuse foorum
SIP	Aine identifitseerimisandmete profiil
SMILES	lihtsustatud molekulaarse sisendrea sisestamissüsteem
TSCA	mürgiste ainete piiramise seadus (USA)
UV/VIS	ultraviolettkiirgus / nähtav valgus
UVCB	tundmatu või muutuva koostisega ained, kompleksed reaktsioonisaadused või bioloogilist päritolu materjalid
XRD	röntgendifraktsioon
XRF	röntgenfluorestsents

2.2. Mõisted

Juhendis kasutatud peamised mõisted koos selgitustega: Tabel 2

Määratlused arvestavad REACH- ja CLP-määruse määratlusi. Sel põhjusel on mõni mõiste määratletud teisiti kui varem direktiivis 67/548/EMÜ.

Tabel 2. Määratlused

Määratlus	Kirjeldus
Aine*	Looduslik või tootmismenetluse teel saadud keemiline element või selle ühendid koos püsivuse säilitamiseks vajalike lisaainete ja tootmismenetlusest johtuvate lisanditega, välja arvatud lahustid, mida on võimalik ainest eraldada, mõjutamata aine püsivust või muutmata selle koostist.
EÜ loetelu	Kuigi seda ei ole REACH-määruses õiguslikult määratletud, on EÜ loetelu kolmest iseseisvast ja õiguslikult kinnitatud Euroopa aineletoetelust koosnev loetelu, mis koostati Euroopa Liidu varasemate kemikaaliõigusaktide raamistikus: EINECS-, ELINCS- ja NLP-loetelu (endised polümeerid). EÜ loetelu kirjed koosnevad keemilisest nimetusest ja numbrist (EÜ nimetus ja EÜ number), CAS-numbrist, molekulvalemist (kui olemas) ja kirjeldusest (teatud ainetüüpide korral).
EÜ number	Aine numbriline identifikaator EÜ loetelus.
IUCLID	Rahvusvaheline unifitseeritud kemikaaliteabe andmebaas. IUCLID on keemiliste ainete andmete jagamise andmebaasi- ja haldussüsteem.
Keemiliselt modifitseerimata aine*	Aine, mille keemiline struktuur jääb muutumatuks isegi juhul, kui aine on läbi teinud keemilise protsessi või töötlemise või füüsikalise mineraloogilise muundumise, nt lisandite eemaldamine.
Koostisaine	Segu moodustamiseks tahtlikult lisatud aine.
Koostisosa	Aine koostise mis tahes üksikud aineosakesed, millel on ainulaadne keemiline olemus.
Kromatograafiline jälg	Aine koostise kirjeldus ainele iseloomuliku koostisosade jaotuse alusel analüütilises kromatogrammis.

Lisaaine	Aine stabiliseerimiseks tahtlikult lisatud aine ⁴ .
Lisand	Toodetud aines esinev tahtmatu koostisosa. See võib pärineda lähtematerjalist või olla tekkinud tootmisprotsessis sekundaarsete või puudulike reaktsioonide tulemusel. Kuigi lisand sisaldub lõppaines, ei ole seda tahtlikult lisatud.
Loetelunumber	Ameti antud number. Number, mille annab REACH-IT automaatselt. Kehtib kõigile saabuvatele nõuetekohastele esitamistele (nt PPORD-teated, päringud, registreerimised, klassifitseerimise ja märgistuse teated).
Looduses esinevad ained*	Looduslikud ained, mis on töötlemata kujul või mida on töödeldud üksnes käsitsi, mehaaniliselt või gravitatsiooniliste meetmetega, vees lahustamise, flotatsiooni, veega ekstraheerimise, aurdestillatsiooni teel või kuumutades ainult vee eraldamiseks, või mida saadakse õhust eraldamise teel mis tahes vahenditega.
Mitme koostisosaga aine	Tavaliselt aine koostise järgi määratletud aine, milles on mitu põhikoostisosa kontsentratsioonis ≥ 10 massi-% ja < 80 massi-%.
Monomeer*	Aine, mis suudab konkreetsetes protsessis kasutatava polümerisatsioonireaktsiooni tingimustes moodustada kovalentseid sidemeid paljude samasuguste või erinevate molekulidega.
Polümeer*	Aine, mille molekulides paiknevad järjestikku ühesugused või erinevad monomeerüksused. Sellised molekulid peavad olema erinevate molekulmassidega, kusjuures erinevused molekulmassis peavad eelkõige tulenema monomeerühikute arvust. Polümeer vastab järgmistele tingimustele: (a) molekulid, mis koosnevad vähemalt kolmest monomeerühikust, mis on kovalentselt seotud vähemalt ühe monomeerühiku või muu reagentiga, on aines massilt ülekaalus; (b) ühesuguse molekulmassiga molekulid on aines massilt vähemuses. Käesolevas määratluses tähendab monomeerüksus monomeeri reaktsioonijärgset kuju polümeeris.
Põhikoostisosa	Aine koostisosa, mis ei ole lisaaine ega lisand, mis moodustab ainest olulise osa ning mida seetõttu kasutatakse aine nimetuses ja aine üksikasjalikul identifitseerimisel.
Segu*	Kahest või enamast ainest koosnev segu või lahus.

⁴ Muudes valdkondades võib lisaainel olla ka muid funktsioone, nt pH-regulaator või värvaine. REACH-määruses ja selles juhendis on lisaaine siiski stabiliseeriv aine.

Sulam*	Makroskoopiliselt homogeenne metalliline materjal, mis koosneb kahest või enamast keemilisest elemendist, mis on omavahel ühendatud selliselt, et neid ei saa mehhaaniliselt hõlpsasti eraldada. Sulameid käsitatakse erisegudena.
Teatatud aine*	Aine, mille kohta on esitatud teatamisdokumendid ja mille tohib vastavalt direktiivile 67/548/EMÜ turule viia.
Toode*	Ese, millele antakse tootmisel teatud kuju, pinnaviimistlus või kujundus, mis määrab tema funktsiooni suuremal määral kui tema keemiline koostis.
Tootmine*	Ainete tootmine või eraldamine nendele iseloomulikus olekus.
Vaheaine*	Aine, mida toodetakse ja kasutatakse või tarbitakse keemilistes protsessides eesmärgiga muuta see aine mõneks muuks aineks (edaspidi „süntees“): (a) <u>isoleerimata vaheaine</u> – vaheaine, mida ei eemaldata sünteesi jooksul tahtlikult (välja arvatud proovivõtuks) seadmetest, milles süntees toimub. Sellised seadmed hõlmavad reaktsioonianumat, selle lisaseadmeid ja mis tahes seadmeid, mille kaudu aine (ained) liigub (liiguvad) pideva voona või perioodiliselt, samuti torustikku aine ühest anumast teise üleviimiseks järgmise reaktsioonistme jaoks; seadmed ei hõlma mahuteid ja teisi anumeid, milles ainet (aineid) pärast tootmist hoitakse; (b) <u>kohapeal kasutatav isoleeritud vaheaine</u> – vaheaine, mis ei vasta isoleerimata vaheaine kriteeriumidele ja mille puhul vaheaine tootmine ja muu (teiste) aine (ainete) sünteesimine sellest vaheainest toimub ühes ja samas tegevuskohas, mida käitab üks või mitu juriidilist isikut; (c) <u>transporditav isoleeritud vaheaine</u> – vaheaine, mis ei vasta isoleerimata vaheaine kriteeriumidele ja mida transporditakse tegevuskohtade vahel või tarnitakse teistesse tegevuskohtadesse.
ühe koostisosaga aine	Tavaliselt aine koostise järgi määratletud aine, milles esineb üht põhikoostisosa vähemalt 80 massi-%.

* Määratlused põhinevad REACH-määruse artikli 3 määratlustel.

3. Aine identifitseerimise nõuded REACH- ja CLP-MÄÄRUSES

REACH- ja CLP-määruses on aine määratlus ning REACH-määruses on loetletud aine identifitseerimise parameetrid (VI lisa punktis 2), mida tuleb kasutada registreeritava aine identifitseerimiseks.

Käesolevas peatükis kirjeldatakse aine määratlust REACH- ja CLP-määruses (peatükk 3.1), antakse üldjuhised, kuidas kasutada varasema kemikaale reguleeriva õigusraamistiku EÜ loetelu (peatükk 3.2) ja esitatakse rohkem taustteavet REACH-määruses sätestatud aine identifitseerimise nõuete kohta (peatükk 3.3).

3.1. Aine määratlus

Aine määratlus REACH- (artikli 3 lõige 1) ja CLP-määruses (artikli 2 lõige 7):

Aine on looduslik või tootmismenetluse teel saadud keemiline element või selle ühendid koos püsivuse säilitamiseks vajalike ja tootmismenetlusest johtuvate lisanditega, välja arvatud lahustid, mida on võimalik ainest eraldada, mõjutamata aine püsivust või muutmata selle koostist.

Aine määratlus REACH- ja CLP-määruses on täpselt sama kui ohtlike ainete direktiivi 7. muudatuses (direktiiv 92/32/EMÜ, millega muudetakse direktiivi 67/548/EMÜ). Mõlemal juhul tähendab aine rohkem kui üksnes sama molekuliga keemilist ühendit. Aine määratlus hõlmab ka mitmesuguseid koostisosi, näiteks lisandeid.

3.2. Numbrilised identifikaatorid

3.2.1. EÜ loetelu

EÜ loetelu koondab kolm eri loetelu, mis koostati varasema kemikaale reguleeriva õigusraamistikuga: Euroopa kaubanduslike keemiliste ainete loetelu (EINECS), Euroopa uute keemiliste ainete loetelu (ELINCS) ja endiste polümeeride (NLP) loetelu.

1. jaanuarist 1971 kuni 18. septembrini 1981 Euroopa turul olnud ained on loetletud Euroopa kaubanduslike ainete loetelus (EINECS)^{5, 6, 7}.

⁵ EINECS põhineb ECOIN-põhiloetelul (ECOIN – **E**uropean **C**ore **I**Nventory), millele tööstus võib aineid täiendavalt teatada (vastavalt ainete EINECSile teatamise kriteeriumidele). ECOIN moodustati Euroopa turul eeldatavalt olnud kemikaalide eri loetelusid liites (nt TSCA). EINECS avaldati 15. juunil 1990 ja sisaldab üle 100 000 aine. Loetelu kasutamisel tuvastati mitmeid vigu (trükivead, nt vale keemiline nimetus, valem või CAS-number), mille tõttu avaldati 1. märtsil 2002 parandus.

⁶ ECB (2005) Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/EEC (Directives 79/831/EEC and 92/32/EEC) Non-confidential version. EUR 20519 EN. Updated version of June 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, p. 21-33.

Selles on ligikaudu 100 000 ainet, mis on määratletud keemilise nimetuse (ja teatud ainetüüpide korral kirjelduse), CAS-numbri ja 7-kohalise EINECS-numbri alusel. EINECS-number algab alati 2 või 3-ga (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Ainete lisamisel EINECS-loetellu on kontrollitud nende lisamise põhjendusi.

Pärast 18. septembrit 1981 teatatud ja turule viidud ained on loetletud Euroopa uute keemiliste ainete loetelus (ELINCS)⁶. See loetelu hõlmab kõiki aineid, millest on teatatud kuni 31. maini 2008 vastavalt direktiivile 67/548/EMÜ ja selle muudatustele. Neid aineid nimetatakse „uuteks aineteks“, sest neid 18. septembri 1981 seisuga ühenduses veel ei turustatud. ELINCS-numbri andis ainele Euroopa Komisjon pärast seda, kui liikmesriikide pädevad asutused olid selle läbi vaadanud. Erinevalt EINECSist ei sisalda ELINCS-kirjed CAS-numbrit, vaid liikmesriigi pädeva asutuse antud teatenumbrit, kaubanduslikku nimetust (kui olemas), klassifikatsiooni ja klassifitseeritud ainete IUPAC-nimetust. ELINCS-numbrid on samuti 7-kohalised ja algavad alati 4-ga (4xx-xxx-x).

EINECSile teatamisel tehti polümeeridele erand ja neid reguleeriti direktiivis 67/548/EMÜ esitatud erieeskirjadega⁸⁹. Mõiste „polümeer“ määratleti hiljem direktiivi 67/548/EMÜ 7. muudatuses (direktiiv 92/32/EMÜ). Selle määratluse rakendamise tulemusena ei olnud mõni aine, mida EINECSi teatamiseeskirjade kohaselt käsitati polümeerina, 7. muudatuse kohaselt enam polümeer. Kõikidest EINECSis loetlemata ainetest pidi teatama ja seega oleks tulnud teatada ka nn endistest polümeeridest (NLP). Euroopa Liidu Nõukogu selgitas siiski, et endistest polümeeridest ei pea tagasiulatuvalt teatama. Komisjonil paluti koostada endiste polümeeride loetelu (NLP-loetelu). Sellesse loetellu lisati ained, mida turustati Euroopa Liidus ajavahemikus 18. septembrist 1981 (direktiivi 79/831/EMÜ kui direktiivi 67/548/EMÜ 6. muudatuse jõustumiskuupäev) kuni 31. oktoobrini 1993 (direktiivi 92/32/EMÜ kui direktiivi 67/548/EMÜ 7. muudatuse jõustumiskuupäev) ning mis täitsid EINECSi teatamiseeskirjade kohaselt polümeeridena käsitamise nõude, kuid mis 7. muudatuse kohaselt enam ei olnud polümeerid. NLP-loetelu on mittetäielik loetelu. NLP-loetelus olevad ained identifitseeritakse keemilise nimetuse, CAS-numbri ja 7-kohalise NLP-numbri alusel. NLP-number algab alati 5-ga (5xx-xxx-x).

Neid kolme aineloetelu – EINECS, ELINCS ja NLP-loetelu – nimetatakse kokku EÜ loeteluks. Kõigil selle loetelu ainetel on EÜ number, mille annab Euroopa Komisjon (üksikasjalik teave EÜ numbriga kohta on II lisas).

Nende ainete teavet saab Euroopa Kemikaaliameti veebilehelt (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), mis peab ja avaldab ka registreeritud ainete loetelu (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

EÜ loetelu saab kasutada tootjate ja importijate jaoks vahendina, mille abil leida oma aine EÜ number.

3.2.2. Loetelunumbrid

REACH-ITi süsteemi luues pidas ECHA kasulikuks anda ainele number automaatselt kõigi saabuvate tehniliselt täielike registreerimisdokumentide korral (eelregistreerimised, PPORD-teated, päringud, registreerimised, klassifitseerimise ja märgistuse teated jne), millel puudus EÜ number (vt loetelunumbrite andmise kriteeriumid allpool). See on tehniliselt hõlbustanud registreerimisdokumentides käsitletavate ainete haldamist, edasist töötlemist ja

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

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

identifitseerimist. Need nn loetelunumbrid on samasugusel numbrilisel kujul kui EINECS-, ELINCS- ja NLP-numbrid, kuid algavad teistmoodi.

Loetelunumbrite vorming on samalaadne EINECS-, ELINCS- ja NLP-kirjetega. Enamiku loetelunumbrite ja nendega seotud aine identifitseerimise korral ei ole kontrollitud nende õigsust, kehtivust ega seda, kas on järgitud käesolevas juhendis kirjeldatavaid tavasid.

NB! On võimalik, et samale ainele antakse eri loetelunumbrid, kui aine kohta kasutatakse eri identifikaatoreid (nt eri nimetusi). Seetõttu on võimalik, et loetelunumber antakse EINECS-, ELINCS- või NLP-loetelus olevale ainele. See võib juhtuda, kui REACH-IT kaudu ECHA-le esitatavas taotluses kasutatakse EÜ loetelus olevast nimetusest erinevat aine nimetust.

Loetelunumbrid võivad alata näiteks numbritega 6, 7, 8 või 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

NB! Mõne EINECS-kirje korral on aine kirjeldus suhteliselt lai ja võib hõlmata mitme aine identifitseerimisandmeid REACH-määruse artikli 3 lõike 1 määratluse tähenduses. Sellistel juhtudel palutakse võimalikul registreerijal kirjeldada ainet täpsemini (nt IUPAC-nimetuse ja muude kättesaadavate identifikaatorite abil). Registreerija peab siiski märkima, mis EINECS-kirje alla aine kuulub. Sellisel juhul kaalub Euroopa Kemikaaliamet, kas kõnealusele ainele saab anda loetelunumbri.

3.3. Aine identifitseerimise nõuded REACH-määruses ja CLP-määruses

Kui REACH-määruse kohaselt on registreerida vaja, peab see hõlmama aine identifitseerimisandmeid, nagu on sätestatud VI lisa punktis 2. See teave peab olema adekvaatne ja piisav, et saaks identifitseerida iga aine. Kui aine ühe või mitme identifitseerimisparameetri kohta teabe esitamine ei ole tehniliselt võimalik või teaduslikust seisukohast vajalik, peavad põhjused olema selgesti märgitud, nagu sätestatakse VI lisa 1. märkuses.

Samuti kui on vaja teatada CLP-määruse järgi (CLP-määruse artikkel 40), peab teade sisaldama REACH-määruse VI lisa punktides 2.1–2.3.4 sätestatud aine identifitseerimisandmeid. See teave peab olema iga aine identifitseerimiseks asjakohane ja piisav. Kui aine ühe või mitme identifitseerimisparameetri kohta teabe esitamine ei ole tehniliselt võimalik või teaduslikust seisukohast vajalik, peavad põhjused olema selgesti märgitud, nagu sätestatakse VI lisa 1. märkuses.

REACH-määruse VI lisa loetletud aine identifitseerimisparameetreid kirjeldab Tabel 3.

Tabel 3. REACH-määruse VI lisa punktis 2 loetletud aine identifitseerimisparameetrid

REACH-määruse VI lisa punktis 2 loetletud aine identifitseerimisparameetrid	
2.	<p>AINE IDENTIFITSEERIMINE</p> <p><i>Käesolevas punktis iga aine kohta esitatud teave on piisav nimetatud aine identifitseerimiseks. Kui teabe esitamine ühe või mitme allpool esitatud punkti kohta ei ole tehniliselt võimalik või teaduslikust seisukohast vajalik, tuleb seda selgesõnaliselt põhjendada.</i></p>
2.1	Aine nimetus ja mis tahes muu identifikaator iga aine kohta
2.1.1	<i>Nimetus(ed) IUPAC-nomenklatuuris. Kui ei ole kättesaadav, muu rahvusvaheline keemiline nimetus (muud rahvusvahelised keemilised nimetused)</i>
2.1.2	<i>Muud nimetused (triviaalnimetus, kaubanduslik nimetus, lühend)</i>
2.1.3	<i>EÜ number – st EINECS-, ELINCS- või NLP-loetelu number – või ameti määratud number (kui on kättesaadav ja asjakohane)</i>
2.1.4	<i>CAS-nimetus ja CAS-number (kui on kättesaadav)</i>
2.1.5	<i>Muu tunnuscode, näiteks tollinumber (kui on kättesaadav)</i>
2.2	Teave iga aine molekul- ja struktuurivalemi või kristallstruktuuri kohta
2.2.1	<i>Molekulvalem ja struktuurivalem (sh SMILES-kood ja muu esitusviis, kui on kättesaadav) ning kristallstruktuuri(de) kirjeldus</i>
2.2.2	<i>Teave optilise aktiivsuse ja tüüpilise (stereo)isomeeride suhtarvu kohta (kui on kättesaadav ja asjakohane)</i>
2.2.3	<i>Molekulmass või molekulmassivahemik</i>
2.3.	Iga aine koostis
2.3.1	<i>Puhtusaste (%), kui see on kohaldatav</i>

2.3.2	<p><i>Koostisainete ja lisandite nimetused</i></p> <p><i>Tundmatu või muutuva koostisega aine, kompleksse reaktsioonisaaduse või bioloogilist päritolu materjali (UVCB) korral:</i></p> <ul style="list-style-type: none">– nende koostisainete nimetused, mille sisaldus on $\geq 10\%$;– nende teadaolevate koostisainete nimetused, mille sisaldus on $< 10\%$;– koostisainete korral, mis ei ole eraldi identifitseeritavad, koostisainete rühmade kirjeldus nende keemilise olemuse alusel;– päritolu või allika ja tootmisprotsessi kirjeldus
2.3.3	<p><i>Punktis 2.3.2 kirjeldatud koostisainete, eraldi identifitseerimatute koostisainete rühmade ja lisandite tüüpiline kontsentratsioon ja kontsentratsioonivahemik</i></p>
2.3.4	<p><i>Lisaainete nimetused ning tüüpiline kontsentratsioon ja kontsentratsioonivahemik</i></p>
2.3.5	<p><i>Kõik aine identifitseerimiseks vajalikud kvalitatiivsed analüüsandmed, näiteks ultraviolet-, infrapuna-, tuumamagnetresonants- või massispektri või difraktsiooni andmed</i></p>
2.3.6	<p><i>Kõik aine identifitseerimiseks vajalikud kvantitatiivsed analüüsandmed, näiteks kromatograafilise, titrimetrilise või elementanalüüsi või difraktsiooni andmed</i></p>
2.3.7	<p><i>Aine identifitseerimiseks vajalike analüüsimeetodite või asjakohaste bibliograafiliste viidete kirjeldus (sh aine koostisosade ja vajaduse korral lisandite ja lisaainete identifitseerimine ja kvantifitseerimine). Kirjeldus peab sisaldama järgitud katseprotokolle ja punktide 2.3.1–2.3.6 kohaselt esitatud tulemuste asjakohast tõlgendust. Teave peab olema piisav meetodite korratavuseks.</i></p>
2.5	<p>Aine identifitseerimiseks asjakohane mis tahes muu kättesaadav teave</p>

4. Aine identifitseerimise ja nimetamise juhised REACH-määruses ja CLP-määruses

4.1. Sissejuhatus

Eri tüüpi ainete identifitseerimise ja nimetamise eeskirjad on erinevad. Praktilistel põhjustel on käesolev juhend üles ehitatud nii, et iga tüüpi aine korral suunatakse kasutaja otse selle juhiseid sisaldavad peatüki juurde. Selleks selgitatakse kõigepealt ainete eri tüüpe ja hiljem antakse vajaliku peatüki viide.

Aine identifitseerimine peab põhinema vähemalt REACH-määruse VI lisa punktis 2 nimetatud aine identifitseerimisparameetritel (vt Tabel 3). Iga ainet tuleb seetõttu identifitseerida asjakohaste identifitseerimisparameetrite kombinatsiooni alusel:

- IUPAC- ja/või muu nimetus ning identifikaatorid, nt CAS-number, EÜ number (VI lisa punkt 2.1);
- molekul- ja struktuurivalemi teave (VI lisa punkt 2.2);
- aine keemiline koostis (VI lisa punkt 2.3).

Ainet identifitseerib täiesti selle keemiline koostis, st aine keemiline olemus ja iga aines sisalduva koostisosa sisaldus. Kuigi selline lihtne identifitseerimine võib enamiku ainete puhul olla võimalik, ei saa seda teatud ainete puhul rakendada või ei ole see REACH- ja CLP-määruse reguleerimisala kontekstis piisav. Neil juhtudel on vaja muud või täiendavat aine identifitseerimisteavet.

Seega võib ained jagada kahte põhirühma:

1. „Täpselt määratletud ained“: kindla kvalitatiivse ja kvantitatiivse koostisega ained, mida saab REACH-määruse VI lisa punkti 2 järgi nõutava identifitseerimisteabe alusel piisava täpsusega identifitseerida.
2. „UVCB-ained“: tundmatu või muutuva koostisega ained, kompleksed reaktsioonisaadused või bioloogilist päritolu materjalid. Neid aineid ei saa eespool nimetatud parameetrite alusel piisava täpsusega identifitseerida.

Täpselt määratletud ainete koostise varieeruvust näidatakse põhikoostisosade kontsentratsioonivahemikega. UVCB-ainete korral on varieeruvus suhteliselt suur ja/või halvasti prognoositav.

Võimalik on ka, et ainet ei saa selgesti määratleda ei täpselt määratletud ainenäidena (mitme koostisosa reaktsioonisaadused, iga koostisosa kontsentratsioonivahemik on suur) ega UVCB-ainena (väga muutlikud ja raskesti prognoositava koostisega reaktsioonisaadused). Sellisel juhul otsustab registreerija, kuidas on ainet identifitseerida kõige asjakohasem.

Täpselt määratletud ainete identifitseerimise ja nimetamise eeskirjad olenevad sellest, kas ainel on üks või mitu põhikoostisosa. Juhendis kirjeldatakse UVCB-määratluse alla kuuluvate eri tüüpi ainete mitmesuguseid identifitseerimise ja nimetamise eeskirju.

Mitmesuguste ainetüüpide põhiidentifikaatorite loetelud:

Tabel 4 ja Tabel 5. Näited on rühmitatud nii, et näitlikustada aine identifitseerimise sarnasusi ja erinevusi.

Tabel 4 ja Tabel 5 ei ole kõigi võimalike ainetüüpide täielik loetelu. Ainete selline identifitseerimis- ja nimetamiseeskirjade alusel rühmitamine ei ole ainete ametlik liigitussüsteem, vaid praktiline viis, kuidas rakendada erieeskirju ja leida käesolevast juhendist vajalikud juhised.

Tabel 4: Sarnaste täpselt määratletud ainete eri tüüpide näidete põhiidentifikaatorite rühmitamine

Tavalised omadused	Ainetüüpide näited	Peamised identifikaatorid
Keemilise koostise järgi täpselt määratletud ained [Peatükk 4.2]	Ühe koostisosaga ained, nt - benseen (95%) - nikkel (99%) [Peatükk 4.2.1]	Keemiline koostis: üks põhikoostisosa ≥ 80%: - põhikoostisosa keemiline olemus (keemiline nimetus, CAS-number, EÜ number jne) - tüüpiline kontsentratsioon ning kontsentratsioonipiirid
	Mitme koostisosaga aine, nt reaktsioonisaadused, näiteks 2-, 3- ja 4-klorotolueeni (à 30%) reaktsioonimass [Peatükk 4.2.2]	Keemiline koostis: põhikoostisosade segu (reaktsioonimass), igaüht vahemikus ≥ 10... < 80%: - iga põhikoostisosa keemiline olemus - iga koostisosa ja reaktsioonimassi tüüpiline kontsentratsioon ning kontsentratsioonipiirid
	Muu kui ainult keemilise koostise järgi määratletud ained, nt grafiit ja teemant [Peatükk 4.2.3]	Ühe ja mitme koostisosaga ainete keemiline koostis NING muud füüsikalised või iseloomulikud parameetrid: nt kristallimorfoloogia, (geoloogiline) mineraalne koostis jne.

Tabel 5. UVCB-ainete eri tüüpide näidete põhiidentifikaatorite rühmitamine

Tavalised omadused	Ainetüüpide näited	Peamised identifikaatorid			
		Allikas	Protsess	Muud identifikaatorid	
UVCB-ained (tundmatu või muutuva koostisega ained, kompleksed reaktsioonisaadused või bioloogilist päritolu materjalid) [Peatükk 4.3]	Bioloogilised materjalid (B)	Bioloogilistest materjalidest eraldatud ained, nt looduslikud lõhnaained, looduslikud õlid, looduslikud värvid ja pigmendid	- Taime või looma liik ja sugukond - Taime/looma osa	- Ekstraheerimine - Fraktsioonimine, kontsentreerimine, isoleerimine, puhastamine jne - <u>Derivaatimine*</u>	- Teadaolev või üldine koostis - Kromatograafilised ja muud jäljed - Standardiviited - Värvainindeks
		Kompleksed bioloogilised makromolekulid, nt ensüümid, valgud, DNA- või RNA-fragmendid, hormoonid, antibiootikumid			- Standardne ensüümiindeks - Geneetiline kood - Stereokonfiguratsioon - Füüsilised omadused - Funktsioon/aktiivsus - Struktuur - Aminohappejärjestus
	Kääritussaadused antibiootikumid, biopolümeerid, ensüümid, destilleerimisjääd (suhkru kääritamissaadused), soforolipiidid jne.	- Sööde - Kasutatav mikroorganism	- Kääritamine - Saaduste eraldamine - Puhastusetapid	- Saaduste liik: nt antibiootikumid, biopolümeerid, proteiinid jne - Teadaolev koostis	
Raskesti määratletava, kompleksse või muutuva	Raskesti prognoositava ja/või muutuva koostisega reaktsioonisegud	Lähtematerjalid	<u>Keemilise reaktsiooni tüüp</u> , nt esterdamine, alküülimine, hüdrogeenimine	- Teadaolev koostis - Kromatograafilised ja muud jäljed - Standardiviited	

	koostisega keemilised ja mineraalsed ained (UVC)	<ul style="list-style-type: none"> - Fraktsioonid või destillaadid, nt naftast saadud ained - Savi, nt bentoniit - Tõrvad 	<ul style="list-style-type: none"> - Toornafta - Kivisüsi/turvas - Mineraalgaasid - Mineraalid 	<ul style="list-style-type: none"> - Fraktsioonimine, destilleerimine - <u>Fraktsioonide muundamine</u> - Füüsikaline töötlemine - Jäägid 	<ul style="list-style-type: none"> - Piirvahemikud - Ahelapikkuse vahemik - Aromaatsete ja alifaatsete koostisosade suhe - Teadaolev koostis - Standardindeks
		Kontsentraadid või sulatised, nt metalsed mineraalid või mitmesuguste sulamis- või metallurgiaprotsesside jäägid, nt räbud	Maagid	<ul style="list-style-type: none"> - Sulatamine - Termiline töötlemine - Mitmesugused metallurgiaprotsessid 	<ul style="list-style-type: none"> - Teadaolev või üldine koostis - Metallide kontsentratsioon

* Allajoonitud protsessides sünteesitakse uus molekul

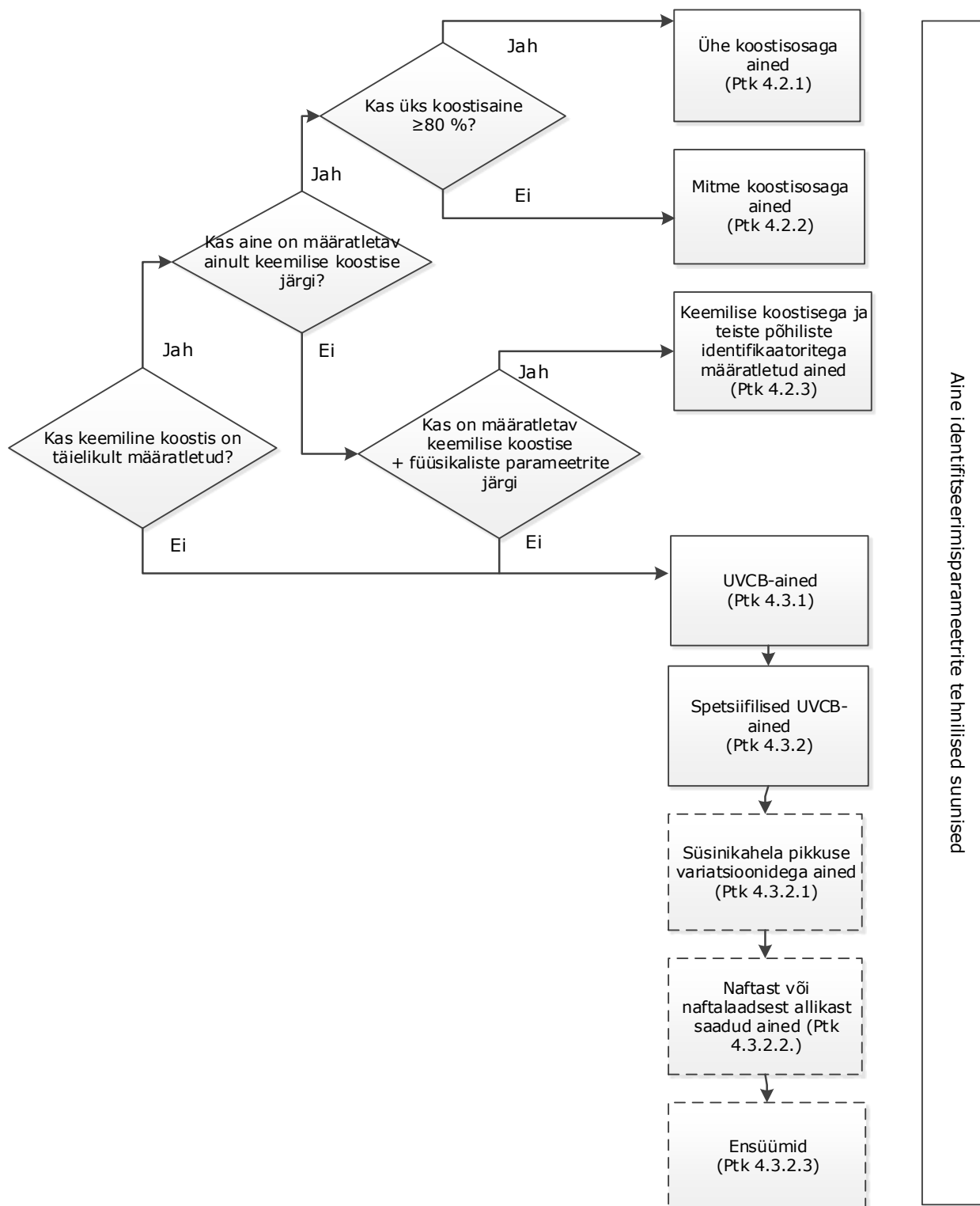
See peatükk on jaotatud punktideks, kus on eri tüüpi ainete identifitseerimise erijuhised. Asjakohaste peatükkide leidmise skeem: Joonis 1.

Skeem Joonis 1 põhineb üldreeglitel. Registreerija otsustab, mis peatükk on sobivaim, ja märgib aine identifitseerimisandmed seda tüüpi aine eeskirjade ja kriteeriumide järgi.

Põhireegel on, et aineid identifitseeritakse võimalikult palju keemilise koostise ja koostisosade olemuse alusel. Ainult siis, kui see ei ole tehniliselt teostatav, tuleb kasutada muid identifikaatoreid, nagu märgiti mitmesuguste UVCB-ainete kohta.

Kui registreerija ei kasuta juhendis esitatud aine identifitseerimise eeskirju ja kriteeriume, tuleb seda põhjendada. Aine identifitseerimine peab olema selge, jälgitav ja järjepidev.

Joonis 1: Juhendi vajaliku peatüki ja lisa leidmine mitmesuguste ainetüüpide korral



Vajaduse korral peab kirjeldama aine identifitseerimiseks ja, kui asjakohane, siis ka lisandite ja lisaainete identifitseerimiseks kasutatud analüütilisi meetodeid ja/või esitama nende kohta kirjandusviited (REACH-määruse VI lisa punktid 2.3.5, 2.3.6 ja 2.3.7). Teave peab olema piisav meetodite korratavuseks. Analüüsimeetodite kohta tuleb esitada ka tüüpilised tulemused.

4.2. Täpselt määratletud koostisega ained

Täpselt määratletud keemilise koostisega aineid nimetatakse põhikoostisosa(de) järgi. Teatud ainetüüpide korral ei piisa iseloomustamiseks ainult keemilisest koostisest. Sellistel juhtudel tuleb aine identifitseerimisele lisada mõned täiendavad füüsikalised parameetrid, mis on seotud keemiliste struktuuridega.

Tavaliselt on eesmärk identifitseerida aine kõik koostisosad nii, et nende koostisosade summa on 100%, kusjuures iga koostisosa vajab täielikku keemilist kirjeldust, sh struktuurivalemi teavet. Keemilise koostise järgi määratletud ainete korral eristatakse järgmisi koostisosi:

- Põhikoostisosa: aine koostisosa, mis ei ole lisaaine ega lisand, mis moodustab ainest olulise osa ning mida seetõttu kasutatakse aine nimetuses ja aine üksikasjalikul identifitseerimisel.
- Lisand: toodetud aines esinev soovimatu koostisosa. See võib pärineda näiteks lähtematerjalidest või tekkida tootmisprotsessi sekundaarsetel või puudulikel reaktsioonidel. Kuigi lisand esineb lõppaines, ei ole seda tahtlikult lisatud.
- Lisaaine: aine stabiliseerimiseks tahtlikult lisatud aine.

Kõiki koostisosi (v.a lisaained), mis ei ole ühe või mitme koostisosaga aine põhikoostisosa (põhikoostisosad), käsitatakse lisanditena. Kuigi mõnes sektoris nimetatakse neid nt jälgedeks ja mikrokogusteks, kasutatakse käesolevas juhendis üksnes nimetust „lisandid“.

Eri koostisosadel on erinevad identifitseerimisnõuded:

- Põhikoostisosad aitavad ainet nimetada ja need peavad olema täpselt määratletud.
- Lisandid ei mõjuta aine nimetust, kuid iga lisand tuleb täpselt identifitseerida.
- Lisaained aitavad määrata aine koostist (aga mitte ainet nimetada) ja need tuleb alati täpselt identifitseerida.
- Põhikoostisosade, lisandite ja lisaainete täpsed identifitseerimisandmed peavad koosnema IUPAC-nimetusest, keemilisest nimetusest, struktuurivalemist, EÜ numbrist ja CAS-numbrist, kui need on olemas.

Ühe või mitme koostisosaga ainete eristamisel kasutatakse järgmisi põhimõtteid:

- Ühe koostisosaga aine on aine, kus ühe koostisosa kontsentratsioon on vähemalt 80 massi-% ja see sisaldab kuni 20 massi-% lisandeid.

Ühe koostisosaga ainet nimetatakse ainsa põhikoostisosa järgi.

- Mitme koostisosaga aine on aine, kus mitme koostisosa kontsentratsioon on tavaliselt vahemikus $\geq 10 \dots < 80$ massi-%.

Mitme koostisosaga ainet nimetatakse vähemalt kahe põhikoostisosa reaktsioonimassiks.

Need põhimõtted on esitatud juhistena. Juhiste eiramine on lubatud, kui esitatakse usaldusväärne põhjendus.

Tavaliselt tuleb kirjeldada lisandeid, mille kontsentratsioon on $\geq 1\%$. Alati tuleb olenemata kontsentratsioonist kirjeldada ka lisandeid, mis on olulised klassifitseerimisel ja PBT-omaduste hindamisel¹⁰. Tavaliselt peab koostise teave olema esitatud nii, et kõigi koostisosade kontsentratsiooni summa on 100%.

REACH- ja CLP-määruse ning käesoleva juhendi tähenduses on lisaained ained, mida on vaja aine stabiilsuse säilitamiseks. Seega on lisaained aine olulised koostisosad ja need esitatakse koostise teabes. Samas nimetatakse mujal kui REACH-määruse ja käesoleva juhendi määratluses lisaaineks ka tahtlikult lisatud muude funktsioonidega aineid, nt pH-regulaatoreid ja värvaineid. Need tahtlikult lisatud ained ei ole aine kui sellise osad ning seetõttu neid koostise teabes arvesse ei võeta.

Segud, nagu need on määratletud REACH- ja CLP-määruses, on tahtlikult segatud ained ja seetõttu neid ei käsitata mitme koostisosaga ainetena.

Ühe koostisosaga ainete erijuhised on peatükis 4.2.1 ja mitme koostisosaga ainete erijuhised peatükis 4.2.2. Lisateavet vajavate ainete (nt teatud mineraalid) juhised on peatükis 4.2.3.

4.2.1. Ühe koostisosaga ained

Ühe koostisosaga aine on aine, mida määratletakse kvantitatiivse koostise alusel ja kus üht põhikoostisosa on vähemalt 80 massi-%.

Nimetamis põhimõte

Ühe koostisosaga ainet nimetatakse põhikoostisosa järgi. Põhimõtteliselt peab nimetus olema esitatud inglise keeles kooskõlas IUPAC-nomenklatuuri eeskirjadega (vt I lisa). Peale selle võib esitada ka muid rahvusvaheliselt heakskiidetud nimetusi.

Identifikaatorid

Ühe koostisosaga ainet identifitseeritakse põhikoostisosa keemilise nimetuse ja kõigi muude kättesaadavate identifikaatorite (sh molekul- ja struktuurivalemi või kristallstruktuuri) alusel. Identifitseeritakse kõik ühe koostisosaga aine lisandid ja/või lisaained. Tuleb esitada põhikoostisosa, lisandite ja/või lisaaainete tüüpiline kontsentratsioon (tüüpilised kontsentratsioonid) ja kontsentratsioonivahemik(ud). Kogu see teave peab olema põhjendatud analüütiliste andmetega.

Näide				
Põhikoostisosa	Sisaldus (%)	Lisand	Sisaldus (%)	Aine identifitseerimisandmed
<i>m</i> -ksüleen	91	<i>o</i> -ksüleen	5	<i>m</i> -ksüleen
<i>o</i> -ksüleen	87	<i>m</i> -ksüleen	10	<i>o</i> -ksüleen

Tavaliselt on põhikoostisosa > 80% ja seda tuleb kõikide eespool nimetatud parameetrite abil täielikult kirjeldada. Põhikoostisosa ja lisandite tüüpiliste kontsentratsioonide summa peaks olema 100%. Lisandeid kontsentratsioonis > 1% tuleb kirjeldada nimetuse ja identifikaatorite

¹⁰ Lisateave PBT-omaduste hindamise ning asjakohaste kriteeriumide kohta on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi peatükis R11 „PBT-omaduste hindamine“.

abil. Klassifitseerimiseks ja/või PBT-omaduste hindamiseks¹¹ asjakohaseid lisandeid tuleb nende kontsentratsioonist olenemata alati kirjeldada samade identifikaatoritega.

Et kohaldada 80% reeglit nõuetekohaselt, ei tohi tahtlikult lisatud aineid (nt pH-regulaatoreid ega värvaineid) koostise teabes arvesse võtta.

80% reeglit kasutatakse uutest ainetest teatamise korral (direktiiv 67/548/EMÜ) ja seda kohaldatakse REACH-määruses. Lahknevus sellest 80% reeglist peab siiski olema põhjendatud. Põhjendatud eiramine on näiteks järgmine:

- kui põhikoostisosa on < 80%, kuid aine kohta saab näidata, et sellel on samasugused füüsikalised-keemilised omadused ning ohuprofiil kui muudel ühe koostisosaga ainetel, millel on samasugune olemus ja mis vastavad 80% reeglile;
- põhikoostisosa ja lisandite kontsentratsioonivahemikud kattuvad 80% kriteeriumiga ning põhikoostisosa on ainult mõnikord ≤ 80%.

Näited

Aine	Põhikoostisosa	Sisalduse ülempiir (%)	Tüüpiline sisaldus (%)	Sisalduse alampiir (%)	Lisand	Sisalduse ülempiir (%)	Tüüpiline sisaldus (%)	Sisalduse alampiir (%)	Aine identifitseerimisandmed
1	<i>o</i> -ksüleen	90	85	65	<i>m</i> -ksüleen	35	15	10	<i>o</i> -ksüleen
2	<i>o</i> -ksüleen <i>m</i> -ksüleen	90 35	85 15	65 10	<i>p</i> -ksüleen	5	4	1	<i>o</i> -ksüleen

Põhikoostisosa ja lisandite kontsentratsioonivahemike alusel võib 1. ja 2. ainet pidada kahest põhikoostisosast (*o*- ja *m*-ksüleenist) koosnevaks mitme koostisosaga aineks või ühe koostisosaga aineks. Sellisel juhul tuleb mõlemat ainet käsitada ühe koostisosaga ainega eelkõige seetõttu, et *o*-ksüleeni on tavaliselt > 80%.

Analüütiline teave

Ühest koostisosast koosneva aine koostisosade ja lisandite identsuse kinnitamiseks tuleb esitada piisavad kvalitatiivsed andmed. Aine identifitseerimisandmete kinnitamiseks võivad sobida mitmed spektroskoopiameetodid, näiteks UV- ja nähtava valguse absorptsioonspektroskoopia, infrapunaspektroskoopia, tuumamagnetresonantsspektroskoopia ja massispektroskoopia. Anorgaaniliste ainete või orgaaniliste ja/või metallorgaaniliste ainete korral, mida saab avastada/mõõta kristallstruktuuri abil, on enamikul juhtudel eelistatav kasutada röntgendifraktsiooni.

Aine koostise kinnitamiseks tuleb esitada kvantitatiivsed meetodid, nt gaasikromatograafia või kõrgefektiivne vedelikkromatograafia koos avastamismeetodiga. Anorgaaniliste ainete korral võib rohkem sobida röntgendifraktsioon, röntgenfluorestsents, aatomabsorptsioonspektroskoopia, induktiivsidestatud plasma optiline emissioonspektroskoopia või induktiivsidestatud plasma massispektrometria. Vajaduse korral tuleb kasutada ka muid valideeritud koostisosade eraldamismeetodeid.

Analüüsimeetodite kirjeldus peab sisaldama järgitud katseprotokolle ja esitatud tulemuste tõlgendust.

Analüüsimeetodeid arendatakse ja tõhustatakse pidevalt. Seetõttu vastutab registreerija asjakohaste analüütiliste andmete esitamise eest.

¹¹ Lisateave PBT-omaduste hindamise ning asjakohaste kriteeriumide kohta on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi peatükis R11 „PBT-omaduste hindamine“.

4.2.2. Mitme koostisosaga ained

Mitme koostisosaga aine on kvantitatiivse koostise järgi määratletud aine, milles on mitu põhikoostisosa kontsentratsioonis $\geq 10\% < 80$ massi-%. Mitme koostisosaga aine tekib tootmisprotsessi tulemusena¹².

REACH-määrus nõuab aine registreerimist toodetaval kujul. Kui toodetakse mitme koostisosaga ainet, tuleb see registreerida^{13 14}. Iga juhtumi puhul otsustatakse eraldi, mis määral tähendavad aine tootmise etapid tootmist. Ei ole vaja katsetada ainet kui sellist, kui aine ohuprofiili saab piisava täpsusega kirjeldada üksikkoostisosade teabe alusel.

Nimetamispõhimõte

Mitme koostisosaga ainet nimetatakse aine kui sellise põhikoostisosade reaktsioonimassi järgi, st mitte aine tootmiseks vajalike lähteainete järgi. Üldine vorming on järgmine. Üldine vorming on „[põhikoostisosade nimetuste] reaktsioonimass“. On soovitatav, et koostisosade loetelu oleks esitatud tähestiku järjekorras ja eraldatud sidesõnaga „ja“. Nimetuses tuleb loetleda ainult tüüpiliselt üle $\geq 10\%$ sisalduvad põhikoostisosad. Põhimõtteliselt peavad nimetused olema esitatud inglise keeles kooskõlas IUPAC-nomenklatuuri eeskirjadega. Peale selle võib esitada ka muid rahvusvaheliselt heakskiidetud nimetusi.

Identifikaatorid

Mitme koostisosaga ainet identifitseeritakse aine keemilise nimetuse ja kõigi muude kättesaadavate tunnuste ning koostisosade keemilise identiteedi (sh molekuli- ja struktuurivalemi või kristallstruktuuri(de)) järgi. Identifitseerida tuleb kõik mitme koostisosaga aine lisandid ja/või lisaained. Tuleb esitada koostisosade, lisandite ja/või lisaainete tüüpiline kontsentratsioon (tüüpilised kontsentratsioonid) ja kontsentratsioonivahemik(ud). Kogu see teave peab olema põhjendatud analüütiliste andmetega.

Näide				
Põhikoostisosad	Sisaldus (%)	Lisand	Sisaldus (%)	Aine identifitseerimisandmed
m-ksüleen	50	p-ksüleen	5	m-ksüleeni ja o-ksüleeni reaktsioonimass
o-ksüleen	45			

Mitme koostisosaga ainete korral on aine identifitseerimiseks vaja teada keemilist koostist ja vähemalt üht põhikoostisosa. Aine keemiline koostis on tüüpiliste väärtuste ja vahemikena prognoositav. Loetletakse kõik põhikoostisosad koos kõigi asjakohaste parameetritega. Põhikoostisosade ($\geq 10\%$) ja lisandite ($< 10\%$) tüüpilise kontsentratsiooni summa peaks olema 100%.

Et identifitseerida mitme koostisosaga ainet nõuetekohaselt, ei tohi tahtlikult lisatud aineid (nt pH-regulaatoreid ega värvaineid) koostise teabes arvesse võtta.

¹² Segu ja mitut koostisosa sisaldava aine erinevus on selles, et segu on saadud kahe või enama aine segamisel ilma keemilise reaktsioonita. Mitme koostisosaga aine tekib keemilise reaktsiooni tulemusena.

Paljud ained on REACH-registreerimise kohustusest vabastatud (nt IV lisas loetletud ained). See lähenemisviis ei kehti paljude konkreetse ainete, näiteks mineraalide korral (üksikasjalik teave: vt peatükk 7.5).

Lisandeid kontsentratsioonis $\geq 1\%$ tuleb kirjeldada nimetuse ja kõigi olemasolevate identifikaatorite alusel. Klassifitseerimiseks ja/või PBT-omaduste hindamiseks asjakohaseid lisandeid tuleb nende kontsentratsioonist olenemata alati kirjeldada samade identifikaatoritega.

Näide								
Põhikoostisosa	Sisalduse ülempiir (%)	Tüüpiline sisaldus (%)	Sisalduse alampiir (%)	Lisand	Sisalduse ülempiir (%)	Tüüpiline sisaldus (%)	Sisalduse alampiir (%)	Aine identifitseerimisandmed
aniliin	90	75	65	fenantreen	5	4	1	Aniliini ja naftaleeni reaktsioonimass
naftaleen	35	20	10					

Selle juhendi eeskirjade järgi on see aine mitme koostisosaga aine. Kuigi ühe koostisosa kontsentratsioonivahemik võib olla $> 80\%$, on see üksnes ülempiir ja tüüpiline sisaldus on $< 80\%$.

Kui mitme koostisosaga aine peamine koostisosa on $\geq 80\%$ või $< 10\%$ (massi-%), tuleb seda lahknepust põhjendada. Põhjendatud lahknepuse võimalik näide:

- koostisosa on ainult aeg-ajalt $\geq 80\%$ või $< 10\%$.

Näiteks kui aine sisaldab kaht koostisosa – üht 85% ja teist 10% – ning ülejäänud 5% on lisandid. Mõlemad koostisosad aitavad kaasa ja on olulised aine soovitud tehnilise mõju saavutamisel. Sellisel juhul võib ainet kirjeldada kahe koostisosaga aina, kuigi üht koostisosa on $> 80\%$.

Analüütiline teave

Mitme koostisosa sisaldava aine koostisosade ja lisandite identifitseerimise kinnitamiseks tuleb esitada piisavad kvalitatiivsed andmed. Aine identifitseerimisandmete kinnitamiseks võivad sobida mitmed spektroskoopiameetodid, näiteks UV- ja nähtava valguse absorptsioonspektroskoopia, infrapunaspektroskoopia, tuumamagnetresonantspektroskoopia ja massispektroskoopia. Anorgaaniliste ainete või orgaaniliste ja/või metallorgaaniliste ainete korral, mida saab avastada/mõõta kristallstruktuuri abil, on enamikul juhtudel eelistatav kasutada röntgendifraktsiooni.

Aine koostise kinnitamiseks tuleb esitada kvantitatiivsed meetodid, nt gaasikromatograafia või kõrgefektiivne vedelikkromatograafia koos avastamismeetodiga. Anorgaaniliste ainete korral võib rohkem sobida röntgendifraktsioon, röntgenfluorestsents, aatomabsorptsioonspektroskoopia, induktiivsidestatud plasma optiline emissioonspektroskoopia või induktiivsidestatud plasma massispektromeetria. Vajaduse korral tuleb kasutada ka muid valideeritud koostisosade eraldamismeetodeid.

Analüüsimeetodite kirjeldus peab sisaldama järgitud katseprotokolle ja esitatud tulemuste tõlgendust.

Analüüsimeetodeid arendatakse ja tõhustatakse pidevalt. Seetõttu vastutab registreerija asjakohaste analüütiliste andmete esitamise eest.

Mitme koostisosaga aine üksikkoostisosade registreerimine

Üldiselt tuleb mitme koostisosaga aine registreerimisel ainet identifitseerida mitme koostisosaga ainete lähenemisviisi abil. Vajaduse korral saab seda eirata ja registreerida ka üksikkoostisosi, kui see on põhjendatud. Tavalisest üksikkoostisosade alusel aine identifitseerimisest (ja samalaadsest registreerimisest, kui see on asjakohane) võib kõrvale

kalduda järgmistel juhtudel:

- nõutav teave ei vähene;
- üksikkoostisosade registreerimise põhjendamiseks on piisavalt olemasolevaid andmeid, st selle lähenemisviisiga ei kaasne rohkem loomkatseid selgroogsetega kui tavalise lähenemisviisiga;
- üksikkoostisosade registreerimine on tõhusam lahendus (st välditakse samadest koostisosadest koosnevate ainete mitmekordset registreerimist);
- esitatakse konkreetsete reaktsioonimasside koostise andmed.

Sellist pakutavat paindlikkust ei tohi nõutava teabe vältimiseks kuritarvitada: näiteks mitme koostisosaga aine „(C+D)“ korral, mida toodetakse 1200 tonni aastas ja mille koostises on 50% ainet C ja 50% ainet D, tähendaks selline lähenemisviis järgmise teabe kahekordset registreerimist.

Aine C

- Kogus: 600 t/a
- Koguse > 1000 t/a korral nõutav teave (X lisa)

Aine D

- Kogus: 600 t/a
- Koguse > 1000 t/a korral nõutav teave (X lisa)

Seda lähenemisviisi tuleb kasutada koos REACH-nõudega liita sama juriidilise isiku sama aine kogused. Võimalik on esitada nõutav teave nii:

- liita kõik üksikkoostisosade kogused (vastavalt nende sisaldusele aines);
- viidata suurimale kogusele, mis sisaldab seda koostisosa.

Nõutava teabe tingimused tuleb määrata suurima tulemuse alusel. Koguse teatamisel tuleb lähtuda iga üksikkoostisosa summaarsest kogusest. Kaks järgmist lihtsustatud näidet selgitavad, kuidas seda lähenemisviisi kasutada praktikas.

Näide 1

Mitme koostisosaga aine „C+D+E“ on saadud sama juriidilise isiku teostatud protsessiga, milles tekivad järgmised ained:

- 1. aine: 50% C ja 25% D ja 25% E, 1100 t/a.
- 2. aine: 50% C ja 50% D, 500 t/a.

Samuti on sellisel juhul lähtepunktiks reaktsioonisaadus: need kaks ainet tuleb registreerida mitme koostisosaga ainetena. Kui registreeritakse üksikkoostisosi¹⁵, tuleb teha järgmist.

Ainest D teatamine tähendab sellisel juhul järgmist:

- Kogus: $(25\% \times 1100) + (50\% \times 500) = 525$ t/a.

Teabevajaduse määramisel lähtutakse kõige rangemast nõudest. Sellisel juhul: >1000 t/a, sest mitme koostisosaga aine „C+D+E“ summaarne kogus on üle 1000 t/a.

Märkus: näite ained C ja E tuleb asjakohaselt registreerida.

¹⁵ Näidete eesmärk on üksnes illustreerida nõutava teabe leidmist ning kogustest teatamist. Näited ei käsitle lähenemisviisi põhjendatust.

Näide 2

Mitme koostisosaga aine „G+H+I” on saadud sama juriidilise isiku teostatud protsessiga, milles tekivad järgmised ained:

- 3. aine: 65% G ja 15% H ja 20% I, 90 t/a.
- 4. aine: 60% G ja 40% H, 90 t/a.

Ainest G teatamine:

- Kogus: $(65\% \times 90) + (60\% \times 90) = 112,5$ t/a.

Teabevajaduse määramisel lähtutakse kõige rangemast nõudest. Sellisel juhul: > 100 t/a, sest koostisosa G üldkogus on üle 100 t/a.

Märkus: näite ained H ja I tuleb asjakohaselt registreerida.

Peale nõutava teabe leidmise tuleb kaaluda ka võimalike uute uuringute arvu (loomkatsed selgroogsetega). Enne strateegia valimist peavad võimalikud registreerijad kaaluma, kas uuringud (loomkatsed selgroogsetega) on piisavad ning kas kavandatud paindlikkus tähendaks vähem või rohkem uusi katseid (selgroogsetega). Kasutada tuleb strateegiat, mille abil välditakse uusi katseid (selgroogsetega).

Kahtluse korral tuleb aine identifitseerimisandmed registreerida alati selle toodetud kujul.

4.2.3. Määratletud keemilise koostisega ained ja muud peamised identifikaatorid

Teatud aineid (nt anorgaanilisi mineraale), mida saab identifitseerida nende keemilise koostise järgi, tuleb täiendavalt täpsustada lisaidentifikaatorite abil, mis identifitseerib neid üheselt. Need ained võivad olla kas ühe või mitme koostisosaga ained, kuid peale aine eespool kirjeldatud identifitseerimisparameetrite tuleb aine identifitseerimisandmete üheseks registreerimiseks kasutada ka teisi põhiidentifikaatoreid.

Näited

Mõned mittemetallilised ainulaadse struktuuriga mineraalid (looduslikud või tehislükud) vajavad aine üheseks identifitseerimiseks ka morfoloogia ja mineraalse koostise kirjeldamist: näiteks kaoliin (CAS 1332-58-7) koosneb kaoliniidist, kaaliumalumiiniumsilikaadist, päevakivist ja kvartsist.

„Nanovormides” sisalduva aine REACH-määruse kohaste konkreetsete kohustuste täitmise juhend on esitatud *nanovormide lisa registreerimisjuhendile ja ainete identifitseerimise juhendile*¹⁶. Dokumendis selgitatakse nanovormide identifitseerimise ja iseloomustamise eriküsimusi.

Nimetamispeähimõte

Põhimõtteliselt tuleb järgida sama nimetamise tava kui ühe koostisosaga ainete (vt peatükk 4.2.1) või mitme koostisosaga ainete (vt peatükk 4.2.2) korral.

Anorgaaniliste mineraalide korral saab koostisosade kohta kasutada mineraloogilisi nimetusi: näiteks apatiit on mitme koostisosaga aine, mis koosneb fosfaatmineraalidest, mida tavaliselt nimetatakse hüdroksüülapatiidiks, fluorapatiidiks ja kloorapatiidiks, sest nende kristallis

¹⁶Nanovormide lisa registreerimisjuhendile ja ainete identifitseerimise juhendile:
<https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

sisaldub suures kontsentratsioonis OH⁻, F⁻ ja Cl⁻-ioone. Kolme tavalisima liigi segu valem on Ca₅(PO₄)₃(OH,F,Cl). Teine näide on aragoniit, mis on kaltsiumkarbonaadi eriline kristallvorm.

Identifikaatorid

Põhimõtteliselt tuleb järgida sama identifitseerimise ja nimetamise tava kui ühe (vt peatükk 4.2.1) või mitme koostisosaga ainete (vt peatükk 4.2.2) korral. Muud lisatavad spetsiifilised peamised identifitseerimisparameetrid olenevad aineist. Muud põhiidentifikaatorid võivad olla elementkoostis ja spektraalandmed, röntgendifraktsioonanalüüsiga määratud kristallstruktuur, infrapunaabsorptsiooni piigid, pundumisindeks, katioonivahetusvõime või muud füüsikalised ja keemilised omadused.

Mineraalide korral on oluline mineraloogilise koostise ja kristallstruktuuri määramiseks ühendada elemendilise koostise tulemused ja spektraalandmed. Seejärel kinnitatakse seda iseloomulike füüsikalise-keemiliste omadustega, nagu kristallstruktuur (mis määrati röntgendifraktsiooni abil), kuju, kõvadus, punduvus, tihedus ja/või eripindala.

Teatud mineraalide korral võib esitada muid põhiidentifikaatoreid, sest mineraalidel võivad olla iseloomulikud füüsikalise-keemilised omadused, mille nimetamisel on identifitseerimine täielik: näiteks talgi väga väike kõvadus, bentoniidi punduvus, diatomiidi vorm, barüüdi väga suur tihedus ja eripindala (lämmastiku adsorptsiooniga).

Analüütiline teave

Põhikriteerium on, et aine struktuuri kinnitamiseks tuleb esitada kogu vajalik teave. Esitama peab sama analüütilise teabe kui ühe (vt peatükk 4.2.1) või mitme koostisosaga ainete (vt peatükk 4.2.2) korral.

4.3. UVCB-ained

Tundmatu või muutuva koostisega aineid, kompleksseid reaktsioonisaadusi või bioloogilist päritolu materjale^{17, 18, 19} ehk UVCB-aineid ei saa nende keemilise koostise tõttu piisava täpsusega identifitseerida järgmistel põhjustel:

- koostisosade arv on suhteliselt suur ja/või
- koostis on suures osas tundmatu ja/või
- koostise varieeruvus on suhteliselt suur või halvasti ennustatav.

Nendel põhjustel vajavad UVCB-ained identifitseerimiseks ka muud liiki teavet peale selle, mis on teada nende keemilise koostise kohta.

Tabel 5 on kirjeldatud, et eri tüüpi UVCB-ainete põhiidentifikaatorid on seotud aine päritolu ja kasutatud protsessiga, või siis kuuluvad need muude „peamiste identifikaatorite“ rühma (nt „kromatograafilised või muud jäljed“). Tabel 5 esitatud identifikaatorite arv ja tüüp illustreerib tüüpide varieeruvust ja on üksnes näitlik. Kui näiteks kompleksse reaktsioonisaaduse või bioloogilise päritoluga aine keemiline koostis on teada, tuleb aine identifitseerida vastavalt kas ühe koostisosaga aine või mitme koostisosaga aine. Aine

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, lk 403–416.

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

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

UVCB-ainena määratlemise tulemusel tekib allika või protsessi mis tahes oluliste muudatuste tõttu tõenäoliselt teistsugune aine, mis tuleb omakorda registreerida. Kui reaktsioonisegu on määratletud mitme koostisosaga ainenäol, võidakse ainet saada eri allikast ja/või eri protsessidest, kui lõpliku aine koostis jääb vajalikesse piiridesse. Siis ei ole ainet uuesti registreerida vaja.

UVCB-ainete üldjuhised on peatükis 4.3.1. Peatükis 4.3.2 on konkreetsed juhised muutuva süsinikahela pikkusega ainete ning naftast või naftalaadsetest allikatest ja ensüümidest saadud ainete kui teatavat liiki UVCB-ainete kohta.

4.3.1. UVCB-ainete üldjuhised

Selles juhendi peatükis esitatakse üldjuhised, kuidas kasutada UVCB-ainete identifitseerimisel teatavaid peamisi identifikaatoreid lisaks REACH-määruse VI lisa (punktis 2) nimetatud aine identifitseerimisparameetritele.

Keemilise koostise teave

UVCB-aineid kas ei ole võimalik koostisosade IUPAC-nimetuse alusel üheselt kindlaks määrata, sest kõiki koostisosi ei saa identifitseerida, või siis võidakse neid kirjeldada üldiselt, sest täpne kirjeldus ei ole täpse koostise varieeruvuse tõttu võimalik. Koostisosi ja lisandeid ei eristata ning seetõttu ei ole nimetused „põhikoostisosad“ ja „lisandid“ UVCB-ainete korral asjakohased.

Tuleb siiski esitada koostisosade keemiline koostis ja identifitseerimisandmed, kui need on teada. Koostise kirjelduse võib sageli esitada üldisel viisil, nt „lineaarsed C8–C16-rasvhapped“ või „alkoholetoksülaadid C10–C14-alkoholidega ja 4–10 etoksülaadiüksusega“. Samuti võib esitada keemilise koostise teavet tuntud võrdlusproovide või standardite alusel. Sageli saab samuti kasutada indekseid ja olemasolevaid koode. Muu üldine koostise teave võib sisaldada nn sõrmejälgi ehk näiteks kromatograafilisi või spektraalkujutisi, mis näitavad piikide iseloomulikku jaotumismustrit.

UVCB-aine korral tuleb ingliskeelse IUPAC-nimetuse, tüüpilise kontsentratsioonide ja kontsentratsioonivahemikega märkida kõik koostisosad, mis esinevad kontsentratsioonis $\geq 10\%$, ja kõik muud teadaolevad koostisosad, mille kontsentratsioon on $< 10\%$.

Lisaks peate võimaluse korral esitama iga koostisosa kohta numbrilise identifikaatori (CAS-number ja/või EÜ või loetelunumber).

Koostisosi, mida ei saa üksikult identifitseerida, kirjeldatakse keemilise olemuse järgi rühmadena. Sellisel juhul peab iga rühma kohta täpsustama vähemalt keemilise nimetuse, tüüpilise kontsentratsiooni ja kontsentratsioonivahemiku. Lisaks peate võimaluse korral esitama molekul- ja struktuurivalemi teabe.

Klassifitseerimiseks ja/või PBT-omaduste hindamiseks asjakohaseid koostisosi²⁰ tuleb alati kirjeldada samade identifikaatoritega, olenemata nende kontsentratsioonist.

Tundmatuid koostisosi, mis ei mõjuta klassifitseerimist, tuleb nii palju kui võimalik identifitseerida nende keemiliste omaduste üldise kirjelduse alusel. Lisaained tuleb täielikult kirjeldada nii, nagu siin juhendis selgitati täpselt määratletud ainete kohta.

²⁰ Lisateave PBT-omaduste hindamise ning asjakohaste kriteeriumide kohta on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi peatükis R11: „PBT-omaduste hindamine“.

Peamised identifitseerimisparameetrid – nimetus, allikas ja protsess

Ainuüksi keemilisest koostisest aine identifitseerimiseks ei piisa; ainet peab tavaliselt identifitseerima nimetuse, päritolu või allika ning tootmisprotsessi kirjelduse järgi. Peamised identifikaatorid võivad olla ka muud aine omadused – nii olulised üldised identifikaatorid (nt keemistemperatuur) kui ka konkreetsete ainerühmade iseloomulikud identifikaatorid (nt ensüümide katalüütiline aktiivsus).

1. *Nimetamispõhimõte*

Tavaliselt koosneb UVCB-aine nimetus üldisel kujul nimetatud allikast ja protsessist: esiteks allikas ja seejärel protsess(id).

- Aine, mida saadakse bioloogilistest allikatest, identifitseeritakse liiginimetuse järgi.
- Aine, mida saadakse mittebioloogilistest allikatest, identifitseeritakse lähteainete järgi.
- Protsessid identifitseeritakse keemilise reaktsiooni tüübi järgi, kui see hõlmab uute molekulide sünteesi, või rafineerimisetapi tüübi alusel, näiteks ekstraheerimine, fraktsioonimine ja kontsentreerimine, või siis jäägina.

Näited	
EÜ number	EÜ nimetus
296-358-2	Lavendel, Lavandula hybrida, ekstrakt, atsetüülitud
307-507-9	Lavendel, Lavandula latifolia, ekstrakt, sulfureeritud, pallaadiumisool

EÜ loetelus on kasutatud reaktsioonisaaduste korral mitut vormingut, näiteks järgmisi:

- EINECS: peamine lähteaine, muu(de) lähteaine(te) reaktsioonisaadus(ed)
- ELINCS: lähteaine(te) reaktsioonisaadus(ed)

Näited	
EÜ number	EÜ nimetus
232-341-8	Lämmastikushape, 4-metüül-1,3-benseendiamiinhüdrokloriidiga reaktsiooni saadused
263-151-3	Kookosrasvhapped, dietüleentriamiiniga reaktsiooni saadused
400-160-5	Tallõlirasvhapete, dietanoolamiini ja boorhappe reaktsioonisaadused
428-190-4	Järgmiste ainete reaktsioonisaadus: 2,4-diamino-6-[2-(2-metüül-1H-imidasool-1-üül)etüül]-1,3,5-triasiin ja tsüaanuurhape

Siin juhendis esitatakse reaktsioonisaadus(t)e nimetus üldiselt kujul „[lähteainete nimetused] reaktsioonisaadus“. Põhimõtteliselt peavad nimetused olema esitatud inglise keeles kooskõlas IUPAC-nomenklatuuri eeskirjadega. Peale selle võib esitada ka muid rahvusvaheliselt heakskiidetud nimetusi. Soovitatav on asendada nimetuses sõna „reaktsioon“ üldisel kujul kirjeldatud konkreetset tüüpi reaktsiooniga, nt esterdamine või soola moodustumine jms (vt nelja konkreetse UVCB-ainete alamklassi juhised allpool).

2. Allikas

Allikad jagunevad kahte rühma.

2.1. Bioloogilise päritoluga allikad

Bioloogilise päritoluga aineid tuleb määratleda perekonna, liigi ja sugukonna järgi, nt *Pinus cembra*, *Pinaceae* – *Pinus* (perekond), *cembra* (liik), *Pinaceae* (sugukond) –, ning vajaduse korral tüve või geneetilise tüübi järgi. Vajaduse korral tuleb nimetada ka aine eraldamiseks kasutatud kude või organismiosa, nt luuüdi, kõhunääre või vars, seemned või juured.

Näited	
EÜ number	EÜ nimetus
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ekstrakt EÜ kirjeldus Ekstraktiivained ja nende füüsikaliselt modifitseeritud derivaadid, nagu tinktuurid, tahked valmistised, absoluteeritud valmistised, eeterlikud õlid, õlivaigud, terpeenid, terpeenivabad fraktsioonid, destillaadid, jäägid jne, mis on saadud organismist <i>Saccharomyces cerevisiae</i> , <i>Saccharomycelaceae</i> .
296-350-9	<i>Arnica mexicana</i> , ekstrakt EÜ kirjeldus Ekstraktiivained ja nende füüsikaliselt modifitseeritud derivaadid nagu tinktuurid, tahked valmistised, absoluteeritud valmistised, eeterlikud õlid, õlivaigud, terpeenid, terpeenivabad fraktsioonid, destillaadid, jäägid jne, mis on saadud organismist <i>Arnica mexicana</i> , <i>Compositae</i> .

2.2. Keemilised või mineraalsed allikad

Keemiliste reaktsioonide saaduste korral tuleb lähteaineid kirjeldada ingliskeelse IUPAC-nimetusega. Mineraalseid allikaid tuleb kirjeldada üldnimetustega, nt fosfaatmaagid, boksiit, kaoliinit, mineraalgaas, kivisüsi, turvas.

3. Protsess

Protsesse identifitseeritakse keemilise reaktsiooni tüübi alusel, kui see hõlmab uute molekulide sünteesi, või rafineerimisetapi tüübi alusel, nt ekstraheerimine, fraktsioonimine ja kontsentreerimine, või siis jäägina.

Mõne aine, nt keemiliste derivaatide korral tuleb protsessi kirjeldada rafineerimise ja sünteesi kombinatsioonina.

3.1 Süntees

Lähtematerjalide vahel toimub teatav keemiline või biokeemiline reaktsioon, mille tulemusel tekib aine. Näiteks Grignardi reaktsioon, sulfoonimine, ensümaatiline lõhustamine proteaasi või lipaasi abil jne. Paljud derivaatimisreaktsioonid kuuluvad samuti sellesse liiki.

Uute sünteesitud ainete korral, mille keemilist koostist ei ole võimalik esitada, on lähteained peamine tunnus koos reaktsiooni spetsifikatsiooniga, st keemilise reaktsiooni liigiga. Keemilise reaktsiooni liik viitab aines eeldatavasti esinevatele molekulidele. Lõplikke keemilisi reaktsioone on mitut liiki: hüdrolüüs, esterdamine, alküülimine, kloorimine jne. See annab üksnes üldist teavet võimalike toodetavate ainete kohta ja seetõttu on sageli aine täielikuks iseloomustamiseks ja identifitseerimiseks vaja esitada ka kromatograafiline jälg.

Näited	
EÜ number	EÜ nimetus
294-801-4	Linaseemneõli, epoksiiditud, tetraetüleenpentamiiniga reaktsiooni saadused
401-530-9	(2-hüdroksü-4-(3-propenoksü)bensofenooni ja trietoksüsilaani) ning (ränioksiidi ja metüültrimetoksüsilaani hüdrolüüsi saaduste) reaktsiooni saadus

3.2 Rafineerimine

Loodusliku või mineraalse päritoluga ainete töötlemiseks saab kasutada mitmesuguseid rafineerimisprotsesse, milles koostisosade keemiline olemus säilib, aga kontsentratsioon muutub. Rafineerimine on näiteks taimsete kudede külmtöötlemine ja seejärel alkoholiga ekstraheerimine.

Rafineerimist saab määratleda täpsemalt, näiteks et kasutatakse ekstraheerimist. Aine identifitseerimine oleneb protsessi tüübist:

- Füüsikaliste meetoditega, nt rafineerimise või fraktsioonimisega saadud ainete korral tuleb kirjeldada fraktsiooni piirsaldust ja parameetreid (nt molekulisuurus, ahelapikkus, keemistemperatuur, lenduvusvahemik).
- Kontsentreerimisega saadud ainete, nt metallurgiaprotsesside saaduste, tsentrifuugitud sademete, filtreerimisjääkide korral tuleb kontsentreerimisetappi kirjeldada koos saadud aine üldkoostisega, võrreldes seda lähteainega.

Näited	
EÜ number	EÜ nimetus
408-250-6	Volframorgaanilise ühendi kontsentraat (volframheksakloriidi ning 2-metüülpropaan-2-ooli, nonüülfelooni ja pentaan-2,4-diooni reaktsiooni saadused)

- Teatud reaktsioonijääkide, nt rübude, tõrvade ja kõrgkeevate destillaatide korral tuleb protsessi kirjeldada koos lõppaine üldkoostisega.

Näited	
EÜ number	EÜ nimetus
283-659-9	Tina, sulatamisjääd EÜ kirjeldus Aine, mis saadakse esmastest või teisestest allikatest, sealhulgas taaskasutatud tööstuslikest vaheainetest saadud tina ja selle sulamite kasutamisest ja tootmisest. Koosneb peamiselt tinaühenditest ning võib sisaldada muude mitteraudmetallide jääke ja nende ühendeid.
293-693-6	Sojajahu, proteiini eraldusjääd Jääd EÜ kirjeldus Peamiselt sahhariididest koosnev kõrvalsaadus, mis on saadud rasvatustatud sojaubadest etanooliga ekstraheerimise teel.

- Ekstraktide korral tuleb nimetada ekstraheerimismeetod, ekstraheerimislahusti ja muud olulised tingimused, nt temperatuur või temperatuurivahemik.
- Kombineeritud töötlemise korral tuleb peale allika andmete kirjeldada (üldiselt) ka protsessi iga etappi. Kombineeritud töötlemist kasutatakse sageli keemilisel derivaatimisel.

Näited:

- Taim kõigepealt ekstraheeritakse, seejärel destilleeritakse ekstrakt ja taimeekstrakti destilleeritud fraktsiooni kasutatakse keemilisel derivaatimisel. Saadud ainet võidakse puhastada. Puhastatud toote keemiline koostis võib lõpuks olla täpselt määratletud ning ainet ei ole vaja pidada UVCB-aineks. Kui toodet pidada siiski UVCB-aineks, võib kombineeritud töötlemise saaduse kirjeldus olla „taimeekstrakti destilleeritud fraktsiooni puhastatud keemiline derivaat“.
- Kui ekstrakti edasine töötlemine hõlmab ainult füüsikalist derivaatimist, muutub koostis, kuid ei toimu uute molekulide tahtlikku sünteesi. Koostis siiski muutub ja seega tekib eri aine, nt taimeekstrakti destillaat või sade.
- Naftatoodete tootmisel kasutatakse sageli nii keemilist derivatsiooni kui ka fraktsioonimist: näiteks nafta destilleerimisele järgneva krakkimise tulemusel tekib lähteaine fraktsioon ja tekivad uued molekulid. Seega tuleb sellisel juhul identifitseerida mõlemat tüüpi protsessid või kirjeldada destillaati krakkimise lähteainena. Eelkõige kehtib see selliste naftaderivaatide korral, mis saadakse sageli mitme kombineeritud protsessi tulemusel. Naftasaaduste identifitseerimiseks saab kasutada siiski eraldi spetsiaalset süsteemi (vt peatükk 4.3.2.2).

Kui ekstrakti keemiline derivaat ei sisalda samu koostisosi kui lähteekstrakt, tuleb seda käsitada eri ainenä. Selle reegli tulemusel võib nimetuse ja kirjelduse alusel identifitseerimine erineda varasemast EINECS-nimetusest ja -kirjeldusest. EINECS-loetelu koostamise ajal registreeriti eri protsesside ja lahustitega saadud ekstraktid ning ka füüsikalised või keemilised derivaadid sageli samas kirjes. REACH-määruse kohaselt tuleb need ained siiski registreerida eraldi ainetena.

4. Aine identifitseerimise muud parameetrid

Peale keemilise nimetuse ning allika ja protsessi kirjelduse peab UVCB-aine identifitseerimine hõlmama mis tahes muud asjakohast teavet, mida nõutakse REACH-määruse VI lisa punktis 2.

Teatud liiki UVCB-ainete korral võivad olla asjakohased teatud muud identifitseerimisparameetrid. Täiendavad muud identifikaatorid võivad olla näiteks järgmised:

- keemilise koostise üldine kirjeldus;
- kromatograafiline või muud tüüpi jälg;
- viitematerjal (nt ISO);
- füüsikalise-keemilised parameetrid (nt keemistemperatuur);
- värvainete registri number;
- AISE-number.

Allpool on spetsiaalsed juhised, kuidas teatud tüüpi allikate ja protsesside korral kasutada UVCB-ainete identifitseerimiseks nimetust, allikat ja protsessi teavet. Järgmistes punktides kirjeldatakse bioloogiliste või keemiliste/mineraalsete allikate ja protsesside (süntees või rafineerimine) kombinatsiooni järgi UVCB-ainete nelja alltüüpi.

UVCB-ainete 1. alltüüp: bioloogiline allikas ja süntees

Bioloogilist päritolu aineid saab muuta (bio)keemiliste protsessidega, et toota lähteaines puudunud koostisosi, nt taimeekstraktide keemilisi derivaate või ekstraktide ensüümtöötlemissaadusi. Valke saab näiteks oligopeptiidide saamiseks hüdrolüüsida proteaasiga ja puidutselluloosi saab karboksüülmetüülselluloosi (CMC) saamiseks karboksüülida.

Sellesse UVCB-aine alltüüpi võivad kuuluda ka käärimissaadused: näiteks on melassipära suhkruga selline käärimissaadus, mis sisaldab suhkruga võrreldes rohkem eri koostisosi. Kui käärimissaadusi seejärel puhastada, võivad ained muutuda keemilise koostise järgi täiesti identifitseeritavaks ja neid ei pea enam käsitama UVCB-ainetena.

Ensüümid on eriline ainerühm, mida on võimalik saada bioloogilise allika ekstraheerimise ja sellele järgneva rafineerimise teel. Kuigi allikat ja protsessi võib üksikasjalikult kirjeldada, ei anna see konkreetset teavet ensüümi kohta. Nende ainete korral tuleb kasutada spetsiaalselt klassifitseerimise, nimetamise ja identifitseerimise süsteemi (vt peatükk 4.3.2.3).

Aine identifitseerimiseks tuleb märkida protsessi lõppetapp ja/või muu protsessietapp, mis on aine olemuse suhtes asjakohane.

Keemilise protsessi kirjeldus peab olema protsessi tüübi üldkirjeldus (esterdamine, aluseline hüdrolüüs, alküülimine, kloorimine, asendamine jne) koos asjakohaste protsessitingimustega.

Biokeemilise protsessi kirjeldus võib olla katalüütilise reaktsiooni üldkirjeldus koos reaktsiooni katalüüsiva ensüümi nimetusega.

Kääritamisel või liikide (koe-) kultuuridest saadavate ainete korral tuleb nimetada kääritavad liigid, käärimistüüp ja kääritamise üldised tingimused (etapiline või pidev käärimine, aeroobne, anaeroobne või anoksiline käärimine, temperatuur, pH jne). Samuti tuleb nimetada protsessi mis tahes lisaetapid, mida kasutatakse kääritamissaaduste eraldamiseks, nt tsentrifuugimine, sadestamine, ekstraheerimine. Kui neid aineid rafineeritakse, võib see tekitada fraktsiooni, kontsentraati või jääki. Selliseid töödeldud aineid identifitseeritakse nende protsesside lisakirjelduse abil.

UVCB-ainete 2. alltüüp: keemiline või mineraalne allikas ja süntees

Sellised UVCB-ained, mis saadakse keemilistest või mineraalsetest allikatest ja mis saadakse protsessiga, milles sünteesitakse uusi molekule, on reaktsioonisaadused. Keemilised reaktsioonisaadused on näiteks esterdamise, alküülimise või kloorimise saadused. Biokeemilised reaktsioonid, kus kasutatakse eraldatud ensüüme, on eritüüpi keemilised reaktsioonid. Täielikke mikroorganisme kasutatavate keeruliste biokeemiliste sünteesiprotsesside korral on parem saadud ainet käsitleda pigem käärmissaadusena ning identifitseerida see käärimisprotsessi ja kääritamislükide, mitte lähteainete järgi (vt UVCB-aine 4. alltüüp).

Iga reaktsioonisaadust ei saa automaatselt käsitleda UVCB-ainena. Kui reaktsioonisaadust saab piisava täpsusega määratleda keemilise koostise järgi (arvestades teatud varieeruvust), tuleb eelistada aine identifitseerimist mitme koostisosaga ainenäiteks (vt peatükk 4.2.2). Alles siis, kui reaktsioonisaaduse koostis ei ole piisavalt täpselt teada või kui see on halvasti ennustatav, tuleb ainet identifitseerida UVCB-ainena (reaktsioonisaadusena). Reaktsioonisaaduse identifitseerimine põhineb reaktsiooni lähteainetel ja (bio)keemilisel reaktsiooniprotsessil, milles aine tekib.

Näited		
EÜ number	EINECS-nimetus	CAS-number
294-006-2	Nonaandihape, 2-amino-2-metüül-1-propanooliga reaktsiooni saadused	91672-02-5
294-148-5	Formaldehüüd, dietüleenglükooli ja fenooliga reaktsiooni saadused	91673-32-4

Reaktsioonisaaduste peamine identifikaator on tootmisprotsessi kirjeldus. Aine identifitseerimiseks tuleb nimetada lõplik või kõige olulisem protsessietapp. Keemilise protsessi kirjeldus peab olema protsessi tüübi üldkirjeldus (nt esterdamine, aluseline hüdrolyüs, alküülimine, kloorimine, asendamine) ja nimetada tuleb asjakohased protsessitingimused. Biokeemilist protsessi tuleb kirjeldada reaktsiooni tüübi ja reaktsiooni katalüüsiva ensüümi järgi.

UVCB-ainete 3. alltüüp: bioloogiline allikas ja rafineerimine

Bioloogilist päritolu ja sellise rafineerimisprotsessi käigus saadud UVCB-ained, milles tahtlikult uusi molekule ei tekitata, võivad olla näiteks ekstraktid, ekstraktifraktsioonid, ekstraktikontsentraadid, puhastatud ekstrakt või bioloogilist päritolu aine töötlemisjääd.

Kui ekstrakti seejärel töödeldakse, ei ole aine enam sama aine kui ekstrakt, vaid muud alltüüpi UVCB-aine, nt fraktsioon või ekstraktijääk. Neid aineid kirjeldatakse (edasise) töötlemise lisaparameetritega. Kui ekstrakti muudetakse keemiliste või biokeemiliste reaktsioonidega, milles tekivad uued molekulid (derivaadid), identifitseeritakse aine UVCB-aine 2. alltüüpi juhiste või peatüki 4.2 järgi täpselt määratletud ainenäiteks.

Sellise edasi töödeldud ekstraktide eritlemise tõttu võib olla, et uus nimetus ja kirjeldus erineb EINECS-loetelu omast. EINECS-loetelu koostamisel sellist eristust ei tehtud ning eri lahustite ja protsessi lisaetappidega saadud igat tüüpi ekstraktid oleksid kuulunud samasse kirjesse.

Selle UVCB-aine alltüübi esimene peamine identifikaator on aine päritoluorganismi sugukond, perekond ja liik. Vajaduse korral tuleb nimetada ka aine eraldamiseks kasutatud kude või organismiosa, nt luuüdi, kõhunääre või vars, seemned või juured. Mikrobioloogilist päritolu ainete korral tuleb määratleda liigi tüvi ja geneetiline tüüp.

Kui UVCB-aine saadakse eri liigist, käsitatakse seda erineva ainenäitega, isegi kui keemiline koostis võib olla sarnane.

Näited	
EÜ number	EINECS-nimetus
290-977-1	Kampetše veripuu (<i>Haematoxylon campechianum</i>) oksüdeeritud ekstrakt EÜ kirjeldus Aine on identifitseeritud värvaineindeksis: C.I. 75290 (oksüdeeritud).
282-014-9	Kõhunäärmeekstrakt, valgud eemaldatud

Teine peamine identifikaator on aine töötlemisprotsess, nt ekstraheerimine, fraktsioonimine, puhastamine või kontsentreerimine, või jäägi koostist mõjutav protsess. Ekstraktide rafineerimisel mitmesugustes protsessides, näiteks eri lahusteid või puhastamisetappe kasutades, saadakse seega erinevad ained.

Mida rohkem etappe rafineerimisel kasutatakse, seda kergem on ainet määratleda keemilise koostise järgi. See ei tähenda, et teist liiki allikas või teistsugused muudatused protsessi käigus annaksid tulemuseks automaatselt teistsuguse aine.

Bioloogilist päritolu ainete peamine identifitseerimisparameeter on asjakohaste protsesside kirjeldus. Ekstraktide korral tuleb aine identifitseerimiseks kirjeldada ekstraheerimisprotsessi piisavalt täpselt; vähemalt tuleb kirjeldada kasutatavat lahustit.

Kui aine tootmiseks kasutatakse edasisi protsessietappe, nagu fraktsioonimine või kontsentreerimine, tuleb kirjeldada asjakohaseid etappe, nt ekstraheerimise ja fraktsioonimise kombineerimist, ning samuti piirvahemikke.

UVCB-ainete 4. alltüüp: keemiline või mineraalne allikas ja rafineerimine

Mittebioloogilist päritolu ained, st mineraalid, maagid, kivisüsi, maagaas ja toornafta, nendest saadud ained või muu keemiatööstuse tooraine, mis on saadud ilma tahtlike keemiliste reaktsioonideta töötlemise tulemusel, võivad olla (puhastatud) fraktsioonid, kontsentraadid või nende protsesside jäägid.

Kivisütt ja toornaftat kasutatakse destilleerimis- või gaasistamisprotsessides, et toota mitmesuguseid aineid (naftasaadused, gaaskütused jpm) ning samuti jääke (nt tõrv ja räbu). Väga sageli töödeldakse destilleeritud või muul viisil fraktsioneeritud toodet kohe edasi, kasutades selleks ka keemilisi reaktsioone. Sellistel juhtudel tuleb aine identifitseerimisel järgida UVCB-aine 2. alltüübi juhiseid, sest protsess on olulisem kui allikas.

Naftasaaduste korral kasutatakse identifitseerimise erisüsteemi (vt peatükk 4.3.2.2), mis hõlmab muu hulgas fraktsioone ja keemiliste reaktsioonide saadusi.

Muud 4. alltüüpi UVCB-ained võivad hõlmata maake, maagikontsentraate ja räbusid, mis sisaldavad mitmesuguses koguses metalle, mida saab eraldada metallurgiaprotsessidega.

Mineraale, näiteks bentoniiti või kaltsiumkarbonaati, saab töödelda nt happega lahustamise ja/või keemilise sadestamise teel või ionivahetuskolonnides. Kui kogu keemiline koostis on teada, tuleb mineraale identifitseerida peatüki 4.2 asjakohases osas olevate juhiste järgi. Kui mineraale töödeldakse üksnes mehaaniliste meetoditega (jahvatamine, sõelumine, tsentrifuugimine, flotatsioon jne), käsitatakse neid samade ainetena kui kaevandatud kujul

mineraalid. Tootmisprotsessi abil toodetud mineraale saab identifitseerimise²¹ eesmärgil käsitada samana kui nende looduslik analoog, kui nende koostis on sarnane ja toksilisusprofiil täpselt sama.

Peamine mittebioloogilist päritolu ainete identifitseerimisparameeter on asjakohaste protsessietappide kirjeldamine.

Fraktsioonide korral tuleb fraktsioonimisprotsessi kirjeldada eraldatud fraktsiooni parameetrite ja piirvahemiku abil, kirjeldades vajaduse korral eelnenud protsessietappe.

Kontsentratsioonietapi kohta tuleb nimetada protsessi tüüp (aurustamine, sadestamine jt) ning peamiste koostisosade alg- ja lõppkontsentratsiooni suhe ning samuti eelnenud protsessietappide teave.

Mittebioloogilist päritolu jääkide peamine identifitseerimisparameeter on jääki tekitava protsessi kirjeldus. Protsess võib olla mis tahes füüsikaline reaktsioon, milles tekivad jäägid, nt puhastamine, fraktsioonimine või kontsentreerimine.

Analüütiline teave

UVCB-ainete hulka kuuluvad väga erinevad ained, mis erinevad näiteks allika ja tootmisprotsessi poolest. Sellest tulenevalt tuleb esitada sobivad analüüsimeetodid, mis annavad teavet UVCB-aine koostise kohta ja mis sõltuvad konkreetsest juhtumist. Lisaks arendatakse ja tõhustatakse pidevalt teadmisi, kuidas selliseid meetodeid kasutada. Seetõttu on registreerija kohustus esitada asjakohased analüüsiaandmed, et anda parimat võimalikku teavet aine identifitseerimiseks.

UVCB-ainete iseloomustamiseks saab kasutada mitmeid kvalitatiivseid meetodeid, näiteks UV/Vis, infrapuna- ja massispektromeetria, tuumamagnetresonants, röntgendifraktsioon.

Aine koostise iseloomustamiseks tuleb esitada kvantitatiivsed andmed, näiteks kromatogrammide või difraktsiooniaandmed, mida saab kasutada kromatograafilise jäljena.

Analüüsimeetodite kirjeldus peab sisaldama järgitud katseprotokolle ja esitatud tulemuste tõlgendust.

4.3.2. UVCB-ainete eritüübid

Siin jaotises esitatakse juhised UVCB-ainete järgmiste eritüüpide kohta: muutuva süsinikahela pikkusega ained (4.3.2.1), naftast või naftalaadsetest allikatest saadud ained (4.3.2.2) ja ensüümid (4.3.2.3).

4.3.2.1 Muutuva süsinikahela pikkusega ained

Selles UVCB-ainete rühmas on muutuva pikkusega pika süsinikahelaga alküülrühma sisaldavaid aineid, nt parafiine ja olefiine. Neid aineid saadakse kas looduslikest rasvadest ja õlidest või toodetakse neid sünteetiliselt. Looduslikud rasvad on kas taimsed või loomsed. Taimset päritolu pika süsinikahelaga ainetel on ahelas süsinikuaatomeid tavaliselt paarisarv, kuid loomset päritolu pika süsinikahelaga ainetel on see (mõnikord) ka paaritu. Sünteetiliselt toodetud pika süsinikahelaga ainetel võib süsinikuaatomite arv ahelas olla nii paaris kui ka paaritu.

²¹ Sama lähenemisviis looduses esinevate ja keemiliselt toodetud mineraalide identifitseerimisel ei tähenda tingimata, et juriidilised nõuded (nt registreerimiserandid) oleksid samad.

Identifikaatorid ja nimetamis põhimõte

Rühma kuuluvad ained, mille üksikkoostisosadel on ühised struktuuriomadused: vähemalt üks pika ahelaga alküülrühm, sageli koos funktsionaalrühmaga. Koostisosad erinevad üksteisest alküülahelarühma vähemalt ühe järgmise omaduse poolest:

- süsinikahela pikkus (süsinikuaatomite arv)
- küllastatus
- struktuur (lineaarne või hargnev)
- funktsionaalrühma asukoht

Koostisosade keemilist olemust võib kirjeldada piisava täpsusega ja süstemaatiliselt nimetades, kasutades järgmist kolme deskriptorit:

- **alküüldeskriptor**, mis kirjeldab süsinikuaatomite arvu alküülrühma/alküülrühmi sisaldavas süsinikahelas;
- **funktsionaalsuse deskriptor**, mis identifitseerib aine funktsionaalrühma (amiinid, ammoonium, karboksüülhape jt);
- **soola deskriptor**, mis kirjeldab mis tahes soola katioone/anioone, nt naatriumi- (Na^+), karbonaadi- (CO_3^{2-}), kloriidioon (Cl^-).

Alküüldeskriptor

- Tavaliselt viitab alküüldeskriptor C_{x-y} küllastunud alküülrühma/-rühmi sisaldavale hargnemata ahelale pikkusega $x-y$, nt C_{8-12} tähendab ahelapikkusi C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} ja C_{12} .
- Tuleb märkida, kas alküüldeskriptor viitab ainult paaris- või paaritu arvuga süsinikuaatomitega alküülahelale, nt C_{8-12} (paarisarvuline).
- Tuleb märkida, kas alküüldeskriptor viitab (ka) hargnevale alküülahelale, nt C_{8-12} (hargnev) või C_{8-12} (lineaarne ja hargnev).
- Tuleb märkida, kas alküüldeskriptor viitab (ka) küllastumata alküülahelale, nt C_{12-22} (C_{18} küllastumata).
- Alküülahela pikkuste kitsas jaotumisvahemik ei hõlma laiemat ja vastupidi, nt C_{10-14} ei sisaldu vahemikus C_{8-18} .
- Alküüldeskriptor võib viidata ka alküülahelate allikale, nagu kookosõli või tahkerasv. Süsinikahela pikkuste jaotumisvahemik peab siiski vastama allika vahemikule.

Selle süsteemiga tuleb kirjeldada muutuva süsinikahela pikkusega aineid. See ei sobi täpselt määratletud ainete jaoks, sest neid saab identifitseerida kindla keemilise struktuuri järgi.

Alküüldeskriptori, funktsionaalsuse deskriptori ja soola deskriptori teave on seda tüüpi UVCB-aine nimetamise aluseks. Samuti võib aine täpsemaks identifitseerimiseks lisada allika ja protsessi teave.

Näited

Deskriptorid

Nimetus

Alküüldeskriptor	alküülahela pikkused	rasvhapped (C_{10-18}) kaadmiumsoolad
Funktsionaalsuse deskriptor	C_{10-18} rasvhapped	
Soola deskriptor	(karboksüülhape) kaadmiumsoolad	

Alküüldeskriptor Funktsionaalsuse deskriptor Soola deskriptor	di(C ₁₀₋₁₈)alküüldimetüül- ammoonium kloriid	di-C ₁₀₋₁₈ -alküül-dimetüülammooniumkloriid
Alküüldeskriptor Funktsionaalsuse deskriptor Soola deskriptor	trimetüültahkerasvalküül- ammoonium kloriid	trimetüültahkerasvalküülammooniumkloriid

4.3.2.2 Naftast või naftalaadsetest allikatest saadud ained

Naftast saadud ained (naftasaadused) või naftalaadsetest allikatest saadud ained (nt kivisüsi) on väga keeruka ja muutliku või osaliselt tundmatu koostisega ained. Käesolevas peatükis kasutatakse naftasaadusi näitena, kuidas identifitseerida seda eritüüpi UVCB-ainet. Sama lähenemisviisi saab rakendada ka naftalaadsetest allikatest saadud ainete, näiteks kivisöe korral.

Nafta rafineerimise lähteained võivad olla toornafta või mis tahes ühe või mitme protsessi tulemusel saadud mis tahes rafineerimisvoog. Lõppsaaduste koostis oleneb tootmiseks kasutatavast toornaftast (sest toornafta koostis oleneb päritolust) ja sellele järgnevast rafineerimisprotsessist. Sel põhjusel varieerub naftasaaduste koostis loomulikult ja protsessist sõltumatult ¹⁷.

1. Nimetamispeähimõte

Naftasaaduste identifitseerimiseks on soovitatav anda nimetus kehtestatud nomenklatuurisüsteemi²² järgi. Nimetus koosneb tavaliselt rafineerimisprotsessist, naftavoo allikast ja üldkoostisest või -omadustest. Kui aine sisaldab > 5 massi-% 4–6 kondenseerunud tuumaga aroomaatseid süsivesinikke, tuleb see teave lisada kirjeldusele. EINECS-numbriga naftasaaduste korral kasutatakse EÜ loetelus olevat nimetust.

2. Identifikaatorid

Naftasaaduste identifitseerimiseks kasutavad nimetused ja määratlused hõlmavad tavaliselt naftavoo allikat, rafineerimisprotsessi, üldkoostist, süsinikuaatomite arvu, keemistemperatuurivahemikku või muid asjakohaseid füüsikalisi omadusi, ning valdavat süsivesinike tüüpi²².

Esitada tuleb REACH-määruse VI lisa punkti 2 identifitseerimisparameetrid. Naftasaaduste tootmisel juhindutakse toote soovitud tehnilistest omadustest, mitte ettenähtud koostisest. Sel põhjusel on naftasaaduste võimalikult täpselt identifitseerimisel koostisest asjakohasem kasutada selliseid tunnuseid ja omadusi nagu nimetus, süsinikahela pikkuse vahemik, keemispunkt, viskoossus, piirväärtused ja muud füüsikalised omadused.

Kuigi keemiline koostis ei ole UVCB-ainete peamine identifikaator, tuleb esitada kõik koostisosad kontsentratsioonis $\geq 10\%$ ja teadaolevad koostisosad kontsentratsioonis $< 10\%$ ning koostist tuleb kirjeldada üldiselt, nt molekulmassivahemik, alifaatsete või aroomaatsete

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

ühendite sisaldus, hüdrogeenimisaste ja muu oluline teave. Samade parameetritega tuleks kirjeldada ka koostisosade rühmi, mida ei ole võimalik individuaalselt identifitseerida. Ühtlasi tuleb nimetuse ja tüüpilise kontsentratsiooni abil identifitseerida ka kõik muud väiksema kontsentratsiooniga koostisosad, mis mõjutavad ohuklassifikatsiooni.

4.3.2.3 Ensüümid

Ensüüme saadakse kõige sagedamini mikroorganismide, kuid mõnikord ka taimse või loomse päritoluga ainete kääritamise teel. Kääritamise või ekstraheerimise ning sellele järgneva puhastamisprotsessiga saadav vedel ensüümkontsentraat sisaldab peale vee ka aktiivset ensüümvalku ja muid käärimisjääke sisaldavaid koostisosi, nagu valgud, peptiidid, aminohapped, süsivesinikud, lipiidid ja anorgaanilised soolad.

Ensüümvalku koos muude koostisosadega, mida saadakse kääritamise või ekstraheerimise teel, välja arvatud vesi, mille saab eraldada ensüümvalgu stabiilsust mõjutamata või koostist muutmata, tuleb käsitada kui identifitseeritavat ainet.

Ensüümained sisaldab tüüpiliselt 10–80 massi-% ensüümvalku. Muude koostisosade protsentuaalne sisaldus varieerub ja need sõltuvad tootmisel kasutatud organismist, käärimiskeskonnast ja käärimisprotsessi parameetritest ning samuti edasisest puhastamisest, kuid koostis on tavaliselt järgmises vahemikus:

Aktiivne ensüümproteiin	10–80%
Muud proteiinid + peptiidid ja aminohapped	5–55%
sahhariidid	3–40%
lipiidid	0–5%
Anorgaanilised soolad	1–45%
Kokku	100%

Varieeruvuse ja osaliselt tundmatu koostise tõttu tuleb ensüümained käsitada UVCB-ainena. Ensüümproteiini tuleb käsitada UVCB-aine koostisosana. Kõrgpuhastatud ensüüme saab identifitseerida täpselt määratletud koostisega ainetena (ühe koostisosaga ained või mitme koostisosaga ained) ja neid tuleb sellisena ka identifitseerida.

EINECS-loetelus on ensüümide peamine identifikaator nende katalüütiline aktiivsus. Ensüümid on loetellu kantud täpsustamata üldkirjetena või erikirjetena, milles nimetatakse lähteorganism või substraat.

Näited		
EÜ number	EINECS-nimetus	CAS-number
278-547-1	Proteaaas, Bacillus'e suhtes neutraalne	76774-43-1
278-588-5	Proteaaas, Aspergillus'e suhtes neutraalne	77000-13-6
254-453-6	Elastaas (sea kõhunääre)	39445-21-1

262-402-4	Mannanaas	60748-69-8
-----------	-----------	------------

Euroopa Komisjoni tellitud ensüümide uuringus soovitati identifitseerida ensüüme Rahvusvahelise Biokeemia ja Molekulaarbioloogia Liidu (IUBMB) ensüümide rahvusvahelise nomenklatuuri kohaselt.²³ Seda lähenemisviisi kasutatakse ka käesolevas juhendis ja see võimaldab ensüüme identifitseerida süstemaatilisemalt, üksikasjalikumalt ja terviklikumalt kui EINECS.

1. Nimetamispõhimõte

Ensüüme nimetatakse IUBMB nomenklatuuri põhimõtete järgi.

IUBMB klassifitseerimissüsteem annab igale ensüümi tüübile ja katalüütilisele funktsioonile ainulaadse 4-arvulise koodi (nt α -amülaasile 3.2.1.1)²⁴. Koodi iga arv võib tähendada muutuva aminohapete järjestuse ja päritoluga ensüüme, kuid ensüümide funktsioonid on identsed. Aine identifitseerimiseks tuleb kasutada IUBMB nomenklatuuri nimetust ja koodi. IUBMB nomenklatuur liigitab ensüümid kuude põhirühma:

- 1. Oksidoreduktaasid
- 2. Transferaasid
- 3. Hüdrolaasid
- 4. Lüaasid
- 5. Isomeraasid
- 6. Ligaasid

Järgmine näide selgitab IUBMB nomenklatuuri järgivat kirjet.

EC 3.4.22.33

Heakskiidetud nimetus: puuviljabromeliin

Reaktsioon: valkude hüdroolüüs suure spetsiifilisusega peptiidsidemete suhtes. Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec on hea sünteetiline substraat, kuid puudub mõju ainele Z-Arg-Arg-NHMec (vrd tüvibromeliin).

Muu(d) nimetus(ed): mahlabromeliin; ananaas; bromelaas; bromeliin; ekstranaas; mahlabromeliin; pinaas; ananassiensüüm; traumanaas; puuviljabromeliin FA2.

Märkused: saadud harilikust ananassist (*Ananas comosus*). Inhibeerub kana tsüstatiiniga vähe. Teist väikestele molekulisubstraatidele samasuguse toimega tsüsteiinendopeptidaasi, pinguiniini (endine EC 3.4.99.18), saadakse sarnasest taimest *Bromelia pinguin*, kuid pinguiniin erineb puuviljabromeliinist, sest seda inhibeerib kana tsüstatiin [4].²⁵ Kuulub peptidaasi rühma C1²⁶ (papaiinirühm). Varem EC 3.4.22.5 ja lisatud kirjesse EC 3.4.22.4, CAS-number: 9001-00-7

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

²⁴ Seda nimetatakse sageli ka ensüümikomisjoni numbriks (EC-number) ja IUBMB-numbriks. Selguse huvides on IUBMB 4-arvulist koodi soovitatav nimetada IUBMB-numbriks.

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

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

Lingid muudele andmebaasidele:

[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)

Üldised viited

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

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

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

Ensüümide IUBMB süsteemi kohase klassifitseerimise näited

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

Proteaaside nummerduspõhimõtted:

3.	Hüdrolaasid
3.4	Mõjub peptiidsidemetele (peptidaasid), koos alamklassidega:
3.4.1	α -amino-aküül-peptiidi hüdrolaasid (praegu EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidüül-amino-happe hüdrolaasid (praegu EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptiidi hüdrolaasid (praegu EC 3.4.13)
3.4.4	Peptidüülpeptiidi hüdrolaasid (praegu on ümber klassifitseeritud klassi EC 3.4 piires)
3.4.11	Amino-peptidaasid
3.4.12	Peptidüül-amino-happe hüdrolaasid või aküül-amino-happe hüdrolaasid (praegu on ümber klassifitseeritud klassi EC 3.4 piires)
3.4.13	Dipeptidaasid
3.4.14	Dipeptidüül-peptidaasid ja tripeptidüül-peptidaasid
3.4.15	Peptidüül-dipeptidaasid
3.4.16	Seriinitüüpi karboksüpeptidaasid
3.4.17	Metallokarboksüpeptidaasid
3.4.18	Tsüsteiinitüüpi karboksüpeptidaasid

3.4.19	Oomegapeptidaasid
3.4.21	seriini endopeptidaasid
	Üksikensüümid:
3.4.21.1	kümotrüpsiin
3.4.21.2	kümotrüpsiin C
3.4.21.3	metridiin
3.4.21.4	trüpsiin
3.4.21.5	trombiin
3.4.21.6	hüübimistegur Xa
3.4.21.7	plasmiin
3.4.21.8	praegu kuulub EC 3.4.21.34 ja EC 3.4.21.35 alla
3.4.21.9	enteropeptidaas
3.4.21.10	akrosiin
3.4.21.11	praegu kuulub EC 3.4.21.36 ja EC 3.4.21.37 alla
3.4.21.12	12 a-lüütiline endopeptidaas
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Tundmatu katalüütilise mehhanismiga endopeptidaasid

EINECS-loetelu näited koos IUBMB-numbriga

EÜ number	EINECS-nimetus	CAS-number	IUBMB-number
278-547-1	Proteaas, Bacillus'e suhtes neutraalne	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisiin	1.01.9014	3.4.21.62
232-734-4	Tsellulaas	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identifikaatorid

Ensüümained identifitseeritakse IUBMB nomenklatuuri järgi nimetatava ensüümvalgu sisalduse ja muude käärimisel tekkivate koostisosade alusel. Peale ensüümvalgu ei ole tavaliselt ühtegi konkreetset koostisosa kontsentratsioon üle 1%. Kui nende konkreetsete koostisosade olemus ei ole teada, saab neid rühmitada (st valgud, peptiidid, aminohapped, sahhariidid, lipiidid ja anorgaanilised soolad). Üksikkoostisosad tuleb siiski nimetada, kui nende identifitseerimisandmed on teada või kui nende kontsentratsioon on vähemalt 10% või kui need on klassifitseerimise ja märgistuse või PBT-omaduste hindamise seisukohast asjakohased.²⁷

Ensüümvalgud

Kontsentraadis sisalduvaid ensüümvalke tuleb identifitseerida järgmise teabega:

- IUBMB-number
- IUBMB kirje nimetused (süsteemne nimetus, ensüümi nimetus, sünonüümid);
- IUBMB esitatud kommentaarid
- reageerimine ja reakstioonitüüp;
- EÜ number ja nimetus, kui see on asjakohane;
- CAS-number ja nimetus, kui on olemas.

Tuleb täpsustada ensüümi tekitatav reakstioon. Reakstiooni määrab IUBMB.

Näide

α -amülaas: polüsahhariid, mis sisaldab α -(1-4)-sidemega glükoosiühikut + H₂O = maltooligosahhariidid; 1,4- α -d-glükosiidsideme endohüdrolüüs polüsahhariidides, mis sisaldavad vähemalt kolme 1,4- α -sidemega d-glükoosi ühikut.

Vastavalt ensüümi klassile tuleb määrata reakstiooni tüüp. See võib olla oksüdeerimine, redutseerimine, eemaldamine, lisamine või reakstiooni nimetus.

Näide

α -amülaas: O-glükosüülsideme hüdrolüüs (endohüdrolüüs).

Muud koostisosad kui ensüümvalgud

Identifitseerida tuleb kõik suurema kontsentratsiooniga kui ≥ 10 massi-% sisalduvad koostisosad või koostisosad, mis on klassifitseerimise ja märgistuse või PBT-omaduste hindamise²⁸ seisukohast asjakohased. Alla 10% koostisosade identifitseerimisandmed võib esitada keemilise rühmana. Tuleb esitada nende tüüpiline kontsentratsioon (tüüpilised kontsentratsioonid) või kontsentratsioonivahemikud, st:

- (glüko)proteiinid
- peptiidid ja aminohapped
- sahhariidid

²⁷ Lisateave PBT-omaduste hindamise ning asjakohaste kriteeriumide kohta on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi peatükis R11 „PBT-omaduste hindamine“.

²⁸ Lisateave PBT-omaduste hindamise ja asjakohaste kontsentratsioonipiirnormide kohta on REACH-rakendusprojekti (RIP) 3.2 kemikaaliohutuse hindamise tehnilise juhendi osas, mis käsitleb PBT-omaduste hindamist.

- lipiidid
- anorgaanilised ained (nt naatriumkloriid või muud anorgaanilised soolad)

Kui ensüümikontsentradi muid koostisosi ei saa piisava täpsusega identifitseerida, tuleb nimetada tootmiseks kasutatud organism (perekond ja tüvi või geneetiline tüüp, kui asjakohane), nagu muude bioloogilist päritolu UVCB-ainete korral.

Võimaluse korral saab lisada ka muid parameetreid, nt funktsionaalparameetreid (st pH või optimaalsed temperatuurid ja temperatuurivahemikud), kineetikaparameetrid (st spetsiifiline aktiivsus või muutmissuhe), ligandid, substraadid ning tooted ja kaasmõjurid.

5. AINETE SAMASUSE KONTROLLIMISE kriteeriumid

Kontrollides, kas eri tootjate/importijate aineid võib pidada samaks, tuleb järgida teatud eeskirju. Neid EINECS-loetelu koostamisel kasutatud eeskirju tuleb käsitada aine identifitseerimise ja nimetamise ning seega konkreetse aine võimalike kaasregistreerijate leidmise ühise alusena^{5, 6, 16, 29, 30}. Aineid, mida ei peeta samaks, võib siiski eksperthinnangu alusel käsitada struktuuri poolest sarnastena. Nende ainete korral võib andmete jagamine olla siiski võimalik, kui seda teaduslikult põhjendada. Samas ei ole see käesoleva juhendi teema ja seda on pigem käsitletud andmete jagamise juhendis.

- Ühe koostisosaga ainete korral tuleb kasutada $\geq 80\%$ reeglit ja mitme koostisosaga ainete määratlust.

Ainete tehnilisi, puhtaid ega analüütilisi vorme ei eristata. See tähendab, et samaks peetaval ainel võib olla erinev puhtusaste või lisandiprofiil, olenevalt aine sellisest vormist. Samas peaksid täpselt määratletud aineid sisaldama samu põhikoostisosi ja ainsad lubatud lisandid on tekkinud tootmisprotsessi käigus (üksikasjalik teave: vt peatükk 4.2) ning ainsad lubatud lisaained on need, mida on vaja aine stabiliseerimiseks.

- Ühendite hüdraatunud ja veevabu vorme käsitatakse registreerimisel sama ainenäitega.

Näited			
Nimetus ja valem	CAS-number	EÜ number	Eeskiri
Vasksulfaat (Cu · H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Väävelhape, vask(II)sool (1:1), pentahüdraat (CuSO ₄ · 5H ₂ O)	7758-99-8		Aine on hõlmatud veevaba vormi registreeringuga (EÜ nr) 231-847-6)

Hüdraatunud ja veevabadel vormidel on eri keemilised nimetused ja CAS-numbrid.

- Happeid ja aluseid ning nende sooli käsitatakse eri ainetena.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
201-186-8	Peräädikhape C ₂ H ₄ O ₃	See aine ei ole sama kui näiteks selle naatriumsool (EINECS 220-624-9)
220-624-9	Naatriumglükolaat C ₂ H ₄ O ₃ · Na	See aine ei ole sama kui näiteks sellele vastav hape

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

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

		(EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-kloroaniliin C ₆ H ₆ ClN	See aine ei ole sama kui näiteks 2-kloroaniliinvesinikbromiid (1 : 1) (C ₆ H ₆ ClN · HBr)

- Üksiksooli (nt naatrium- või kaaliumsooli) käsitatakse eri ainetena.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
208-534-8	Naatriumbensoaat C ₇ H ₅ O ₂ · Na	See aine ei ole sama kui näiteks selle kaaliumsool (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Kaaliumbensoaat C ₇ H ₅ O ₂ · K	See aine ei ole sama kui näiteks selle naatriumsool (EINECS 208-534-8)

- Hargnevaid ja lineaarseid alküülahelaid käsitatakse eri ainetena.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
295-083-5	Fosforhappe dipentüülester, hargnev ja lineaarne	See aine ei ole sama kui hargneva ahelaga fosforhappe dipentüülester ega lineaarse ahelaga fosforhappe dipentüülester üksikainetena

- Hargnevaid rühmi tuleb sellisena ka nimetada. Alküülrühmi sisaldavad lisateabeta ained hõlmavad ainult hargnemata lineaarseid ahelaid, kui ei ole märgitud teisiti.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
306-791-1	Rasvhapped, C12–16	Ainult aineid, millel on lineaarne ja hargnemata alküülrühm, peetakse samadeks aineteks
279-420-3	Alkoholid, C12–14	
288-454-8	Amiinid, C12–18-alküülmetüül	

- Alküülrühmi sisaldavaid aineid, kus kasutatakse selliseid lisatermineid nagu „iso“, „neo“, „hargnev“ jne, ei käsitata sama ainenäitega, kui ei ole märgitud teisiti.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
266-944-2	Glütseriidid, C ₁₂₋₁₈ Selle aine SDA ainenimetus on C12-C18-trialküülgütseriid ja selle SDA-viitenumber: 16-001-00	See aine ei ole sama kui C _{12-18-iso} -ahelaga aine, mille küllastunud alküülahel hargneb mis tahes positsioonis

- Kui ei ole märgitud teisiti, käsitatakse hapete, alkoholide jt alküülahelaid ainult küllastunudena. Kui ahel on küllastumata, tuleb seda märkida ja vastav aine on eri aine.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
200-313-4	Steariinhape, puhas C18H36O2	See aine ei ole sama kui puhas oleiinhape, C18H34O2 (EINECS 204-007-1)

- Kiraalkeskmega ained

Ühe stereokeskmega aine võib esineda vasak- või paremkiraalse enantiomeerina. Kui ei ole märgitud teisiti, eeldatakse, et aine on kummagi kiraalvormi 1:1 (ratseemiline) segu.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
201-154-3	2-kloropropaan-1-ool	Üksikenantiomeere (R)-2-kloropropaan-1-ool ja (S)-2-kloropropaan-1-ool ei käsitata selle kirjega samaväärsetena

Ratseemaate käsitatakse mitme koostisosaga ainetena. Kui aine on ühe enantiomeeri suhtes rikastatud, tuleb kohaldada ühe- või mitme koostisosaga ainetes eeskirju, st sõltuvalt isomeeride kontsentratsioonivahemikust on aine üht või mitut koostisosa sisaldav aine.

Mitme stereokeskmega ained võivad esineda 2ⁿ vormis (kus n on stereokeskmete arv). Nendel eri vormidel võivad olla üksteisest erinevad füüsikalised-keemilised, toksikoloogilised ja/või ökotoksikoloogilised omadused. Neid tuleb käsitada eri ainetena.

- Anorgaanilised katalüsaatorid

Anorgaanilisi katalüsaatoreid käsitatakse segudena. Identifitseerimiseks tuleb katalüsaatoris sisalduvaid metalle või metalliühendeid käsitada eri ainetena (ilma kasutusala kirjeldamata).

Näited		
	Nimetus	Eeskiri
	Koobaltoksiid- alumiiniumoksiidkatalüsaator	Peab identifitseerima eraldi järgmiste ainetena: – koobalt(II)oksiid – koobalt(III)oksiid – alumiiniumoksiid – alumiiniumkoobaltoksiid

- Sama IUBMB-numbriga ensüüm-kontsentrante võib käsitada sama ainenä, kuigi neid toodetakse eri tootmisorganismidega, kui nende ohuomadused ei erine oluliselt ja tagavad sama klassifikatsiooni.

Mitme koostisosaga ained

Direktiiviga 67/548/EMÜ reguleeriti ainete turuleviimist. Aine tootmisviis ei olnud oluline. Seetõttu kanti EINECS-loetellu turuleviidud mitme koostisosaga ained juhul, kui sinna olid kantud *kõik* üksikkoostisosad, nt oli difluorobenseeni isomeerisegu hõlmatud järgmiste EINECS-kirjetega: 1,2-difluorobenseen (206-680-7), 1,3-difluorobenseen (206-746-5) ja 1,4-difluorobenseen (208-742-9), kuigi isomeerisegu ise EINECS-loetelust puudus.

Seevastu nõutakse REACH-määruses toodetava aine registreerimist. Iga juhtumi korral otsustatakse eraldi, mis määral hõlmab tootmise määratlus aine tootmise eri etappe (nt eri puhastus- või destilleerimisetappe). Kui toodetakse mitme koostisosaga ainet, tuleb see registreerida (v.a kui see on hõlmatud selle üksikkoostisosade registreeringutega, vt peatükk 4.2.2.4) – näiteks kui toodetakse difluorobenseeni isomeerisegu, tuleb difluorobenseen registreerida isomeeriseguna. Mitme koostisosaga ainet korral ei ole siiski vaja katsetada ainet kui sellist, kui aine ohuprofiili saab piisavalt täpselt kirjeldada selle üksikkoostisosade teabe alusel. Kui üksikisomeere 1,2-difluorobenseeni, 1,3-difluorobenseeni ja 1,4-difluorobenseeni toodetakse eraldi ning segatakse kokku hiljem, tuleb üksikisomeerid registreerida ja isomeerisegu käsitatakse seguna.

Põhikoostisosadest A, B ja C koosnevat mitme koostisosaga ainet ei käsitata samana kui põhikoostisosadest A ja B koosnevat mitme koostisosaga ainet või ainet A, B, C ja D reaktsioonimassi.

- Mitme koostisosaga ainet ei käsitata samana kui ainet, mis sisaldab üksnes mõnd selle üksikkoostisosa.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
207-205-6	2,5-difluorotolueen	Kumbki aine ei ole sama kui difluorotolueeni isomeerisegu, sest kumbki aine on kõigist võimalikest isomeeridest üksnes üks.
207-211-9	2,4-difluorotolueen	

- Mitme koostisosaga aine registreerimine ei hõlma üksikkoostisosi.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
208-747-6	1,2-dibromoetüleen	Aine on cis- ja trans-isomeeride segu. Üksikained (1Z)-1,2-dibromoeteen ja (1E)-1,2-dibromoeteen ei ole kaetud isomeerisegu registreerimisega.

UVCB-ained

- Koostisosade kitsa jaotusega UVCB-ainet ei käsitata samana kui koostisosade laiemal jaotusega UVCB-ainet ning vastupidi.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
288-450-6	Amiinid, C12-18-alküül, atsetaadid	Ained „amiinid, C12-14-alküül, atsetaadid“ või „amiinid C12-20-alküül, atsetaadid“ või „amiinid, dodeküül- (C12-alküül), atsetaadid“ või paarisarvuliste alküülahelaga ained ei ole samad kui see aine.

- Ainet, mida kirjeldatakse taksonoomilise liigi või perekonna järgi, ei käsitata samana kui ainet, mis on eraldatud muust liigist või perekonnast.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
296-286-1	Glütseriidid, päevalilleõli di-	Seda ainet ei käsitata sama aina mis soja diglütseriidid (EINECS: 271-386-8) ega tahkerasva diglütseriidid (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Linaseemneõli, epoksiiditud	Seda ainet ei käsitata oksüdeeritud linaseemneõlina (EINECS: 272-038-8) maleaaditud linaseemneõlina (EINECS: 268-897-3) ega epoksiiditud riitsinusõlina (EINECS-loetelus puudub).

- Puhastatud ekstrakti või kontsentraati käsitatakse muu aina kui ekstrakti.

Näited		
EÜ number	Nimetus	Eeskiri
232-299-0	Rapsiõli Ekstraktiivained ning nende füüsikaliselt modifitseeritud derivaadid. Koosneb peamiselt rasvhapete eruukhappe, linoolhappe ja oleiinhappe glütseriididest. (Brassica napus, Cruciferae)	Aine „(Z)-dokos-13-eenhappe (erukhappe)“ on aine „rapsiõli“ koostisosana. Eruukhappe ei ole sama kui rapsiõli, sest see on eraldatud rapsiõlist puhta aina; eruukhappel on oma EINECS-kirje (204-011-3). Palmitiinhappe, oleiinhappe, linoolhappe, eruukhappe ja eikonseenhappe eraldatud segu ei ole sama kui rapsiõli, sest kogu õlis on ka muid koostisosi.

6. Aine identifitseerimisandmed päringus

Ainete identifitseerimise ja nimetamise juhised on esitatud selle juhendi peatükis 4. Käesolev juhend kirjeldab põhimõtteid, kuidas selgitada, kas ained on REACH- ja CLP-määruse kontekstis samad. Seda on allpool ainete uurimise korral täpsemalt kirjeldatud.

Artikli 4 kohaselt võib iga tootja või importija, vastutades endiselt täielikult oma REACH-kohustuste täitmise eest, nimetada enda esindajaks kolmanda isiku kõigi III jaotise kohastes menetlustes, mis hõlmavad arutelusid teiste tootjate või importijatega.

Kõikide ainete korral peab võimalik registreerija esitama enne registreerimist ECHA-le päringu, et saada teada, kas sama aine kohta on juba esitatud registreerimistaotlus (REACH-määruse artikkel 26). Päring peab sisaldama järgmist:

- võimaliku registreerija isikuandmed, nagu on sätestatud REACH-määruse VI lisa punktis 1, v.a kasutuskohad;
- aine identifitseerimisandmed, nagu on sätestatud REACH-määruse VI lisa punktis 2;
- mis nõutava teabe tõttu peab võimalik registreerija tegema selgroogsete loomadega uusi uuringuid;
- mis nõutava teabe tõttu peab võimalik registreerija tegema muid uusi uuringuid.

Võimalik registreerija peab esitama aine identifitseerimisandmed ja nimetuse käesoleva juhendi 4. peatükis kirjeldatud eeskirjade järgi.

ECHA teeb kindlaks, kas sama aine on varem registreeritud. Seda tehakse ka selle juhenddokumendi peatükis 4 sätestatud eeskirjade alusel. Tulemusest teatatakse võimalikule registreerijale ning samuti kõigile varasematele registreerijaile ja muudele võimalikele registreerijaile.

Päringu esitamise menetluse lisateave on *andmete jagamise juhendis* aadressil ja ECHA veebilehel:

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

7. Näited

Järgmistel lehekülgedel olevad näited selgitavad, kuidas kasutaja saab kasutada juhendi eeskirju. Näited ei selgita ühtki REACH-kohustuste pretsedenti.

Näited:

- Dietüülperoksüdikarbonaat on sellise ühe koostisosaga aine näide, mis sisaldab lahustit, mis toimib ka stabilisaatorina (vt peatükk 7.1).
- Solimidiin on ühe või mitme koostisosaga aine näide (vt peatükk 7.2).
- Tootmisreaktsioonis tekkiv isomeerisegu on mitme koostisosaga aine näide (vt peatükk 7.3). Varem oli see aine hõlmatud üksikisomeeride EINECS-kirjetega.
- Lõhnaine AH on sellise aine näide, mida toodetakse eri variantides, mida saab kirjeldada viie koostisosa reaktsioonimassina ja nende kontsentratsioonivahemike järgi (vt peatükk 7.4). Näites eiratakse põhjendatult 80% ja 10% lävendeid.
- Mittemetalsed mineraalid, sh montmorilloniit, on näide täpselt määratletud aine kohta, mida tuleb füüsikaliste omaduste alusel täiendavalt kirjeldada (vt peatükk 7.5).
- Eeterlik lavendliõli on taimedest saadud UVCB-aine näide (vt peatükk 7.6).
- Krüsanteemiõli ja sellest eraldatud isomeerid on edasi töödeldud bioloogilist päritolu UVCB-aine näide (vt peatükk 7.7).
- Aine „fenool, isopropüülitud, fosfaat“ on muutuva koostisega ja täielikult määratlematu koostisega UVCB-aine näide (vt peatükk 7.8).
- Kvaternaarsed ammooniumiühendid on süsinikahela varieeruva pikkusega ainete näide (vt peatükk 7.9).
- Naftasaaduste, bensiini segu ja gaasiõlide kaks näidet on peatükis 7.10.
- Ensüümide lakaasi ja amülaasi identifitseerimise kaks näidet on peatükis 7.11.

7.1. Dietüülperoksüdikarbonaat

Dietüülperoksüdikarbonaati (EÜ nr 238-707-3, CAS-nr 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) toodetakse 18% lahuseana isododekaanist (EÜ nr 250-816-8, CAS-nr 31807-55-3). Isododekaan toimib ka plahvatusohtlikkuse stabilisaatorina. Suurim võimalik kontsentratsioon, mis tagab aine ohutu käitlemise, on 27% lahus.

Kuidas peab seda ainet registreerimiseks identifitseerima ja nimetama?

REACH-määruses oleva aine määratluse järgi tuleb välja jätta lahustid, mida võidakse eraldada aine püsivust mõjutamata või koostist muutmata. Nagu eespool öeldud, toimib isododekaan ka stabilisaatorina ja seda ei saa täielikult eraldada aine plahvatusohtlikkuse tõttu, seega tuleb käsitada isododekaani peale lahusti ka lisaainena. Ainet ennast tuleb sellegipoolest käsitada ühe koostisosaga ainenäide. Sel põhjusel tuleb aine registreerida lahuseana, millel on isododekaani vähim kontsentratsioon, mis tagab aine ohutu käitlemise:

dietüülperoksüdikarbonaat (ülemine piirkontsentratsioon: 27%). Isodekaan tuleb registreerida lisaainena ja nimetada selle stabiliseeriv funktsioon.

7.2. SOLIMIDIIN

Toodetav metanoolilahus sisaldab solimidiini (EÜ nr 214-947-4; CAS-nr 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) ja imidasooli (EÜ nr 206-019-2; CAS-nr 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Kui lahusti metanool on eraldatud ja optimeeritakse tootmisprotsessi, on solimidiini puhtusvahemik 74–86% ja imidasoolil 4–12%.

Kuidas peab seda ainet registreerimiseks identifitseerima ja nimetama?

REACH-määruses oleva aine määratluse järgi tuleb välja jätta lahustid, mida võidakse eraldada aine püsivust mõjutamata või koostist muutmata. Käesoleval juhul saab metanooli

kergesti eraldada; registreerida tuleb lahustivaba aine.

Üldiselt käsitatakse ainet ühe koostisosaga ainena, kui ühe põhikoostisosa kontsentratsioon on $\geq 80\%$, ja mitme koostisosaga ainena, kui mitme põhikoostisosa kontsentratsioon on $\geq 10\% \dots < 80\%$. Käesolev näide on piirjuhtum, sest koostisosade kontsentratsioon ei vasta nendele tingimustele. Sel põhjusel saab ainet käsitada ühe koostisosaga ainena (solimidiin) või mitme koostisosaga ainena (solimidiini ja imidasooli reaktsioonimass).

Sellisel piirjuhul saab otsustada põhikoostisosade tüüpilise kontsentratsiooni järgi, kuidas on ainet kõige parem kirjeldada:

(1) Kui solimidiini tüüpiline kontsentratsioon on 77% ja imidasoolil 11%, on soovitatav käsitada ainet solimidiini ja imidasooli reaktsioonimassina;

(2) Kui solimidiini tüüpiline kontsentratsioon on 85% ja imidasoolil 5%, on soovitatav käsitada ainet ühe koostisosaga aine solimidiinina.

7.3. Isomeerisegu

Aine on kahe isomeeri segu (reaktsioonimass), mis on tekkinud tootmisel reaktsiooni käigus. Üksikisomeerid olid teatatud EINECS-loetellu. Direktiiviga 67/548/EMÜ reguleeriti ainete turuleviimist. Et aine tootmismeetod ei olnud oluline, kanti EINECS-loetellu segu isomeerid erialdi kirjetena. REACH-määruses aga nõutakse toodetavate ainete registreerimist. Iga juhtumi korral otsustatakse eraldi, mis määral tähendavad aine tootmisetapid tootmist. Kui isomeerisegu registreeritakse mitme koostisosaga ainena (juhendi peatüki 4.2.2 järgi), ei ole vaja katsetada ainet kui sellist, kui aine ohuprofiili saab piisava täpsusega kirjeldada üksikkoostisosade teabe alusel.

1. Nimetus ja muud identifikaatorid

Näited	
IUPAC-nimetus või muu rahvusvaheline (aine) keemiline nimetus	2,2'-[[[4-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanooli ja 2,2'-[[[5-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanooli reaktsioonimass
Muud (aine) nimetused	2,2'-[[[metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanool Aine „etanool, 2,2'-[[[metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bis-“ ja vee reaktsioonimass Aine „etanool, 2,2'-[[[metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bis-“ (9CI) isomeeriühend
EÜ number (aine) EÜ nimetus EÜ kirjeldus	Ainet ei ole EÜ numbrit, sest isomeeride segu ei ole esitatud EINECS-loetelus. Ainet hõlmasid siiski koostisosade EINECS-kirjed (279-502-9 ja 279-501-3).
CAS-number (aine) CAS-nimetus	Puudub Puudub
EÜ number (koostisosa A) EÜ nimetus EÜ kirjeldus	279-502-9 2,2'-[[[4-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanool /
EÜ number (koostisosa B) EÜ nimetus EÜ kirjeldus	279-501-3 2,2'-[[[5-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanool /
CAS-number (koostisosa A) CAS-nimetus	80584-89-0 Etanool, 2,2'-[[[4-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bis-
CAS-number (koostisosa B) CAS-nimetus	80584-88-9 Etanool, 2,2'-[[[5-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bis-
Muu tunnuscode Viide	ENCS-nr 5-5917

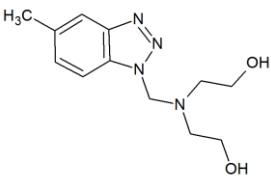
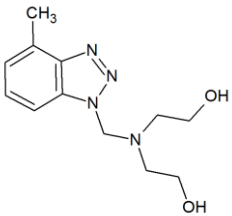
2. Koostise teave – põhikoostisosad

Põhikoostisosad						
	IUPAC-nimetus	CAS-number	EÜ number	Molekulvalem Hilli meetod	Tüüpiline kontsentratsioon (massi-%)	Kontsentratsioonivahemik (massi-%)
A	Etanool, 2,2'-[[[4-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
B	Etanool, 2,2'-[[[5-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

Põhikoostisosad	
Muud nimetused	
A	2,2'-[[[4-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanool
B	2,2'-[[[5-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanool

Põhikoostisosad		
	EÜ nimetus	EÜ kirjeldus
A	2,2'-[[[4-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanool	/
B	2,2'-[[[5-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bisetanool	/

Põhikoostisosad		
	CAS-nimetus	CAS-number
A	Etanool, 2,2'-[[[4-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bis-	80584-89-0
B	Etanool, 2,2'-[[[5-metüül-1H-bensotriasool-1-üül)metüül]imino]bis-	80584-88-9

Põhikoostisosad			
	Molekulvalem (CAS-meetod)	Struktuurivalem	SMILES-kood
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Põhikoostisosad		
	Molekulmass (g·mol ⁻¹)	Molekulmassivahemik
A	250	/
B	250	/

7.4. Lõhnaaine AH

Lõhnaaine AH koosneb γ -(iso- α)-metüülionoonist ja selle isomeeridest. Ainet toodetakse kolmes variandis (A, B ja C), mille isomeeride suhtarv on erinev.

Alljärgnevas tabelis on variantide koostise ülevaade.

Lõhnaaine AH variantide koostis				
Kontsentratsioonivahemik [%]	Variant A	Variant B	Variant C	Vahemik kokku
γ -(iso- α)-metüülionoon	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
δ -(iso- β)-metüülionoon	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
α -n-metüülionoon	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
γ -n-metüülionoon	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0,5-4
β -n-metüülionoon	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15	0,5-15
pseudometüülionoonid	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3	0,5-3

Aine identifitseerimiseks on mitu võimalust:

- Variant A sisaldab vähemalt 80% γ -(iso- α)-metüülionooni isomeeri ja seda saab seetõttu pidada ühe koostisosaga aineks, mis põhineb γ -(iso- α)-metüülionooni isomeeril, ning muud isomeerid on lisandid.
- Variandid B ja C sisaldavad < 80% γ -(iso- α)-metüülionooni isomeeri ja \geq 10% muid isomeere. Seetõttu võib neid käsitada mitme koostisosaga ainetena.
 - variant B on γ -(iso- α)-metüülionooni (65-75%) ja α -n-metüülionooni (10-20%) reaktsioonimass, kus muud isomeerid on lisandid;
 - variant C on γ -(iso- α)-metüülionooni (50-60%) ja α -n-metüülionooni (20-30%) reaktsioonimass, kus muud isomeerid on lisandid.

Koostis varieerub ja mõnikord on isomeeri \geq 10% (siis oleks see põhikoostisosa) ning mõnikord < 10% (siis oleks see lisand).

Võimalik oleks registreerida eri variandid eraldi. See tähendaks kolme registreerimist. Andmete vastastikune võrdlemine võib siiski olla põhjendatud.

Alternatiivina saab kaaluda järgmisi võimalusi:

- Ühekordne registreerimine ühe koostisosaga ainenä, millel on kaks allvarianti. Sellisel juhul erinevad allvariandid 80% reeglist (vt peatükk 4.2.1).
- Üks registreerimine määratletud 5 isomeeri reaktsioonimassina (mitme koostisosaga aine). Sellisel juhul erineb mõni isomeer (põhikoostisosa) 10% lävendist, mis eristab põhikoostisosa lisanditest (vt peatükk 4.2.2).
- Üks registreerimine määratletud reaktsioonimassina, kus koostise varieeruvust kirjeldatakse üksikisomeeride koguvahemike abil. NB!

NB!

- Kõigil kolmel variandil on samad või väga sarnased füüsikalis-keemilised omadused.
- Kõigil kolmel variandil on samasugune kasutusala ja samasugused kokkupuutestsenaariumid.
- Kõikidel variantidel on samasugune ohuklassifikatsioon ja märgistus ning nende ohutuskaartide ja kemikaaliohutuse aruannete sisu on sama.
- Olemasolevad katseandmed (ja tulevased katsed) hõlmavad kõigi kolme variandi varieeruvust.

Siin näites kirjeldatakse, kuidas identifitseerida ainet, mis on määratletud 5 isomeeri reaktsioonimassina (mitme koostisosaga aine). Põhjendus on vajalik seoses kõrvalekaldumisega 80% reeglist (vt peatükk 4.2.1) ja 10% lävendist (mitme koostisosaga aine määratlus, vt peatükk 4.2.2). Et iga varianti toodetakse lõplikul kujul, tuleb kõiki kolme varianti kirjeldada registreerimistoimikus. Samas võib formaalsetel põhjustel olla vaja registreerida vähemalt kaks ainet: 1) γ -(iso-a)-metüülionoon ja 2) γ -(iso-a)-metüülionooni ja α -n-metüülionooni reaktsioonimass.

Aine identifitseerimine

Lõhnaainet AH toodetakse kolmes eri variandis (A, B ja C), millel on sama kvalitatiivne, kuid erinev kvantitatiivne koostis. Kõiki kolme varianti kirjeldatakse samas mitme koostisosaga aine registreerimistoimikus. Kuigi see tähendab, et määratlust ei ole täpselt järgitud, on mitme koostisosaga ainenäite registreerimine põhjendatud, sest 1) olemasolevad katseandmed käsitlevad kõigi kolme variandi varieeruvust; 2) kõigil kolmel variandil on väga sarnased füüsikalis-keemilised omadused; 3) kõigil variantidel on samasugune ohuklassifikatsioon ja märgistus (seega on ohutuskaardid identsed) ning 4) kõigil kolmel variandil on samasugused kasutusala ja kokkupuutestsenaariumid (seega on kemikaaliohutuse aruanded sarnased).

1. Nimetus ja muud identifikaatorid

IUPAC-nimetus või muu rahvusvaheline keemiline nimetus	Ühendite 3-metüül-4-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)but-3- een-2-ooni, 3-metüül-4-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)but-3- een-2-ooni, [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)pent-1- een-3-ooni, 1-(6,6-metüül-2-metüleentsükloheks-1-üül)pent-1- een-3-ooni ja 1-(2,6,6-trimetüül-1-tsüklohekseen-1-üül)pent-1- teen-3-ooni reaktsioonimass
Muud nimetused	γ -metüülionoon, variant A γ -metüülionoon, variant B γ -metüülionoon, variant C
EÜ number	Puudub
EÜ nimetus	/
EÜ kirjeldus	/

CAS-number	Puudub
CAS-nimetus	/

2. Koostise teave – põhikoostisosad

Teoreetiliselt võivad esineda ka muud enantiomeerid. Analüüsiti järgmisi isomeere:

Põhikoostisosad						
	IUPAC-nimetus	CAS-number	EÜ number	Molekulvalem Hilli meetod	Vähim kontsentratsioon (massi-%)	Suurim kontsentratsioon (massi-%)
A	3-metüül-4-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)but-3-een-2-oon	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
B	3-metüül-4-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)but-3-een-2-oon	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)pent-1-een-3-oon	127-42-4	204-842-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	30
D	1-(6,6-metüül-2-metüleentsükloheks-1-üül)pent-1-een-3-oon	Puudub	Puudub	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimetüül-1-tsüklohekseen-1-üül)pent-1-een-3-oon	127-43-5	204-843-7	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	15

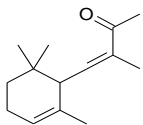
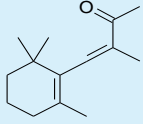
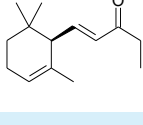
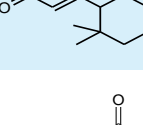
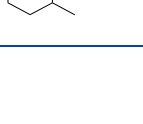
Põhikoostisosad	
Muud nimetused	
A	α-iso-metüülionoon; γ-metüülionoon
B	β-iso-metüülionoon; δ-metüülionoon
C	α-n-metüülionoon

D	γ -n-metüülionoon
E	β -n-metüülionoon

Põhikoostisosad		
	EÜ nimetus	EÜ kirjeldus
A	3-metüül-4-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)-3-buteen-2-oon	/
B	3-metüül-4-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)-3-buteen-2-oon	/
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)pent-1-een-3-oon	/
D	1-(2,6,6-trimetüül-1-tsüklohekseen-1-üül)pent-1-een-3-oon	/
E	1-(2,6,6-trimetüül-1-tsüklohekseen-1-üül)pent-1-een-3-oon	/

Põhikoostisosad		
	CAS-nimetus	CAS-number
A	3-buteen-2-oon, 3-metüül-4-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)-	127-51-5
B	3-buteen-2-oon, 3-metüül-4-(2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül)-	79-89-0
C	1-penteen-3-oon, 1-[(1R)-2,6,6-trimetüül-2-tsüklohekseen-1-üül]-, (1E)-	127-42-4
D	Puudub	Puudub
E	1-penteen-3-oon, 1-(2,6,6-trimetüül-1-tsüklohekseen-1-üül)-	127-43-5

Põhikoostisosad		
	Muu tunnuskoode	Viide
A	2714 07.036	FEMA ELi lõhnaainete register
B	07.041	ELi lõhnaainete register
C	2711 07.009	FEMA ELi lõhnaainete register
D	Puudub	Puudub
E	2712 07.010	FEMA ELi lõhnaainete register

Põhikoostisosad			
	Molekulvalem (CAS-meetod)	Struktuurivalem	SMILES-kood
A	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
B	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
C	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>
D	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem>
E	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>

Põhikoostisosad		
	Molekulmass (g·mol⁻¹)	Molekulmassivahemik
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Koostise teave – lisandid ja lisaained

Lisandid						
	IUPAC-nimetus	CAS-number	EÜ number	Molekulvalem	Tüüpiline kontsentratsioon (massi-%)	Kontsentratsioonivahemik (massi-%)
F						
määratlemata lisandite arv:				11 (pseudometüülionoonid)		
määratlemata lisandite kontsentratsioon kokku:				0,5–3 massi-%		
Lisaained						
	IUPAC-nimetus	CAS-number	EÜ number	Molekulvalem	Tüüpiline kontsentratsioon (massi-%)	Kontsentratsioonivahemik (massi-%)
G	Butüülhüdrosütolueen (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0,1	0,05–0,15

4. Variantide teave

Kolme variandi viie põhikoostisosa kontsentratsioonivahemikud:

Kontsentratsioonivahemik [%]	Variant A	Variant B	Variant C
γ-(iso-α)-metüülionoon	80 - 85	65 - 75	50 - 60
δ-(iso-β)-metüülionoon	6 - 10	3 - 7	3 - 7
α-n-metüülionoon	3 - 11	10 - 20	20 - 30
γ-n-metüülionoon	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4
β-n-metüülionoon	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15
pseudometüülionoonid	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Mineraalid

Mineraal on määratletud kui anorgaaniliste koostisosade kombinatsioon maakoos leiduval kujul, millel on iseloomulik keemiline koostis ja kristallivorm (väga kristalsest kuni amorfse aineni) ning iseloomulikud füüsikalise-keemilised omadused.

Mineraalid on registreerimiskohustusest vabastatud, kui need vastavad looduses esineva aine määratlusele (REACH-määruse artikli 3 lõige 39) ja kui need on keemiliselt modifitseerimata (REACH-määruse artikli 3 lõige 40). See kehtib mineraalide kohta, mille keemiline struktuur püsib samana keemilises protsessis või töötlemises või füüsikalisel mineraloogilisel muutmisel, näiteks lisandite eemaldamisel.

Kuigi teatud mineraale saab kirjeldada üksnes keemilise koostise järgi (ühe koostisosaga ained: vt peatükk 4.2.1; mitme koostisosaga ained: vt peatükk 4.2.2), ei piisa muude mineraalide identifitseerimiseks üksnes nende keemilisest koostisest (vt peatükk 4.2.3).

Erinevalt muudest ühe või mitme koostisosaga ainetest tuleb paljusid mineraale identifitseerida nende keemilise koostise *jasisestruktuuri* järgi (mis selgub nt röntgendifraktsiooni abil), sest need näitajad on sisuliselt mineraalide põhiindikaatorid ja määravad nende füüsikalise-keemilised omadused.

Muude mitme koostisosaga ainete korral tuleb mineraali (st anorgaaniliste koostisosade kombinatsiooni) identifitseerimise osana kasutada CAS-numbrit. Eri koostisosade kirjeldamiseks kasutatakse süstemaatilises mineraloogias määratletud anorgaaniliste koostisosade CAS-numbreid. Kui toodetakse üksikut anorgaanilist koostisosa (ühe koostisosaga ainet), tuleb aine identifitseerimisel kasutada selle CAS-numbrit. Näited:

- Mineraalne kaoliin (EINECS-nr 310-194-1, CAS-nr: 1332-58-7) koosneb põhiliselt primaarsetest ja sekundaarsetest kaoliniitidest (EINECS-nr 215-286-4, CAS: 1318-74-7), mis on hüdraatunud alumosilikaatsavi.

Kui kaoliini üksikkoostisosa, nt kaoliniidi tootmisel kasutatakse kaoliini rafineerimist ja aine CAS-/EINECS-number on EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Mineraalne bentoniit (EINECS-nr: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), mille kirjeldus EINECS-loetelus on „peamiselt montmorilloniidist koosnev kolloidsavi“. Sisaldab suures osas anorgaanilist koostisosa montmorilloniiti (EINECS-nr: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), kuid mitte ainult.

Kui toodetakse puhast montmorilloniiti (EINECS-nr 215-288-5, CAS: 1318-93-0), märgitakse CAS-numbriga, et aine on just montmorilloniit.

NB! Bentoniiti (EINECS-nr 215-108-5, CAS: 1302-78-9) ja montmorilloniiti (EINECS-nr 215-288-5, CAS: 1318-93-0) ei käsitata sama ainaena.

Kokkuvõtteks võib öelda, et mineraal nimetatakse tavaliselt selle anorgaanilis(t)e koostisosa(d)e kombinatsiooni järgi. Neid võib käsitada kas ühe või mitme koostisosaga ainetena (üldjuhised on peatükkides 4.2.1 ja 4.2.2). Teatud mineraale tuleb identifitseerimiseks kirjeldada peale keemilise koostise ka füüsikaliste omaduste või protsessiparameetrite järgi (vt peatükk 4.2.3). Näited on alljärgnevas tabelis.

Mineraalide näited

Nimetus	CAS	EINECS	Lisakirjeldus
Kristobaliit	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (kristallisüsteem: kuup/nelinurk)
Kvarts	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (kristallisüsteem: kolmnurk/kuusnurk)
Diatomiit	61790-53-2	-	Teised nimetused: kiiselguur, Celite. Kirjeldus: Pehme tahke ränimaterjal, mis on tekkinud ränivetikate toese kivististest. Koosneb peamiselt ränidioksiidist.
Dolomiit	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ · ½Ca · ½Mg
Päevakivi rühma mineraalid	68476-25-5	270-666-7	Anorgaaniline aine, mis on kõrge temperatuuriga kaltsineerimise reaktsioonisaadus, kus eri kogustes alumiiniumoksiid, baariumoksiid, kaaliumoksiid, magneesiumoksiid, ränioksiid ja strontsiumoksiid liituvad homogeenseks ja iooniliseks kristallmaatriksiks.
Talk	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Vermikuliit	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

Mineraalide korral nõutav analüütiline teave

Elementkoostis	Keemiline koostis annab üldise ülevaate mineraali koostisest, olenemata koostisosade arvust ja nende osakaalust mineraalis. Kokkuleppeliselt väljendatakse keemilist koostist oksiidide kaudu.
Spektraalandmed (XRD või samaväärne)	XRD või muude tehnikatega saab mineraale identifitseerida nende kristallograafilise struktuuri järgi. Mineraali identifitseerivad iseloomulikud XRD-andmed või sobivad alternatiivsed andmed peab esitama koos analüütilise meetodi lühikirjelduse või kirjandusviidetega.
Tüüpilised füüsikaliskemilised omadused	Konkreetsedel mineraalidel võivad olla näiteks järgmised iseloomulikud füüsikaliskemilised omadused, mille järgi saab neid identifitseerida: <ul style="list-style-type: none"> - Väga väike kõvadus - Punduvus - Diatomiidi vorm (optilise mikroskoobiga) - Väga suur tihedus - Eripindala (lämmastiku adsorptsiooniga)

7.6. Hübridlavendli eeterlik õli

Eeterlikke õlisid saadakse taimedest, mistõttu võib eeterlikke õlisid iseloomustada ka taimsete ainetena.

Üldiselt on taimsed ained keerulised looduslikud ained, mida saadakse taime või selle osade töötlemisel, nt ekstraheerimise, destilleerimise, pressimise, fraktsioonimise, puhastamise, kontsentreerimise või kääritamise. Ainete koostis on taksonoomilisest perekonnast ja liigist, taimede kasvutingimustest ja koristusajast ning töötlemismeetoditest.

Eeterlikke õlisid saab kirjeldada põhikoostisosade järgi, nagu tehakse mitme koostisosaga ainete korral. Eeterlikes õlides võib olla kuni mitusada koostisosa, mille olemus võib sõltuda paljudest teguritest (nt perekonnast, kasvutingimustest, koristusperioodist, töötlemisest). Sageli ei piisa UVCB-ainete määramisel seetõttu üksnes põhikoostisosade kirjeldamisest. Eeterlikku õli tuleb kirjeldada kasutatava taime ja selle töötlemisprotsessi abil peatüki 4.3.1 järgi (lähitudes UVCB-aine 3. alltüübist).

Sageli on eeterlike õlide kohta olemas tööstusstandardid (paljude eeterlike õlide kohta ka ISO-standardid). Standardite teabe võib esitada lisateabena. Aine identifitseerimisel tuleb siiski lähtuda ainest selle toodetaval kujul.

Näide kirjeldab eeterlikku lavandiiniõli, mille kohta on olemas ISO standard (ISO 8902-1999).

1. Nimetused ja muud identifikaatorid

Allikas

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

Protsess

Aine tootmisel kasutatavate (bio)keemiliste reaktsiooniprotsesside kirjeldus

Lavandula hybrida grosso (Lamiaceae) õisikute veeauruga destilleerimine ja edasine vee eraldamine eeterlikust õlist.

Edasine eraldamine on iseeneslik füüsikaline protsess, mis toimub tavaliselt separaatoris (ümarkolvis), võimaldades kergesti isoleerida eraldunud õli. Selle destilleerimisetapi temperatuur on ligikaudu 40 °C.

Nimetus

IUPAC-nimetus või muu rahvusvaheline keemiline nimetus	<i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) eeterlik õli
EÜ number EÜ nimetus EÜ kirjeldus	297-385-2 Hübriidlavendel, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstrakt Ekstraktiivained ja nende füüsikaliselt modifitseeritud derivaadid, nagu tinktuurid, tahked valmistised, absoluteeritud valmistised, eeterlikud õlid, õlivaigud, terpeenid, terpeenivabad fraktsioonid, destillaadid, jäägid jne, mis on saadud organismist <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³¹ .
CAS-number CAS-nimetus	93455-97-1 Hübriidlavendel, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstrakt

³¹ „Labiatae“ ja „Lamiaceae“ on sünonüümid.

2. Koostise teave – teadaolevad koostisosad

Teadaolevad koostisosad					
	kemikaali nimetus EK CAS IUPAC muud	Number EK CAS	Mol. Molekulv alem (Hilli meetod)	Tüüpiline kontsentra atsioon (massi-%)	Kontsentr atsiooniv ahemik (massi- %)
A	EU linalüülatsetaat CAS 1,6-oktadien-3-ool, 3,7- dimetüül-, atsetaat IUPAC 3,7-dimetüül-okta-1,6-dien- 3-üülatsetaat	EU 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
B	EU linalool CAS 1,6-oktadien-3-ool, 3,7- dimetüül- IUPAC 3,7-dimetüül-okta-1,6-dien- 3-ool	EK 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24 – 35
C	EU bornaan-2-oon CAS bitsüklo[2.2.1]heptaan-2- oon, 1,7,7-trimetüül- IUPAC 1,7,7- trimetüülbitsüklo[2.2.1]-2- heptanoon Muu kamper	EU 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
D	EU tsineool CAS 2-oksabitsüklo[2.2.2]oktaan, 1,3,3-trimetüül- IUPAC 1,3,3-trimetüül-2- oksabitsüklo[2.2.2]oktaan Muu 1,8-tsineool	EU 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7

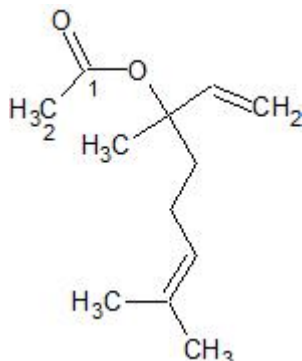
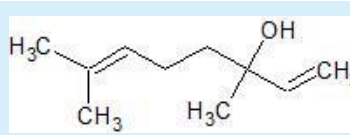
E	<p>EU p-ment-1-een-4-ool</p> <p>CAS 3-tsüklohekseen-1-ool, 4- metüül-1-(1-metüületüül)-</p> <p>IUPAC 1-(1-metüületüül)-4-metüül- 3-tsüklohekseen-1-ool</p> <p>Muu terpineen-4-ool</p>	<p>EU 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5–5
F	<p>EU 2-isopropenüül-5- metüülheks-4-enüülatsetaat</p> <p>CAS 4-hekseen-1-ool, 5-metüül- 2-(1-metüületenüül)-, atsetaat</p> <p>IUPAC 2-(1-metüületenüül)-5- metüülheks-4-een-1-ool</p> <p>muu (±)-lavanduloolatsetaat</p>	<p>EU 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5–3
G	<p>EU DL-borneool</p> <p>CAS bitsüklo[2.2.1]heptaan-2- ool, 1,7,7-trimetüül-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7- trimetüül- bitsüklo[2.2.1]heptaan-2-ool</p> <p>Muu borneool</p>	<p>EÜ 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5–3
H	<p>EU karüofülleen</p> <p>CAS bitsüklo[7.2.0]undets-4-een, 4,11,11-trimetüül-8- metüleen, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11- trimetüül-8-metüleen- bitsüklo[7.2.0]undets-4-een</p> <p>Muu trans-β-karüofülleen</p>	<p>EK 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1–2,5

I	<p>EU (E)-7,11-dimetüül-3-metüleendodeka-1,6,10-trieen</p> <p>CAS 1,6,10-dodekatrieen, 7,11-dimetüül-3-metüleen-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-dimetüül-3-metüleen-1,6,10-dodekatrieen</p> <p>Muu trans-β-farneseen</p>	<p>EU 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	$C_{15}H_{24}$	1,1	0,2–2
J	<p>EU (R)-p-menta-1,8-dieen</p> <p>CAS tsüklohekseen, 1-metüül-4-(1-metüületenüül)-, (4R)-</p> <p>IUPAC (4R)-1-metüül-4-(1-metüületenüül)tsüklohekseen</p> <p>Muu limoneen</p>	<p>EU 227-813-5</p> <p>CAS 5989-27-5</p>	$C_{10}H_{16}$	1	0,5–1,5
K	<p>EU 3,7-dimetüül-okta-1,3,6-trieen</p> <p>CAS 1,3,6-oktatrieen, 3,7-dimetüül-</p> <p>IUPAC 3,7-dimetüül-okta-1,3,6-trieen</p> <p>Muu cis-β-otsimeen</p>	<p>EU 237-641-2</p> <p>CAS 13877-91-3</p>	$C_{10}H_{16}$	1	0,5–1,5

Teadavaolevad koostisosad ≥ 10%

Teadavaolevad koostisosad		
	EÜ nimetus	EÜ kirjeldus
A	linalüülatsetaat $C_{12}H_{20}O_2$	
B	linalool $C_{10}H_{18}O$	

Teadaolevad koostisosad		
	CAS-nimetus	Seotud CAS-numbrid
A	linalüülatsetaat C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Teadaolevad koostisosad			
	Molekulvalem (CAS-meetod)	Struktuurivalem	SMILES-kood
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Teadaolevad koostisosad		
	Molekulmass	Molekulmassivahemik
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Krüsanteemiõli ja sellest eraldatud isomeerid

Ettevõtte toodab krüsanteemiõli, mida ekstraheeritakse taime *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae õite ja lehtede purustamise teel, kasutades selleks lahustina vee ja etanooli segu (1 : 10). Pärast ekstraheerimist eemaldatakse lahusti ja nn puhast ekstrakti rafineeritakse edasistes etappides, mille tulemusel saadakse lõplik krüsanteemiõli.

Samuti eraldatakse ekstraktist kaks isomeeri, mis on järgmiste ainete reaktsioonimass:

jasmoliin I

(tsüklopropaankarboksüülhape, 2,2-dimetüül-3-(2-metüül-1-propenüül)-, (1S)-2-metüül-4-okso-3-(2Z)-2-pentenüül-2-tsüklopenteen-1-üülester, (1R, 3R)-; CAS-nr 4466-14-2), ja

jasmoliin II

(tsüklopropaankarboksüülhape, 3-[(1E)-3-metoksü-2-metüül-3-okso-1-propenüül]-2,2-dimetüül-(1S)-2-metüül-4-okso-3-(2Z)-2-pentenüül-2-tsüklopenteen-1-üülester, (1R, 3R)-; CAS-nr 1172-63-0.

Ettevõtte otsustas sünteesida ka jasmoliini I ja II isomeeride reaktsioonimassi.

Ettevõtte küsib järgmist:

1. Kuidas krüsanteemiõli registreerimisel identifitseerida?
2. Kas õli registreerimine hõlmab eraldatud isomeeride jasmoliini I ja II reaktsioonimassi?
3. Kas kahe isomeeri sünteesitud segu (reaktsioonimassi) võib pidada samaks kui krüsanteemiõlist eraldatud isomeeride segu?

1. Kuidas krüsanteemiõli registreerimisel identifitseerida?

Krüsanteemiõli käsitatakse UVCB-ainena, mida ei saa keemilise koostise alusel piisava täpsusega identifitseerida (üksikasjalikud juhised on peatükis 4.3). Tingimata tuleb kasutada muid identifitseerimisparameetreid, nagu allikat ja protsessi. Krüsanteemiõli on bioloogilist päritolu ja seda tuleb määratleda kasutatud taimeliigi ja -osa ning rafineerimisprotsessi (lahustiga ekstraheerimine) järgi. Tuleb siiski esitada koostisosade keemiline koostis ja identifitseerimisandmed, kui need on teada.

Aine piisava täpsusega identifitseerimiseks on vaja järgmist teavet:

Aine nimetus	Taime <i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , <i>Compositae</i> õli, mis saadakse purustatud õite ja lehtede vee ja etanooli (1 : 10) lahusega ekstraheerimisel
Allikas	
Perekond, liik, alamliik	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , <i>Compositae</i>
Õliks kasutatav taimeosa	Õied ja lehed
Protsess	
Tootmismeetod	Purustamine, seejärel ekstraheerimine

Ekstraheerimislahusti	Vesi : etanool (1:10)			
Koostise teave – teadaolevad koostisosad (massi-%)				
Koostisosa nimetus	EÜ nr	CAS-nr	Vähim kontse ntratsi oon (%)	Suurim kontse ntratsi oon (%)
Püretriin I 2-metüül-4-okso-3-(penta-2,4-dienüül)-tsüklopent-2-enüül-[1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-krüsantemaat	204-455-8	121-21-1	30	38
Püretriin II 2-metüül-4-okso-3-(penta-2,4-dienüül)-tsüklopent-2-enüül-[1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(metoksü-2-metüül-3-oksoprop-1-enüül)-2,2-dimetüültsüklopropanoat	204-462-6	121-29-9	27	35
Tsineriin I 3-(but-2-enüül)-2-metüül-4-oksotsüklopent-2-enüül-2,2-dimetüül-3-(2-metüülprop-1-enüül)tsüklopropanoat	246-948-0	25402-06-6	5	10
Tsineriin II 3-(but-2-enüül)-2-metüül-4-oksotsüklopent-2-enüül-2,2-dimetüül-3-(3-metoksü-2-metüül-3-oksoprop-1-enüül)tsüklopropanoat	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmoliin I 2-metüül-4-okso-3-(pent-2-enüül)tsüklopent-2-enüül-(1R-{1 α [S*(Z)],3 β })-2,2-dimetüül-3-(2-metüülprop-1-enüül)tsüklopropanoat	puudub	4466-14-2	4	10
Jasmoliin II 2-metüül-4-okso-3-(pent-2-enüül)tsüklopent-2-en-1-üül (1R-{1 α [S*(Z)],3 β })-2,2-dimetüül-3-(3-metoksü-2-metüül-3-oksoprop-1-enüül)tsüklopropanoat	puudub	1172-63-0	4	10

Peale selle sisaldab aine kuni 40 koostisosast kontsentratsiooniga < 1%.

Samuti saab ainet identifitseerida mitme koostisosaga ainena, milles on 6 põhikoostisosa (ainete püretriin I, püretriin II, tsineriin I, tsineriin II, jasmoliin I ja jasmoliin II reaktsioonimass).

Ainet käsitatakse looduses esineva ainena, kui tootmisprotsess seisneb ainult purustamises; sellisel juhul on aine registreerimiskohustusest vabastatud, v.a kui aine vastab direktiivis 67/548/EMÜ sätestatud ohtliku ainena klassifitseerimise kriteeriumidele.

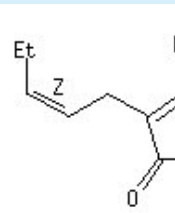
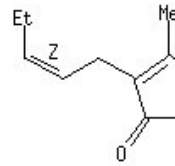
2. Kas õli registreerimine hõlmab eraldatud isomeeride jasmoliini I ja II reaktsioonimassi?

„Taim *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae õli“ registreerimine ei hõlma eraldatud isomeeride jasmoliin I ja II reaktsioonimassi, sest üks koostisosa ei hõlma UVCB-ainet tervikuna ja vastupidi. Isomeeride jasmoliin I ja II reaktsioonimassi käsitatakse eri ainena.

Isomeeride jasmoliin I ja II reaktsioonimassi saab pidada mitme koostisosaga aineks (üksikasjalikud juhised on peatükis 4.2.3), millel on kaks põhikoostisosa.

Aine piisava täpsusega identifitseerimiseks on vaja järgmist teavet:

Aine IUPAC-nimetus	Ühendite (2-metüül-4-okso-3-(pent-2-enüül)tsüklopent-2-enüül-(1R-{1 α [S*(Z)],3 β })-2,2-dimetüül-3-(2-metüülprop-1-enüül)tsüklopropankarboksülaadi) ja (2-metüül-4-okso-3-(pent-2-enüül)tsüklopent-2-ään-1-üül-(1R-{1 α [S*(Z)],3 β (E)})-2,2-dimetüül-3-(3-metoksü-2-metüül-3-oksoprop-1-enüül)tsüklopropankarboksülaadi) reaktsioonimass			
Muu nimetus	Isomeeride jasmoliin I ja jasmoliin II reaktsioonimass			
Aine puhtus	95–98 massi-%			
Koostise teave – põhikoostisosad (massi-%)				
Koostisosa nimetus	EÜ nr	CAS-nr	Vähim kontsentratsioon (%)	Suurim kontsentratsioon (%)
Jasmoliin I 2-metüül-4-okso-3-(pent-2-enüül)tsüklopent-2-enüül-(1R-{1 α [S*(Z)],3 β })-2,2-dimetüül-3-(2-metüülprop-1-enüül)tsüklopropankarboksülaad	puudub	4466-14-2	40	60

Molekulvalem				
Struktuurivalem				
Molekulmass		C ₂₂ H ₃₀ O ₅ M = 374 g/mol		
Jasmoliin II 2-metüül-4-okso-3-(pent-2-enüül)tsüklopent-2-en-1-üül (1R-{1α[S*(Z)],3β})-2,2-dimetüül-3-(3-metoksü-2-metüül-3-oksoprop-1-enüül)tsüklopropankarboksülaat	puudub	1172-63-0	35	65
Molekulvalem				
Struktuurivalem				
Molekulmass		C ₂₁ H ₃₀ O ₃ M = 330 g/mol		

3. Kas kahe isomeeri sünteesitud segu (reaktsioonimassi) võib pidada samaks kui krüsanteemiõlist eraldatud isomeeride segu?

Keemiliselt täpselt määratletud ainete korral, mida kirjeldatakse koostisosade järgi piisavalt, ei ole oluline, kas aine eraldati ekstraktist või sünteesiti seda keemilise protsessiga. Sel põhjusel võib isomeeride jasmoliin I ja II sünteesitud reaktsioonimass olla sama kui taimest *Chrysanthemum* eraldatud isomeeride segu, isegi kui see on saadud teistsuguste tootmisprotsessidega, kui segu puhtus ja põhikoostisosade kontsentratsioonivahemikud on samad.

4. Järeldus

Identifitseeritakse kaks ainet:

1. Taime *Chrysanthemum cinerariaefolium*, *Compositae* õli, mis saadakse purustatud õite ja lehtede vee ja etanooli (1 : 10) lahusega ekstraheerimisel
2. Aine tootmisprotsessist sõltumatu isomeeride jasmoliin I ja II reaktsioonimass.

Kui neid aineid kasutatakse *üksnes* taimekaitsevahendites ja biotsiidides, loetakse need REACH-määruse kohaselt registreerituiks (*artikkel 15*).

7.8. Fenool, isopropüülitud, fosfaat

Aine „fenool, isopropüülitud, fosfaat (3:1)“ on UVCB-aine, mille isopropüülitud üksuse varieeruvust ei saa täielikult määratleda.

1. Nimetus ja muud identifikaatorid

IUPAC-nimetus või muu rahvusvaheline keemiline nimetus	Fenool, isopropüülitud, fosfaat (3:1)
Muud nimetused	Fenool, isopropüülitud, fosfaat Fenool, isopropüülitud, fosfaat (3:1) (põhineb 1:1 moolisuhtega propüleenil ja fenoolil)
EÜ number EÜ nimetus EÜ kirjeldus	273-066-3 Fenool, isopropüülitud, fosfaat (3:1) /
CAS-number CAS-nimetus	68937-41-7 Fenool, isopropüülitud, fosfaat (3:1)

2. Koostise teave – põhikoostisosad

Põhikoostisosad					
IUPAC-nimetus	CAS-number	EÜ number	Molekulvalem Hilli meetod	Tüüpiline kontsentratsioon (massi- %)	Kontsentratsiooniva hemik (massi- %)
Fenool, isopropüülitud, fosfaat (3:1)	68937-41-7	273-066-3	määratlemata		

Põhikoostisosad	
EÜ nimetus	EÜ kirjeldus
Fenool, isopropüülitud, fosfaat (3:1)	/
CAS-nimetus	CAS-number
Fenool, isopropüülitud, fosfaat (3:1)	68937-41-7

7.9. Kvaternaarsed ammooniumühendid

Ettevõtte sünteesib järgmisi aineid:

Aine A

Kvaternaarsed ammooniumühendid, di-C₁₀₋₁₈-alküüldimetüül-, kloriidid

EÜ number 294-392-2

CAS-number 91721-91-4

Süsinikahela pikkuse jaotus:

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%

Aine B

Kvaternaarsed ammooniumühendid, dikookosalküüldimetüül-, kloriidid

EÜ number 263-087-6

CAS-number 61789-77-3

Ettevõtte ei tea aine täpset koostist.

Aine C

Didodeküüldimetüülammooniumbromiid

Aine D

Didodeküüldimetüülammooniumkloriid

Aine E

Ainet E toodetakse didodeküüldimetüülammooniumbromiidi ja didodeküüldimetüülammooniumkloriidi reaktsioonimassina (ainete C ja D reaktsioonimass)

Aine F

Kvaternaarsed ammooniumühendid, di(C₁₄₋₁₈)alküüldimetüülammoonium-, kloriidid

EÜ number 268-072-8

CAS-number 68002-59-5

Süsinikahela pikkuse jaotus:

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

Aine G

Kvaternaarsed ammooniumühendid, di(C₄₋₂₂)alküüldimetüülkloriidid

Süsinikahela pikkuse jaotus (üks priim tähistab üht kaksiksidet, kaks priimi tähistavad üht kolmiksidet):

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

Seni on ettevõtte nimetamisel kasutanud ainult ainet B (kvaternaarsed ammooniumühendid, dikookosalküüldimetüül-, kloriidid, EÜ nr 263-087-6, CAS-nr 61789-77-3), sest see sobib kõigi ainete kohta (ained A–G) kõige paremini. Ettevõtte soovib teada, kas aine B ühekordne registreerimine hõlmab kõiki aineid (A–G).

1. Üldmärkused

Rasvadest ja õlidest saadud või sünteetiliselt süsivesinikke (parafiinid, olefiinid) identifitseeritakse süsinikahela pikkuse jaotuse, päritolu (alküüldeskriptor), funktsionaalrühma (funktsionaalsuse deskriptor; nt ammooniumsulfaat) ja anioonide/katioonide (soola deskriptor; nt kloriid) järgi. Süsinikahela pikkuse jaotus (nt C₈₋₁₈) tähistab

küllastatud

lineaarset (hargnemata) ahelat, mis

sisaldab igat süsinikuaatomite arvu vahemikust (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁, ..., C₁₈), kusjuures kitsam jaotus ei hõlma laiemat ja vastupidi.

Vastasel juhul peaks see olema märgitud nii:

küllastumata (C₁₆ küllastumata)

hargnenud ahealaga (C₁₀ hargnev)

paarisarv süsinikuaatomeid (C₁₂₋₁₈ paarisarv)

Allika järgi kirjeldatud süsinikahelad peavad hõlmama allikas, nt tahkerasvalkүүлamiinis, esinevat jaotust.

Tahkerasvalkүүлamiinid on 99% ulatuses primaarsed hargnemata ahealaga alkүүлamiinid, mille süsinikahelate jaotus on järgmine (Ullmann, 1985) [üks priim tähistab üht kaksiksidet, kaks priimi tähistavad üht kolmiksidet]:

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

2. Kuidas aineid registreerimisel identifitseerida?

Iga ainet võrreldakse ainega B (mida kasutati seni nimetamiseks), et otsustada, kas mõlemat saab pidada samaks.

Ainete A ja B võrdlus

Aine B kookosõlist pärinevas osas on järgmine süsinikahelate pikkuse jaotus (Ullmann, 1985) [üks priim tähistab üht kaksiksidet, kaks priimi tähistavad üht kolmiksidet]:

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

Seega erineb aine A süsinikahelate pikkuste jaotus aine B kookosõli osa jaotusest. Et kummagi aine kvalitatiivne ja kvantitatiivne koostis on oluliselt erinev, ei saa neid pidada samaks.

Ainete B ja C võrdlus

Aine B, „kvaternaarsed ammooniumühendid, dikookosalküüldimetüül-, kloriidid“ kirjeldab süsinikahela eri pikkustega koostisosade segu (C₆₋₁₈, paarisarvulised, lineaarsed, küllastunud või küllastumata), ent aine C kirjeldab üksnes üht koostisosa, millel on üks teadaolev ja küllastunud ahelapikkus (C₁₂) ning teine anioon (bromiid). Sel põhjusel ei saa aine C olla sama kui aine B.

Ainete B ja D võrdlus

Aine B, „kvaternaarsed ammooniumühendid, dikookosalküüldimetüül-, kloriidid“ kirjeldab süsinikahela eri pikkustega koostisosade segu (C₆₋₁₈, paarisarvulised, lineaarsed, küllastunud või küllastumata), ent aine D kirjeldab üksnes üht koostisosa, millel on üks teadaolev ja küllastunud ahelapikkus (C₁₂) ja sama anioon (kloriid). Ainetel B ja D on eri nimetused ning neid ei saa pidada samaks, sest üksikkoostisosa ei hõlma segu ja vastupidi.

Ainete B ja E võrdlus

Aine E on ainete C ja D segu. Mõlemal on küllastunud ahela pikkus C₁₂, kuid erinevad anioonid (bromiid ja kloriid). Aine B „kvaternaarsed ammooniumühendid, dikookosalküüldimetüül-, kloriidid“ kirjeldab süsinikahela eri pikkustega koostisosade segu (C₆₋₁₈, paarisarvulised, lineaarsed, küllastunud või küllastumata), mille anioon on kloriid. Ainet E kirjeldab üksnes süsinikahel pikkusega C₁₂, mille lisaanioon on bromiid. Sel põhjusel ei saa ained B ja E olla samad ning aine E tuleb registreerida eraldi.

Ainete B ja F võrdlus

Aine F „kvaternaarsed ammooniumühendid, di(C₁₄₋₁₈)alküüldimetüülammoonium-, kloriidid“ on süsinikahela eri pikkustega koostisosade segu (C₁₄₋₁₈, paaris- ja paartuarvulised, lineaarsed ja küllastunud). Aine F erineb ainest B nii koostise kui ka süsinikahela jaotuse poolest. Ainel F on kitsas süsinikahela pikkuse jaotus ning lisaks C₁₅- ja C₁₇-süsinikahelad. Sel põhjusel ei saa aineid B ja F pidada samaks.

Ainete B ja G võrdlus

Ained B ja G näivad olevat väga sarnased, sest süsinikahela jaotus on peaaegu samas vahemikus. Aine G hõlmab siiski ka süsinikahela pikkusi C₄, C₂₀ ja C₂₂. Aine G süsinikahela pikkuste jaotus hõlmab suuremat vahemikku kui ainel B. Sel põhjusel ei saa aineid B ja G pidada samaks.

3. Järeldus

Süsvesinikke (parafiinid, olefiinid) saab pidada samaks aineks, kui kõik kolm deskriptorit (alküül, funktsionaalsus ja sool) on samad.

Ülal näidetes on deskriptorid alati erinevad, mille tõttu üksnes aine B registreerimine neid aineid ei hõlma.

7.10. Naftasaadused

Järgmises kahes näites kasutatakse peatüki 4.3.2 konkreetsete UVCB-ainete juhiseid.

7.10.1. Bensiini seguvoog (C4-C12)

1. Nimetus ja muud identifikaatorid

Nimetus

IUPAC-nimetus või muu rahvusvaheline keemiline nimetus	Raskbensiin (nafta), katalüütiliselt konverteeritud
---	---

Allikas

Voo allika identifitseerimine või kirjeldus	Toornafta
--	-----------

Protsess

Töötlemisprotsessi kirjeldus	Katalüütiline reformimine
Süsinikuaatomite arv	C4-C12
Keemistemperatuur või -vahemik	30-220 °C
Muud füüsikalised omadused, nt viskoossus	alla 7 mm ² /s (40 °C) (viskoossus)

EÜ number CAS-number EÜ nimetus / CAS-nimetus EÜ kirjeldus / CAS-kirjeldus	273-271-8 68955-35-1 Raskbensiin (nafta), katalüütiliselt konverteeritud Keeruka koostisega süsivesinikusegu, mis tekib katalüütilise reformimise saaduste destilleerimisel. Koosneb süsivesinikest süsinikuaatomite arvuga valdavalt vahemikus C4–C12 ja keemivahemikuga u 30–220 °C (90–430 °F). Sisaldab suhteliselt suures osas aromaatsid ja hargneva ahelaga süsivesinikke. Võib sisaldada vähemalt 10 mahu-% benseeni.
---	--

2. Koostise teave

Teadaolevad koostisosad			
IUPAC-nimetus	CAS-number	EÜ number	Kontsentratsiooni vahemik (massi-%)
Benseen	71-43-2	200-753-7	1-10
Tolueen	108-88-3	203-625-9	20-25
Ksüleen	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Gaasiõlid (nafta)

1. Nimetus ja muud identifikaatorid

IUPAC-nimetus või muu rahvusvaheline keemiline nimetus	Gaasiõlid (nafta), rasked atmosfäärdestillatsioonist
---	--

Allikas

Voo allika identifitseerimine või kirjeldus	Toornafta
--	-----------

Protsess

Töötlemisprotsessi kirjeldus	Atmosfäärdestilleerimine
Süsinikuaatomite arv	C7–C35
Keemistemperatuur või -vahemik	121–510 °C
Muud füüsikalised omadused, nt viskoossus	20 mm ² /s (40 °C) (viskoossus)
EÜ number CAS-number EÜ nimetus / CAS-nimetus EÜ kirjeldus / CAS-kirjeldus	272-184-2 68783-08-4 Gaasiõlid (nafta), rasked atmosfäärdestillatsioonist Keeruka koostisega süsivesinikusegu, mis saadakse toornafta destilleerimisel. Koosneb süsivesinikest süsinikuaatomite arvuga valdavalt vahemikus C7–C35 ja keemivahemikuga u 121–510 °C (250–950 °F).

2. Keemiline koostis

Teave puudub.

7.11. Ensüümid

Järgmises kahes ensüümikontsentraatide näites kasutatakse peatüki 4.3.2.3 konkreetsete UVCB-ainete juhiseid. Näited on subtilisiin (identifitseeritakse IUBMB nomenklatuuri ja muude koostisosade järgi) ja α -amülaas (identifitseeritakse IUBMB nomenklatuuri ja tootmisorganismi järgi)

7.11.1. Subtilisiin

Ensüümvalk	Subtilisiin
IUBMB-number	3.4.21.62

IUBMB-nimetused (Süsteemne nimetus, ensüümi nimetus, sünonüümid)	Subtilisiin; alkalaas; alkalaas 0,6L; alkalaas 2,5L; ALK-ensüüm; batsillopeptidaas A; batsillopeptidaas B; organismi <i>Bacillus subtilis</i> aluseline proteaas biopraas; biopraas AL 15; biopraas APL 30; kolistinaas; (vt ka kommentaarid); subtilisiin J; subtilisiin S41; subtilisiin Sendai; subtilisiin GX; subtilisiin E; jne.
IUBMB esitatud kommentaarid	Subtilisiin on seriini endopeptidaas, peptidaasi rühma S8 tüüpnaide. See ei sisalda tsüsteiini jääke (kuigi neid leidub homoloogsetes ensüümides). Liigivariandid on muu hulgas subtilisiin BPN (ka subtilisiin B, subtilopeptidaas B, subtilopeptidaas C, nagaraas, nagaraasproteaas, subtilisiin Novo, bakteriaalproteaas Novo) ja subtilisiin Carlsberg (subtilisiin A, subtilopeptidaas A, alkalaas Novo) Varem EC 3.4.4.16 ja lisatud ka kirjesse EC 3.4.21.14. Sarnaseid ensüüme toodavad organismi <i>Bacillus subtilis</i> mitmesugused tüved ja muud perekonna <i>Bacillus</i> liigid [1, 3].
Reaktsioon	Proteiinide hüdroolüüs laia spetsiifilisusega peptiidsidemete suhtes, eelistatavalt suure laenguta jäägi suhtes positsioonis P1. Peptiidamiidide hüdroolüüs.
Reaktsiooni tüüp	Hüdrolaasid; mõjub peptiidsidemele (peptidaasid); seriini endopeptidaasid
EÜ number	232-752-2
EÜ nimetus	Subtilisiin
CAS-number	9014-01-1
CAS-nimetus	Subtilisiin
Ensüümi proteiinikontsentratsioon	26%

Muud koostisosad	
Muud valgud, peptiidid ja aminohapped	39%
sahhariidid	11%
lipiidid	1%
Anorgaanilised soolad	23%
Lisaparaameetrid	
Substraadid ja saadused	proteiinid või oligopeptiidid, vesi peptiidid

7.11.2. α -amülaas

Ensüümvalk	α-amülaas
IUBMB-number	3.2.1.1
IUBMB-nimetused (Süsteemne nimetus, ensüümi nimetus, sünonüümid)	1,4- α -D-glukaanglukanohüdrolaas; glüklogenaas; α -amülaas alfaamülaas; endoamülaas; Taka-amülaas A
IUBMB esitatud kommentaarid	Reageerib tärklise, glükogeeni ning seotud polüsahhariidide ja oligosahhariididega juhuslikult; vabastab redutseerivaid rühmi α -konfiguratsioonis. Eesliide „ α -“ viitab eraldunud vabade suhkrate rühma algsele anomeersele konfiguratsioonile, mitte hüdrolüüsitud sidemetega konfiguratsioonile.
Reaktsioon	1,4- α -D-glükosiidsideme endohüdrolüüs polüsahhariidides, mis sisaldavad vähemalt kolme 1,4- α -sidemega D-glükoosi ühikut

Reaktsiooni tüüp	hüdrolaasid; glükosidaasid glükosidaasid, st O- ja S-glükosüülühendeid hüdrolüüsivad ensüümid glükosüülühendid
EÜ number	232-565-6
EÜ nimetus	α --amülaas
CAS-number	9000-90-2
Seotud CAS-numbrid	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (kõik kustutatud)
CAS-nimetus	α --amülaas
Ensüümi proteiinikontsentratsioon	37%
Muud koostisosad	
Muud valgud, peptiidid ja aminohapped	30%
sahhariidid	19%
Anorgaanilised soolad	14%
Lisaparameetrid	
Substraadid ja saadused	Tärklis; glükogeen; vesi; polüsahhariid; oligosahhariid.

I lisa – abimaterjalid

Selles lisa esitatakse selliste veebilehtede, andmebaaside ja käsiraamatute loetelu, mida saab kasutada abimaterjalina aine identifitseerimisel nõutavate asjakohaste IUPAC-, CAS- ja EÜ nimetuste, CAS- ja EÜ numbrite, molekul- ja struktuurivalemite, sealhulgas SMILES-koodi ning muude parameetrite leidmiseks. Loetelus ei ole kaubanduslikke andmebaase ega suuniseid.

Üldist		
Aine identifitseerimisandmete parameeter	Allikas	Allika kirjeldus
USA tervishoiu- ja sotsiaalministeerium	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Kemikaaliteabe otsimise andmebaasid ja vahendid
Perkin Elmer Informatics	https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	Keemilise struktuuri ja füüsikaliste omaduste teabe ning asjakohase veebilinkidega tasuta andmebaas
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Keemiatarkvara; tarkvara Accord tooteloetelu

Nimetus ja muud identifikaatorid		
Aine identifitseeri misandmete parameeter	Allikas	Allika kirjeldus
IUPAC-nimetus	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	IUPACi ametlik veebileht
	https://iupac.qmul.ac.uk/	IUPACi keemiline nomenklatuur ja soovitused (IUPACi ametlik teave)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	IUPACi keemilise nomenklatuuri põhiväljaanne, uus trükk eeldatavasti 2006
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	IUPACi keemilise nomenklatuuri põhiväljaanne, uus trükk eeldatavasti 2006
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	IUPACi keemilise nomenklatuuri põhiväljaanne, uus trükk eeldatavasti juulis 2005
IUPAC-nimetus	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	IUPACi keemilise nomenklatuuri põhiväljaanne
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Kõigi ühenditüüpide nomenklatuuri sissejuhatus
IUPAC-nimetus	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Kaubanduslik arvutipõhine nimetamisprogramm, mida saab kasutada keskmise keerukusega struktuuriga ühendite nimetamisel. Samuti on olemas vabavara väikeste molekulide jaoks (IUPACi soovitus)

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	IUPACi orgaanilise keemia nomenklatuur (IUPACi soovitus)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Orgaaniliste ühendite triviaalnimetuste ja poolsüstemaatiliste tüvinimetuste täielik loetelu
	http://www.chemexper.com/	Kemikaalikataloogi ChemExper eesmärk on luua ühine ja interneti kaudu vabalt juurdepääsetav kemikaaliandmebaas, milles on kemikaalide ja nende füüsikaliste omaduste teave. Kemikaaliteavet saab iga kasutaja veebibrauseri abil sisestada ja vaadata.
IUBMB-nomenklatuur	https://iubmb.qmul.ac.uk/	IUBMB biokeemianomenklatuuri andmebaas (IUBMB ametlik teave)
Muud nimetused	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Üldnimetused värvaineregistris, rahvusvaheline värvaineregister, neljas veebiväljaanne
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (rahvusvaheline kosmeetikavahendite koostisainete nomenklatuur), hügieenitoodete komisjoni ametlik veebileht
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	USA keskkonnakaitseagentuuri (EPA) loetelu: süsinikahela varieeruva pikkusega ained (alküülvahemikud on tähistatud kui CX-Y)
Muud identifikaatorid	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	Euroopa standardid, Euroopa Standardikomitee ametlik veebileht
EÜ number	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	EÜ loetelu: otsing EINECS-, ELINCS- ja NLP-loetelust ning direktiivi 67/548/EMÜ I lisast
CAS-number	http://www.cas.org	CAS-registri ametlik veebileht
	http://www.chemistry.org	USA Keemiaühingu (American Chemical Society) ametlik veebileht

Molekulvalem ja struktuurivalem		
Aine identifitseerim isandmete parameeter	Allikas	Allika kirjeldus
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html	SMILES-koodi tasuta generaator
Molekulmass ja SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html	ACDChemsketch, vabavara (olemas ka kaubandusliku versioonina)
Füüsikaliskemilised parameetrid	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface	Hindamistarkvara liides EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ on Windowsil põhinev füüsikaliskemiliste omaduste ja keskkonnas käitumise hindamise mudelite kogum, mille on välja töötanud USA keskkonnakaitseagentuuri saastuse ennetamise ja toksiliste ainete piiramise amet ning ettevõtte Syracuse Research Corporation (SRC).
Täiendav tugi konkreetsete ainete korral	Küsimused ja vastused – ECHA Sektoripõhine tugi aine identifitseerimisel – ECHA	Tuge konkreetsete ainete nimetamise ja iseloomustamise lähenemisviiside kohta antakse ECHA veebilehel ning küsimuste ja vastuste jaotises.

II lisa. Tehniline juhend aine identifitseerimisparameetrite järgi

Selle lisa teave on suunatud juhendi kasutajatele, kes ei tunne nomenklatuuri tehnilisi eeskirju, mitmesuguste registrinumbrite kasutamist ega molekul- ja struktuurivalemi teabe, spektraalandmete jt märkimise eeskirju.

Peamiste põhimõtete kokkuvõtte esitatakse sissejuhatavates märkustes ja seejärel suunatakse kasutaja täieliku teabe algallikate juurde.

See ülevaade on lihtsustatud, mitte täielik ega ammendav versioon, ja see ei ole professionaalsele kasutajale piisavalt põhjalik. Seda ei tohi mingil juhul pidada samaväärseks ametlike allikatega.

1 IUPAC- või muu rahvusvahelise nomenklatuuri nimetused

Registreerimisel tuleb esitada ingliskeelne IUPAC-nimetus või mõni muu täpselt määratletud ja rahvusvaheliselt tunnustatud ainenimetus.

IUPAC-nimetus põhineb rahvusvahelisel standardsel keemianomenklatuuril, mille on kehtestanud Rahvusvaheline Puhta Keemia ja Rakenduskeemia Liit (IUPAC) (vt I lisa). IUPAC-nomenklatuuriga nimetatakse süstemaatiliselt nii anorgaanilisi kui ka orgaanilisi aineid. IUPAC-nomenklatuuris kasutatakse aine funktsionaalrühmade liigi ja asendi kirjeldamiseks ees-, lõpp- ning siseliiteid. Näide:

penta-1,3-dieen-1-ool, milles on järgmised osad:

eesliide on *penta-1,3-*

siseliide on *-di-*

lõppliide on **-ool**

põhinimetuse alus (tüvinimetus) on **-een-**

Pidevalt täiendatav reeglistik on välja töötatud paljude aastate jooksul eesmärgiga käsitleda kõikvõimalikke molekule ja lahendada võimalikke vasturääkivusi ning leitud arusaamatusi. IUPAC-eeskirju saab kasutada ainult täpselt määratletud ainete korral.

IUPAC-nimetuse struktuuri üldjuhised on allpool. Üksikasjalikumad juhised on viidatud käesoleva juhendi 4. peatükis.

1.1 Orgaaniline aine

1. etapp. Leidke pikima pideva süsinikahela süsinikuaatomite arv, mis määrab tüvinimetuse alguse:

Süsinikuaatomite arv	Tüvi
1	met-
2	et-
3	prop-

4	but-
5	pent-
6	heks-
7	hept-
8	okt-
N

2. etapp. Leidke, kas süsinikahel on küllastunud, see määrab tüvinimetuse lõpu:

Küllastatus	Side	Lõppliide
Küllastumata	Kaksiksidade Kolmikside	-een -üün
Küllastunud	-	-aan

Mitme kaksik- või kolmiksideme korral tähistatakse sidemete arvu enne lõppliidet vaheliidetega „-mono-“, „-di-“, „-tri-“ jne:

2 kaksiksidemega penteen: pentadieen

3. etapp. Lisage eesliide, lõppliide ja tüvinimetuse täiendused.

NB! Tüvinimetuse korral tohib kasutada ka IUPACi heakskiidetud triviaal- ja poolsüsteematisi nimetusi:

benseen, toluen jt

4. etapp. Kasutage alljärgnevat tabelit:

- Leidke asendus- ja/või funktsionaalrühmad: süsinik- või mittesüsinikrühmad, mis on seotud 1. etapis nimetatud süsinikahelaga.
- Leidke asendus- ja/või funktsionaalrühmade järjekord.
- Lisage esimese ja kõikide järgmiste asendus- ja/või funktsionaalrühmade nimetustele nende eelisjärjestuses lõppliide.
- Lisage muude asendus- ja/või funktsionaalrühmade eesliited tähestiku järjekorras.

Järjestus	Rühm	Valem	Lõppliide	Eesliide
1	Karboksüülhape	R-COOH	-hape	karboksü-
2	Ester	R-CO-O-R	-oaat	-
3	Amiid	R-CONH ₂	-amiid	karbamoüül-

4	Tsüaniid	R-CN	-nitril	tsüano-
5	Aldehyüd	R-CHO	-aal	okso-
6	Ketoon	R-CO-R	-oon	okso-
7	Alkohol	R-OH	-ool	hüdrosüül-
8	Tiool	R-SH	-tiool	sulfanüül-
9	Amiin	R-NH ₂	-amiin	amino-

1.2 Anorgaaniline aine

1.2.1 Lihtsate anorgaaniliste ainete nimetamine

Anorgaaniliste ainete nimetamine põhineb reeglistikul (IUPACi punane raamat, vt viide peatükis 7.1), mille põhipunktid on järgmised.

1 Üheaatomilisi anioone nimetatakse lõppliitega „-iid“:

O²⁻ onoksiid

2 Lihtsaid iooniühendeid nimetatakse nii, et kationile järgneb anioon. Laenguga >1 kationide korral kirjutatakse laeng Rooma numbritega sulgudes vahetult pärast elemendi nimetust:

Cu²⁺ on vask(II)ioon

3 Hüdraate nimetatakse nii, et ioonilisele ühendile järgneb numbereesliide ja „-hüdraat“. Numbrilised eesliited on „mono-“, „di-“, „tri-“, „tetra-“, „penta-“, „heksa-“, „hepta-“, „okta-“, „nona-“, „deka-“:

CuSO₄·5H₂O nimetus on „vask(II)sulfaatpentahüdraat“

Sama metallisoola hüdraatide ja, kui asjakohane, veevaba vormi registreerimisel käsitatakse neid samade ainetena.

4 Anorgaanilisi molekulühendeid nimetatakse eesliitega (vt hüdraadid), mis asub enne iga elemendi nimetust. Elektronegatiivsem element kirjutatakse viimasena ja selle järele lõppliide „-iid“:

CO₂ on süsinikdioksiid ja CCl₄ on süsiniktetrakloriid

5 Happeid nimetatakse happe vees lahustumisel tekkiva aniooni järgi. Nimetamisvõimalusi on mitu:

a kui vees lahustumisel dissotsieerub hape aniooniks lõppliitega „x“-iid, on happe nimetus vesinik-„x“-iidhape:

vesinikkloriidhape moodustab kloriidaniooni

b kui vees lahustumisel dissotsieerub hape aniooniks lõppliitega „x“-aat, nimetatakse hapet „x“-hape:

kloorhape dissotsieerub vees klooratanioonideks

c kui vees lahustumisel dissotsieerub hape aniooniks lõppliitega „x“-it, nimetatakse hapet „x“-ishape

kloorishape laguneb vees kloritanioonideks

1.2.2 Mineraloogiliste faaside nimetamine

Kompleksed mineraloogilised faasid sisaldavad enamasti vähemalt kolme elemendi kombinatsiooni. Enamik elemente esineb koos hapnikuga ja nende identifitseerimise lihtsustamiseks käsitatakse mineraloogias kompleksühendeid tavaliselt oksiididest koosnevate ainetena, millest osad on aluselised ja teised happelised. Näide: silikaate nimetatakse tavaliselt kas mitme oksiidi summana või ränihappe või alumiiniumränihappe sooladena. Seega saab kaltsiumortosilikaati tähistada valemiga $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$, nimetada see eraldi oksiidide kombinatsiooniks või tähistada valemiga Ca_2SiO_4 ehk ortoränihappe H_4SiO_4 kaltsiumsoolana. Sama kehtib komplekssete mineraaloksiidide korral – nende nimetamisel lisatakse iga oksiidi ette eesliide (nt $\text{Ca}_3\text{SiO}_5 = \text{trikaltsiumsilikaat} = 3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$). Mõnes tööstussektoris lihtsustatakse nimetusi, et lühendada ühendi valemit: näiteks portlandtsemendiklinkri korral lühendatakse valem $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ (kaltsiumortosilikaat ehk dikaltsiumfosfaatsilikaat) valemiks C_2S , kus $\text{C} = \text{CaO}$ ja $\text{S} = \text{SiO}_2$. Komplekssete mineraloogiliste faaside korral soovitatakse viidata mineraloogia või tööstuse standardtekstidele.

1.3 Looduslikku päritolu tooted ja nendega seotud koostisained

Looduslikku päritolu toodete kohta on IUPAC koostanud mitu süstemaatilise nimetamise eeskirja. Lühidalt tähendab see, et looduslikust allikast saadud ainete nimetus põhineb võimaluse korral selle organismi sugukonna, perekonna või liigi nimetusel, millest aine on saadud:

Näide: hüpoteetiline valk *hypothecalia*, mille nimetus põhineb nimetustel *hypothecalia* ja/või *exemplare*, näiteks hüpoteetilisel taimenimetusel *Primula exemplare*

Võimaluse korral peab nimetus kajastama loodusliku toote teadaolevat või tõenäolist jaotust. Vajaduse korral võib mitmes omavahel seotud sugukonnas esineva aine nimetamisel lähtuda ka klassist või seltsist. Tundmatu struktuuriga looduslike toodete nimetus ei tohi sisalda ühtki orgaaniliste kemikaalide nomenklatuuris kasutatavat ees-, lõpp- ega siseliidet:

Primula exemplare, Primulaceae kondensatsioonisaadus, lisatud N-terminaalsele otsale

Paljud looduslikud ained kuuluvad täpselt määratletud struktuuriklassidesse, millest igaüht iseloomustab tihedalt seotud lähtestruktuuride kogum, st igaüht on võimalik saada põhistruktuurist. Selliste looduslikult esinevate ainete ja nende derivaatide süstemaatiline nimetus võib põhineda asjakohase peamise lähtestruktuuri nimetusel:

hästi tuntud lähtestruktuurid on alkaloidid, steroidid, terpenoidid ja vitamiinid

Peamine lähtestruktuur peaks peegeldama enamiku selle klassi ainete ühist põhistruktuuri. Looduslikult esinevad ained ja nende derivaadid nimetatakse nende lähtestruktuuri alusel, lisades ees-, lõpp- või siseliidet, mis tähistavad järgmist:

- põhistruktuuri muudatused;
- struktuuriaatomite asendamine;
- lähtestruktuuri nimetusega tähistatavad hüdrogeenimisoleku muutused;
- lähtestruktuuri vesinikuaatomeid asendavad aatomid või rühmad;

- konfiguratsioonid, mida lähtestruktuuri nimetus juba ei hõlma või mis on sellega võrreldes muutunud.

Tiamiinkloriidi teine nimetus on vitamiin B₁

Üksikasjaliku teabe saamiseks looduslike toodete ja nendega seotud ainete süstemaatilise nimetamise kohta pöörduge IUPACi poole (vt I lisa).

1.4 Kui IUPAC-nimetust ei saa tuletada

Kui teatud ainete korral ei saa IUPAC-nimetust tuletada, võib kasutada muud rahvusvaheliselt tunnustatud nomenklatuuri, mis käsitleb konkreetset neid aineid, näiteks järgmisi:

- mineraalid ja maagid: mineraloogilised nimetused;
- Naftasaadused
- värvaineindeksi üldnimetused³;
- õlilisaained;
- rahvusvaheline kosmeetikavahendite koostisainete nomenklatuur (INCI)⁴;
- seebi- ja pesemisvahendite liidu (SDA) pindaktiivsete ainete nimetused⁵;
- jt.

2 Muud nimetused

REACH-määruse raames on soovitatav lisada kõik asjakohased nimetused ja/või avalikud identifikaatorid kõikides keeltes, milles ainet Euroopa Liidus juba turustatakse või hakatakse turustama (nt kaubanduslikud nimetused). See hõlmab kaubanduslikke nimetusi, sünonüüme, lühendeid jne.

- <http://www.colour-index.com>, Rahvusvaheline värvaineindeks, neljas veebiväljaanne
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI (rahvusvaheline kosmeetikavahendite koostisainete nomenklatuur), hügieenitoodete komisjoni ametlik veebileht
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, Ameerika puhastusainete instituudi (ACI) ametlik veebileht.

3 EINECS-, ELINCS- või NLP-loetelu (EÜ loetelu) EÜ number

EÜ number, st EINECS-, ELINCS- või NLP-loetelu number, on aine ametlik number Euroopa Liidus. EÜ numbreid saab EINECS-, ELINCS- ja NLP-loetelu ametlikest väljaannetest ja Euroopa Kemikaaliametist.

EÜ number on 7-kohaline arv kujul x₁x₂x₃-x₄x₅x₆-x₇. Esimese numbri määrab loetelu, kuhu aine kuulub:

Loetelu	EÜ numbri esimene arv
EINECS	2 või 3
ELINCS	4
NLP	5

4 CAS-nimetus ja CAS-number

USA Keemiaühingu (ACS) talitus CAS (Chemical Abstracts Service) määrab igale registrisse kantavale kemikaalile CAS-nimetuse ja -numbri. Nimetused ja numbrid antakse ainulaadsetele üksikainetele järjekorras, nagu neid tuvastavad CASi teadlased. Igal CAS-registri ainel on CAS-nomenklatuurile vastav nimetus, mille esitab ACSi nomenklatuurikomitee ja kinnitab ACS (vt viited I lisas).

4.1 CAS-nimetus

CAS-nimetus on CASi antud nimetus, mis erineb IUPAC-nimetusest. CAS-nomenklatuur põhineb väikesel arvul kriteeriumidel, millest aine nimetuse tuletamiseks alati ei piisa. Sel põhjusel on õige CAS-nimetuse saamiseks üldiselt soovitatav pöörduda CASi poole.

Lühidalt on peamised nomenklatuurieeskirjad järgmised:

- Nimetuse alguseks või lähtestruktuuriks valitakse aine nn põhiosa.
- Asendusrühmad loetletakse pärast nimetuse algust või lähtestruktuuri, millele viidatakse tagurpidi järjekorras.
- Mitu asendusrühma loetletakse tähestiku järjekorras (sh eesliited):

o-ksüleen-3-ool on „benseen, 1,2-dimetüül-, 3-hüdroksü-“

4.2 CAS-number

CAS-umbreid annab CAS.

CAS-number koosneb vähemalt 5 numbrist, mis on jaotatud kolmeks sidekriipsudega eraldatud osaks. Teine rühm koosneb alati 2 numbrist, kolmas osa 1 numbrist:

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

CAS-numbri kontrollimiseks on nn kontrollsumma:

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

CAS-number peab vastama kontrollsummale.

5 Muud tunnuskoovid

Samuti võib märkida ka muid rahvusvaheliselt tunnustatud tunnuskoode, näiteks järgmisi:

- Tollinumber
- ÜRO number;
- värvaineindeksi number;
- värvaine number.

6 Molekulvalem, struktuurivalemid ja SMILES-kood

6.1 Molekulvalem

Molekulvalem identifitseerib keemilised elemendid nende keemiliste sümbolite järgi ning näitab iga elemendi aatomite arvu aine molekulis.

Molekulvalem tuleb esitada (tavapärasel) Hilli meetodil ja ka CAS-süsteemi järgi, kui see erineb Hilli meetodi valemist.

Hilli meetodi kasutamisel saab järgida selliseid etappe:

1. Leidke molekuli elemendid ja loetlege nende keemilised sümbolid.

2. Järjestage elemendid vajalikus järjekorras:

a. Süsinikku sisaldavad ained:

iga elemendi keemiline sümbol nimetatakse järgmises järjekorras:

(1) süsinik;

(2) vesinik;

(3) muud elementide sümbolid tähestiku järjekorras:

pentaan: C5H12

penteen: C5H10

pentanool: C5H12O

b. Ained, mis ei sisalda süsinikku:

elemendid esitatakse tähestiku järjekorras:

vesinikkloriidhape: ClH

3. Iga elemendi kohta, mille aatomite arv on >1, tuleb esitada aatomite arv keemilise sümboli allindeksina.

4. Lisateave, mis ei ole seotud molekulvalemi lõpus oleva põhistruktuuriga, eraldatakse punkti või komaga:

naatriumbensoaat on C7H6O2, naatriumsool

vasksulfaatdihüdraat on CuO4S.2H2O

Kui Hilli meetodit ei saa konkreetse aine korral kasutada, tuleb molekulvalem esitada mõnel muul viisil, näiteks empiirilise valemiga, aatomite ja aatomite teadaoleva suhtarvu lihtsa kirjeldusena või CASi antud valemiga (vt juhendi 4. peatükk).

6.2 Struktuurivalem ja kristallstruktuuri kirjeldus

Struktuurivalemiga kujutatakse aine molekulide kuju ja paigutust. Struktuurivalem peaks näitama aatomite, ionide või rühmade asukohta ning neid ühendavate sidemete olemust. Struktuurivalem kirjeldab ka isomeere, st cis-/trans-isomeere, kiraalsust, enantiomeere jt.

Struktuurivalemi teabe saab esitada mitmel viisil: molekulvalemi ja/või struktuuridiagrammina.

- *Struktuurivalem molekulvalemiga*

1. Kirjutage üles kõik elemendid rühmade kaupa ja esinemisjärjekorras:

n-pentaan: CH3CH2CH2CH2CH3

2. Märkige iga asendusrühm sulgudesse vahetult pärast aatomit, millega see on seotud:

2-metüülbutaan: CH3CH(CH2)CH2CH3

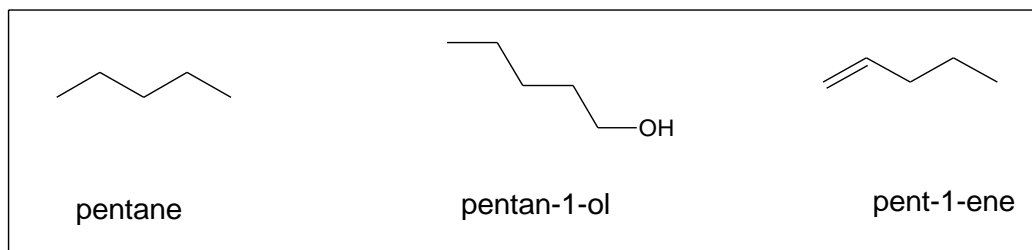
3. Kaksik- või kolmiksidemed tuleb märkida asjakohaste elemendirühmade vahel:

pent-1-een: CH2=CHCH2CH2CH3

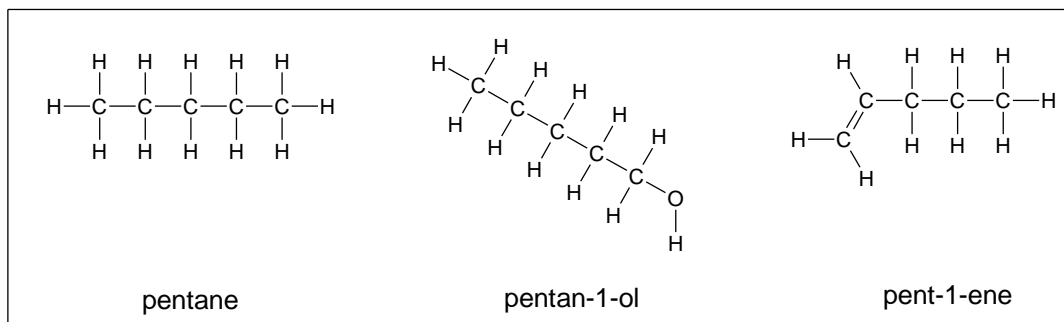
Struktuurivalem struktuuridiagrammina

Struktuuridiagrammi korral kujutatakse elemendid ja nende sidemed tasandilise või ruumilise kujutisena. Meetodeid on mitu:

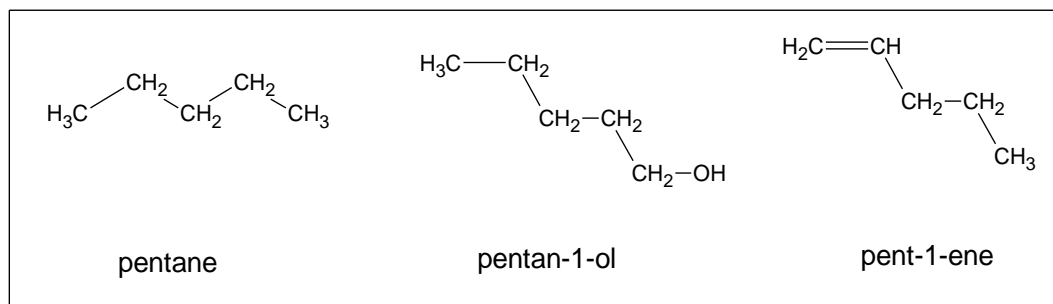
1. Kõigi mittesüsinikelementide ja nendega seotud vesiniku kujutamine



2. Kõigi elementide sümbolite kujutamine



3. Süsiniku ja vesiniku kujutamine rühmadena (nt CH₃), kõigi mittesüsinikelementide ja süsinikuga mitteseotud vesinikuaatomite kujutamine

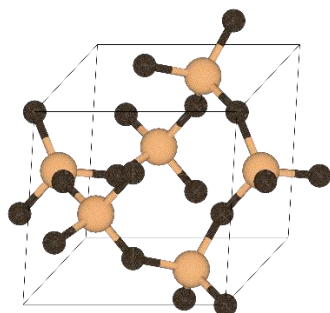


- - *Struktuurivalem molekulvalem*

1. Esitage molekulvalem:



2. Esitage aine kristallstruktuur



3. Esitage mineraloogiline ja/või kristallograafiline nimetus kristallisüsteemi³² ja kristalliklassi alusel:

α-kvarts [*β*-kvarts] / **kristallisüsteem:** kolmnurk – kuusnurk, **kristalliklass:** kolmnurk-trapetsikujuline kuustahukas 3 2

6.3 SMILES-kood

Lühend SMILES tähendab lihtsustatud molekulaarse sisendrea sisestamissüsteemi (Simplified Molecular Input Line Entry Specification).³³ See on kemikaalide tähistamise süsteem, milles kujutatakse molekulstruktuuri lineaarse sümbolijada abil. Standardse SMILES-koodi korral on molekuli nimetus sünonüümne struktuuriga ja esitab kaudselt molekulaarstruktuuri tasandilist kujutist. Et keemilise struktuuri tasandilist kujutist saab esitada mitmel viisil, on sama molekuli kohta mitu õiget SMILES-koodi. SMILES-kood põhineb molekuli valentsmudelil, mistõttu see ei sobi kirjeldama molekule, mida selle abil kujutada ei saa.

SMILES-kood koosneb aatomitest, mida tähistavad elementide sümbolid, sidemete tähised, hargnemist tähistavad sulud ja tsüklilist struktuuri näitavad arvud. SMILES-kood kujutab molekulaarstruktuuri skeemina, milles võib valikuliselt olla märgitud kiraalsus. SMILES-koodi, millega kirjeldatakse struktuuri ainult sidemete ja aatomite osas, nimetatakse üldiseks SMILES-koodiks; kui see kirjeldab ka isotoope ja kiraalsust, nimetatakse seda isomeerseks SMILES-koodiks.

Lühidalt põhineb SMILES-kood mitmel järgmisel põhireeglil:

1. Aatomeid tähistavad keemiliste elementide sümbolid.
2. Iga muu aatomid peale vesinikuaatomite märgitakse eraldi.
 - a. Nn orgaanilise allrühma elemendid B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br ja I kirjutatakse ilma sulgudeta ja ilma seotud vesinikuaatomita, kui viimaste arv vastab keemilise sideme vähimale normaalsele valentsile:

³² kuup/nelinurk/ortoromb/rombiline kuustahukas (või kolmnurk)/kuusnurk/monokliinik/trikliinik

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.

Nn orgaanilise allrühma element	Vähimad normaalsed valentsid
B	3
C	4
N	3 ja 5
O	2
P	3 ja 5
S	2, 4 ja 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Orgaanilise allrühma elemendid kirjutatakse sulgudesse, kui nendega seotud vesinikuaatomite arv ei vasta vähimale normaalsele valentsile:

ammooniumkatioon on NH₄⁺

- c. Muud kui orgaanilisse allrühma elemendid kirjutatakse sulgudes koos seotud vesinikuaatomitega.

3. Alifaatsed aatomid kirjutatakse suur- ja aromaatsed aatomid väiketähtedega:

benseen on c1ccccc1 ja tsükloheksaan on C1CCCCC1

4. Vesinikuaatomid märgitakse üksnes järgmistel juhtudel:

- laenguga vesinikuaatom (st prooton), [H⁺];
- teiste vesinikuaatomitega seotud vesinikuaatomid (st molekulaarne vesinik), [H][H];
- mitme teise aatomiga seotud vesinikuaatomid, nt sild-vesinikuaatomid;
- vesiniku isotoopvormid, nt deuteerium ([²H]);
- kui vesinik on seotud kiraalse aatomiga.

5. Neli põhisidet kujutatakse nii:

Sideme tüüp	SMILES-kood
Üksikside	- (ei ole vaja näidata)
Kaksikside	=

Kolmikside	#
Aromaatne side	Väiketähed

6. Asendusrühmad näidatakse sulgudes ja vahetult pärast aatomeid, millega need on seotud:

2-metüülbutaan on CC(C)CC

- a. Asendusrühmad näidatakse alati vahetult pärast asjakohaseid aatomeid, need ei saa järgneda kaksik- ega kolmiksideme sümbolile:

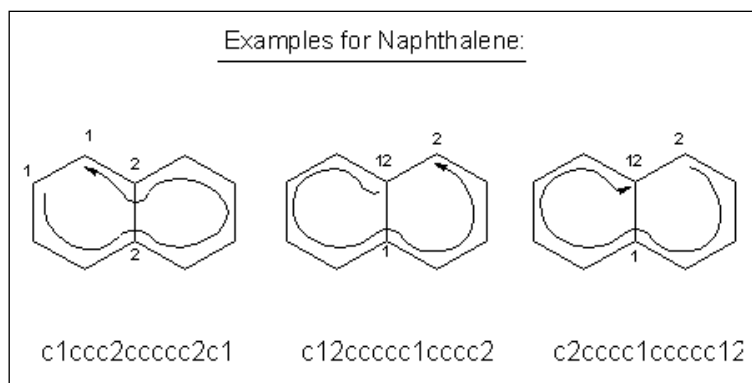
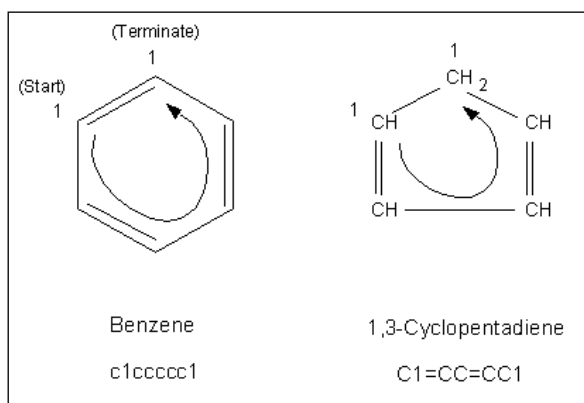
pentaanhape on CCCCC(=O)O

- b. Asendusrühmades võivad olla omakorda asendusrühmad:

2-(1-metüületüül) butaan on CC(C(C)C)CC

7. Tsükiliste struktuuride korral märgistatakse tsükli algus- ja lõpuaatom arvudega 1–9.

- a. Iga rõnga algus- ja lõpuaatomit tähistatakse sama arvuga. Algus- ja lõpuaatomid peavad olema omavahel ühendatud.
b. Arvud märgitakse kohe pärast aatomeid, millega tähistatakse alg- ja lõppasendeid.
c. Algus- või lõpuaatomit saab siduda kahe järjestikuse arvuga.



8. Eraldatud ühendeid nimetatakse üksikstruktuurideks või ioonideks, mis on eraldatud punktiga („.“). Punktiga („.“) eraldatud kõrvuti asetsevad aatomid ei ole üksteisega otseselt seotud, näiteks van der Waalsi jõud:

aminopropreenvesinikkloriid on C=CC(N).HCl

9. Isomeerikonfiguratsioone tähistatakse kaldkriipsudega (\ ja /), mis näitavad kahe isomeerse sideme suunda üksteise suhtes (cis = „/ \”, trans = „/ /”). SMILES-kood märgib kohalikku kiraalsust, st kiraalsus peab olema täiesti määratletud:

cis-1,2-dibromoeteen on Br/C=C\Br

trans-1,2-dibromoeteen on Br/C=C/Br

10. Enantiomeere või kiraalsust tähistatakse sümboliga „@”. Üks sümbol „@” tähendab, et kiraalse aatomi järgmised naabrid on märgitud vastupäeva, ja kaks („@@”), et päripäeva. Kiraalne aatom ja sümbol „@” pannakse sulgudesse:

määratletud kiraalsusega 2-kloro-2-hüdroksüpropaahape

on C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)

11. Isotoopvormid märgitakse enne aatomi sümbolit arvuga, mis võrdub isotoobi massiarvuga. Massiarvu saab märkida üksnes sulgudes:

Süsinik-13 on [13C] ja hapnik-18 on [18O]

SMILES-koodi määramiseks on olemas mitmeid vahendeid (SMILES-koodi generaatorid) (vt I lisa).

7 Optilise aktiivsuse teave

Optiline aktiivsus on asümmeetriliste ainete omadus pöörata valguse polarisatsioonitasandit. Selliseid aineid ja nende peegelpilte nimetatakse enantiomeerideks ning neil on üks või mitu kiraalset. Erinevale geomeetrilisele paigutusele vaatamata on enantiomeeridel ühesugused keemilised ja füüsikalised omadused. Iga enantiomeer mõjutab polariseeritud valgust erinevalt ja seepärast saab optilise aktiivsuse abil tuvastada proovis esinevad enantiomeerid ning seega ka aine puhtusastme. Pöörangu suurus (pöördenurk) on molekuli olemuslik omadus.

Enantiomeeride pöörang on alati vastupidise märgiga: nad polariseerivad valgust ühepalju, kuid vastupidises suunas. Enantiomeeride segu optiline aktiivsus näitab seetõttu kahe enantiomeeri suhtarvu. Kahe enantiomeeri võrdsetes osades (1:1) segu optiline aktiivsus on 0.

Vaadeldav pöörang sõltub kontsentratsioonist, proovianuma kõrgusest, temperatuurist ja valgusallika lainepikkusest.

Optiline aktiivsus on seega asümmeetrilise aine tuvastamisel oluline parameeter ja see on ainus parameeter, millega saab eristada ainet peegelpildilisest enantiomeerist. Seega tuleb asjakohasel juhul märkida aine optilise aktiivsuse teave.

Optilise aktiivsuse standardväärtus on eripöörang, mis on määratletud kui 5896 Å lainepikkusega valguse polarisatsioonitasandi vaadeldav pöörang, kui valguse teepikkus on 1 dm ja proovi kontsentratsioon on 1 g/ml. Eripöörangu arvutamiseks jagatakse vaadeldav pöörang tegeliku teepikkuse (dm) ja kontsentratsiooni (g/ml) korrutisega.

Optilist aktiivsust saab mõõta mitmel meetodil. Kõige tavalisemad meetodid on järgmised:

- optiline pöörang, kus mõõdetakse proovi läbinud polariseeritud valguskiire tasandi pöörangut;
- ringdikroism, kus mõõdetakse paremale ja vasakule polariseeritud valguse absorptsiooni proovis.

Kui aine pöörab polarisatsioonitasandit paremale (päripäeva), tähistatakse seda plussmärgiga (+, dekstrorotatsioon); kui vasakule, siis miinusmärgiga (–, levorotatsioon).

8 Molekulmass või molekulmassivahemik

Molekulmass on aine molekuli mass, mida väljendatakse aatommassiühikuga või molaarmassina (g/mol). Molekulmassi saab arvutada aine molekulvalemi järgi: see on molekuli moodustavate aatomite aatommasside summa. Teatud molekulide korral (nt teatud valgud ja määratlemata reaktsioonisegud), mille konkreetset molekulmassi ei saa arvutada, saab esitada molekulmassivahemiku.

Ainete molekulmassi saab leida mitme meetodiga:

- Gaasiliste ainete molekulmassi saab leida Avogadro seaduse abil, mille järgi sisaldab teatud temperatuuril ja rõhul mis tahes gaasi teatud ruumala teatud arvu gaasimolekule.

$$PV = nRT = NkT$$

n = moolide arv

R = universaalne gaasikonstant = 8,3145 J/(mol K)

N = molekulide arv

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

k = R/NA

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

- Vedelike ja tahkete ainete molekulmassi saab leida, mõõtes nende mõju sulamis- ja keemistemperatuurile, aururõhule või lahusti osmootsele rõhule.
- Massispektromeetria, mis on väga täpne mõõtmismeetod
- Selliste suure molekulmassiga keerukate ainemolekulide korral nagu valgud või viirused saab molekulmassi mõõta näiteks ultratsentrifuugis sadestumiskiiruse mõõtmisega või nefelomeetriaga.
- Olemas on mitmeid vahendid, millega saab arvutada molekulmassi struktuuridiagrammi või aine molekulvalemi järgi (vt I lisa).

9 Aine koostis

Iga aine kohta tuleb esitada koostis põhikoostisosade, lisaainete ja lisandite kombinatsioonina kooskõlas juhendi 4. peatükis kirjeldatud eeskirjade ja kriteeriumidega.

Iga koostisosa, lisaaine või lisand tuleb korralikult identifitseerida järgmisega:

- nimetus (IUPAC-nimetus või selle puudumisel muu rahvusvaheliselt tunnustatud nimetus);
- CAS-number (kui on olemas);
- EÜ number (kui on olemas).
- Kõik muud olemasolevad identifikaatorid

Iga koostisosa, koostisosade rühma, lisaaine või lisandi kohta tuleb võimaluse korral esitada tüüpiline kontsentratsioon protsentides kaubanduslikes partiides (eelistatavalt kaalu või mahu järgi). Esitatud väärtuste summa peab olema 100%. Alati tuleks esitada ülemine ja alumine kontsentratsioonipiirnorm kui kaubandusliku aine vahemik.

10 Spektraalandmed

Spektraalandmeid on vaja, et kinnitada ühe koostisosaga aine struktuuri või seda, et reaktsioonisegu ei ole valmistis. Kasutada saab mitut spektroskoopiameetodit (ultraviolet-, infrapuna-, tuumamagnetresonants- või massispekter). Kõik meetodid ei sobi kõigi ainetüüpide korral. Kui võimalik, selgitab juhend, mis spektraalandmed tuleb esitada mis ainetüüpide korral (ECB 2004; ECB 2005).

Paljude tuntud meetodite korral tuleb kas spektris endas või sellele lisatud dokumentides märkida järgmised andmed

Nähtava valguse ja ultraviolettkiirguse (UV-VIS) spekter

- Aine andmed
- Lahusti ja kontsentratsioon
- Vahemik
- Peamiste piikide asend (ja molaarsed neeldumistegurid)
- Happe mõju
- Aluse mõju

Infrapunaspektroskoopia (IR) spekter

- Aine andmed
- Keskkond
- Vahemik
- Tulemused (märkige aine identifitseerimiseks, nt jälje piirkonna tõlgendamiseks olulised peamised piigid)

Tuumamagnetresonantspektroskoopia (NMR) spekter

- Aine andmed
- Tuum ja sagedus
- Lahusti
- Sise- ja välisetalon (kui asjakohane)
- Tulemused (märkige aine identifitseerimiseks olulised signaalid ning lahustile ja lisanditele vastavad signaalid)
- ¹H NMR spektri korral esitage integratsioonikõver
- Suurendage nõrkade NMR-piikide intensiivsust püstsuunas ja laiendage keerukaid mustreid

Massispektroskoopia (MS) spekter

- Aine andmed
- Kiirenduspinge
- Laadimismeetod (vahetu sisestamine, gaasikromatograafi kaudu jt)
- Ioniseerimisrežiim (elektronkiirga, keemiline ionisatsioon, väljadesorptsioon jt)
- Molekulaarioon (M)
- Aine identifitseerimiseks olulised fragmendid
- Aine struktuuri identifitseerimiseks olulised M/z väärtused või piigid
- Laiendage keerukaid mustreid

Röntgendifraktsiooni massispektroskoopia (XRD) spekter

- Aine andmed

- Pinge,
- vool,
- röntgenikiirguse allikas ja kõik kirjandusviited, mis võimaldavad aine kristallilis(t)e oleku(te) identifitseerimist.

Juhul, kui aines esinevate kristalliliste või amorfsete olekute identifitseerimiseks ja kvantifitseerimiseks kasutatakse XRD-meetodit, on vaja vähemalt järgmisi nõudeid:

- kasutatavate rafineerimismeetodite ja sisestandardite kirjeldus,
- tulemusväärtuse näitaja, mis kajastab modelleeritud/võrdlusdifraktsiooni mustrisobivust,
- mõõdetud muster ja tulemusväärtuse skaala (nt 0–1 või 0–100).

Kasutada saab ka muid teaduslikult tunnustatud meetodeid, kui spektraalandmed kinnitavad aine identifitseerimist, nt sisestruktuuri.

Spektrite mõistmiseks ja/või tõlgendamiseks on vaja täita järgmised üldnõuded:

- Kirjeldage proovi ettevalmistamist;
- Märkige olulised lainepikkused või muud asjakohased andmed.
- Esitage lisateave, nt lähtematerjalide spektrid.
- Nimetage kasutatud lahusti ja/või muud olulised andmed, nagu on märgitud eespool mõne meetodi kohta.
- Esitage selged koopiad (mitte originaalid) koos nõuetekohaselt märgistatud skaaladega.
- Esitage kasutatud aine kontsentratsioonide teave.
- Kontrollige, et kõige intensiivsemad ainega seotud piigid oleksid kujutatud skaala võimalikult suures ulatuses.

11 Kõrgsurve-vedelikkromatograafia, gaasikromatograafia

Kui ainetüübi korral on asjakohane, tuleb aine koostise kinnitamiseks esitada kromatogramm. See võib näiteks kinnitada reaktsioonisegu lisandite, lisaainete ja koostisosade olemasolu. Kaks tuntuimat segude eristamise ja identifitseerimise meetodit on gaasikromatograafia (GC) ja kõrgsurve-vedelikkromatograafia (HPLC). Mõlemad põhinevad liikuva ja liikumatu faasi vastastikmõjul, mille tulemusel segu koostisosad eraldatakse.

GC-/HPLC-kromatogrammides tuleb kas kromatogrammil endal või sellele lisatud dokumentides näidata järgmisi andmeid (ECB 2004; ECB 2005):

HPLC

- Aine andmed
- Kolonni omadused, nt läbimõõt, täidis, pikkus
- Temperatuur, samuti temperatuurivahemik, kui seda kasutatakse
- Liikuva faasi koostis, samuti vahemik, kui seda kasutatakse
- Aine kontsentratsioonivahemik
- Visualiseerimismeetod, nt UV-VIS
- Tulemused (märkige aine identifitseerimiseks olulised peamised piigid)

Gaasikromatograafia

- Aine andmed
- Kolonni omadused, nt läbimõõt, täidis, pikkus
- Temperatuur, samuti temperatuurivahemik, kui seda kasutatakse
- Sisestamistemperatuur
- Kandegaas ja kandegaasi rõhk

- Aine kontsentratsioonivahemik
- Visualiseerimismeetod, nt UV-VIS
- Piikide andmed
- Tulemused (märkige aine identifitseerimiseks olulised peamised piigid)

12 Analüütiliste meetodite kirjeldus

REACH-määruse VI lisa nõutakse, et registreerija peab kirjeldama aine identifitseerimiseks ja, kui asjakohane, siis ka lisandite ja lisaainete identifitseerimiseks kasutatud analüütilisi meetodeid ja/või esitama nende kohta kirjandusviited. Teave peab olema piisav meetodite korratavuseks.

III lisa. Aine identifitseerimine ja andmete ühine esitamine

Selle juhendi põhiosas kirjeldatakse üldpõhimõtteid, mida potentsiaalsed registreerijad peavad järgima oma juriidilise isiku spetsiifiliste registreeritavate ainete identifitseerimisel. Selles lisas antakse potentsiaalsetele registreerijatele praktilisi juhiseid selle kohta, kuidas kohaldada aine identifitseerimise põhimõtteid, kui ühiselt määratakse kindlaks aine identifitseerimisandmed ja nende ulatus ühiseks registreerimiseks, järgides REACH-määruse põhimõtet „Üks aine – üks registreerimine“. Lisateave ühise esitamise kohustuste ja üldiselt andmete jagamise protsessi kohta on andmete jagamise juhendis aadressil <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

On enesestmõistetav, et samu aine identifitseerimise põhimõtteid, mis on esitatud põhijuhendis, kohaldatakse vastavalt ainetüübile ühise registreerimise korral ühe aine identifitseerimisandmete suhtes.

REACH-määruse artikli 11 lõike 1 esimeses osas ja artikli 19 lõikes 1 on sätestatud „andmete ühine esitamine mitme registreerija poolt“. Täpsemalt nõutakse nendes sätetes järgmist: „Kui ainet on kavas toota ühenduses ühe või mitme tootja poolt ja/või importida ühe või mitme importija poolt“, esitab aine omaduste ja klassifikatsiooniga seotud teabe „esmalts üks registreerija, kes tegutseb teis(t)e registreerija(te) nõusolekul (edaspidi „juhtregistreerija“)“.

Komisjoni rakendusmääruses (EL) 2016/9 andmete ühise esitamise ja jagamise kohta kinnitatakse ja konsolideeritakse sama aine identifitseerimisandmete mitme registreerija kohustust esitada teatud teave ühiselt. Praktikas tähendab see, et teabe ühisel esitamisel peavad asjaomased pooled kokku leppima aine identifitseerimisandmete piirid ja ulatuse. Seda nimetatakse aine identifitseerimisandmete profiiliks (SIP). Aine identifitseerimisandmete profiilis tuleks täpsustada aine piirnäitajad, mida registreerijad on nõustunud ühiselt esitatud andmetega täitma. See kehtib ka registreerijate kohta, kes võivad teatud ühiselt esitatud teabest loobuda.

Seega on registreeritava aine identifitseerimisandmete ulatuse kokkuleppimine ühise esitamise eeltingimus. Rakendamisel on keskse tähtsusega selle aine identifitseerimisandmete kohaldamisala ja andmete läbipaistvus. Seega tuleb aine või aine identifitseerimisandmete profiil selgelt esitada juhtregistreerija toimikus kõigi teiste registreerijate nimel ning kõik registreerijad peavad esitama oma koostise teabe individuaalselt.

Lihtne illustreeriv näide selle kohta, kuidas koostada ELis üksikregistreerijate toodetavate/importitavate kemikaalide aine identifitseerimisandmete profiil, on skemaatiliselt esitatud allpool

Joonis 2. See illustreerib registreeritava aine identifitseerimist, eri koostiste koondamist, andmete koostamist ja lõplikku esitamist registreerimistoimikus IUCLID-vormingus. Näide käsitleb lihtsat täpselt määratletud ühe koostisosaga ainet. Keerulisemate ainete korral võib aine identifitseerimisandmete profiili määratlemise protsess hõlmata kordusi joonise etappide 3 ja 5 vahel.

Potentsiaalsete registreerijate arutelude käigus võib aine identifitseerimisandmete profiili dokumentatsioon olla näiteks Word-dokument või Excel-fail, kus asjakohane kokkulepitud teave salvestatakse ning tehakse kättesaadavaks kõigile liikmetele ja potentsiaalsetele liikmetele. Mõni tööstusühing on teinud kättesaadavaks aine identifitseerimisandmete profiili dokumenteerimise vormid ja paljud registreerijad on neid kasutanud (nt Euroopa

Keemiatööstuse Nõukogu vorm³⁴). Teised on asjaomase teabe lihtsalt dokumenteerinud Word-dokumendis või asjaomase aine registreerimiseks loodud konsortiumi veebilehel.

2. Registreerimiseks esitatud andmetele vastava aine identifitseerimisandmete ja ulatuse määratlemine

Etapid, mida mitu potentsiaalset registreerijat võivad läbida nende ühiselt esitatud andmetele vastava aine identifitseerimisandmete määratlemisel, on skemaatilisel kujutatud näites joonisel

Joonis 2 (etapid 1–4) lihtsate hästi määratletud ainete korral.

Iga üksik potentsiaalne registreerija määrab oma kohustused seoses sellega, mida ta toodab/impordib, lähtudes artikli 3 lõikes 1 esitatud aine määratlusest ja kohaldades selle juhendi põhiosas esitatud aine identifitseerimise põhimõtteid (

Joonis 2 1. ja 2. etapp).

Iga potentsiaalne registreerija saab seejärel kontrollida, kas teistel potentsiaalsetel registreerijatel on sama nimetus ja muud identifikaatorid (3. etapp). Sellest hetkest alates võivad potentsiaalsed registreerijad ühiselt kohaldada selle juhendi põhiosa põhimõtteid, et määrata kindlaks aine identifitseerimisandmete piirid, mis vastavad nende ühiselt esitatavatele andmetele, st aine identifitseerimisandmete profiili (4. etapp).

Selles aine identifitseerimisandmete profiilis kirjeldatakse üldisel viisil aine ulatust selle koostist käsitleva teabe (sh muude asjakohaste parameetrite, nagu morfoloogia, nt füüsikaline vorm, kuju), nimetuse ja muude identifikaatorite osas, mille korral ühiselt esitatud klassifitseerimis- ja ohuandmed on asjakohased. Aine identifitseerimisandmete profiili määratlemisel ei tohiks kasutada liiga konservatiivset lähenemisviisi, et vältida konkurentide väljajätmist ühisest esitamisest.

Selle aine identifitseerimisandmete profiiliga luuakse olemuslik seos aine identifitseerimisandmete ja ühiselt esitatavate ohuandmete vahel. Kui aine identifitseerimisandmete profiil luuakse piisavalt varakult, võib see lihtsustada teabe koostamise/kogumise etappi registreerimiskohustuste täitmise käigus (kirjeldatud teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendis; allpool,

Joonis 2, 5. etapp), et tagada, et loodud või kogutud andmed hõlmavad kõiki aine identifitseerimisandmeid.

Nagu on kirjeldatud põhijuhendi jaotistes 4.2.3 ja 4.3, kasutavad potentsiaalsed registreerijad keerukamate ainete korral tavaliselt 1.–3. etapis koostise teabe lisaparameetreid ja/või deskriptoreid (nt allika/protsessi kirjeldus) ning seejärel saab kokkulepitud parameetrid lisada aine identifitseerimisandmete profiili (4. etapp). Mõnel juhul võib aine identifitseerimisandmete piiri ja ühiselt esitatud ohuandmete vaheline seos olla täiesti selge alles siis, kui osa või kõik olemasolevad ohuandmed on kogutud. 3.–5. etapi vahel võib vajaduse korral teha kordusi, olenevalt aine identifitseerimisandmete keerukusest ja 5. etapis kogutud andmetest, nt kui teatud koostised sisaldavad koostisosi, mis tingivad klassifitseerimise ja märgistamise ja/või PBT-omaduste hindamise. Aine identifitseerimisandmete profiil võib sisaldada mitut koostisprofiili, et kirjeldada

³⁴ Aine identifitseerimisandmete profiili kirjeldati algselt Euroopa Keemiatööstuse Nõukogu juhistes juhtregistreerijatele aadressil <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Näiteid aine identifitseerimisandmete profiilide kohta, mille registreerijad on koostanud selle vormi abil, võib leida näiteks REACH-keskuse veebilehel <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

adekvaatselt aine identifitseerimisandmete piire.

Aine identifitseerimisandmete profiil peab esitama järgmist üldist teavet, mis võimaldab ühiselt esitatud andmetele vastavate aine identifitseerimisandmete piiride määramist:

- aine nimetus;
- muud identifikaatorid (nt CAS, EÜ, molekul- ja struktuurivalemi teave, kirjeldus vastavalt vajadusele), mida hõlmavad kõik asjaomase aine identifitseerimisandmete registreerijad;
- koostise teave;
 - aine identifitseerimiseks oluliste komponentide identifitseerimisandmed ja vastavad kontsentratsioonivahemikud;
 - aine identifitseerimiseks oluliste stabilisaatorite üldloetelu (ja vastavad kontsentratsioonivahemikud, kui kohaldatav);
 - ainetüübi jaoks oluliste lisaparaameetrite üldloetelu (nt mõne UVCB-aine lähteprotsessi deskriptorid).

On oluline, et ühise esitamisega hõlmatud aine identifitseerimisandmete piire määratlevad paraameetrid lepitakse kokku kõigi ühiste registreerijatega ja dokumenteeritakse selgelt aine identifitseerimisandmete profiilis. Seega võib olla vaja aine identifitseerimisandmete profiili muuta või laiendada mis tahes uue potentsiaalse registreerija taotlusel, kui ta nõustub, et osa ühiselt esitatud andmetest või kõik andmed on asjakohased ka tema tootetava või imporditava aine korral.

Aine identifitseerimisandmete profiilis ei tohi registreerijate vahel jagada konfidentsiaalset äriteavet, samuti ei tohi ühisel esitamisel sellist teavet avalikustada kolmandatele isikutele. Kui aine identifitseerimisandmete profiili selgeks määratlemiseks on vaja, et ühised registreerijad jagavad konfidentsiaalset äriteavet, võivad nad kaaluda usaldusliku kasutamist, nagu on kirjeldatud andmete jagamise juhendis.

3. Aine identifitseerimisandmete profiili dokumenteerimise praktiline juhend

Aine identifitseerimise üldpõhimõtted täpselt määratletud ainete ja UVCB-ainete jaoks on esitatud põhijuhendis. Allpool on mõned praktilised juhised nende põhimõtete ühiseks kohaldamiseks. Põhijuhendis sätestatakse, et üldpõhimõtetest võib teha erandeid. Selliste erandite korral peavad registreerijad suutma tõendada olemuslikku seost aine identifitseerimisandmete ja ühiselt esitatud ohuandmete vahel.

3.1 Täpselt määratletud ained

Täpselt määratletud aine korral tuleb põhikoostisosa(de) ning nende kontsentratsioonivahemike ja lisandite määratlemisel järgida ühe koostisosaga aine identifitseerimise $\geq 80\%$ (massi-%) põhimõtet ja mitme koostisosaga aine identifitseerimise $< 80\%$, $\geq 10\%$ põhimõtet. See kehtib igale üksikule registreerijale ja kõigile mitmele registreerijale koos, kui nad määravad aine identifitseerimisandmete profiili. Eelkõige tuleb esitada aine identifitseerimisandmete profiilis kokkulepitud lisandiprofiilid. Kui aine identifitseerimisandmete profiil sisaldab konkreetseid lisandeid, mis mõjutaksid klassifitseerimist ja märgistamist ja/või püsivate, bioakumuleeruvate ja toksiliste ainete hindamist, peavad registreerijad, keda need lisandid mõjutavad, neid arvesse võtma andmete kogumise etapis (5. etapp). REACH-määruse artikli 11 lõike 3 kohaselt võivad registreerijad esitada VII–XI lisas nõutava teabe ühiselt või eraldi (nn loobumisvõimalused). Esitatavate kontsentratsiooniväärtuste korral tuleb arvesse võtta kogu ühise esitamise kontsentratsioonivahemikku.

Kui aine üheseks identifitseerimiseks on vaja täiendavaid paraameetreid, peab iga registreerija järgima juhendi põhiosa peatükis 4.2.3 esitatud põhimõtteid. Tuleb

kaalutleda, kas nende parameetrite varieerumine tingib vajaduse korral klassifikatsiooni või ühiselt esitatud ohuandmete kohandamise. Ühise esitamisega seotud aine identifitseerimisandmete profiili määramisel võib kasutada sarnaseid kaalutlusi. Näiteks võib olla vaja aine identifitseerimisandmete profiili lisada need parameetrid (nt füüsikaline olek ja/või morfoloogilised parameetrid, nagu poorsus, osakeste suurus, osakeste kuju), mis võivad mõjutada ohuprofiili määramiseks olulisi omadusi (nt lahustuvus, reaktsioonivõime, toksilisus sissehingamisel). Sel juhul tuleb läbipaistvalt esitada nende aine identifitseerimisandmete profiiliga hõlmatud parameetrite üldvahemikud (nt kõigile registreerijatele kohaldatavad osakeste suurusvahemikud ning nende kuju(de) ja pinnakeemia(te) loetelu). Seega tagatakse aine identifitseerimisandmete profiiliga seoses ühiselt esitatavate ohuandmete terviklikkus.

Samamoodi võivad anorgaaniliste kemikaalide kristallilise oleku erinevused tingida eri ohuprofiili kaalutlusi, mis on seotud nende olekutega (nt kvarts, kristaboliit, amorfne ränidioksiid). Arvestades võimalikke erinevusi eri olekute omadustes, peavad nende ainete potentsiaalsed registreerijad kaalutlema, kas esitada üks ühine registreerimistoimik, mis hõlmab kõiki olekuid, sh eri olekute ohuandmeid, või esitada eri olekute (st aine eri identifitseerimisandmete) kohta mitu ühist registreeringut. Mõlemal juhul tuleb hõlmatud etapid loetleda aine identifitseerimisandmete profiilis ning asjakohastes VII–XI lisa andmetes tuleb käsitleda kõiki registreerimisega hõlmatud etappe, tagades seega, et andmed katavad kogu aine identifitseerimisandmete profiili.

NB! Koostistel võivad olla eri lisandid ja/või ohuprofiilid ning need erinevused ei pruugi tähendada, et need koostised ei tohi olla registreeritud samas registreeringus.

3.2 UVCB-ained

UVCB-ainete identifitseerimine võib olla keerukam ja sel põhjusel on ühiseks registreerimiseks aine identifitseerimisandmete kokkuleppimisel väga kasulik läbipaistev dokumentatsioon. Iga potentsiaalne registreerija peab selle juhendi põhiosas esitatud nõuandeid kaalutlema eraldi ja seejärel kohaldama samu põhimõtteid ühiselt. NB! Kontsentratsioonivahemike koondamisel aine identifitseerimisandmete profiili võib tekkida väga laiade kontsentratsioonivahemikega profiil, mis võib viia selleni, et seda ei saa enam käsitada ühe ainenäitega.

Nagu on kirjeldatud põhijuhendis, on mõne UVCB-aine identifitseerimise alus nende tootmises kasutatav allikas ja protsess, mitte nende koostisosade olemus ja kontsentratsioonivahemikud. Sellistel juhtudel kasutatakse koostisosa olemuse ja vastavate kontsentratsioonivahemike näitajatena teisi deskriptoreid. Potentsiaalsed registreerijad võivad kirjeldada tootmisprotsessi seoses allika ja protsessiga määral, mis on vajalik aine identifitseerimiseks. Kirjeldus võib sisaldada mis tahes täiendavaid parameetreid/omadusi, mida registreerijad peavad oma aine identifitseerimisandmete jaoks vajalikuks (vt nt Tabel 5 põhijuhendis). Ühise registreerimise jaoks jagatakse kirjeldusi ainult siis, kui see on vajalik UVCB-aine identifitseerimisandmete ulatuse kokkuleppimiseks registreerimiseks. Potentsiaalsed registreerijad saavad järgida põhijuhendis kirjeldatud põhimõtteid nii üksikult kui ka koos. Seega esitatakse aine identifitseerimisandmete profiilis üldised allika- ja protsessiparameetrid, et see hõlmaks üksikute registreerijate kõigi koostiste ulatust. Seda kujutatakse skemaatiliselt siin: Joonis 3.

Allika ja protsessi alusel identifitseeritud ainete korral, nagu on kirjeldatud põhijuhendis, tekivad allika või protsessi mis tahes olulise muudatuse tõttu tõenäoliselt teistsugused aine identifitseerimisandmed, mis tuleb registreerida eraldi. Erandid sellest põhimõttest tähendavad, et registreerijad suudavad tõendada, et iga protsessi/allika kombinatsioonist saadakse koostised, mida saab käsitleda samas ühises registreerimises. Aine

identifitseerimisandmete profiilis saab arvesse võtta lähteainete ning protsessi- ja/või protsessitingimuste väheolulisi varieeruvusi. Registreerijad peavad leppima kokku, et iga protsessi/allika kombinatsioon annab sarnase koostise, mis on tähenduslik nende käsitlemisel ühe aine identifitseerimisandmetena, ja veenduma, et ohuandmed on asjakohased aine identifitseerimisandmete profiili varieeruvuse koguulatuses. Täpsemalt peavad registreerijad suutma põhjendada, et ühiselt esitatav ohuandmestik on asjakohane kõigi nende koostiste korral või seda kohandatakse vajaduse korral REACH-määruse artikli 11 lõike 3 kohaselt konkreetsete koostiste kohta eraldi esitatud teabega (teatud teabe ühisest esitamisest loobumine).

Et tõendada andmekogumi asjakohasust iga protsessi/allika kombinatsiooni korral, tuleb need kombinatsioonid aine identifitseerimisandmete profiilis läbipaistvalt dokumenteerida, et dokumenteerida kriteeriumid, mida kohaldatakse praeguste ja tulevaste ühisregistreerijate suhtes.

Muud tüüpi UVCB-ainete korral (vt põhijuhendi peatükk 4.3.2) võivad potentsiaalsed registreerijad kasutada vastavalt vajadusele koostise ja täiendavate deskriptorite kombinatsiooni. Näiteks on mõne õlikeemiatootte koostis varieeruv, sest koostisosade alküülahela pikkuse jaotus on varieeruv ja alküülahela pikkuse jaotus võib olla täiendav identifitseerimisel kasutatav deskriptor. Aineteabe vahetuse foorumi lähenemisviis tuleb aine identifitseerimisandmete profiilis läbipaistvalt dokumenteerida.

3.3 Aine identifitseerimisandmete profiil

Kõik ühiselt teavet esitavad registreerijad peavad kokku leppima aine identifitseerimiseks vajalikud parameetrid ja need vastavas aine identifitseerimisandmete profiilis läbipaistvalt dokumenteerima. Kõik kõrvalekalded aine identifitseerimise tavapõhimõtetest või erandid tuleb läbipaistvalt dokumenteerida. Et aine identifitseerimisandmete profiil dokumenteerib lisamise/väljajätmise kriteeriumid, peab aineteabe vahetuse foorum tagama, et kohaldatavad kriteeriumid on läbipaistvad ja et kogutud/koostatud asjakohased VII–XI lisa andmed hõlmavad tõendatavalt kõiki kokkulepitud koostise profiile.

Kui potentsiaalsed registreerijad lisavad artikli 3 lõike 1 kohaselt identifitseerimisandmete profiili stabiliseerivad lisaained, tuleb nende identifitseerimisandmed ja kontsentratsioonivahemikud kokku leppida ja teatada need läbipaistvalt aine identifitseerimisandmete profiilis.

Andmete kogumise etapis tuleb arvestada andmete koostamisel/kogumisel VII–XI lisa nõutava teabe esitamiseks kasutatud katsematerjali(de) asjakohasust. Aine identifitseerimisandmete profiili koostiste representatiivsuse järelduste põhjendus tuleb dokumenteerida ning lisada tehnilisse toimikusse. See on eriti oluline laia koostisprofiiliga komplekssete ainete identifitseerimisandmete korral.

Andmete kogumisel võivad potentsiaalsed registreerijad leida, et nende aine identifitseerimisandmete profiil on liiga lai ega sobi kokku aine identifitseerimisandmeid esindava ohuteabe ühise esitamisega. Sel juhul võivad potentsiaalsed registreerijad jagada aineteabe vahetuse foorumi osadeks, et käsitleda kahte või enam ainet eraldi³⁵. Sel juhul on igal ainel oma aine identifitseerimisandmete profiil ja ühine esitatav ohuteave, mis peab olema aine identifitseerimisandmetele eriomane. Põhjused, miks teatud

³⁵ Kaalutlused EINECSI rolli kohta aine REACH-määruse kohasel identifitseerimisel on REACH- ja CLP-määruse pädevate asutuste (CARACAL) 4. koosolekul kokkulepitud CARACALi dokumendis: CA/74/2009 rev.2 "Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)" (aine identifitseerimisandmed ja aineteabe vahetuse foorumi moodustamine, EINECSI roll).

ohuteave ei ole aine identifitseerimisandmete teatud parameetrite korral representatiivne, tuleb aine identifitseerimisandmete profiilis iga eraldi registreerimise korral läbipaistvalt dokumenteerida. Samuti võivad potentsiaalsed registreerijad selles etapis leida, et koostisprofiile tuleb edasi täpsustada nende koostisosade ja/või lisandite alusel, mille alusel tuleb aine klassifitseerida ja märgistada, hinnata PBT-omadusi jne.

Potentsiaalsete registreerijate korral, kes kavatsevad ühineda teiste potentsiaalsete registreerijatega, kui nad on aine identifitseerimisandmete profiilis juba kokku leppinud ja registreerimistaotlust ei ole veel esitatud, peaksid nad kaaluma, kas nende aine identifitseerimisandmed jäävad aine identifitseerimisandmete profiili piiridesse. Kui see ei ole nii, peavad nad potentsiaalsete registreerijatega arutama ja kokku leppima, kas profiili ulatust on vaja uue liikme kaasamiseks laiendada, või otsustama, et see ei kuulu ulatusse.

Aine identifitseerimisandmete profiili oleks vaja kohandada, kui potentsiaalsel registreerijal on aine registreerimiseks vaja aine identifitseerimisandmete parameetreid, mis võivad muuta ühiselt esitatud ohuteabe representatiivsust ja vajavad seetõttu konkreetset põhjendust (nt konkreetne lisand, erinev koostise suhtarv, erinev etapp, erinev osakeste suurus). Läbipaistvuse huvides tuleb seda parameetrit aine identifitseerimisandmete profiilis täpsustada.

Üksikjuhtudel võivad potentsiaalsed ja olemasolevad registreerijad leppida kokku, et ühiselt esitatavad ohuandmed ei ole põhimõtteliselt representatiivsed potentsiaalse registreerija ainet, sest aine identifitseerimisandmete parameetrid ei jää aine identifitseerimisandmete profiili kokkulepitud piiridesse. Sel juhul esitab potentsiaalne registreerija eraldi registreerimistaotluse kas koos teiste registreerijatega, kelle aine identifitseerimisandmed sisaldavad seda parameetrit, või eraldi, kui puuduvad muud sama aine identifitseerimisandmete registreerijad.

4. Aine identifitseerimisandmete profiili esitamine registreerimistoimikus

Kui potentsiaalsed registreerijad on kogunud/loonud oma aine kohta kõik nõutavad VII–XI lisa andmed (st

Joonis 2, 5. etapp), on andmepakett valmis IUCLID-vormingus esitamiseks ametile esitatavates toimikutes (st

Joonis 2, 6. etapp). Aine identifitseerimisandmete profiili esitamiseks IUCLID-vormingus esitatakse IUCLIDi jaotistes 1.1 ja 1.2 nimetus ja muud identifikaatorid, koostise teave ja muud asjakohased parameetrid.

Aine identifitseerimisandmete profiil	Esitatud IUCLIDis
nimetus ja muud identifikaatorid	Kõikide toimikute jaotis 1.1
koostise teave ja muud parameetrid, kui asjakohane	Juhtregistreerija toimiku jaotis 1.2

Aine identifitseerimisandmete profiili nimetus ja muud identifikaatorid on esitatud kõigi toimikute jaotises 1.1. Juhtregistreerija esitab oma toimiku jaotises 1.2 aine piirkoostisena aine identifitseerimisandmete profiili koostise teave ja muud parameetrid³⁶.

³⁶ Aine piirkoostise sisestamise juhised on käsiraamatus „Kuidas koostada registreerimis- ja PPORD-toimikuid“ aadressil <http://echa.europa.eu/manuals>.

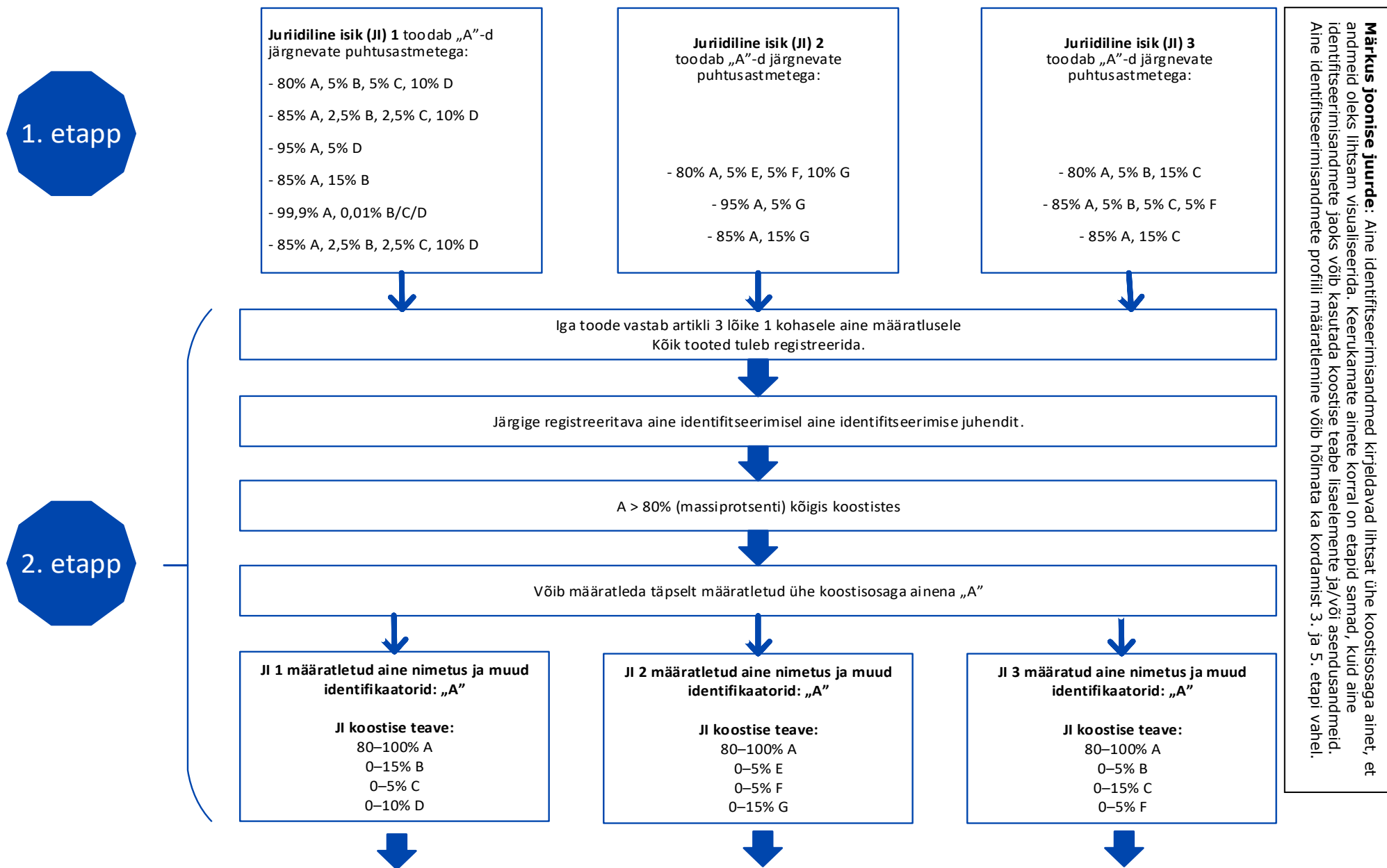
Juhtregistreerija peab esitama kõigi registreerijate nimel ka kõik asjakohased VII–XI lisa andmed jaotistes 4–14 (kui ei ole põhjendatud loobumist ühe või mitme nõutava teabelemendi esitamisest).

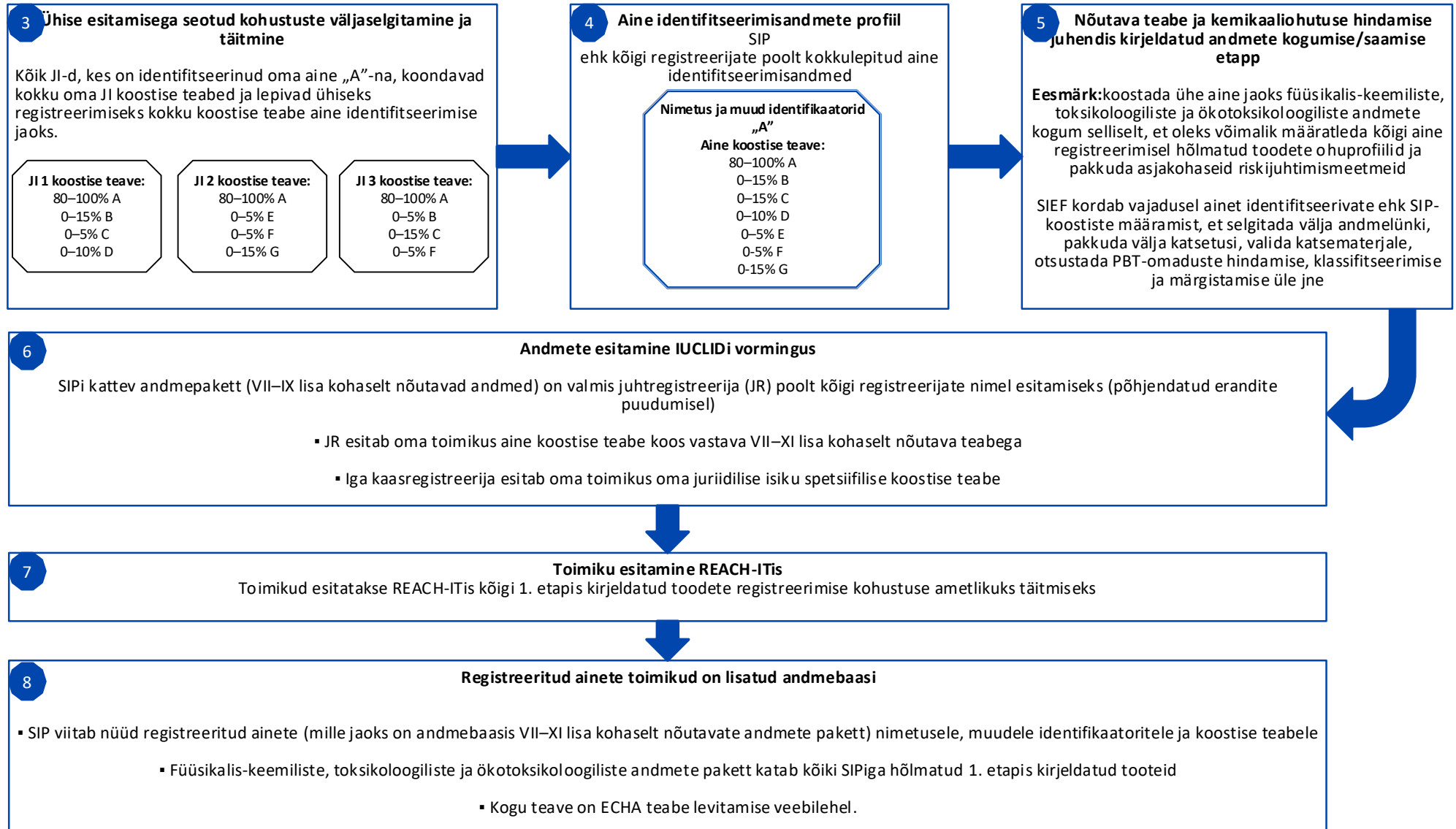
Iga registreerija (sh juhtregistreerija) esitab oma toimiku jaotises 1.2 oma juriidilise isiku toodetava või imporditava aine koostise teabe. See tähendab, et juhtregistreerija esitab oma toimiku jaotises 1.2 nii aine identifitseerimisandmete profiili koostise kui ka enda juriidilise isiku koostise teabe ning kõik teised registreerijad esitavad oma koostise spetsiifilise teabe. Iga standardregistreering peab sisaldama asjakohast analüütilist teavet ka IUCLIDI jaotises 1.4.

Iga registreerija peab tõendama, et tema poolt konkreetselt toodetavate või imporditavate ainete koostise teave on hõlmatud aine identifitseerimisandmete profiiliga, nagu see on esitatud piirkoostises, ning see on omakorda hõlmatud juhtregistreerija toimikus esitatud VII–XI lisa andmetega (põhjendatud erandite puudumisel).

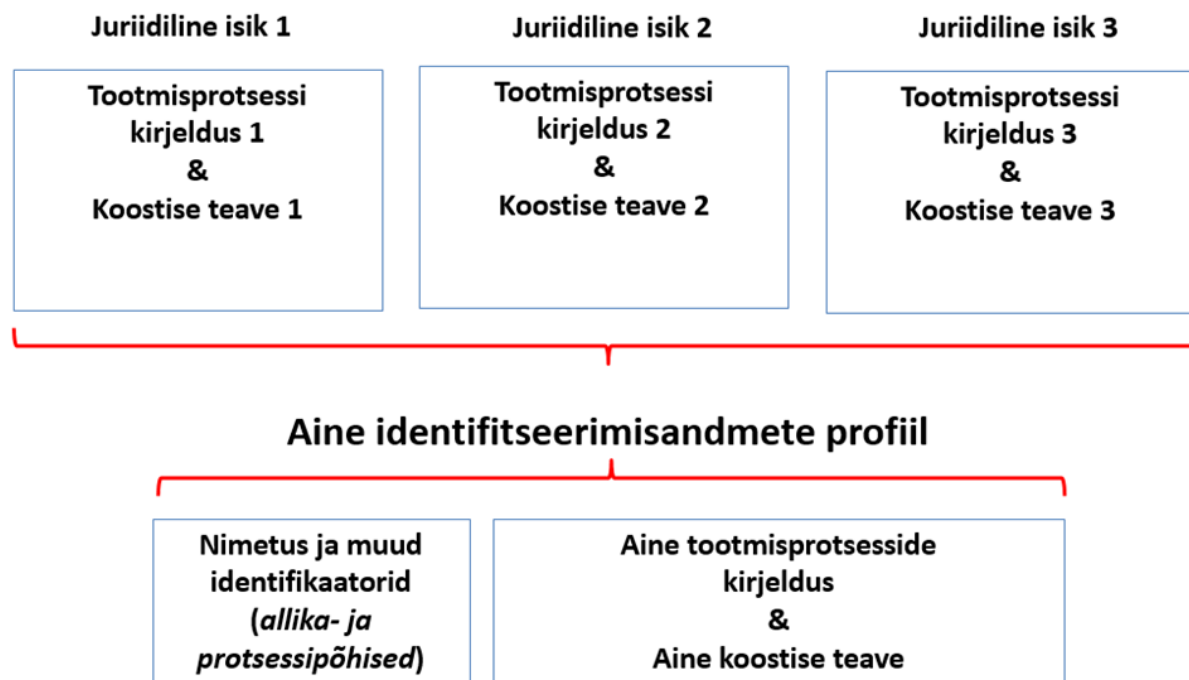
Tehnilised juhised koostise teabe esitamiseks IUCLID-vormingus on IUCLIDI käsiraamatutes (<http://echa.europa.eu/manuals>).

Joonis 2 (järgmine leht): Skemaatiline ülevaade sellest, mida potentsiaalsed registreerijad teevad alates 1) registreerimiskohustuste tuvastamisest ja 4) aine identifitseerimisandmete profiili määramisest kuni 8) registreerimisdokumentide esitamiseni nende ainete registreerimiskohustuste ametlikuks täitmiseks.





Joonis 3: Näitlik skeem UVCB-aine identifitseerimisandmete profiili (4. etapp joonisel 2) määratlemiseks UVCB-aine korral, mis on identifitseeritud allika ja protsessi deskriptorite järgi juriidilise isiku individuaalsest allikast, ning protsessi kirjeldused.



EUROOPA KEMIKAALIAMET
P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINGI
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://echa.europa.eu)