

REACH- ja CLP-asetusten mukaista aineiden yksilöimistä ja nimeämistä koskevat toimintaohjeet

Joulukuu 2023
Versio 3.0



OIKEUDELLINEN HUOMAUTUS

Tämän asiakirjan on tarkoitus tukea käyttäjiä heidän REACH- ja CLP-asetusten mukaisten velvoitteidensa täyttämässä. Lukijoita muistutetaan kuitenkin siitä, että REACH- ja CLP-asetukset ovat ainoat todistusvoimaiset oikeudelliset viiteasiakirjat ja etteivät asiakirjaan sisältyvät tiedot ole verrattavissa oikeudelliseen neuvontaan. Tietojen käyttö on täysin käyttäjän vastuulla. Euroopan kemikaalivirasto ei vastaa tämän asiakirjan sisältämien tietojen mahdollisesta käytöstä.

REACH- ja CLP-asetusten mukaista aineiden yksilöimistä ja nimeämistä koskevat toimintaohjeet

Viite: ECHA-23-H-07-FI
Luett.nro ED-09-23-444-FI-N
ISBN: 978-92-9468-308-3
DOI: 10.2823/694870
Julkaistu: Joulukuu 2023
Kieli: FI

© Euroopan kemikaalivirasto, 2023
Etusivu © Euroopan kemikaalivirasto

Asiakirjaa koskevat mahdolliset kysymykset tai huomautukset voi lähettää tietopyyntölomakkeella (mainitse viite ja julkaisuajankohta). Tietopyyntölomakkeen saa Euroopan kemikaaliviraston verkkosivustolta Yhteydenotto-osiosta:

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

European Chemicals Agency (Euroopan kemikaalivirasto)

Postiosoite: PL 400, 00121 Helsinki
Käyntiosoite: Telakkakatu 6, 00150 Helsinki

JOHDANTO

Tässä asiakirjassa selitetään, miten kemialliset aineet nimetään ja yksilöidään REACH- ja CLP-asetusten mukaisesti. Asiakirja kuuluu toimintaohjeiden sarjaan, jonka tarkoituksena on auttaa kaikkia asianosaisia valmistautumaan REACH- ja CLP-asetusten mukaisten velvoitteidensa täyttämiseen. Näissä asiakirjoissa annetaan tarkkoja ohjeita keskeisiä REACH- ja CLP-prosesseja sekä sellaisia tieteellisiä ja/tai teknisiä menetelmiä varten, joita teollisuuden tai viranomaisten on REACH- ja CLP-asetusten mukaan käytettävä.

Toimintaohjeet on laadittu ja käsitelty Euroopan komission yksiköiden johtamissa REACH-asetuksen täytäntöönpanohankkeissa (RIP), ja niihin ovat osallistuneet kaikki asianosaiset: jäsenvaltiot, teollisuus ja kansalaisjärjestöt. Toimintaohjeet ovat saatavilla Euroopan kemikaaliviraston verkkosivustolla (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Sivustossa julkaistaan lisää toimintaohjeita sitä mukaa kuin niitä saadaan valmiiksi tai päivitetään.

ASIAKIRJAN VERSIOHISTORIA

Versio	Huomautus	Päivämäärä
Versio 1	Ensimmäinen painos	Kesäkuu 2007
Versio 1.1	<p>Korjaukset:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Asiakirjan otsikkoon ja luvun otsikoihin on lisätty viittaus CLP-asetukseen (16.12.2008 annettu asetus (EY) N:o 1272/2008). - Toimintaohjeiden soveltamisalaa on selkeytetty lisäämällä tekstiä. Tarpeetonta tekstiä on poistettu koko asiakirjasta. - Viittaukset CLP-asetukseen on sisällytetty koko tekstiin tarpeen mukaan. - Lyhenne "TGD" on muutettu toimintaohjeiksi koko asiakirjassa. - Termi "valmiste" on muutettu seokseksi koko asiakirjassa. - Termi "numero" (item) on muutettu kohdaksi koko asiakirjassa. - "Esirekisteröinti" (pre-registration) on muutettu "(pidennetyksi) esirekisteröinniksi" ((late) pre-registration) koko asiakirjassa. - Lyhenteet AAS ja CLP on otettu käyttöön, ja lyhenteet RIP ja TGD on poistettu. - Lejeeringin, EY-luettelon ja IUCLIDin kuvauksia on muutettu. Tekstiin on lisätty EY-numeron, luettelonumeron, seoksen ja ilmoitettujen aineiden määritelmät. "Valmisteen" määritelmä on poistettu. - Kohtaa 3.2 on tarkistettu sisällön selventämiseksi. - Kohtaa 3.3 on tarkistettu CLP-asetuksen velvoitteita koskevan sisällön selventämiseksi. - Kohtaa 4.2.2.1 on muutettu siten, että ainesosien esittämistapa on muutettu pitoisuusprosenttien mukaisesta järjestyksestä aakkosjärjestykseen, joten suhteellista koostumusta ei voi päätellä luettelon järjestyksen perusteella. - Kohtaa 4.2.3.1 on muutettu vaihtamalla hila-termi kiteeksi. - Kohtaa 4.3.1.2.3 on tarkistettu sisällön selventämiseksi. 	Marraskuu 2011 (vain englanniksi)

	<ul style="list-style-type: none">- Kohtaan 5 on lisätty viittaus tietojen toimittamista koskevan oppaan osaan 18 – "Tunnistetietojen toimittaminen IUCLID 5 -järjestelmään REACH-rekisteröintiä varten".- Kohtaa 5 on tarkistettu sisällön selventämiseksi.- Kohdassa 6 "esirekisteröinnin" (pre-registration) kuvausta on muutettu "(pidennetyksi) esirekisteröinniksi" ((late) pre-registration).- Liitteen 1 toimimattomat hyperlinkit on päivitetty.- Liitteen 2 osa 4.3 on poistettu, sillä sen sisältö esitetään asiaa koskevalla verkkosivulla.	
Versio 1.2	<p>Korjaus "Vaiheittain rekisteröitävän aineen" määritelmä on muutettu vastaamaan asetuksen (EY) Nro 1907/2006 vastaavaa määritelmää, joka otettiin käyttöön neuvoston asetuksella (EY) Nro 1354/2007 ja Euroopan unionin virallisessa lehdessä L 36, 5.2.2009, s. 84 (1907/2006) julkaistulla korjauksella. Huom. Versioihin 1.1 ja 1.2 tehdyt muutokset on yhdistetty 1.2 version käännöksissä muiden kielten paitsi englannin osalta.</p>	Maaliskuu 2012
Versio 1.3	<p>Korjaus Kaksi puuttuvaa rakennekaavaa lisättiin lukuun 7.6.</p>	Helmikuu 2014
Versio 1.4	<p>Korjaukset:</p> <ul style="list-style-type: none">- Asiakirja muotoiltiin uudelleen nykyisen yhteisöidentiteetin mukaiseksi.- Vanhentuneeseen IUCLID-versioon perustuneita teknisiä ohjeita sisältänyt luku 8 poistettiin.- Korjattu osiossa 7.5 kristobaliitin ja kvartsin kuvaus ja poistettu viite direktiiviin 2000/30/EY.- Viitteet lukuun 8 ja tietojen toimittamista koskeviin oppaisiin poistettiin ja viitteet ECHAN uusiin oppaisiin lisättiin.- Liite III poistettiin ja tiedot siirrettiin asiakirjaversio- taulukkaan.- Toimimattomat linkit verkkosivuille ja toimituksellisia virheitä korjattiin.	Kesäkuu 2016
Versio 2.0	<p>Osittainen päivitys, joka rajoittuu seuraaviin:</p>	Joulukuu 2016

	<ul style="list-style-type: none">- - Lisätty uusi liite III, jossa on kuvaus aineen tunnistetietoprofiili -käsitteestä.- - Lisätty lukuun 1 uutta tekstiä, jossa esitellään uusi liite III.- - Korjattu lyöntivirheitä ja toimituksellisia virheitä.	
Versio 2.1	Tekstin typografisten virheiden ja liitteen III kuvassa 2 olevien koostumusta koskevien väärin tietojen korjaukset.	Toukokuu 2017
Versio 3.0	Päivityksiä: <ul style="list-style-type: none">- Yhteensovitettu 24. maaliskuuta 2022 annetun komission asetuksen (EU) 2022/477 sisältämien muutosten kanssa- Poistettu viittaukset (pidennettyyn) ennakkorekisteröintiin- Korjattu lyöntivirheitä ja toimituksellisia virheitä- Lisätty linkkejä ECHAN verkkosivuston tukiosioon ja kysymysten ja vastausten osioon- Poistettu liitteen III luku 5 "IUCALID-järjestelmän 5. ja 6. version väliset siirtymätoimet"	Joulukuu 2023

Sisällysluettelo

1. YLEISTÄ	9
1.1. Tavoitteet	9
1.2. Soveltamisala.....	10
1.3. Toimintaohjeidenrakenne.....	11
2. MÄÄRITELMÄT JA LYHENTEET	12
2.1. Lyhenteet	12
2.2. Määritelmät	14
3. AINEEN YKSILÖINTIÄ REACH- JA CLP-ASETUSTEN MUKAISESTI KOSKEVAT VAATIMUKSET	18
3.1. Aineen määritelmä.....	18
3.2. Numeeriset tunnisteen	18
3.2.1. EY-luettelo	18
3.2.2. Luettelonumerot	20
3.3. Aineen yksilöintiä REACH- ja CLP-asetusten mukaisesti koskevat vaatimukset.....	20
4. AINEIDEN YKSILÖIMISTÄ JA NIMEÄMISTÄ REACH- JA CLP-ASETUSTEN MUKAAN KOSKEVAT TOIMINTAOHJEET	24
4.1. Johdanto	24
4.2. Aineet, joilla on tarkasti määritelty koostumus	30
4.2.1. Yhdestä ainesosasta koostuvat aineet.....	31
4.2.2. Useammasta ainesosasta koostuvat aineet.....	33
4.2.3. Kemialliselta koostumukseltaan määritetyt aineet ja muut tunnistetiedot.....	36
4.3. UVCB-aineet	38
4.3.1. Yleisiä ohjeita UVCB-aineista	38
4.3.2. UVCB-aineiden erityislajit.....	47
5. AINEEN SAMUUDEN SELVITTÄMISEN PERUSTEET	56
6. AINEEN TUNNISTETIETO TIEDUSTELUSSA	63
7. ESIMERKKEJÄ	64
7.1. Dietyyliperoksidikarbonaatti	64
7.2. TSOLIMIDIINI	65
7.3. Isomeeriseos.....	65
7.4. Hajuste AH	69
7.5. Mineraalit	75
7.6. Eteerinen öljy Lavandin grosso	78
7.7. Krysanteemiöljy ja siitä eristetyt isomeerit.....	84

7.8. Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti.....	88
7.9. Kvaternaariset ammoniumyhdisteet	90
7.10. Maaöljyn ainesosat.....	94
7.10.1. Bensinisekoitus (C4-C12)	94
7.10.2. Kaasuöljyt (maaöljy)	95
7.11. Entsyymit	96
7.11.1. Subtilisiini	97
7.11.2. α -amylaasi	98
LIITE I - TUKIMATERIAALIA.....	100
LIITE II - AINEEN TUNNISTEPARAMETREJA KOSKEVA TEKNINEN OPAS	104
LIITE III – AINEEN YKSILÖIMINEN JA TIETOJEN YHTEISTOIMITUS	121

Taulukot

Taulukko1: Lyhenteet	12
Taulukko2: Määritelmät.....	14
Taulukko3: Aineen yksilöintiparametrit REACH-asetuksen liitteen VI 2 jakson mukaisesti	22
Taulukko 4: Keskeisten tunnistetietojen ryhmittely erityyppisiä tarkasti määriteltyjä samanlaisia aineita koskevia esimerkkejä varten.....	25
Taulukko5: Keskeisten tunnistetietojen ryhmittely erityyppisiä UVCB-aineita koskevia esimerkkejä varten	26

Kuvat

Kaavio 1: Ohje toimintaohjeiden lukuihin ja liitteisiin erityyppisiä aineita koskevien ohjeiden löytämiseksi	29
Kuva 2 (seuraava sivu) Yhteenvetokaavio vaiheista, joiden mukaan mahdolliset rekisteröijät toimivat määrittäessään rekisteröintivelvollisuutensa (1), laatiessaan yhtä ainetta koskevan tunnistetietoprofiilinsa (4) ja toimittaessaan rekisteröintinsä, jotta niiden aineen rekisteröintiä koskevat velvollisuudet täyttyisivät muodollisesti (8).	127
Kaavio 3: Havainnollistava kaavio sellaisen UVCB-tyyppisen aineen tunnisteprofiilin määrittämisestä (vaihe 4 kuvassa 2), joka on yksilöity yksittäisen oikeushenkilön lähde- ja prosessikuvauksista saatujen lähde- ja prosessikuvauksien perusteella.	130

1. Yleistä

REACH-asetuksella (asetus (EY) N:o 1907/2006) perustetaan järjestelmä kemikaalien rekisteröintiä, arviointia, lupamenettelyjä ja rajoituksia varten sekä Euroopan kemikaalivirasto (ECHA), joka vastaa asetuksen täytäntöönpanosta.¹

CLP-asetus (asetus (EY) N:o 1272/2008) puolestaan on uusi aineiden ja seosten luokitusta, merkitsemistä ja pakkaamista koskeva EU-säädös.² Tämän säädöksen myötä Euroopan unionissa otetaan käyttöön uusi kemikaalien luokitus- ja merkitsemisjärjestelmä, joka perustuu YK:n maailmanlaajuisesti yhdenmukaistettuun järjestelmään (UN GHS).

REACH-asetuksessa käsitellään aineita. Sen varmistamiseksi, että REACH-prosessit toimivat asianmukaisesti, on erittäin tärkeää, että aineet yksilöidään oikein ja yksiselitteisesti. Näiden aineiden yksilöimistä ja nimeämistä koskevien toimintaohjeiden tarkoituksena on tukea teollisuutta, jäsenvaltioita ja Euroopan kemikaalivirastoa.

Nämä toimintaohjeet perustuvat aineiden yksilöimisestä aiemman kemikaalilainsäädännön (direktiivi 67/548/ETY ja direktiivi 98/8/ETY) perusteella kerättyihin kokemuksiin. Näiden toimintaohjeiden tarkistamisen perusteina ovat kuitenkin nykyiset käytänteet, jotka liittyvät aineen yksilöimiseen REACH-asetuksen sekä aineiden ja seosten luokitusta, merkintöjä ja pakkaamista koskevan CLP-asetuksen mukaisesti. Tarvittaessa on otettu lisäksi huomioon Euroopan unionin ulkopuolisen lainsäädännön mukaiset toimintatavat.

Tässä asiakirjassa annetaan myös erityyppisiä aineita koskevia erityisohjeita.

Näitä toimintaohjeita tulee soveltaa yksilöitäessä ja nimettäessä sellaisia aineita, joita säännellään REACH- ja CLP-asetuksilla.

1.1. Tavoitteet

Näiden toimintaohjeiden tarkoituksena on antaa valmistajille ja maahantuojille selvät ohjeet siitä, miten jokin aine yksilöidään ja miten aineen tunnistetiedot ilmoitetaan REACH- ja CLP-asetusten nojalla. Toimintaohjeissa neuvotaan, miten aine nimetään; se on keskeinen ja tärkeä osa aineiden yksilöintiä. Lisäksi ohjeissa annetaan ohjeita siitä, voidaanko aineita pitää samoina REACH- ja CLP-asetusten tarkoitusten kannalta ja miten ”yksi aine, yksi rekisteröinti” (YAYR) -periaatetta voidaan toteuttaa määrittämällä aineen tunnistetietoprofiili. Samojen aineiden tunnistaminen, jotka voivat kuulua saman tunnistetietoprofiilin piiriin, on tärkeää tiedustelujen, tietojen yhteiskäytön, tietojen yhteistoimituksen, luokitusten ja merkintöjen luetteloon ilmoittamisen sekä luokituksen ja merkintöjen yhtenäistämisen kannalta.

On suositeltavaa, että aineiden yksilöiminen annetaan teollisuuden asiantuntijoiden tehtäväksi. Sellaisille teollisuuden toimijoille, joilla on käytettävissään vain vähän aineiden yksilöintiä koskevaa asiantuntemusta, näiden toimintaohjeiden liitteessä on lisäohjeistusta yksilöintiparametreista.

¹ Euroopan parlamentin ja neuvoston asetus (EY) N:o 1907/2006, annettu 18 päivänä joulukuuta 2006, kemikaalien rekisteröinnistä, arvioinnista, lupamenettelyistä ja rajoituksista (REACH), Euroopan kemikaaliviraston perustamisesta, direktiivin 1999/45/EY muuttamisesta sekä neuvoston asetuksen (ETY) N:o 793/93, komission asetuksen (EY) N:o 1488/94, neuvoston direktiivin 76/769/ETY ja komission direktiivien 91/155/ETY, 93/67/ETY, 93/105/EY ja 2000/21/EY kumoamisesta (”REACH”).

² Euroopan parlamentin ja neuvoston asetus (EY) N:o 1272/2008, annettu 16 päivänä joulukuuta 2008, aineiden ja seosten luokituksista, merkinnöistä ja pakkaamisesta sekä direktiivin 67/548/ETY ja 1999/45/EY muuttamisesta ja kumoamisesta ja asetuksen (EY) N:o 1907/2006 muuttamisesta (ETA:n kannalta merkityksellinen teksti) (”CLP”).

Lisäksi näissä toimintaohjeissa on luettelo linkeistä keskeisiin välineisiin, joita voidaan käyttää apuna aineiden luonnehdinnassa ja aineen kemiallisen identiteetin selvittämisessä.

Tarkempia ohjeita siitä, miten aineen tunnistetiedot syötetään IUCLID-järjestelmään erilaisissa REACH- ja CLP-asetuksiin liittyvissä menettelyissä, on kemikaaliviraston oppaissa, jotka ovat saatavana osoitteessa <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Soveltamisala

REACH-asetuksen 1 artiklan mukaisesti asetus koskee aineiden valmistusta, tuontia, markkinoille saattamista ja käyttöä sellaisenaan, seoksissa tai esineissä. REACH-asetuksessa ei säädetä seoksista ja esineistä sinänsä.

REACH-asetuksen 10 artiklan mukaisesti rekisteröinti edellyttää, että aine yksilöidään käyttämällä REACH-asetuksen liitteessä VI olevassa 2 jaksossa määritettyjä parametreja (katso Taulukko3). Samanlaisia parametreja (REACH-asetuksen liitteessä VI olevissa 2.1–2.3.4 jaksoissa määritetyn mukaisesti) tarvitaan tallennettaessa aineen tunnistetietoja CLP-asetuksen 40 artiklan 1 kohdan mukaista ilmoitusta varten. Näissä toimintaohjeissa keskitytään REACH- ja CLP-asetusten mukaisen aineen oikeudellisen määritelmän piiriin kuuluvien aineiden asianmukaiseen yksilöintiin. Lisäksi toimintaohjeissa annetaan ohjeita REACH-asetuksen liitteessä VI olevan 2 jakson mukaisista aineen yksilöintiparametreista. Aineesta on annettava riittävästi tietoja, jotta kukin aine voidaan yksilöidä. Yksi tai useampi aineen yksilöintiparametri voidaan jättää pois, jos vaadittujen tietojen antaminen ei ole teknisesti mahdollista tai jos se ei vaikuta olevan tieteellisesti tarpeellista. Parametrien poisjättämisen syyt on ilmoitettava selvästi, ja sille on oltava tieteelliset perustelut.

Se, miten aine yksilöidään, määräytyy aineen tyyppin mukaan. Sen vuoksi näiden toimintaohjeiden käyttäjää ohjataan tutkimaan tiettyjä lukuja erityyppisten aineiden osalta.

Direktiivin 67/548/ETY mukaisesti käytettävät EY-luettelot (EINECS-, ELINCS- ja NLP-luettelot) ovat tärkeitä työkaluja aineiden tunnistamisessa. Luvussa 3.2. annetaan ohjeita siitä, miten näitä luetteloja käytetään REACH-asetuksen yhteydessä.

REACH- ja CLP-asetusten soveltamisalan (ja siis näiden toimintaohjeiden) mukaiset aineet syntyvät tyypillisesti tuloksena kemiallisista reaktioista, jotka ovat osa aineen valmistusta, ja niissä voi olla useita erillisiä ainesosia. REACH- ja CLP-asetuksissa määritettyihin aineisiin kuuluvat myös aineet, jotka on johdettu tai eristetty kemiallisesti luonnossa esiintyvistä aineista. Niissä voi olla yksittäinen osa tai molekyyli (esimerkiksi puhtaat metallit tai tietyt mineraalit) tai useampia ainesosia (esimerkiksi eteeriset öljyt tai metallikivet, joita muodostuu sulfidisten metallimalmien sulaessa). Aineet, joita säännellään yhteisön muun lainsäädännön perusteella, on monissa tapauksissa vapautettu REACH-asetuksen mukaisesta rekisteröinnistä (katso REACH-asetuksen 2 artikla). Myös REACH-asetuksen liitteessä IV luetellut aineet sekä tietyt REACH-asetuksen liitteessä V määritetyt kriteerit täyttävät aineet on vapautettu rekisteröinnistä. Todettakoon, että vaikka jokin aine voidaan vapauttaa rekisteröinnistä, se ei välttämättä tarkoita sitä, että aine vapautetaan myös REACH-asetuksen muiden osastojen tai CLP-asetuksen mukaisista vaatimuksista.

REACH-asetus edellyttää, että saman aineen rekisteröijät liittyvät yhteen ja sopivat aineen tiettyjen tietojen yhteistoimituksesta (YAYR-periaate)³. Tätä periaatetta sovellettaessa on oltava selvää, miten rekisteröijät ovat määrittäneet tunnistetietoprofiilinsa laajuuden.

³Tarkempia tietoja saman aineen tietojen yhteistoimitukseen liittyvästä tietojen yhteiskäytöstä on julkaisussa *Tietojen yhteiskäyttöä koskevat toimintaohjeet*.

1.3. Toimintaohjeiden rakenne

Luvussa 1 esitetään taustatietoja, esimerkiksi näiden toimintaohjeiden tavoitteet ja soveltamisala. Lyhenteet ja määritelmät esitetään luvussa 2. Luvussa 3 puolestaan annetaan oleellista tietoa (esimerkiksi aineen määritelmä ja tietovaatimukset asetustekstissä) aineen yksilöimisestä REACH-asetuksen mukaisesti.

Käytännön ohjeet aineen yksilöimisestä ja nimeämisestä ovat luvussa 4.

- Luvussa 4.1 kuvataan ero aineiden välillä, jotka on ”tarkasti määriteltyjä” ja jotka eivät ole ”tarkasti määriteltyjä”. Näiden pääryhmien mukaisille ainetyypeille annetaan omat erityisohjeet aineen yksilöimisestä. Luvussa esitetään myös kuva, jonka avulla käyttäjä löytää sen luvun, joka sisältää yksilöimisohjeet tietyntyyppistä ainetta varten.
- Seuraavissa luvuissa on kutakin ainetyyppiä koskevia erityisohjeita, jotka on koottu selityksiä ja esimerkkejä sisältäväksi sääntökokonaisuudeksi.

Luvussa 5 annetaan ohjeita sen selvittämiseen, voidaanko aineita pitää samoina vai ei. Luku 6 sisältää ohjeita aineiden yksilöimiseen tiedustelumenettelyä varten.

Lukuun 7 on lisäksi laadittu joitakin yksityiskohtaisia esimerkkejä luvun 4 käytännön ohjeiden avulla.

Liitteessä I on muutamia linkkejä keskeisiin välineisiin, joita voidaan käyttää apuna aineiden luonnehdinnassa ja kemiallisten tunnistetietojen selvittämisessä.

Liitteessä II annetaan taustatietoa aineiden yksilöintimenettelyssä käytetyistä yksittäisten aineiden yksilöintiparametreista, kuten nimikkeistösäännöistä, EY-numeroista, CAS-numeroista, molekyyli- ja rakennekaavoja koskevia huomautuksista sekä analyysimenetelmistä.

Liitteessä III annetaan tietoa aineen tunnistetietoprofiilin käsitteestä, sen merkityksestä yhteistoimitukseen liittyvien velvollisuuksien osalta sekä siitä, miten se on laadittava ja ilmoitettava.

2. Määritelmät ja lyhenteet

2.1. Lyhenteet

Näissä toimintaohjeissa käytetyt keskeiset lyhenteet, ks. Taulukko1.

Taulukko1: Lyhenteet

Lyhenne	Merkitys
AAS	Atomic Absorption Spectroscopy, atomiabsorptiospektroskopia
AISE	International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products, kansainvälinen saippua-, pesuaine- ja siivoustuotteiden liitto
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Aineiden ja seosten luokitusta, merkintöjä ja pakkaamista koskeva asetus (EY) N:o 1272/2008
EINECS	European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (Euroopassa kaupallisessa käytössä olevien kemiallisten aineiden luettelo)
ELINCS	European List of Notified Chemical Substances (Euroopan ilmoitettujen kemiallisten aineiden luettelo)
ENCS	Existing and New Chemical Substances (Japan), japanilainen nykyisten ja uusien kemiallisten aineiden luettelo
ESIS	European Chemical Substances Information System, Euroopan kemikaalitietojärjestelmä
EU	Euroopan unioni
EY	European Commission (Euroopan komissio)
GC	Gas chromatography, kaasukromatografia
GHS	Globally Harmonized System, maailmanlaajuisesti yhdenmukaistettu järjestelmä
HPLC	High performance liquid chromatography, korkean erotuskyvyn nestekromatografia
InChI	IUPAC International Chemical Identifier, IUPAC:n mukainen kansainvälinen kemiallinen yksilöinti
INCI	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients, kosmetiikan ainesosien kansainvälinen nimikkeistö
IR	Infrared, infrapuna
ISO	International Organization for Standardization, kansainvälinen standardointijärjestö

IUBMB	International Union of Biochemistry and Molecular Biology, kansainvälinen biokemian ja molekyylibiologian liitto
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database, yhdenmukaisten kemiallisten tietojen kansainvälinen tietokanta
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry (kansainvälinen teoreettisen ja sovelletun kemian liitto)
MS	Mass spectroscopy, massaspektroskopia
NLP	No Longer Polymer, aine, joka ei täytä enää polymeerin määritelmää
NMR	Nuclear Magnetic Resonance, ydinmagneettinen resonanssi
p/p	Weight by weight, painoprosentti
ppm	Parts per million, miljoonasosa
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals, kemikaalien rekisteröinti, arviointi, lupamenettelyt ja rajoitukset
SIEF	Tietojenvaihtofoorumi
SIP	Aineen tunnistetietoprofiili
SMILES	Simplified molecular input line entry specification, SMILES-järjestelmä
TSCA	Toxic Substances Control Act (USA), myrkyllisten aineiden valvontaa koskeva laki (Yhdysvallat)
UV/VIS	Ultra violet /visible, ultravioletti/näkyvä
UVCB	Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials, koostumukseltaan tuntemattomat tai vaihtelevat aineet, monimutkaiset reaktiotuotteet tai biologiset materiaalit
XRD	X-Ray Diffraction, röntgendiffraktio
XRF	X-Ray Fluorescence, röntgenfluoresenssi

2.2. Määritelmät

Näissä toimintaohjeissa käytetyt keskeiset määritelmät, ks. Taulukko2.

Näissä määritelmässä otetaan huomioon REACH- ja CLP-asetuksissa käytetyt määritelmät. Tämän vuoksi muutamat termit on määritelty eri tavalla kuin direktiivissä 67/548/ETY.

Taulukko2: Määritelmät

Määritelmä	Selitys
Aine*	Alkuaine ja sen yhdisteet sellaisina kuin ne esiintyvät luonnossa tai millä tahansa valmistusmenetelmällä tuotettuina, mukaan luettuna aineen pysyvyyden säilyttämiseksi tarvittavat lisäaineet ja valmistusprosessista johtuvat epäpuhtaudet, mutta lukuun ottamatta liuottimia, jotka voidaan erottaa vaikuttamatta aineen pysyvyyteen tai muuttamatta sen koostumusta.
Ainesosa	Tarkoituksella lisätty aine seoksen muodostamiseksi.
Ainesosa	Mikä tahansa aineessa oleva kemiallinen osa-aine, joka voidaan tunnistaa sen ainutkertaisen kemiallisen identiteetin perusteella.
Epäpuhtaus	Aineessa oleva tahaton ainesosa, joka syntyy valmistuksen yhteydessä. Se voi olla peräisin lähtömateriaaleista tai olla tulosta valmistusprosessin aikaisista sekundaarisista tai epätäydellisistä reaktioista. Lopullisessa aineessa olevia epäpuhtauksia ei ole siis lisätty aineeseen tarkoituksellisesti.
Esine*	Tuotetta, jolle annetaan tuotannossa erityinen muoto, pinta tai rakenne, joka määrittää sen käyttötarkoitusta enemmän kuin sen kemiallinen koostumus.
EY-luettelo	REACH-asetuksessa EY-luetteloa ei ole määritetty lainsäädännöllisestä näkökulmasta, mutta se muodostuu kolmesta yhdistetystä ja laillisesti hyväksytystä eurooppalaisesta aineluettelosta, jotka kuuluivat EU:n aiempaan kemikaalien sääntelyjärjestelmään. Nämä kolme luetteloa ovat EINECS, ELINCS ja NLP-luettelo (aine, joka ei enää täytä polymeerien määritelmää). EY-luettelon kirjaukset sisältävät kemiallisen nimen ja numeron (EY-nimi ja EY-numero), CAS-numeron, molekyylikaavan (jos saatavilla) sekä kuvauksen (tietyyntyyppisistä aineista).
EY-NUMERO	EY-numero on EY-luettelon mukaisten aineiden numeerinen tunniste.
Ilmoitettu aine*	Aine, josta on tehty ilmoitus ja joka voidaan saattaa markkinoille direktiivin 67/548/ETY mukaisesti.

IUCLID	International Uniform Chemical Information Database eli yhdenmukaisten kemiallisten tietojen kansainvälinen tietokanta. IUCLID on kemiallisten aineiden tietokanta ja hallintajärjestelmä.
Kemiallisesti muuntamaton aine*	Aine, jonka kemiallinen rakenne pysyy muuttumattomana, vaikka se olisi käynyt läpi kemiallisen prosessin tai käsittelyn taikka sitä olisi käsitelty fysikaalis-mineralogisessa muuntoprosessissa, esimerkiksi epäpuhtauksien poistamiseksi.
Kromatografinen sormenjälki	Kuva aineen koostumuksesta, joka saadaan selville ainesosien luonteenomaisesta jakautumisesta analyttisessä kromatogrammissa.
Lisäaine	Aine, joka on lisätty tarkoituksella valmistusprosessin aikana aineen stabiloimiseksi ⁴ .
Luettelonumero	Viraston antama numero. REACH-IT-järjestelmän automaattisesti antama numero. Sovelletaan kaikkiin tuleviin asiaankuuluviin toimituksiin (esimerkiksi esirekisteröinnit, PPORD, tiedustelut, rekisteröinnit, luokitus- ja merkintäilmoitukset).
Luonnossa esiintyvä aine*	Luonnonaine sellaisenaan, käsittelemättömänä tai käsiteltynä ainoastaan manuaalisin, mekaanisin tai painovoimaan perustuvien menetelmin; liuottamalla veteen, vaahdottamalla, erottamalla veden avulla, höyrytislauksella tai lämmittämällä ainoastaan veden poistamiseksi, tai aine, joka erotetaan ilmasta mitä tahansa menetelmää käyttäen.
Metalliseos*	Makroskooppisesti homogeeninen metallimateriaali, joka koostuu kahdesta tai useammasta osasta, jotka on yhdistetty niin, ettei niitä voida helposti erottaa mekaanisin menetelmin. Metalliseoksia pidetään erityisseoksina.
Monomeeri*	Aine, joka pystyy muodostamaan kovalenttisisidoksellisia jaksoja muiden samanlaisten tai erilaisten molekyylien kanssa tietyssä prosessissa, jossa on polymeerin muodostumiselle soveltuvat olosuhteet.

⁴ Muilla aloilla lisäaineella voi olla myös muita tehtäviä; ne voivat toimia esimerkiksi pH:n säätöaineena tai väriaineena. REACH-asetuksessa ja näissä toimintaohjeissa lisäaineella tarkoitetaan kuitenkin stabilisaattoria.

Polymeeri*	<p>Aine, joka koostuu molekyyleistä, joille on ominaista yhden tai useamman tyyppisten monomeeriyksikköjen muodostama jakso. Näiden molekyyliden on moolimassan suhteen jakaannuttava useisiin eri moolimassaluokkiin siten, että erot johtuvat pääasiassa monomeeriyksikköjen lukumäärien eroista. Polymeerin koostumus on seuraavanlainen:</p> <p>(a) sen massasta suurempi osa koostuu molekyyleistä, joissa on vähintään kolme monomeeriyksikköä, jotka ovat sitoutuneet kovalenttisesti vähintään yhteen toiseen monomeeriyksikköön tai muuhun lähtöaineeseen</p> <p>(b) sen massasta pienempi osa koostuu keskenään samanpainoisista molekyyleistä.</p> <p>Tässä määritelmässä "monomeeriyksiköllä" tarkoitetaan polymeerissä esiintyvää monomeeriaineen reagoitua muotoa.</p>
Pääainesosa	<p>Ainesosa, joka ei ole lisäaine tai epäpuhtaus ja joka on huomattava osa kyseistä ainetta ja jota käytetään sen vuoksi aineen nimeämisessä ja aineen yksityiskohtaisissa tunnistetiedoissa.</p>
Seos*	<p>Kahdesta tai useammasta aineesta koostuva seos tai liuos.</p>
Useammasta ainesosasta koostuva aine	<p>Yleensä koostumuksensa perusteella määritetty aine, jossa useamman pääainesosan pitoisuus on 10 painoprosenttia ja < 80 painoprosenttia.</p>
Valmistus*	<p>Aineiden tuottaminen tai luonnossa esiintyvien aineiden uuttaminen.</p>
Väli tuotteet*	<p>Aine, jota valmistetaan kemiallista prosessointia varten tai kulutetaan tai käytetään kemiallisessa prosessoinnissa sen muuntamiseksi toiseksi aineeksi (tätä kutsutaan jäljempänä <i>synteeksiksi</i>):</p> <p>(a) <u>Erottamaton väli tuote</u> on väli tuote, jota ei synteessin aikana tarkoituksellisesti poisteta (paitsi näytteenottoa varten) laitteistosta, jossa synteesi tapahtuu. Tällaiseen laitteistoon kuuluvat reaktioastia, sen lisälaitteet ja kaikki laitteet, joiden kautta aine (aineet) kulkee (kulkevat) jatkuvatoimisessa tai panosprosessissa, sekä putkistot, jotka on tarkoitettu reaktioseoksen siirtämiseen astiasta toiseen seuraavaa reaktiovaihetta varten, mutta siihen eivät kuulu säiliöt ja muut astiat, joissa ainetta (aineita) varastoidaan valmistuksen jälkeen.</p> <p>(b) <u>Tuotantopaikalla käytettävä erotettu väli tuote</u> on väli tuote, joka ei täytä erottamattoman väli tuotteen kriteereitä, kun väli tuotteen valmistus ja toisen (toisten) aineen (aineiden) synteesi kyseisestä väli tuotteesta tapahtuu samalla tuotantopaikalla, jonka toiminnasta vastaa yksi tai useampi oikeushenkilö.</p> <p>(c) <u>Kuljetettava erotettu väli tuote</u> on väli tuote, joka ei täytä erottamattoman väli tuotteen kriteereitä ja jota kuljetetaan muiden tuotantopaikkojen välillä tai toimitetaan muille tuotantopaikoille.</p>

Yhdestä ainesosasta koostuva aine	Yleensä koostumuksensa perusteella määritetty aine, jossa pääaineesosan pitoisuus on vähintään 80 painoprosenttia.
-----------------------------------	--

* Määritelmät REACH-asetuksen 3 artiklan mukaisesti.

3. Aineen yksilöintiä REACH- ja CLP-asetusten mukaisesti koskevat vaatimukset

REACH- ja CLP-asetukset sisältävät aineen määritelmän, ja REACH-asetuksessa on myös luettelo aineen yksilöintiparametreista (liite VI, 2 jakso), jotka on huomioitava, kun ainetta yksilöidään rekisteröintitarkoituksiin.

Tässä luvussa kuvataan aineen määrittely REACH- ja CLP-asetuksissa (luku 3.1), annetaan yleisiä ohjeita aiemman kemikaalilainsäädännön mukaisen EY-luettelon käyttämiseen (luku 3.2) ja esitetään taustatietoja aineen yksilöintiä koskevista vaatimuksista REACH-asetuksessa määritetyn mukaisesti (luku 3.3).

3.1. Aineen määritelmä

Aine määritellään REACH-asetuksen (3 artiklan 1 kohta) ja CLP-asetuksen (2 artiklan 7 kohta) seuraavasti:

Aineella tarkoitetaan alkuainetta ja sen yhdisteitä sellaisina kuin ne esiintyvät luonnossa tai millä tahansa valmistusmenetelmällä tuotettuina, mukaan luettuna aineen pysyvyyden säilyttämiseksi tarvittavat lisäaineet ja valmistusprosessista johtuvat epäpuhtaudet, mutta lukuun ottamatta liuottimia, jotka voidaan erottaa vaikuttamatta aineen pysyvyyteen tai muuttamatta sen koostumusta.

Aineen määritelmä REACH- ja CLP-asetuksissa on sama kuin se aineen määritelmä, jota käytettiin vaarallisia aineita koskevan direktiivin (direktiivi 92/32/ETY, jolla muutettiin direktiiviä 67/548/ETY) seitsemännessä muutoksessa. Molemmissa tapauksissa määritelmä on yksityiskohtaisempi kuin pelkkä yksittäisen molekyyliarakenteen perusteella määritelty kemiallinen yhdiste. Aineen määritelmä sisältää eri ainesosat, esimerkiksi epäpuhtaudet.

3.2. Numeeriset tunnisteet

3.2.1. EY-luettelo

EY-luettelo koostuu kolmesta erillisestä luettelosta, jotka on laadittu aiemman kemikaalilainsäädännön perusteella. Kyseessä olevat luettelot ovat Euroopassa kaupallisessa käytössä olevien kemiallisten aineiden luettelo (EINECS), Euroopassa ilmoitettujen kemiallisten aineiden luettelo (ELINCS) ja NLP-luettelo, joka koskee aineita, jotka eivät enää täytä polymeerien määritelmää.

Aineet, joita on ollut Euroopan markkinoilla 1. tammikuuta 1971 ja 18. syyskuuta 1981 välisenä aikana, on lueteltu EINECS-luettelossa^{5, 6, 7}.

Tässä luettelossa on yli 100 000 ainetta, jotka on yksilöity kemiallisen nimen (ja tiettytyyppisten aineiden osalta myös kuvauksen), CAS-numeron ja seitsennumeroisen EINECS-numeron perusteella. EINECS-numeroiden ensimmäinen numero on aina 2 tai 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). EINECS-luetteloon ilmoitetut aineet ovat läpäisseet tarkastusvaiheen, jonka perusteella aineet hyväksytään luetteloon.

Aineet, joista on tehty ilmoitus ja joita on ollut Euroopan markkinoilla 18. syyskuuta 1981 jälkeen, ovat Euroopassa ilmoitettujen kemiallisten aineiden luettelossa (ELINCS-luettelo).⁶ Tämä luettelo sisältää kaikki aineet, jotka oli ilmoitettu 31. toukokuuta 2008 mennessä direktiivin 67/548/ETY ja sen muutosten mukaisesti. Nämä aineet ovat ns. "uusia aineita", koska niitä ei ollut saatettu yhteisön markkinoille 18. syyskuuta 1981 mennessä. Euroopan komissio antoi aineelle ELINCS-numeron jäsenvaltioiden toimivaltaisten viranomaisten tarkastuksen jälkeen. Toisin kuin EINECS-luettelossa, ELINCS-luettelon nimekkeet eivät sisällä CAS-numeroa, vaan jäsenvaltioiden toimivaltaisten viranomaisten antaman ilmoitusnumeron, kaupanimen (jos saatavilla), luokituksen ja IUPAC-nimen luokiteltujen aineiden osalta. Myös ELINCS-numerot ovat seitsennumeroisia, ja niiden ensimmäinen numero on aina 4 (4xx-xxx-x).

Polymeereja ei tarvinnut ilmoittaa EINECS-luetteloon, ja direktiivissä 67/548/ETY oli niitä koskevia erityissäännöksiä^{8 9}. Polymeerin käsite määriteltiin tarkemmin direktiivissä 67/548/ETY, sellaisena kuin se on muutettuna seitsemännen kerran (direktiivi 92/32/ETY). Tämän määritelmän täytäntöönpanon seurauksena joitakin aineita, joiden katsottiin olevan EINECS-luettelon ilmoittamissääntöjen mukaisia polymeereja, *ei enää* seitsemännen muutoksen nojalla pidetty polymeereina. Koska kaikki aineet, joita ei ole lueteltu EINECSissä, oli ilmoitettava, kaikki aineet, jotka *eivät enää täytä polymeerin määritelmää* (NLP:t), olisi teoriassa pitänyt ilmoittaa. Ministerineuvosto teki kuitenkin selväksi, että näitä aineita, jotka eivät enää täytä polymeerin määritelmää, ei tarvitse ilmoittaa takautuvasti. Komissiota kehoitettiin laatimaan luettelo aineista, jotka eivät enää täytä polymeerin määritelmää (NLP-luettelo). Tähän luetteloon lisättävät aineet olivat niitä, jotka olivat olleet Euroopan unionin markkinoilla 18. syyskuuta 1981 (direktiivin 79/831/ETY, direktiivin 67/548/ETY kuudennen muutoksen, voimaantulopäivä) ja 31. lokakuuta 1993 (direktiivin 92/32/ETY, direktiivin 67/548/ETY seitsemännen muutoksen, voimaantulopäivä) välillä ja jotka täyttivät vaatimuksen, jonka mukaan niiden katsottiin olevan EINECS-luetteloon ilmoittamista koskevien sääntöjen mukaan polymeereja mutta joita ei seitsemännen muutoksen nojalla enää pidetty polymeereina. NLP-luettelo ei ole kattava. NLP-luettelon aineet on yksilöity kemiallisen nimen, CAS-numeron ja seitsennumeroisen NLP-numeron perusteella. NLP-

⁵ EINECS perustuu Euroopan kemikaaliluetteloon (**E**uropean **C**ORE **I**NVENTORY (ECOIN)), johon teollisuus saattoi tehdä täydentäviä ilmoituksia (EINECS-luetteloon ilmoitettavia aineita koskevien perusteiden mukaisesti). ECOIN koostui erilaisista luetteloista, jotka sisälsivät tiedot Euroopan markkinoilla oletettavasti olevista kemikaaleista (esimerkiksi TSCA). EINECS julkaistiin 15. kesäkuuta 1990, ja se sisältää yli 100 000 ainetta. Luetteloa käytettäessä on havaittu lukuisia virheitä (painovirheitä, esimerkiksi virheellinen kemiallinen nimi, koostumus tai CAS-rekisteröintinumero). Sen vuoksi korjattu versio julkaistiin 1. maaliskuuta 2002.

⁶ ECB:n (European Chemicals Bureau) päätöksäkirja direktiivin 67/548/ETY (direktiivien 79/831/ETY ja 92/32/ETY) kuudennen ja seitsemännen muutoksen täytäntöönpanoon, 2005, ei-salassapidettävä versio. EUR 20519 EN. Kesäkuussa 2005 päivitetty versio.

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

⁸ ECB:n ilmoitus vaarallisten aineiden luokituksista, pakkauksesta ja merkinnöistä annetun direktiivin 67/548/ETY mukaisista uusista kemiallisista aineista, 2003. NLP-luettelo. EUR 20519 EN.

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

numeron ensimmäinen numero on aina 5 (5xx-xxx-x).

Nämä kolme aineluetteloa – EINECS, ELINCS ja NLP-luettelo – muodostavat yhdessä EY-luettelon. Kullakin tässä luettelossa olevalla aineella on EY-numero, jonka on antanut Euroopan komissio (katso tarkempia tietoja EY-numeroista liitteestä II).

Tietoa näistä aineista saa Euroopan kemikaaliviraston verkkosivuilta (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>). Lisäksi virasto ylläpitää ja julkaisee luetteloa rekisteröidyistä aineista (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Valmistajat ja maahantuojat voivat käyttää EY-luetteloa apuna löytääkseen aineensa EY-numeron.

3.2.2. Luettelonumerot

Kehittäessään REACH-IT-järjestelmää kemikaalivirasto katsoi, että oli hyödyllistä luoda automaattinen numero kaikille aineille, joita koskevat aineistot olivat teknisesti täydellisiä (esirekisteröinnit, PPORD, tiedustelut, rekisteröinnit, luokitus- ja merkintäilmoitukset jne.) ja joille ei ollut määritetty EY-numeroa (katso luettelonumeroiden antamisen perusteet jäljempää). Tämän ansiosta näissä aineistoissa olevien aineiden hallinnointi, jatkokäsittely ja yksilöinti on ollut teknisesti mahdollista. Näiden ns. "luettelonumeroiden" numeerinen muoto on sama kuin EINECS-, ELINCS- ja NLP-numeroiden, mutta niiden ensimmäinen numero vaihtelee.

Luettelonumerot ovat numeerisessa muodossa, joka on yhteinen EINECS-, ELINCS- ja NLP-merkintöjen kanssa. Valtaosaa luettelonumeroista ja niihin liittyvien aineiden yksilöintiä ei ole koskaan tarkistettu oikeellisuuden ja validiuden osalta. Myöskään sitä ei ole tarkistettu, onko näissä toimintaohjeissa esitettyjä konventioita noudatettu.

Korostettakoon, että on mahdollista, että yhdelle aineelle on voitu antaa eri luettelonumeroita, jos tätä ainetta varten on käytetty erilaisia tunnistetietoja (esimerkiksi eri nimeä). Näin ollen on mahdollista, että luettelonumero annetaan myös EINECS-, ELINCS- tai NLP-luettelossa olevalle aineelle. Näin voi tapahtua, jos kemikaalivirastoon REACH-IT-järjestelmän kautta toimitetussa aineistossa aineen nimi poikkeaa EY-luettelossa käytetystä nimestä.

Luettelonumeroiden ensimmäinen numero voi olla esimerkiksi 6, 7, 8 tai 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-xx; 8xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

On tärkeää muistaa, että joissakin EINECS-kirjauksissa aineen kuvaus on verrattain laaja ja sen voidaan mahdollisesti katsoa kattavan useamman kuin yhden aineen tunnistetiedot REACH-asetuksen 3 artiklan 1 kohdan mukaisesti. Näissä tapauksissa mahdollista rekisteröijää pyydetään kuvaamaan kyseinen aine tarkemmin (esimerkiksi IUPAC-nimen ja muiden käytettävissä olevien tunnistetietojen avulla). Rekisteröijän on kuitenkin ilmoitettava EINECS-EINECS-kirjaus, johon aine kuuluu. Näissä tapauksissa Euroopan kemikaalivirasto harkitsee, voidaanko kyseessä olevalle aineelle antaa luettelonumero.

3.3. Aineen yksilöintiä REACH- ja CLP-asetusten mukaisesti koskevat vaatimukset

Kun aine on rekisteröitävä REACH-asetuksen nojalla, rekisteröinnin on sisällettävä tietoa aineen yksilöimisestä liitteessä VI olevassa 2 jaksossa täsmennetyin mukaisesti. Näiden tietojen on oltava asianmukaisia ja riittäviä, jotta jokainen aine voidaan yksilöidä. Jos tietojen antaminen yhdestä tai useammasta yksilöintiparametrasta ei ole mahdollista teknisistä syistä tai se ei vaikuta olevan tarpeellista tieteellisistä syistä, syyt on ilmoitettava selvästi liitteessä VI olevassa huomautuksessa 1 määritetyllä tavalla.

Kun aineesta on tehtävä ilmoitus CLP-asetuksen nojalla (CLP-asetuksen 40 artikla), sen on sisällettävä tietoa aineen yksilöimisestä REACH-asetuksen liitteessä VI olevissa 2.1–2.3.4 jaksoissa täsmennetyin mukaisesti. Näiden tietojen on oltava asianmukaisia, jotta jokainen aine voidaan yksilöidä. Jos tietojen antaminen yhdestä tai useammasta yksilöintiparametrasta ei ole mahdollista teknisistä syistä tai se ei vaikuta olevan tarpeellista tieteellisistä syistä, syyt on ilmoitettava selvästi liitteessä VI olevassa huomautuksessa 1 määritetyllä tavalla.

Yhteenveto aineen yksilöintiparametreista REACH-asetuksen liitteen VI mukaisesti, ks. Taulukko3.

Taulukko3: Aineen yksilöintiparametrit REACH-asetuksen liitteen VI 2 jakson mukaisesti

Aineen yksilöintiparametrit REACH-asetuksen liitteen VI 2 jakson mukaisesti	
2.	AINEEN YKSILÖIMINEN <i>Kustakin aineesta on annettava riittävästi tietoa, jotta kukin aine voidaan yksilöidä. Ellei yhteen tai useampaan jäljempänä olevaan kohtaan ole teknisesti mahdollista antaa tietoja tai ellei se vaikuta tieteellisesti tarpeelliselta, syyt on ilmoitettava selvästi.</i>
2.1	Aineen nimi ja mahdollinen muu tunniste
2.1.1	<i>IUPAC-nimikkeistössä oleva nimi (nimet). Jos sitä ei ole, muu kansainvälinen kemiallinen nimi (nimet)</i>
2.1.2	<i>Muut nimet (yleinen nimi, kaupp nimi, lyhenne)</i>
2.1.3	<i>EY-numero eli EINECS-, ELINCS- tai NLP-numero tai viraston antama numero (jos käytettävissä ja tarpeen)</i>
2.1.4	<i>CAS-nimi ja -numero (jos saatavilla)</i>
2.1.5	<i>Muu tunnistekoodi, kuten tullinumero (jos saatavilla)</i>
2.2	Kunkin aineen molekyyli- ja rakennekaavaa tai kiderakennetta koskevat tiedot
2.2.1	<i>Molekyylikaava ja rakennekaava (myös SMILES-kaava ja muu kuvaus, jos saatavilla) ja kiderakenteen (-rakenteiden) kuvaus</i>
2.2.2	<i>Tiedot optisesta aktiivisuudesta ja tyyppillinen (stereo)isomeerien suhde (jos saatavilla ja tarpeen)</i>
2.2.3	<i>Molekyylipaino tai molekyylipainon vaihteluväli</i>
2.3.	Aineen koostumus
2.3.1	<i>Puhtausaste (%), jos sovellettavissa</i>

2.3.2	<p><i>Ainesosien ja epäpuhtauksien nimet</i></p> <p><i>Jos on kyse koostumukseltaan tuntemattomasta tai vaihtelevasta aineesta, komplekseista reaktiotuotteista tai biologisista materiaaleista (UVCB):</i></p> <ul style="list-style-type: none"><i>– niiden ainesosien nimet, joiden pitoisuus on $\geq 10\%$</i><i>– niiden tunnettujen ainesosien nimet, joiden pitoisuus on $< 10\%$</i><i>– ainesosista, joita ei voida tunnistaa yksittäin, esitetään ainesosaryhmien kuvaus kemiallisen luonteen perusteella</i><i>– alkuperän tai lähteen sekä valmistusprosessin kuvaus</i>
2.3.3	<p><i>2.3.2 kohdassa yksilöityjen ainesosien, sellaisten ainesosaryhmien, joita ei voida tunnistaa yksittäin, ja epäpuhtauksien tyypillinen pitoisuus ja pitoisuusalue (prosentteina)</i></p>
2.3.4	<p><i>Lisäaineiden nimet ja tyypillinen pitoisuus ja pitoisuusalue (prosentteina)</i></p>
2.3.5	<p><i>Kaikki aineen tunnistamiseksi tarvittava laadullinen analyysidata, kuten ultravioletti-, infrapuna-, ydinmagneettiresonanssi-, massaspektri- tai diffraktiodata</i></p>
2.3.6	<p><i>Kaikki aineen tunnistamiseksi tarvittava kvantitatiivinen analyysidata, kuten kromatografinen data, titrimetrinen data, alkuaineanalyysi- tai diffraktiodata</i></p>
2.3.7	<p><i>Analyysimenetelmien kuvaus tai asianmukaiset kirjallisuusviitteet, jotka ovat tarpeen aineen tunnistamiseksi (mukaan lukien sen ainesosien ja tarvittaessa epäpuhtauksien ja lisäaineiden tunnistaminen ja kvantifiointi). Kuvauksen täytyy sisältää noudatetut koesuunnitelmat ja kohdissa 2.3.1–2.3.6 raportoitujen tulosten asianmukainen tulkinta. Näiden tietojen on oltava riittäviä, jotta menetelmiä voidaan käyttää myös muissa laboratorioissa.</i></p>
2.5	<p>Muut saatavilla olevat tiedot, joilla on aineen yksilöimisen kannalta merkitystä</p>

4. Aineiden yksilöimistä ja nimeämistä REACH- ja CLP-asetusten mukaan koskevat toimintaohjeet

4.1. Johdanto

Erityyppisten aineiden yksilöimistä ja nimeämistä koskevat säännöt vaihtelevat. Käytännön syistä nämä toimintaohjeet on jäsennetty niin, että kunkintyyppisen aineen osalta käyttäjä ohjataan suoraan siihen lukuun, jossa ainetta koskevat ohjeet ovat. Tätä varten jäljempänä esitetään muutamia selityksiä erityyppisten aineiden osalta, ja lopuksi annetaan asianmukaista lukua koskevat tiedot.

Aineen yksilöimisen tulee perustua vähintään niihin aineen yksilöintiparametreihin, jotka on lueteltu REACH-asetuksen liitteessä VI olevassa 2 jaksossa (katso Taulukko3). Toisin sanoen kukin aine on yksilöitävä asianmukaisten yksilöintiparametrien yhdistelmällä:

- IUPAC-nimi ja/tai muu nimi ja muut tunnistetiedot, esimerkiksi CAS-numero, EY-numero (liite VI, 2 jakson 2.1 kohta)
- molekyyli- ja rakennetiedot koskevat tiedot (liite VI, 2 jakson 2 kohta)
- kemiallinen koostumus (liite VI, 2 jakson 3 kohta).

Aine yksilöidään kokonaan sen kemiallisen koostumuksen, ts. kemiallisten tunnistetietojen ja kunkin ainesosan pitoisuuden perusteella. Useimmat aineet voidaan yksilöidä näin suoraviivaisella tavalla, mutta joidenkin aineiden osalta se ei ole mahdollista tai tarkoituksenmukaista REACH- ja CLP-asetusten tarkoituksia varten. Näissä tapauksissa aineen yksilöimiseen tarvitaan muuta tai täydentävää tietoa.

Aineet voidaan jakaa kahteen pääryhmään:

1. "Tarkasti määritellyt aineet": Aineet, joilla on määritelty laadullinen ja määrällinen koostumus, joka voidaan riittävän hyvin yksilöidä REACH-asetuksen liitteessä VI olevassa 2 osassa vaadittujen yksilöintiparametrien perusteella.
2. "UVCB-aineet": Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials eli koostumukseltaan tuntemattomat tai vaihtelevat aineet, monimutkaiset reaktiotuotteet tai biologiset materiaalit. Näitä aineita ei voida yksilöidä riittävästi edellä esitettyjen parametrien perusteella.

Tarkasti määritellyjen aineiden koostumuksen vaihtelu määritetään pääainesosan (-osien) pitoisuuden vaihteluvälin (-välien) ylä- ja alarajan perusteella. UVCB-aineissa vaihtelevuus on verrattain suurta ja/tai huonosti ennustettavissa.

Tarkasti määritellyjen aineiden ja UVCB-aineiden välillä on myös rajatapauksia, esimerkiksi reaktiotuotteita, jotka sisältävät useita ainesosia, joiden vaihteluväli on suuri, ja reaktiotuotteita, joiden koostumus on vaihteleva ja heikosti ennustettava. Rekisteröijän vastuulla on yksilöidä aine tarkoituksenmukaisimmalla tavalla.

"Tarkasti määritellyjen aineiden" yksilöinti- ja nimeämissäännöt vaihtelevat sen mukaan, onko aineessa yksi vai useampi pääainesosa. Lisäksi näissä toimintaohjeissa kuvataan erilaisia UVCB-aineisiin kuuluvien erilaisten ainetyyppien yksilöimis- ja nimeämissääntöjä.

Katso

Taulukko 4 ja Taulukko5, joissa luetellaan keskeiset tunnistetiedot monentyyppisiä aineita koskevien esimerkkien avulla. Esimerkit on ryhmitelty siten, että aineen yksilöimistä koskevat samanlaisuudet ja eroavuudet ovat helposti havaittavissa.

Taulukko 4 ja Taulukko5 eivät edusta kattavaa luetteloa kaikista mahdollisista ainetyypeistä. Tässä esitettyä aineiden ryhmittelyä sekä yksilöinti- ja nimeämissääntöjä ei tule ymmärtää aineiden viralliseksi luokittelujärjestelmäksi vaan käytännön työkaluksi, jonka avulla on helpompi soveltaa tiettyjä sääntöjä ja löytää asianmukaiset ohjeet näistä toimintaohjeista.

Taulukko 4: Keskeisten tunnistetietojen ryhmittely erityyppisiä tarkasti määriteltyjä samanlaisia aineita koskevia esimerkkejä varten

Yleiset ominaisuudet	Esimerkit tai edustajat	Keskeiset tunnistetiedot
Kemiallisen koostumuksen perusteella tarkasti määritellyt aineet [luku 4.2]	Yhdestä ainesosasta koostuvat aineet, esimerkiksi - bentseeni (95 %) - nikkeli (99 %) [luku 4.2.1]	Kemiallinen koostumus: yksi pääainesosa ≥ 80 %: - pääaineesosan kemiallinen identiteetti (kemiallinen nimi, CAS-numero, EY-numero jne.) - ominaispitoisuus sekä ylä- ja alaraja.
	Useammasta ainesosasta koostuvat aineet, esimerkiksi määritetyt reaktiotuotteet, kuten 2-, 3- ja 4-klooritolueenin reaktiomassa (kukin 30 %) [luku 4.2.2]	Kemiallinen koostumus: pääaineesosien seos (reaktiomassa), kunkin ainesosan pitoisuus ≥10 - <80 %: - kunkin pääaineesosan kemialliset tunnistetiedot - kunkin pääaineesosan ja reaktiomassan ominaispitoisuudet sekä ylä- ja alarajat
	Aineet, jotka määritellään kemiallisen koostumuksen lisäksi myös muiden tietojen perusteella, esimerkiksi grafiitti ja timantti [luku 4.2.3]	Kemiallinen koostumus yhdestä tai useammasta aineesta koostuvana aineena JA muut fysikaaliset tai luonnehdintaan liittyvät parametrit: esimerkiksi kidemorfologia, (geologinen) mineraalikoostumus jne.

Taulukko5: Keskeisten tunnistetietojen ryhmittely erityyppisiä UVCB-aineita koskevia esimerkkejä varten

Yleiset ominaisuudet		Esimerkit tai edustajat	Keskeiset tunnistetiedot		
			Lähde	Prosessi	Muut tunnistet
UVCB-aineet (koostumukseltaan tuntemattomat tai vaihtelevat aineet, monimutkaiset reaktiotuotteet tai biologiset materiaalit) [luku 4.3]	Biologiset materiaalit (B)	Biologisista materiaaleista peräisin olevat uutteen, esimerkiksi luonnon hajusteet, luonnonöljyt, luonnonvärit ja -pigmentit	- Kasvi- tai eläinlajit ja heimo - Kasvin/eläimen osa	- Erottaminen - Jakotislaus, rikastus, eristys, puhdistus jne. - <u>Johtaminen</u> *	- Tunnettu tai yleinen koostumus - Kromatografiset ja muut sormenjäljet - Viitteet standardeihin - Väri-indeksi
		Monimutkaiset biologiset makromolekyylit, esimerkiksi entsyymit, proteiinit, DNA- tai RNA-fragmentit, hormonit, antibiootit			- Entsyymien vakioindeksi - Geneettinen koodi - Kaksoisrakenne - Fysikaaliset ominaisuudet - Tehtävä/toiminta - Rakenne - Aminohappojakso
	Käymistuotteet antibiootit, biopolymeerit, entsyymit, vinassit (sokerin käymistuotteet), soforolipidit jne.	- Kasvualusta - Käytetty mikro-organismi	- Käyminen - Tuotteiden eristäminen - Puhdistusvaiheet	- Tuotteiden tyyppi: esimerkiksi antibiootit, biopolymeerit, proteiinit jne. - Tunnettu koostumus	
Kemiallista tai mineraalista alkuperää	Reaktioseokset, joiden koostumus on huonosti ennustettavissa ja/tai	Lähtömateriaalit	<u>Kemiallisen reaktion tyyppi</u> , esimerkiksi esteröinti, alkylointi, hydrogenointi	- Tunnettu koostumus - Kromatografiset ja muut sormenjäljet - Viitteet standardeihin	

	olevat aineet, joiden koostumus on epätarkasti määritelty, monimutkainen tai vaihteleva (UVC)	vaihtelee			
		<ul style="list-style-type: none"> - Jakeet tai tisleet, esimerkiksi öljytuotteet - Savi, esimerkiksi bentoniitti - Tervat 	<ul style="list-style-type: none"> - Raakaöljyt - Hiili/turve - Mineraalista alkuperää olevat kaasut - Mineraalit 	<ul style="list-style-type: none"> - Jakotislaus, tislaus - <u>Jakeiden muuntaminen</u> - Fysikaalinen prosessointi - Jäämät 	<ul style="list-style-type: none"> - Raja-arvot - Ketjun pituuden vaihteluväli - Aromaattisuuden/alifaattisuuden suhde - Tunnettu koostumus Vakioindeksi
		Rikasteet tai sulatteet, esimerkiksi metallimalmit tai erilaisista sulatusprosesseista tai metallurgisista prosesseista peräisin olevat jäämät, kuten kuonat	Malmit	<ul style="list-style-type: none"> - Sulatus - Kuumakäsittely - Erilaiset metallurgiset prosessit 	<ul style="list-style-type: none"> - Tunnettu tai yleinen koostumus - Metallipitoisuus

* Alleviivatut prosessit viittaavat uuden molekyylin synteesiin.

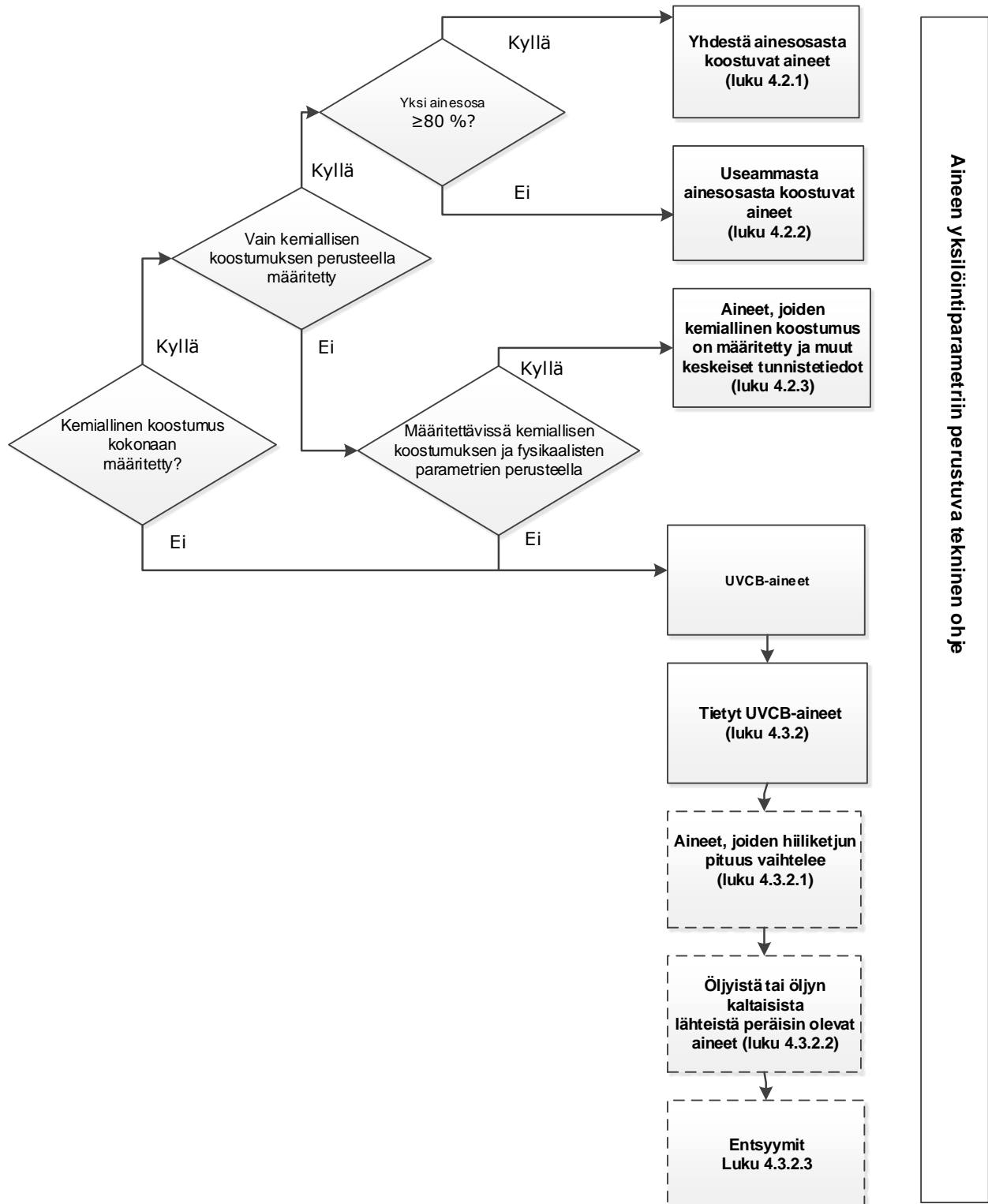
Tämä luku on jaettu alalukuihin, jotka sisältävät erityisohjeita erityyppisten aineiden yksilöintiin. Asianmukaisia lukuja koskeva ohje, ks. Kaavio 1.

Kaavio 1 perustuu kriteereihin, jotka ovat nyrkkisääntöjä. Rekisteröijän on valittava tarkoituksenmukaisin luku ja yksilöitävä aine kyseisentyypistä ainetta koskevien sääntöjen ja kriteerien mukaisesti.

Perussääntö on se, että aineet määritetään niin hyvin kuin mahdollista kemiallisen koostumuksen ja aineosien tunnistetietojen perusteella. Muita tunnistetietoja tulee käyttää vain silloin, jos edellä esitetty ei ole teknisesti mahdollista, kuten on jo mainittu erityyppisten UVCB-aineiden osalta.

Jos hakija poikkeaa näiden toimintaohjeiden mukaisista aineen yksilöintisäännöistä ja -kriteereistä, syy on ilmoitettava. Aineen yksilöinnin on oltava avointa ja luotettavaa, ja sen avulla on voitava varmistaa yhdenmukaisuus.

Kaavio 1: Ohje toimintaohjeiden lukuihin ja liitteisiin erityyppisiä aineita koskevien ohjeiden löytämiseksi



Aineen yksilöimisessä sekä tarvittaessa epäpuhtauksien ja lisäaineiden tunnistamisessa käytettyjen analyysimenetelmien kuvaus ja/tai asianmukaiset kirjallisuusviitteet on esitettävä (REACH-asetuksen liite VI, 2 jakson 2.3.5, 2.3.6 ja 2.3.7 kohta). Näiden tietojen on oltava riittäviä, jotta menetelmiä voidaan käyttää myös muissa laboratorioissa. Analyyttisten tekniikoiden soveltamisesta syntyviä tyypillisiä tuloksia on myös kuvattava.

4.2. Aineet, joilla on tarkasti määritelty koostumus

Kemiallisen koostumuksen perusteella tarkasti määritellyt aineet nimetään pääainesosan (-osien) mukaan. Tietyntyyppisten aineiden kemiallinen koostumus ei kuitenkaan yksinään riitä aineen luonnehdintaan. Näissä tapauksissa aineen tunnistetietoihin on lisättävä muutamia fysikaalisia parametreja, jotka liittyvät kemiallisiin rakenteisiin.

Pääsääntöisesti tavoitteena on kattaa koostumus kokonaan, ja kustakin ainesosasta on esitettävä täydellinen kemiallinen erittely ja rakennetiedot. Aineet, jotka määritellään niiden kemiallisen koostumuksen perusteella, erotellaan seuraavasti:

- Pääainesosa: Ainesosa, joka ei ole lisäaine tai epäpuhtaus ja joka on huomattava osa kyseistä ainetta ja jota käytetään sen vuoksi aineen nimeämisessä ja aineen yksityiskohtaisissa tunnistetiedoissa.
- Epäpuhtaus: Aineessa oleva tahaton ainesosa, joka syntyy valmistuksen yhteydessä. Se voi olla peräisin lähtömateriaaleista tai olla tulosta valmistusprosessin aikaisista sekundaarisista tai epätäydellisistä reaktioista. Lopullisessa aineessa olevia epäpuhtauksia ei ole siis lisätty aineeseen tarkoituksellisesti.
- Lisäaine: Aine, joka on lisätty tarkoituksella valmistusprosessin aikana aineen stabiloimiseksi.

Kaikkia ainesosia (paitsi lisäaineet), jotka eivät ole yhdestä tai useammasta ainesosasta koostuvan aineen pääainesosia, pidetään epäpuhtauksina. Vaikka joillakin aloilla käytetään termiä "jäämät", näissä toimintaohjeissa käytetään ainoastaan termiä "epäpuhtaudet".

Eri ainesosilla on erilaiset yksilöimistä koskevat vaatimukset:

- Aineen nimeäminen tehdään pääainesosien perusteella, ja kukin pääainesosa yksilöidään tarkasti.
- Epäpuhtaudet eivät vaikuta aineen nimeämiseen, mutta jokainen epäpuhtaus yksilöidään tarkasti.
- Lisäaineet vaikuttavat aineen koostumukseen (mutta eivät nimeämiseen), ja ne on yksilöitävä aina tarkasti.
- Pääainesosien, epäpuhtauksien ja lisäaineiden tarkkaan yksilöintiin täytyy sisältyä IUPAC-nimi, kemiallinen nimi, rakennekaava, EY-numero ja CAS-numero, jos ne ovat saatavilla.

Yhdestä ja useammasta ainesosasta koostuvien aineiden erottelussa sovelletaan tiettyjä käytänteitä:

- Yhdestä ainesosasta koostuva aine on aine, jossa yhden ainesosan pitoisuus on vähintään 80 painoprosenttia ja epäpuhtauksien pitoisuus on enintään 20 painoprosenttia.

Yhdestä ainesosasta koostuva aine nimetään yhden pääainesosan mukaan.

- Useammasta ainesosasta koostuva aine on aine, joka koostuu useista pääainesosista, joiden pitoisuus on ≥ 10 painoprosenttia ja < 80 painoprosenttia.

Useammasta ainesosasta koostuvaa ainetta nimetään kahden tai useamman pääainesosan reaktiomassaksi.

Edellä esitetyt säännöt on tarkoitettu ohjeiksi. Niistä voidaan poiketa, jos rekisteröijä voi esittää vankat perustelut.

Yleensä epäpuhtaudet, joiden pitoisuus on ≥ 1 %, on määritettävä. Epäpuhtaudet, jotka ovat merkityksellisiä luokituksen ja/tai PBT-arvioinnin¹⁰ kannalta, on kuitenkin määritettävä aina pitoisuudesta riippumatta. Yleissääntönä koostumusta koskevat tiedot on esitettävä täydellisinä.

REACH- ja CLP-asetuksissa ja näissä toimintaohjeissa lisäaineilla tarkoitetaan aineita, joita tarvitaan aineen pysyvyyden säilyttämiseen. Lisäaineet ovat siis aineen oleellisia ainesosia, ja ne otetaan huomioon määritettäessä massatasetta. REACH-asetuksen määritelmän ja näiden toimintaohjeiden ulkopuolisissa yhteyksissä lisäaine-sanalla tarkoitetaan kuitenkin myös tarkoituksella lisättyjä aineita, jotka toimivat esimerkiksi pH:n säätöaineina tai väriaineina. Tällaiset tarkoituksella lisätyt aineet eivät ole aineen oleellisia ainesosia, eikä niitä oteta huomioon määritettäessä massatasetta.

REACH- ja CLP-asetuksissa seokset on määritetty tarkoituksella sekoitetuiksi aineiksi, eikä niitä siis pidetä useammasta ainesosasta koostuvina aineina.

Luvussa 4.2.1 on erityisohjeita yhdestä ainesosasta koostuvista aineista, ja luvussa 4.2.2 on erityisohjeita useammasta ainesosasta koostuvista aineista. Lisätietoja edellyttävistä aineista (esimerkiksi tietyt mineraalit) on ohjeita luvussa 4.2.3.

4.2.1. Yhdestä ainesosasta koostuvat aineet

Yhdestä ainesosasta koostuva aine on sen määrällisen koostumuksen perusteella määritetty aine, jossa yhden pääainesosan osuus on vähintään 80 painoprosenttia.

Nimeämiskäytäntö

Yhdestä ainesosasta koostuva aine nimetään pääainesosan mukaan. Periaatteessa nimi on ilmoitettava englanniksi IUPAC-nimikkeistösääntöjen mukaisesti (katso liite I). Lisätietona voidaan ilmoittaa myös muita, kansainvälisesti hyväksytyjä nimityksiä.

Tunnisteet

Yhdestä ainesosasta koostuva aine määritetään pääainesosan kemiallisen nimen ja kaikkien muiden saatavilla olevien tunnisteiden (mukaan lukien molekyyli- ja rakennekaava tai kiderakenne) perusteella. Kaikki yhdestä ainesosasta koostuvan aineen epäpuhtaudet ja/tai lisäaineet on määritettävä. Tärkeimmän (tärkeimpien) ainesosan (-osien), epäpuhtauden (-puhtauksien) ja/tai lisäaineen (-aineiden) tyypillinen pitoisuus (pitoisuudet) ja sen (niiden) vaihteluväli(t) on ilmoitettava. Analyysitietojen on vahvistettava kaikki nämä tiedot.

Esimerkki				
Pääainesosa	Pitoisuus (%)	Epäpuhtaus	Pitoisuus (%)	Aineen tunnistetiedot
m-ksyleeni	91	o-ksyleeni	5	m-ksyleeni
o-ksyleeni	87	m-ksyleeni	10	o-ksyleeni

Normaalisti pääainesosan pitoisuus on > 80 %, ja se on määritettävä kokonaan kaikkien edellä esitettyjen parametrien perusteella. Pääainesosan ja epäpuhtauksien tyypillisten pitoisuuksien summan on oltava 100 prosenttia. Epäpuhtaudet, joiden pitoisuus on > 1 %, määritetään nimen ja tunnistetietojen perusteella. Epäpuhtaudet, jotka ovat merkityksellisiä

¹⁰ Katso lisätietoja PBT-arvioinnista ja asiaankuuluvista kriteereistä asiakirjasta "Tietovaatimuksia ja kemikaaliturvallisuusarviointia koskevat toimintaohjeet", luku R11: PBT-arviointi

luokituksen ja/tai PBT-arvioinnin¹¹ kannalta, on kuitenkin määritettävä aina samojen tunnistetietojen perusteella pitoisuudesta riippumatta.

Jotta 80 prosentin sääntöä sovellettaisiin oikein, tarkoituksella lisättyjä aineita, kuten pH:n säätöaineita tai väriaineita, ei tule ottaa huomioon massataseessa.

Näiden toimintaohjeiden mukaista 80 prosentin sääntöä on sovellettu uusien aineiden ilmoittamiseen (direktiivi 67/548/ETY), ja sitä sovelletaan REACH-asetuksessa. Poikkeaminen 80 prosentin säännöstä on kuitenkin perusteltava. Jäljempänä on esitetty mahdollisia esimerkkejä perustelluista poikkeuksista:

- jos pääaineesosan pitoisuus on < 80 prosenttia mutta jos aineella voidaan osoittaa olevan samanlaiset fysikaalis-kemialliset ominaisuudet ja vaaraprofiili kuin muilla yhdestä ainesosasta koostuvilla aineilla, joiden tunnistetiedot ovat samat ja jotka täyttävät 80 prosentin säännön
- jos pääaineesosan ja epäpuhtauksien pitoisuuksien vaihteluväli poikkeaa 80 prosentin säännöstä ja jos pääaineesosan pitoisuus on vain satunnaisesti ≤ 80 prosenttia.

Esimerkkejä									
Aine	Pääaineesosa	Pitoisuuden yläraja (%)	Ominaispitoisuus (%)	Pitoisuuden alaraja (%)	Epäpuhtaus	Pitoisuuden yläraja (%)	Ominaispitoisuus (%)	Pitoisuuden alaraja (%)	Aineen tunnistetiedot
1	o-ksyleeni	90	85	65	m-ksyleeni	35	15	10	o-ksyleeni
2	o-ksyleeni m-ksyleeni	90 35	85 15	65 10	p-ksyleeni	5	4	1	o-ksyleeni

Pääaineesosan ja epäpuhtauksien pitoisuuksien vaihteluvälien vuoksi aineiden 1 ja 2 voidaan katsoa olevan kaksi useammasta ainesosasta koostuvaa pääaineesosaa, o-ksyleeniä ja m-ksyleeniä, tai yhdestä ainesosasta koostuvia aineita. Tällaisessa tapauksessa molempia aineita pidetään yhdestä ainesosasta koostuvina aineina, mikä johtuu siitä, että o-ksyleenin pitoisuus on yleensä > 80 prosenttia.

Analyysitiedot

Yhdestä ainesosasta koostuvan aineen ainesosien ja epäpuhtauksien tunnistamiseksi on toimitettava riittävät laadulliset tiedot. Aineen tunnistetietojen vahvistamiseen voivat soveltua useat spektroskopiamenetelmät, kuten UV/Vis-spektroskopia, infrapunaspektroskopia (IR), ydinmagneettinen resonanssispektroskopia (NMR) ja massaspektroskopia (MS). Epäorgaanisten aineiden tai orgaanisten ja/tai metalliorgaanisten aineiden osalta, jotka voidaan havaita/mitata kiderakenteen perusteella, on useimmiten parempi käyttää röntgendiffraktiota (XRD).

Aineen koostumuksen vahvistamiseksi on toimitettava tiedot kvantitatiivisista menetelmistä, kuten kromatografiatekniikoista, esimerkiksi kaasukromatografista (GC) tai korkean erotuskyvyn nestekromatografista (HPLC), detektiotekniseen menetelmään yhdistettynä. Epäorgaanisten aineiden osalta röntgendiffraktio (XRD), röntgenfluoresenssi (XRF), atomiabsorptiospektroskopia (AAS), induktiivisesti kytketty optinen emissiospektrometria (ICP-OES) tai induktiivisesti kytketty massaspektrometria (ICP-MS) voivat olla soveliaimpia. Tarvittaessa on käytettävä myös muita hyväksyttäviä ainesosien erotteluun tarkoitettuja tekniikoita.

Analyysimenetelmien kuvaukseen täytyy sisältyä noudatetut koesuunnitelmat ja tulkinta raportoiduista tuloksista.

Analyysimenetelmiä kehitetään ja parannetaan jatkuvasti, ja ja rekisteröijä vastaa siitä, että sen esittämä analyysidata on asianmukaista.

¹¹ Katso lisätietoja PBT-arvioinnista ja asiaankuuluvista kriteereistä asiakirjasta "Tietovaatimuksia ja kemikaaliturvallisuusarviointia koskevat toimintaohjeet", luku R11: PBT-arviointi. PBT-arviointi

4.2.2. Useammasta ainesosasta koostuvat aineet

Useasta ainesosasta koostuvalla aineella tarkoitetaan määrällisen koostumuksensa perusteella määritettyä ainetta, jossa useamman pääainekomponentin osuus pitoisuutena on vähintään 10 painoprosenttia (p/p) mutta alle 80 painoprosenttia (p/p). Useammasta ainesosasta koostuva aine on valmistusprosessin tulos¹².

REACH-asetus edellyttää valmistuksen yhteydessä syntyvän aineen rekisteröintiä. Jos valmistetaan useammasta ainesosasta koostuvaa ainetta, useammasta ainesosasta koostuva aine on rekisteröitävä¹³ ¹⁴. On päätettävä tapauskohtaisesti, missä määrin "valmistuksen" määritelmä kattaa erilaiset aineen valmistuksen vaiheet. Ainetta ei tarvitse testata sellaisenaan, jos aineen vaaraprofiilia voidaan kuvata riittävästi yksittäisiä ainesosia koskevien tietojen perusteella.

Nimeämiskäytäntö

Useammasta ainesosasta koostuva aine nimetään aineen pääainekomponenttien reaktiomassana, ei siis aineen valmistamiseen tarvittavien lähtömateriaalien perusteella. Yleisesti käytettävä muoto on seuraava: "[Pääainekomponenttien nimet] reaktiomassa". Aineosien nimet suositellaan esitettävän aakkosjärjestyksessä, ja ne erotetaan konjunktilla "ja". Nimessä huomioidaan vain ne pääainekomponentit, joiden pitoisuus on yleensä ≥ 10 prosenttia. Periaatteessa nimet on ilmoitettava englanniksi IUPAC-nimikkeistösääntöjen mukaisesti. Lisätietona voidaan ilmoittaa myös muita, kansainvälisesti hyväksytyjä nimityksiä.

Tunnisteet

Useammasta ainesosasta koostuva aine määritetään aineen kemiallisen nimen ja kaikkien muiden saatavilla olevien tunnistetietojen sekä aineosien kemiallisen identiteetin perusteella (mukaan lukien molekyyli- ja rakennekaava tai kiderakenne/-rakenteet). Kaikki useammasta ainesosasta koostuvan aineen epäpuhtaudet ja/tai lisäaineet on yksilöitävä. Aineosien, epäpuhtauksien ja/tai lisäaineiden tyypillinen pitoisuus (pitoisuudet) ja pitoisuuden vaihteluväli(t) on ilmoitettava. Analyysitietojen on vahvistettava kaikki nämä tiedot.

Esimerkki				
Pääainekomponentit	Pitoisuus (%)	Epäpuhtaus	Pitoisuus (%)	Aineen tunnistetiedot
m-ksyleeni o-ksyleeni	50 45	p-ksyleeni	5	m-ksyleenin ja o-ksyleenin reaktiomassa.

Useammasta ainesosasta koostuvien aineiden kemiallinen koostumus tunnetaan, ja useampi kuin yksi ainesosa on oleellinen aineen yksilöimiseksi. Lisäksi aineen kemiallinen koostumus on ennustettavissa tyypillisinä arvoina ja vaihteluväleinä. Pääainekomponentit on määritettävä kokonaisuudessaan kaikkien oleellisten parametrien avulla. Pääainekomponenttien ja epäpuhtauksien tyypillisten pitoisuuksien (≥ 10 % ja < 10 %) summan pitäisi olla 100 prosenttia.

¹² Seoksen ja useammasta ainesosasta koostuvan aineen ero piilee siinä, että seos saadaan sekoittamalla kahta tai useampaa ainetta ilman kemiallista reaktiota. Useammasta ainesosasta koostuva aine on kemiallisen reaktion tulos.

¹³ Monet aineet on vapautettu REACH-asetuksen mukaisesta rekisteröinnistä (esimerkiksi liitteessä IV luetellut aineet).

¹⁴ Tätä toimintatapaa ei sovelleta tiettyihin aineisiin, kuten mineraaleihin (katso tarkempia tietoja luvusta 7.5).

Jotta useammasta ainesosasta koostuva aine tunnistettaisiin oikein, tarkoituksellisesti lisättyjä aineita (kuten pH:n säätöaineita tai väriaineita) ei tule ottaa huomioon massataseessa.

Epäpuhtaudet, joiden pitoisuus $\geq 1\%$, määritetään nimen ja kaikkien saatavien tunnistetietojen perusteella. Epäpuhtaudet, jotka ovat merkityksellisiä luokituksen ja/tai PBT-arvioinnin kannalta, on kuitenkin määritettävä aina samojen tunnistetietojen perusteella pitoisuudesta riippumatta.

Esimerkki								
Pääainesosa	Pitoisuuden yläraja (%)	Ominaispitoisuus (%)	Pitoisuuden alaraja (%)	Epäpuhtaus	Pitoisuuden yläraja (%)	Ominaispitoisuus (%)	Pitoisuuden alaraja (%)	Aineen tunnistetiedot
Aniliini	90	75	65	Fenantreeni	5	4	1	Aniliinin ja naftaliinin reaktiomassa
Naftaliini	35	20	10					

Näissä toimintaohjeissa olevien sääntöjen mukaan tämä aine on useammasta ainesosasta koostuva aine. Vaikka yhden ainesosan pitoisuus saattaa olla > 80 prosenttia, pitoisuus vaihtelee ja tyyppillinen pitoisuus on < 80 prosenttia.

Jos useammasta ainesosasta koostuvan aineen pääasiallinen ainesosa on $\geq 80\%$ tai $< 10\%$ (p/p), tämä poikkeama on perusteltava. Esimerkki poikkeamasta, joka on perusteltu:

- ainesosan osuus on vain satunnaisesti $\geq 80\%$ tai $< 10\%$.

Tietystä aineesta voi esimerkiksi olla kaksi ainesosaa, joista toisen pitoisuus on 85 prosenttia ja toisen 10 prosenttia, ja tase tarkoittaa epäpuhtauksia. Molemmat ainesosat vaikuttavat aineen haluttuun tekniseen vaikutukseen ja ovat sen kannalta oleellisia. Tässä tapauksessa aine voidaan määrittää kahdesta ainesosasta koostuvaksi aineeksi, vaikka yhden ainesosan pitoisuus onkin > 80 prosenttia.

Analyysitiedot

Useammasta ainesosasta koostuvan aineen ainesosien ja epäpuhtauksien tunnistamiseksi on toimitettava riittävät kvalitatiiviset tiedot. Aineen tunnistetietojen vahvistamiseen voivat soveltua useat spektroskopiamenetelmät, kuten UV/Vis-spektroskopia, infrapunaspektroskopia (IR), ydinmagneettinen resonansspektroskopia (NMR) ja massaspektroskopia (MS). Epäorgaanisten aineiden tai orgaanisten ja/tai metalliorgaanisten aineiden osalta, jotka voidaan havaita/mitata kiderakenteen perusteella, on useimmiten parempi käyttää röntgendiffraktiota (XRD).

Aineen koostumuksen vahvistamiseksi on toimitettava tiedot kvantitatiivisista menetelmistä, kuten kromatografiatekniikoista, esimerkiksi kaasukromatografista (GC) tai korkean erotuskyvyn nestekromatografista (HPLC), detektiotekniseen menetelmään yhdistettynä. Epäorgaanisten aineiden osalta röntgendiffraktio (XRD), röntgenfluoresenssi (XRF), atomiabsorptiospektroskopia (AAS), induktiivisesti kytketty optinen emissiospektrometria (ICP-OES) tai induktiivisesti kytketty massaspektrometria (ICP-MS) voivat olla sopivampia. Tarvittaessa on käytettävä myös muita hyväksyttäviä ainesosien erotteluun tarkoitettuja tekniikoita.

Analyysimenetelmien kuvaukseen täytyy sisältyä noudatetut koesuunnitelmat ja tulkinta raportoiduista tuloksista.

Analyysimenetelmiä kehitetään ja parannetaan jatkuvasti, ja rekisteröijä vastaa siitä, että sen esittämä analyysidata on asianmukaista.

Useammasta ainesosasta koostuvan aineen yksittäisten ainesosien rekisteröinti

Yleensä aineiden tunnistetietojen ilmoittamisessa rekisteröintiä varten olisi noudatettava useammasta ainesosasta koostuvia aineita koskevaa toimintatapaa (esimerkiksi useammasta ainesosasta koostuvan aineen rekisteröinti). Tästä toimintatavasta poiketen myös yksittäisiä ainesosia voidaan rekisteröidä perustellusta syystä. Vakiomenettelystä voidaan poiketa aineiden yksilöimiseksi (ja mahdollisesti rekisteröimiseksi) niiden yksittäisten ainesosien perusteella seuraavissa tapauksissa:

- kun tietovaatimuksista ei ole tingitty
- kun käytettävissä on riittävästi yksittäisten ainesosien rekisteröimistä puoltavaa tietoa; ts. toimintatavan ei tulisi yleensä johtaa lisätesteihin (selkärankaisilla eläimillä) vakiotoimintatapaa nähden
- kun yksittäisten ainesosien rekisteröinti on tehokkaampaa (jos sillä esimerkiksi vältetään rekisteröimistä samoista ainesosista koostuvia aineita useamman kerran)
- kun tiedot yksittäisten reaktiomassojen koostumuksesta ovat saatavilla.

Tätä joustomahdollisuutta ei tule kuitenkaan käyttää väärin tietovaatimusten laiminlyömiseksi. Esimerkitapaus: vuosittain tuotetaan 1 200 tonnia useammasta ainesosasta koostuvaa ainetta "(C + D)", joka koostuu 50-prosenttisesti ainesosasta C ja 50-prosenttisesti ainesosasta D. Tämän toimintatavan perusteella olisi tehtävä kaksi rekisteröintiä seuraavin tiedoin:

Aine C

- tonnimäärä 600
- noudatettavat tietovaatimukset määräytyvät >1 000 tonnin mukaisesti (liite X).

Aine D

- tonnimäärä 600
- noudatettavat tietovaatimukset määräytyvät >1 000 tonnin mukaisesti (liite X).

Tähän toimintatapaan on liitettävä REACH-asetuksen vaatimus, jonka mukaan saman aineen määrät on laskettava yhteen oikeushenkilökohtaisesti. Tietovaatimukset ehdotetaan laadittavan seuraavasti:

- lasketaan yhteen yksittäisten ainesosien kaikki määrät (aineessa olevien määrien mukaan)
- merkitään suurin määrä ainetta, joka sisältää tätä ainesosaa.

Tietovaatimukset tulee määrittää suurimman tuloksen mukaisesti. Tonnimäärien ilmoittamisessa on otettava huomioon kunkin yksittäisen ainesosan yhteenlaskun tulos. Jäljempänä esitetään yksinkertaistettuja esimerkkejä, joilla havainnollistetaan tämän toimintatavan soveltamista käytännössä.

Esimerkki 1

Useammasta aineesta koostuva aine "C+D+E" on yhden oikeushenkilön prosessin tulos, ja eri aineiden osuudet ovat seuraavat:

- Aine 1: 50 % C ja 25 % D ja 25 % E, 1 100 tonnia vuodessa
- Aine 2: 50 % C ja 50 % D, 500 tonnia vuodessa.

Myös tässä tapauksessa lähtökohtana on reaktiotuote: kaksi ainetta on rekisteröitävä useammasta ainesosasta koostuvina aineina. Jos taas sovelletaan yksittäisten ainesosien

rekisteröintiä¹⁵, on noudatettava seuraavaa toimintatapaa:

Tässä tapauksessa aine D ilmoitettaisiin seuraavasti:

- Tonnimäärä: $(25 \% * 1\ 100) + (50 \% * 500) = 525$ tonnia vuodessa.

Tietovaatimusten määrittäminen perustuu kaikkein tiukimpaan vaatimukseen. Tässä tapauksessa se tarkoittaa seuraavaa: >1 000 tonnia vuodessa, koska useammasta ainesosasta koostuvan aineen "C+D+E" kokonaistonnimäärä on enemmän kuin 1 000 tonnia vuodessa.

Huomautus: tässä esimerkissä aineet C ja E tulisi rekisteröidä samalla tavalla.

Esimerkki 2

Useammasta aineesta koostuva aine "G+H+I" on yhden oikeushenkilön prosessin tulos, ja eri aineiden osuudet ovat seuraavat:

- Aine 3: 65 % G ja 15 % H ja 20 % I, 90 tonnia vuodessa
- Aine 4: 60 % G ja 40 % H, 90 tonnia vuodessa

Aineen G ilmoittaminen:

- Tonnimäärä: $(65 \% * 90) + (60 \% * 90) = 112,5$ tonnia vuodessa

Tietovaatimusten määrittäminen perustuu kaikkein tiukimpaan vaatimukseen. Tässä tapauksessa se tarkoittaa seuraavaa: >100 tonnia vuodessa, koska ainesosan G kokonaistonnimäärä on enemmän kuin 100 tonnia vuodessa.

Huomautus: tässä esimerkissä aineet H ja I tulisi rekisteröidä samalla tavalla.

Edellä käsiteltyjen tietovaatimusten perusteiden määrittämisen lisäksi on pohdittava myös (selkärankaisilla eläimillä tehtävien) uusien tutkimusten määrää. Ennen strategiasta päättämistä mahdollisten rekisteröijien on pohdittava, riittävätkö nykyiset (selkärankaisilla eläimillä tehty) tutkimukset ja edellyttävätkö ehdotettu jousto uusia (selkärankaisilla eläimillä tehtäviä) testejä. On valittava se strategia, jonka avulla voidaan välttää uudet (selkärankaisilla eläimillä tehtävät) testit.

Epäselvissä tapauksissa tavanomainen tapa yksilöidä aine rekisteröintiä varten on yksilöidä aine sellaisena kuin se on valmistettu.

4.2.3. Kemialliselta koostumukseltaan määritetyt aineet ja muut tunnistetiedot

Aineet (esimerkiksi epäorgaaniset mineraalit), jotka voidaan yksilöidä niiden kemiallisen koostumuksen perusteella, on määritettävä tarkemmin lisätunnistetietojen avulla, jotta ne voidaan yksilöidä. Nämä aineet voivat olla joko yhdestä tai useammasta ainesosasta koostuvia aineita, mutta edellä kuvattujen yksilöintiparametrien lisäksi niistä on esitettävä myös muita keskeisiä tunnistetietoja, jotta aine voidaan yksilöidä yksiselitteisesti.

¹⁵ Esimerkillä on tarkoitus ainoastaan havainnollistaa sitä, miten tietovaatimukset määritetään ja määrät ilmoitetaan. Esimerkissä ei käsitellä sitä, onko tämä toimintatapa perusteltu juuri tässä tapauksessa.

Esimerkkejä

Joistakin ei-metallisista mineraaleista (jotka ovat luonnollista alkuperää tai synteettisiä), joiden rakenteet ovat ainutkertaiset, on esitettävä myös morfologinen ja mineraalinen koostumus, jotta aine voidaan yksilöidä yksiselitteisesti. Esimerkiksi otettakoon kaoliini (CAS 1332-58-7), joka koostuu kaoliinitista, kaliumalumiinisilikaatista, maasälvästä ja kvartsista.

Nanomuodoissa olevien aineiden REACH-velvoitteiden noudattamista koskevia ohjeita on *Rekisteröintiä ja aineiden yksilöintiä koskeviin ohjeisiin sovellettava nanomuotoja koskevassa liitteessä*¹⁶. Ohjeet koskevat nanomuotojen tunnistamiseen ja luonnehdintaan liittyviä nanospesifejä kysymyksiä.

Nimeämiskäytäntö

Periaatteessa on noudatettava samaa nimeämiskäytäntöä kuin yhdestä ainesosasta koostuvien aineiden (katso luku 4.2.1) tai useammasta ainesosasta koostuvien (katso luku 4.2.2) aineiden osalta.

Epäorgaanisten mineraalien ainesosista voidaan käyttää mineralogisia nimiä. Esimerkiksi apatiitti on useammasta ainesosasta koostuva aine. Sen ainesosat kuuluvat fosfaattimineraalien ryhmään, ja yleensä kyse on hydroksyyliapatiitista, fluorapatiitista ja klooriapatiitista, jotka on nimetty niiden kiteissä olevien suurten OH⁻-, F⁻- tai Cl⁻-ionipitoisuuksien mukaisesti. Kolmesta yleisimmästä lajista koostuvan seoksen kaava on Ca₅(PO₄)₃(OH, F, Cl). Toinen esimerkki on aragoniitti, joka on eräs kalsiumkarbonaatin erikoiskiderakenne.

Tunnisteet

Nämä aineet yksilöidään ja nimetään yhdestä ainesosasta koostuvia aineita (katso luku 4.2.1) tai useammasta ainesosasta koostuvia (katso luku 4.2.2) aineita koskevien sääntöjen mukaisesti. Muut lisättävät keskeiset yksilöintiparametrit määräytyvät aineen mukaan. Muita keskeisiä tunnistetietoja voivat olla esimerkiksi alkuainekoostumus ja spektritiedot, kiderakenne röntgendiffraktion (XRD) avulla tutkittuna, infrapuna-alueella esiintyvät absorptiohuiput, paisuntaindeksi, kationinvaihtokapasiteetti tai muut fysikaaliset ja kemialliset ominaisuudet.

Mineraalien osalta on tärkeää yhdistää alkuainekoostumusta koskevat tulokset spektritietoihin aineen mineralogisen koostumuksen ja kiderakenteen yksilöimiseksi. Tämä vahvistetaan aineelle ominaisten fysikaalis-kemiallisten ominaisuuksien, kuten kiderakenteen (röntgendiffraktion avulla tutkittuna), muodon, kovuuden, paisuntakyvyn, tiheyden ja/tai pinta-alan perusteella.

Tiettyjen mineraalien tietyistä tärkeistä täydentävistä tunnistetiedoista voidaan antaa esimerkkejä, sillä yleensä mineraalit voidaan yksilöidä niiden tyypillisten fysikaalis-kemiallisten ominaisuuksien perusteella. Tällaisia ovat esimerkiksi talkin erittäin vähäinen kovuus, bentoniitin paisuntakyky, diatomiitin muodot sekä bariitin suuri tiheys ja pinta-ala (typpiadsorptio).

¹⁶ Rekisteröintiä ja aineiden yksilöintiä koskeviin ohjeisiin sovellettava nanomuotoja koskeva liite on osoitteessa <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

Analyysitiedot

Tärkeimpänä vaatimuksena on, että toimitetaan kaikki tarvittavat tiedot aineen rakenteen vahvistamiseksi. Näistä aineista on ilmoitettava samat analyysitiedot kuin yhdestä ainesosasta koostuvista aineista (katso luku 4.2.1) tai useammasta ainesosasta koostuvista aineista (katso luku 4.2.2).

4.3. UVCB-aineet

UVCB-lyhenne on peräisin englanninkielisistä sanoista **U**nknown or **V**ariable composition, **C**omplex reaction products or **B**iological materials” eli koostumukseltaan tuntematon tai vaihteleva aine, kompleksi reaktiotuote tai biologinen materiaali^{17, 18, 19}. Näitä aineita ei voida yksilöidä riittävän tarkasti niiden kemiallisen koostumuksen perusteella seuraavista syistä:

- ainesosien lukumäärä on suhteellisen suuri ja/tai
- koostumus on suurelta osin tuntematon ja/tai
- koostumuksen vaihtelevuus on verrattain suurta ja/tai huonosti ennustettavissa.

Tämän vuoksi UVCB-aineiden yksilöimiseen tarvitaan muuntyyppistä tietoa niiden kemiallista koostumusta koskevien tietojen lisäksi.

Erityyppisten UVCB-aineiden keskeiset tunnistetiedot liittyvät aineen alkuperään ja käytettyyn menetelmään tai ne kuuluvat ryhmään ”muut keskeiset tunnistetiedot” (esimerkiksi ”kromatografiset tai muut sormenjäljet”), ks. Taulukko5. Tunnistetietojen lukumäärä ja tyyppi (Taulukko5) kuvaavat tyyppien moninaisuutta, eikä taulukkoa ole tarkoitettu kattavaksi yhteenvedoksi. Jos esimerkiksi monimutkaisen reaktiotuotteen tai biologista alkuperää olevan aineen kemiallinen koostumus tunnetaan, aine on yksilöitävä joko yhdestä tai useammasta ainesosasta koostuvana aineena. Jos aine määritellään UVCB-aineeksi, kaikki merkittävät alkuperän tai menetelmän muutokset johtavat todennäköisesti siihen, että tuloksena on eri aine, joka on rekisteröitävä uudestaan. Jos reaktioseos määritetään ”useammasta ainesosasta koostuvaksi aineeksi”, aine on voitu johtaa eri alkuperästä ja/tai eri menetelmillä, mikäli lopullisen aineen koostumus on määritetyn vaihteluvälin rajoissa. Tässä tapauksessa uutta rekisteröintiä ei tarvita.

Yleisiä ohjeita UVCB-aineista on luvussa 4.3.1. Luvussa 4.3.2 on erityisohjeita aineista, joiden hiiliketjujen pituudet vaihtelevat, öljystä tai öljyn kaltaisista lähteistä peräisin olevista aineista, entsyymeistä sekä tietyyntyyppisistä UVCB-aineista.

4.3.1. Yleisiä ohjeita UVCB-aineista

Toimintaohjeiden tässä luvussa annetaan yleisiä ohjeita siitä, miten tiettyjä keskeisiä tunnistetietoja käytetään UVCB-aineiden yksilöimisessä REACH-asetuksen liitteessä VI (2 jakso) esitettyjen aineen yksilöintiparametrien lisäksi.

¹⁷ Rasmussen K., Pettauer D., Vollmer G. ym. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. Tox Env Chem Vol. 69, s. 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.

Tiedot kemiallisesta koostumuksesta

UVCB-aineita ei siis voida määrittää yksilöllisesti ainesosien IUPAC-nimen perusteella, koska kaikkia ainesosia ei voida yksilöidä, tai ne voidaan yksilöidä yleisesti mutta ei tarkasti, koska tarkka koostumus vaihtelee. Koska UVCB-aineissa ei eroteta ainesosia ja epäpuhtauksia, niiden osalta termejä ”keskeiset ainesosat” ja ”epäpuhtaudet” ei pidetä oleellisina.

Ainesosien kemiallinen koostumus ja tunnistetiedot tulee silti ilmoittaa siltä osin kuin ne ovat tiedossa. Koostumusta koskeva kuvaus voidaan esittää usein yleisluonteisesti, esimerkiksi ”lineaariset rasvahapot C8–C16” tai ”alkoholietoksylaatit C10–C14 ja 4–10 etoksylaattiyksikköä”. Kemiallista koostumusta koskevat tiedot voidaan ilmoittaa myös hyvin tunnettujen vertailunäytteiden tai standardien perusteella. Monissa tapauksissa voidaan hyödyntää myös luetteloita ja käytössä olevia koodeja. Muita koostumuksesta ilmoitettavia tietoja voivat olla ”sormenjäljet” eli kromatografiset tai spektrikuvat, jotka kuvastavat aineelle tyypillistä huippujen jakautumismallia.

UVCB-aineen osalta kaikki ainesosat, joita esiintyy ≥ 10 prosentin pitoisuuksina, ja kaikki muut tunnetut ainesosat, joita esiintyy < 10 prosentin pitoisuuksina, on ilmoitettava englanninkielisellä IUPAC-nimellä, tyypillisillä pitoisuuksilla ja pitoisuusalueilla.

Lisäksi on ilmoitettava jokaiselle ainesosalle numeerinen tunniste (CAS-numero ja/tai EY- tai luettelonumero), jos sellainen on saatavilla.

Ainesosat, joita ei voida tunnistaa yksittäin, on kuvailtava ryhmissä kemiallisen luonteensa perusteella. Tässä tapauksessa jokaisesta ryhmästä on ilmoitettava vähintään kemiallinen nimi, tyypillinen pitoisuus ja pitoisuuden vaihteluväli. Lisäksi on annettava molekyyli- ja rakennetiedot, jos ne ovat käytettävissä.

Ainesosat, jotka ovat merkityksellisiä luokituksen ja/tai PBT-arvioinnin²⁰ kannalta, on kuitenkin määritettävä aina samojen tunnistetietojen perusteella pitoisuudesta riippumatta.

Tuntemattomat ainesosat, jotka eivät vaikuta luokitukseen, on yksilöitävä mahdollisuuksien mukaan esittämällä yleinen kuvaus niiden kemiallisesta luonteesta. Lisäaineet on määritettävä kokonaisuudessaan siten kuin koostumukseltaan tarkasti määritettyjä aineita koskevissa ohjeissa kuvataan.

Keskeiset yksilöintiparametrit – nimi, alkuperä ja prosessi

Koska ainetta ei voida yksilöidä pelkästään kemiallisen koostumuksen perusteella, aine on yleensä ottaen yksilöitävä sen nimen, alkuperän tai lähteen sekä valmistusprosessin kuvauksen perusteella. Myös aineen muut ominaisuudet voivat olla tärkeitä tunnistetietoja; niitä voivat olla joko olennaiset yleiset tunnistetiedot (esimerkiksi kiehumispiste) tai ratkaisevat tunnistetiedot tiettyjen aineryhmien osalta (esimerkiksi entsyymien katalyyttinen toiminta).

1. Nimeämiskäytäntö

Yleensä UVCB-aineen nimi on lähteen ja prosessin yhdistelmä, ja yleinen ilmoittamismuoto on seuraava: ensin lähde ja sitten prosessi(t).

- Biologista alkuperää oleva aine yksilöidään lajin nimen mukaisesti.
- Muuta kuin biologista alkuperää oleva aine yksilöidään lähtömateriaalien mukaisesti.
- Prosessit yksilöidään kemiallisen reaktion tyyppin mukaan, jos siihen liittyy uusien molekyylien synteesiä, jalostusvaiheen tyyppin (esimerkiksi uutto, jakotislaus, rikastus) mukaan tai jäämänä.

²⁰ Katso lisätietoja PBT-arvioinnista ja asiaankuuluvista kriteereistä asiakirjasta ”Tietovaatimuksia ja kemikaaliturvallisuusarviointia koskevat toimintaohjeet”, luku R11: PBT-arviointi. PBT-arviointi

Esimerkkejä	
EY-numero	EY-nimi
296-358-2	Laventeli, Lavandula hybrida, ext., asetyloitu
307-507-9	Laventeli, Lavandula latifolia, ext., rikitetty, palladiumin suola

Reaktiotuotteista EY-luettelossa on käytetty eri muotoja, esimerkiksi seuraavia:

- EINECS: keskeinen lähtömateriaali, muun lähtömateriaalin (muiden lähtömateriaalien) reaktiotuote (-tuotteet)
- ELINCS: lähtömateriaalin (-materiaalien) reaktiotuote (-tuotteet).

Esimerkkejä	
EY-numero	EY-nimi
232-341-8	Nitriittihappo, reaktiotuotteet 4-metyyli-1,3-bentseenidiamiinihydrokloridin kanssa
263-151-3	Rasvahapot, kookos, reaktiotuotteet dieteenitriamiinin kanssa
400-160-5	Mäntyöljyn rasvahappojen, dietanoliamiinin ja boorihapon reaktiotuotteet
428-190-4	Reaktiotuote: 2,4-diamino-6-[2-(2-metyyli-1H-imidatsoli-1-yl)etyyli]-1,3,5-triatsiini ja syanuurihappo

Näissä toimintaohjeissa reaktiotuotteen (-tuotteiden) nimestä yleisesti käytettävä muoto ilmoitetaan muodossa "[lähtömateriaalien nimet] reaktiotuote (-tuotteet)". Periaatteessa nimet on ilmoitettava englanniksi IUPAC-nimikkeistösääntöjen mukaisesti. Lisätietona voidaan ilmoittaa myös muita, kansainvälisesti hyväksytyjä nimityksiä. On suositeltavaa korvata nimessä esiintyvä sana "reaktio" tietyn reaktiotyyppin yleisellä kuvauksella, esimerkiksi esteröinti tai suolanmuodostus jne. (katso UVCB-aineiden neljää alaluokkaa koskevat ohjeet jäljempänä).

2. Lähde

Alkuperä voidaan jakaa kahteen pääryhmään:

2.1. Biologinen alkuperä

Biologista alkuperää olevat aineet on määritettävä suvun, lajin ja heimon (esimerkiksi *Pinus cembra*, Pinaceae tarkoittaa seuraavaa: Pinus (suku), cembra (laji), Pinaceae (heimo)) sekä tarvittaessa kannan tai geneettisen tyyppin perusteella. Tarvittaessa aineen erottamiseen käytetty kudokse tai organismin osa (esimerkiksi luuydin tai haima) tai kanta, siemenet tai juuret on myös ilmoitettava.

Esimerkkejä	
EY-numero	EY-nimi
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ext. EY-kuvaus Uuttuvat aineet ja niiden fysikaalisesti muunnetut johdannaiset, kuten tinktuurat, jähmeät uutteen (concretes), vahaa poistamalla saadut nesteet (absolutes), eteeriset öljyt, oleohartsit, terpeenit, terpeenittömät jakeet, tisleet, jäännökset jne., joita saadaan seuraavasta: Saccharomyces cerevisia ja Saccharomycelaceae.
296-350-9	Arnica mexicana, ext. EY-kuvaus Uuttuvat aineet ja niiden fysikaalisesti muunnetut johdannaiset, kuten tinktuurat, jähmeät uutteen (concretes), vahaa poistamalla saadut nesteet (absolutes), eteeriset öljyt, oleohartsit, terpeenit, terpeenittömät jakeet, tisleet, jäännökset jne., joita saadaan seuraavasta: Arnica mexicana, Compositae.

2.2. Kemiallinen tai mineraalinen alkuperä

Kemiallisista reaktioista peräisin olevien reaktiotuotteiden lähtömateriaalit on ilmoitettava englanniksi niiden IUPAC-nimen perusteella. Mineraalinen alkuperä on kuvattava yleisillä termeillä, kuten fosfaattimalmit, bauksiitti, kaoliini, mineraalista alkuperää oleva kaasu, hiili, turve.

3. Prosessi

Prosessit yksilöidään kemiallisen reaktion tyyppin mukaan, jos siihen liittyy uusien molekyylien synteisiä, tai jalostusvaiheen tyyppin (esimerkiksi uutto, jakotilaus, rikastus) mukaan tai jalostusvaiheessa syntyneen jäämän mukaan.

Tiettyjen aineiden, esimerkiksi kemiallisten johdosten, osalta prosessi on kuvattava jalostuksen ja synteisin yhdistelmänä.

3.1 Synteesi

Tietty lähtömateriaalien välillä tapahtuva kemiallinen tai biokemiallinen reaktio, jonka tulos aine on. Esimerkkejä ovat Grignardin reaktio, sulfonaatio, proteaasin tai lipaasin ym. synnyttämä entsyymaattinen pilkkominen. Myös monet johdosreaktiot kuuluvat tähän tyyppiin.

Sellaisten uusien syntetisoitujen aineiden, joiden kemiallista koostumusta ei voida ilmoittaa, lähtömateriaaleiksi ilmoitetaan keskeinen tunniste ja reaktion määrittely, esimerkiksi kemiallisen reaktion tyyppi. Kemiallisen reaktion tyyppi ilmaisee, mitä molekyyliä aineessa on odotuksenmukaisesti oltava. Lopullisen kemiallisen reaktion tyyppiä on monia, esimerkiksi hydrolyysi, esteröinti, alkylointi, klooraus jne. Koska reaktiityypistä saadaan vain yleistä tietoa mahdollisesti tuotetuista aineista, monissa tapauksissa tarvitaan myös kromatografinen sormenjälki, jotta ainetta voidaan luonnehtia ja jotta se voidaan yksilöidä täydellisesti.

Esimerkkejä	
EY-numero	EY-nimi
294-801-4	Pellavansiemenöljy, epoksidoitu, reaktiotuotteet tetraeteenipentamiinin kanssa
401-530-9	(2-hydroksi-4-(3-propenoksi)bentsofenonin ja trietoksisilaanin) ja (piidioksidin ja metyyli(trimetoksisilaanin) hydrolyysituotteen) reaktiotuote

3.2 Jalostus

Luonnollista tai mineraalista alkuperää olevia aineita voidaan jalostaa monin eri tavoin. Tällöin ainesosien kemiallinen identiteetti ei muutu, vaan ainesosien pitoisuutta muutetaan esimerkiksi kylmäkäsittämällä kasvikuitua ja uuttamalla sitä sen jälkeen alkoholilla.

Jalostusta voidaan määritellä tarkemmin uuttamisen kaltaisissa prosesseissa. Aine yksilöidään prosessin tyyppin perusteella seuraavasti:

- Fysikaalisin menetelmin (esimerkiksi jalostamalla tai jakamalla) johdetuista aineista on määritettävä yleinen vaihteluväli ja jakeen parametri (esimerkiksi molekyylikoko, ketjun pituus, kiehumispiste, haihtuvuuden vaihteluväli jne.).
- Rikastamalla johdettujen aineiden (esimerkiksi metallurgisista prosesseista peräisin olevat aineet, sentrifugoidut saostumat, suodatusjäämät jne.) rikastusvaihe on määritettävä. Myös lopullisen aineen yleinen koostumus lähtömateriaaliin verrattuna on ilmoitettava.

Esimerkkejä	
EY-numero	EY-nimi
408-250-6	Orgaaninen volframiyhdisterikaste (volframiheksakloridin ja 2-metyylipropaani-2-olin, nonyylifenolin ja pentaani-2,4-dionin reaktiotuotteet)

- Tietyn reaktion jäämien (esimerkiksi kuonat, tervat ja raskaat jakeet) osalta on kuvattava prosessi ja lopputuloksena saatavan aineen yleinen koostumus.

Esimerkkejä	
EY-numero	EY-nimi
283-659-9	Tina, sulatusjäämät EY-kuvaus Aine, joka on peräisin primaarisista ja sekundaarisista lähteistä saadun tinan ja sen seosten käytöstä ja valmistuksesta, mukaan luettuina kierrätetyt tehtaen välituotteet. Koostuu pääasiassa tinayhdisteistä, saattaa sisältää jäämiä muista ei-rautametalteista ja niiden yhdisteistä.

293-693-6	Soijapapuaateria, proteiini, uuttaminen Jäämä EY-kuvaus Sivutuote, sisältää pääasiassa hiilihydraatteja, valmistettu rasvattomista soijapavuista uuttamalla niitä alkoholissa.
-----------	---

- o Uutteista on ilmoitettava uuttomenetelmä, uuttamiseen käytetty liuotin ja muut oleelliset olosuhteet, kuten lämpötila ja sen vaihteluväli.
- o Yhdistelmäprosessoinnista on määritettävä kukin prosessin vaihe (yleisesti) alkuperää koskevien tietojen lisäksi. Yhdistelmäprosessointi on erityisen tärkeää kemiallisissa johdoksissa.

Esimerkkejä:

- o Ensin kasvi uutetaan, uute tislataan, ja kasviuutteen tislattua jaetta käytetään kemialliseen johdokseen. Lopullista ainetta voidaan lisäksi vielä puhdistaa. Puhdistettu tuote voidaan kenties määritellä tarkasti sen kemiallisen koostumuksen perusteella, jolloin ainetta ei tarvitse määritellä UVCB-aineeksi. Jos ainetta kuitenkin pidetään edelleen UVCB-aineena, yhdistelmäprosessointi voidaan kuvata seuraavasti: "kasviuutteen tislattua jakeesta peräisin oleva puhdistettu kemiallinen johdos".
- o Jos uutteen prosessointia jatketaan vain fysikaalisesti johtamalla, koostumus muuttuu mutta ilman uusien molekyylien tarkoituksellista synteisiä. Koostumuksen muutoksen perusteella syntyy kuitenkin eri aine, esimerkiksi kasviuutteen tisle tai saostuma.
- o Öljytuotteiden valmistuksessa käytetään usein kemiallisen johtamisen ja jakotislauksen yhdistelmää. Esimerkiksi öljyn tislauksen jälkeisen krakkauksen tuloksena on lähtömateriaalin jae ja siis myös uusia molekyyliä. Tässä tapauksessa molemmat prosessityypit on yksilöitävä, tai tisle on määritettävä krakkauksen lähtömateriaaliksi. Tämä koskee etenkin öljyjohdoksia, joita syntyy usein prosessien yhdistämisestä. Öljytuotteiden yksilöintiin voidaan kuitenkin käyttää myös niitä varten kehitettyä erikoisjärjestelmää (katso luku 4.3.2.2).

Koska uutteen kemiallinen johdos ei sisällä samoja ainesosia kuin perusuute, sitä on pidettävä eri aineena. Tämän säännön vuoksi aineen yksilöiminen nimen ja kuvauksen perusteella voi poiketa aikaisemmasta EINECS-nimestä ja kuvauksesta. Kun EINECS-luettelo otettiin käyttöön, eri prosessien ja eri liuottimien avulla aikaansaadut uutteet ja jopa eri fysikaaliset tai kemialliset johdotukset merkittiin usein yhdeksi ainoaksi kirjaukseksi. REACH-asetuksen nojalla nämä aineet on kuitenkin rekisteröitävä erillisinä aineina.

4. Muut aineen yksilöintiparametrit

Kemiallisen nimen, alkuperän ja prosessin määrittämisen lisäksi UVCB-aineesta on ilmoitettava myös kaikki muut oleelliset tiedot REACH-asetuksen liitteessä VI olevan 2 jakson mukaisesti.

Eritoten tietyyppisten UVCB-aineiden osalta muut yksilöintiparametrit voivat olla oleellisia. Täydentäviä muita tunnistetietoja voivat olla esimerkiksi seuraavat:

- o kemiallisen koostumuksen yleinen kuvaus
- o kromatografisen sormenjälki tai muuntyyppiset sormenjäljet
- o viiteaineisto (esimerkiksi ISO)
- o fysikaalis-kemialliset parametrit (esimerkiksi kiehumispiste)
- o väri-indeksinumero
- o AISE-numero.

Jäljempänä esitetään erityisohjeita säännöistä ja kriteereistä sekä nimi-, alkuperä- ja prosessitietojen käyttämisestä UVCB-aineiden yksilöimisessä erilaisten alkuperien ja prosessien osalta. Jäljempänä olevissa luvuissa kuvataan UVCB-aineiden neljää alalajia, jotka ovat biologisten ja/tai kemiallisen/mineraalisen alkuperän ja prosessien yhdistelmiä (synteesi tai jalostus).

UVCB:n alalaji 1, jossa alkuperä on biologinen ja prosessi on synteesi

Biologista alkuperää olevia aineita voidaan muuntaa prosessoimalla niitä (bio)kemiallisesti, jolloin saadaan aikaan ainesosia, joita lähtömateriaalissa ei ollut, kuten kasviuutteiden kemiallisia johdoksia tai uutteiden entsyymaattisesta käsittelystä peräisin olevia tuotteita. Esimerkiksi proteiineja voidaan hydrolysoida proteaasiksi, joka voi tuottaa oligopeptidejä, tai puusta saatava selluloosa voidaan karboksyloidata karboksimeetylliselluloosaksi (CMC).

Käymistuotteet voivat myös kuulua tähän UVCB-alalajiin. Esimerkiksi vinassi on sokerin käymistuote, joka sisältää monia erilaisia ainesosia sokeriin verrattuna. Kun käymistuotteita puhdistetaan, on mahdollista, että aineet voidaan yksilöidä täydellisesti niiden kemiallisen koostumuksen perusteella, jolloin niitä ei tarvitse määrittää enää UVCB-aineeksi.

Entsyymit ovat erikoisaineryhmä, ja niitä voidaan johtaa uuttamalla ja jalostamalla niitä biologista alkuperää olevasta lähteestä. Vaikka alkuperä ja prosessi voitaisiin kuvata tarkasti, niistä ei saada yksityiskohtaista tietoa entsyymistä. Näiden aineiden luokitteluun, nimeämiseen ja yksilöintiin on käytettävä niitä varten kehitettyä erikoisjärjestelmää (katso luku 4.3.2.3).

Ainetta yksilöitäessä on ilmoitettava prosessin lopullinen vaihe ja/tai muu aineen yksilöimisen kannalta oleellinen vaihe.

Kemiallisen prosessin kuvauksen on oltava yleinen kuvaus prosessin tyypistä (esteröinti, emäksinen hydrolyysi, alkylointi, klooraus, substituutio jne.), ja myös olennaiset prosessointiolosuhteet on ilmoitettava.

Biokemiallisen prosessin kuvaus voi olla yleinen kuvaus katalysoidusta reaktiosta, ja myös reaktion katalyyttina toimivan entsyymin nimi on ilmoitettava.

Käymisen tai kudosviljelyn avulla tuotettujen aineiden käymisessä käytetyt lajit, tyyppi ja yleiset käymisolosuhteet (panosprosessi vai jatkuva prosessi, aerobinen, anaerobinen, anoksinen, lämpötila, pH-arvo jne.) on ilmoitettava, kuten myös kaikki muut käymistuotteiden erottamisessa sovelletut prosessin vaiheet, esimerkiksi sentrifugointi, saostus, uuttaminen jne. Jos näiden aineiden jalostusta jatketaan, tuloksena voi olla jae, rikaste tai jäämä. Nämä edelleen prosessoidut aineet yksilöidään prosessin jatkovaiheita kuvaavilla täydentävillä erittelyillä.

UVCB:n alalaji 2, jossa alkuperä on kemiallinen tai mineraalinen ja prosessi on synteesi

UVCB-aineet, joiden alkuperä on kemiallinen tai mineraalinen ja jotka on johdettu prosessista, jossa syntetisoidaan uusia molekyyliä, ovat "reaktiotuotteita". Esimerkkejä kemiallisista reaktiotuotteista ovat esteröinti-, alkylointi- tai klooraustuotteet. Biokemialliset reaktiot, joissa käytetään eristettyjä entsyymejä, ovat kemiallisten reaktioiden erikoistyyppisiä. Jos sovelletaan monimutkaista biokemiallista synteeseireittiä, jossa käytetään monimutkaisia mikro-organismeja, on kuitenkin parempi määrittää lopputuloksena saatava aine käymistuotteeksi ja yksilöidä se käymisprosessin ja siinä käytettyjen lajien perusteella kuin lähtömateriaalien perusteella (katso UVCB:n alalaji 4).

Jokaista reaktiotuotetta ei tule määrittää automaattisesti UVCB-aineeksi. Jos reaktiotuote voidaan määrittää riittävän tarkasti sen kemiallisen koostumuksen perusteella (mukaan luettuna tietty määrä vaihtelevuutta), se tulisi yksilöidä mieluummin useammasta ainesosasta

koostuvaksi aineeksi (katso luku 4.2.2). Aine on määritettävä UVCB-aineeksi ("reaktiotuote") vain siinä tapauksessa, jos reaktiotuotteiden koostumusta ei tunneta riittävästi tai jos se on huonosti ennustettavissa. Reaktiotuotteen yksilöinti perustuu reaktion lähtömateriaaleihin ja siihen (bio)kemialliseen prosessiin, jossa aine syntyy.

Esimerkkejä		
EY-numero	EINECS-nimi	CAS-numero
294-006-2	Nonaanidihappo, reaktiotuotteet 2-amino-2-metyyli-1-propanolin kanssa	91672-02-5
294-148-5	Formaldehydi, reaktiotuotteet dieteeniglykolin ja fenolin kanssa	91673-32-4

Reaktiotuotteiden keskeisin tunnistetieto on valmistusprosessin kuvaus. Aineen yksilöimiseksi on ilmoitettava prosessin viimeinen tai olennaisin vaihe. Kemiallisen prosessin kuvauksen on oltava yleinen kuvaus prosessin tyypistä (esteröinti, emäksinen hydrolyysi, alkylointi, klooraus, substituutio jne.), ja myös olennaiset prosessointiolosuhteet on ilmoitettava. Biokemiallinen prosessi on kuvattava reaktiotyyppin perusteella, ja myös reaktion katalyyttina toimivan entsyymin nimi on ilmoitettava.

UVCB:n alalaji 3, jossa alkuperä on biologinen ja prosessi on jalostus

UVCB-aineet, joiden alkuperä on biologinen ja jotka ovat tulosta jalostusprosessista, jossa ei synnytetä uusia molekyyliä tarkoituksellisesti, voivat olla esimerkiksi uutteen jakeita, uutteen rikasteita, puhdistettuja uutteen tai alkuperältään biologisten aineiden prosessoinnista syntyneitä jäämiä.

Heti kun uutteen jalostamista jatketaan, aine ei ole enää sama aine kuin uute, vaan toinen aine, joka kuuluu UVCB-aineiden toiseen alalajiin, eli se on esimerkiksi uutteen jae tai jäämä. Näiden aineiden määrittämisessä on käytettävä täydentäviä prosessointiparametreja. Jos uutetta muunnetaan kemiallisissa tai biokemiallisissa reaktioissa, joissa syntyy uusia molekyyliä (johdoksia), aineen yksilöimisessä sovelletaan UVCB-aineiden alalajia 2 koskevia ohjeita tai lukua 4.2, joka koskee koostumukseltaan tarkasti määritettyjä aineita.

Kun pitemmälle jalostetut uutteen eritellään tällä tavoin, voi olla, että uusi nimi ja kuvaus poikkeavat EINECS-luettelossa olevista. Kun luetteloa laadittiin, tällaista erittelyä ei tehty, ja kaikentyyppiset uutteen, joiden valmistuksessa on käytetty erilaisia liuottimia ja muita prosessivaiheita, ovat voineet kuulua yhteen kirjaukseen.

UVCB-aineiden tämän alalajin ensimmäinen keskeinen tunnistetieto on sen organismin heimo, suku ja laji, josta aine on peräisin. Tarvittaessa on ilmoitettava myös aineen erottamiseen käytetty kudokseksi tai organismin osa, esimerkiksi luuydin tai haima, tai kanta, siemenet tai juuret. Niistä aineista, joiden alkuperä on mikrobiologinen, on määritettävä myös lajin kanta ja geneettinen tyyppi.

Jos UVCB-aine on johdettu eri lajeista, sitä pidetään eri aineena, vaikka kemiallinen koostumus olisikin sama.

Esimerkkejä	
EY-numero	EINECS-nimi
290-977-1	Oksidoitu sinipuu-uute (Haematoxylon campechianum) EY-kuvaus Tämä aine yksilöidään väri-indeksin mukaisella koostumuksella nro C.I. 75290 oksidoitu.
282-014-9	Haimauutteet, deproteinoitu

Toinen keskeinen tunnistetieto on aineen prosessointi, esimerkiksi uutto-, jakotislaus-, puhdistus- tai rikastusprosessi tai jäämän koostumukseen vaikuttava prosessi. Eli kun uutteita jalostetaan eri prosesseissa, esimerkiksi käyttämällä eri liuottimia tai erilaisia puhdistusvaiheita, tuloksena syntyvät aineet ovat erilaisia.

Mitä useampaa vaihetta jalostuksessa käytetään, sitä helpompaa on määrittää aine sen kemiallisen koostumuksen perusteella. Tässä tapauksessa eri alkuperälajit tai erilaiset prosessimuunnelmat eivät johda automaattisesti eri aineisiin.

Biologista alkuperää olevien aineiden keskeinen yksilöintiparametri on oleellisten prosessien kuvaus. Uutteiden uuttamisprosessia on kuvattava aineen yksilöimisen kannalta riittävän yksityiskohtaisesti. Vähintään on ilmoitettava käytetty liuotin.

Kun aineen valmistusprosessissa on vielä muita vaiheita, kuten jakotislaus tai rikastus, oleellisten prosessivaiheiden yhdistelmä on kuvattava, esimerkiksi uuton ja rikastuksen yhdistelmä sekä raja-arvot.

UVCB:n alalaji 4, jossa alkuperä on kemiallinen tai mineraalinen ja prosessi on jalostus

Aineet, joiden alkuperä on muu kuin biologinen eli jotka ovat mineraaleja, malmeja, hiiltä, luonnonkaasua ja raakaöljyä tai peräisin niistä tai muita kemianteollisuuden raaka-aineita ja jotka ovat tulosta prosessoinnista ilman tarkoituksellisia kemiallisia reaktioita, voivat olla (puhdistettuja) jakeita, rikasteita tai jäämiä näistä prosesseista.

Hiiltä ja raakaöljyä käytetään tislaus- tai kaasutusprosesseissa, joissa tuotetaan hyvin monenlaisia aineita (esimerkiksi öljytuotteita, polttokaasuja jne.) sekä tervojen ja kuonien kaltaisia jäämiä. Useimmiten tislatus tai muulla tavoin jakotislatus tuotteen prosessointia, mukaan luettuina kemialliset reaktiot, jatketaan heti. Näissä tapauksissa aineen yksilöinnissä on noudatettava UVCB-aineiden alalajia 2 koskevia ohjeita, koska prosessi on olennaisempi kuin alkuperä.

Öljytuotteisiin sovelletaan niitä varten kehitettyä yksilöintijärjestelmää (katso luku 4.3.2.2). Tähän järjestelmään kuuluvia aineita ovat esimerkiksi jakotisleet sekä kemialliset reaktiotuotteet.

Muita UVCB-aineiden alalajiin 4 kuuluvia aineita ovat esimerkiksi malmit, malmirikasteet ja kuonat, jotka sisältävät vaihtelevia määriä metalleja, joita voidaan erotella metallurgisen prosessin avulla.

Bentoniitin tai kalsiumkarbonaatin kaltaisia mineraaleja voidaan prosessoida esimerkiksi happoliuotuksen ja/tai kemiallisen saostuksen tai ioninvaihtokolonniin avulla. Jos kemiallinen koostumus on kokonaisuudessaan määritetty, mineraalit on yksilöitävä luvun 4.2 asianmukaisessa osassa annettujen ohjeiden perusteella. Jos mineraaleja prosessoidaan ainoastaan mekaanisilla menetelmillä, esim. jauhamalla, seulomalla, sentrifugoimalla tai

vaahdottamalla, niiden katsotaan olevan edelleen samoja luonnossa esiintyviä mineraaleja kuin alkuperäiset mineraalit. Valmistusprosessissa tuotettavia mineraaleja voidaan pitää – yksilöintitarkoituksia varten²¹ – samoina kuin niiden luonnossa esiintyvät vastineet, jos niiden koostumus ja myrkyllisyysprofiili ovat identtiset.

Muuta kuin biologista alkuperää olevien aineiden keskeisin yksilöintiparametri on oleellisten prosessivaiheiden kuvaus.

Jakotisleiden jakotislusprosessi on kuvattava eristettyä jakotislettä koskevien parametrien ja raja-arvojen perusteella. Myös aiemmat prosessivaiheet on tarvittaessa kuvattava.

Rikastusvaiheesta on ilmoitettava prosessin tyyppi (esimerkiksi haihdutus, saostus jne.), ja pääainesosien alku- ja loppupitoisuudet on ilmoitettava aiempia prosessivaiheita koskevien tietojen lisäksi.

Muuta kuin biologista alkuperää olevien jäämien keskeisin yksilöintiparametri on sen prosessin kuvaus, josta jäämä on peräisin. Prosessi voi olla mikä tahansa fysikaalinen reaktio, josta syntyy saostumia, esimerkiksi puhdistus-, jakotislus- tai rikastusprosessi.

Analyysitiedot

UVCB-aineet käsittävät hyvin erilaisia aineiden tyyppejä, jotka eroavat toisistaan sellaisten parametrien, kuten lähteen ja valmistusprosessin, osalta. Näin ollen tietojen tarjoamiseksi UVCB-aineen koostumuksesta pitäisi toimittaa soveltuvat analyysimenetelmät, jotka ovat tapauskohtaisia. Lisäksi näkemyksiä menetelmien käytöstä kehitetään ja parannetaan jatkuvasti, joten rekisteröijä vastaa siitä, että sen esittämä analyysidata on asianmukaista ja aineen tunnistamiseksi saadaan parhaat mahdolliset tiedot.

UVCB-aineiden luonnehdintaan voidaan käyttää useita kvalitatiivisia menetelmiä, kuten UV/Vis-, infrapuna- ja massaspektrometriaa, ydinmagneettista resonanssia ja röntgendiffraktiota.

Aineen koostumuksen luonnehtimiseksi on toimitettava kvantitatiiviset tiedot, kuten kromatogrammit tai diffraktiotiedot, joita voidaan käyttää sormenjälkenä.

Analyysimenetelmien kuvaukseen täytyy sisältyä noudatetut koesuunnitelmat ja tulkinta raportoiduista tuloksista.

4.3.2. UVCB-aineiden erityislajit

Tässä osassa annetaan ohjeita UVCB-aineiden erityislajeista, joita ovat aineet, joiden hiiliketjun pituus vaihtelee (4.3.2.1), öljystä tai öljyn kaltaisista lähteistä peräisin olevat aineet (4.3.2.2) sekä entsyymit (4.3.2.3).

4.3.2.1 Aineet, joiden hiiliketjun pituus vaihtelee

Tässä UVCB-aineiden alalajissa on kyse pitkäketjuisista alkyyliaineista, joiden hiiliketjun pituus vaihtelee, kuten parafiinit ja olefiinit. Näitä aineita joko johdetaan luonnollisista rasvoista tai öljyistä tai tuotetaan synteettisesti. Luonnolliset rasvat ovat peräisin kasveista tai eläimistä. Kasveista peräisin olevien hiiliketjultaan pitkien aineiden ketjuissa on yleensä parillinen määrä hiiliatomeja, kun taas eläimistä peräisin olevien aineiden, joiden hiiliketjut ovat pitkiä, ketjuissa voi olla myös pariton määrä hiiliatomeja. Synteettisesti tuotetuissa hiiliketjultaan pitkissä aineissa voi olla pariton ja parillinen määrä hiiliatomeja.

²¹ Sama toimintatapa luonnossa esiintyvien ja kemiallisesti tuotettavien mineraalien yksilöimisessä ei välttämättä tarkoita sitä, että niihin sovellettaisiin muita samoja lainsäädäntöön perustuvia vaatimuksia (esimerkiksi vapautus rekisteröinnistä).

Tunnistetiedot ja nimeämiskäytäntö

Tämä ryhmä koostuu aineista, joiden yksittäisillä ainesosilla on yhteinen rakenteellinen ominaisuus: yksi tai useampi pitkäketjuinen alkyyliryhmä, joihin on usein kiinnittynyt toiminnallinen ryhmä. Ainesosat eroavat toisistaan yhden tai useamman seuraavan alkyyliketjun ryhmäominaisuuden perusteella:

- o hiiliketjun pituus (hiililuku)
- o tyydyttyneisyys
- o rakenne (lineaarinen tai haarautunut)
- o toiminnallisen ryhmän sijainti.

Ainesosan kemiallinen identiteetti voidaan kuvata riittävästi ja nimetä järjestelmällisesti kolmen seuraavan kuvaajan perusteella:

- o **alkyylikuvaaja**, joka kuvaa hiiliatomien lukumäärää alkyyliryhmän (tai -ryhmien) hiiliketjujen pituuksissa
- o **toiminnallisuuskuvaaja**, joka määrittää aineen toiminnallisen ryhmän (esimerkiksi amiini, ammonium tai karboksyylihappo)
- o **suolakuvaaja** eli suolan kationi tai anioni, kuten sooda (Na^+), karbonaatti (CO_3^{2-}), kloridi (Cl^-).

Alkyylikuvaaja

- o Yleensä ottaen alkyylikuvaaja C_{x-y} tarkoittaa tyydyttyneitä lineaarisia alkyyliketjuja, jotka koostuvat kaikista ketjupituuksista välillä $x-y$; esimerkiksi C_{8-12} , tarkoittaa kaikkia näitä: C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} ja C_{12} .
- o On ilmoitettava, tarkoittaako alkyylikuvaaja vain parillisia tai parittomia alkyyliketjuja, esimerkiksi C_{8-12} (parillinen).
- o On ilmoitettava, tarkoittaako alkyylikuvaaja (myös) haarautuneita alkyyliketjuja, esimerkiksi C_{8-12} (haarautunut) tai C_{8-12} (lineaarinen ja haarautunut).
- o On ilmoitettava, tarkoittaako alkyylikuvaaja (myös) tyydyttymättömiä alkyyliketjuja, esimerkiksi C_{12-22} (C_{18} tyydyttymätön).
- o Alkyyliketjun pituuksien kapea jakauma ei kata leveämpää ja päinvastoin, esimerkiksi C_{10-14} ei ole sama kuin C_{8-18} .
- o Alkyylikuvaajalla voidaan tarkoittaa myös alkyyliketjujen lähdettä, esimerkiksi kookosta tai talia. Hiiliketjun pituuden jakauman täytyy kuitenkin vastata lähteen jakaumaa.

Edellä kuvattua järjestelmää on käytettävä kuvattaessa aineita, joiden hiiliketjujen pituus vaihtelee. Se ei sovi koostumukseltaan tarkasti määriteltäviin aineisiin, jotka voidaan yksilöidä niiden tarkan kemiallisen rakenteen perusteella.

Tämäntyyppisen UVCB-aineen nimeäminen perustuu siis alkyylikuvaajaa, toiminnallisuuskuvaajaa ja suolakuvaajaa koskeviin tietoihin. Lisäksi alkuperää ja prosessia koskevat tiedot voivat olla hyödyllisiä, jotta aine voidaan yksilöidä tarkemmin.

Esimerkkejä		
Kuvaajat		Nimi
Alkyylikuvaaja Toiminnallisuuskuvaaja Suolakuvaaja	alkyyliketjun pituudet C ₁₀₋₁₈ rasvahapot (karboksyylihappo) kadmiumsuolat	rasvahappojen (C ₁₀₋₁₈) kadmiumsuolat
Alkyylikuvaaja Toiminnallisuuskuvaaja Suolakuvaaja	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyyli-dimetyyli ammonium kloridi	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyyli- dimetyyliammoniumkloridi
Alkyylikuvaaja Toiminnallisuuskuvaaja Suolakuvaaja	trimetyyli-tali-alkyyli ammonium kloridi	trimetyyli-taliaalkyyli- ammoniumkloridi

4.3.2.2 Öljystä tai öljyn kaltaisista lähteistä peräisin olevat aineet

Öljystä (öljytuotteet) tai öljyn kaltaisista lähteistä peräisin olevat aineet (esimerkiksi hiili) ovat aineita, joiden koostumus on hyvin monimutkainen ja vaihteleva tai osittain määrittämätön. Tässä luvussa käytetään öljytuotteita havainnollistamaan tämän UVCB-aineisiin kuuluvan erityistyyppin yksilöimistä. Samaa toimintatapaa voidaan kuitenkin noudattaa myös muiden öljyn kaltaisista lähteistä olevien aineiden, kuten hiilen, osalta.

Öljynjalostusteollisuudessa käytettävä lähtömateriaali voi olla raakaöljyä tai jotakin muuta yhdestä tai useammasta prosessista saatavaa jalostusvirtaa. Lopullisten tuotteiden koostumus määräytyy valmistuksessa käytetyn raakaöljyn (koska raakaöljyn koostumus vaihtelee sen alkuperän mukaan) sekä jalostusprosessien mukaan. Näin ollen öljytuotteiden koostumus vaihtelee luonnostaan, jalostusprosessista riippumatta¹⁶.

1. Nimeämiskäytäntö

Öljytuotteiden yksilöimisessä on suositeltavaa nimetä tuotteet vakiintuneen nimikkeistöjärjestelmän perusteella²². Nimi koostuu yleensä jalostusprosessista, virtauksen lähteestä ja yleisestä koostumuksesta tai yleisistä ominaisuuksista. Jos aine sisältää > 5 % (painoprosenttia) 4–6-sidoksia kondensoituneita rengasrakenteisia aromaattisia hiilivetyjä, tämä tieto on ilmoitettava kuvauksessa. Jos öljytuotteella on EINECS-numero, on käytettävä EY-luettelossa käytettyä nimeä.

2. Tunnisteet

Öljytuotteiden yksilöintiä koskeviin käsitteisiin ja määritelmiin kuuluvat yleensä virtauksen lähde, jalostusprosessi, yleinen koostumus, hiililuku, kiehumisalue tai muut tarkoituksenmukaiset fysikaaliset ominaisuudet sekä vallitsevan hiilivedyn tyyppi²¹.

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.

REACH-asetuksen liitteessä VI olevan 2 jakson mukaiset yksilöintiparametrit on ilmoitettava. Öljytuotteiden valmistuksessa käytetään enemmän toimintaeritelmiä kuin koostumusta koskevia eritelmiä. Näin ollen ominaisuudet kuten nimi, hiiliketjun pituuden vaihteluväli, kiehumispiste, viskositeetti, raja-arvot ja muut fysikaaliset ominaisuudet ovat yleensä hyödyllisempiä kuin koostumusta koskevat tiedot, jotta öljytuote voitaisiin yksilöidä niin tarkasti kuin mahdollista.

Vaikka kemiallinen koostumus ei ole UVCB-aineiden ensisijainen tunniste, on kuitenkin ilmoitettava kaikki ainesosat, joiden pitoisuus on ≥ 10 prosenttia, ja tunnetut ainesosat, joiden pitoisuus on < 10 prosenttia, ja koostumuksesta annetaan yleinen kuvaus (esimerkiksi molekyylipainon vaihteluväli, alifaattisuus tai aromaattisuus, hydratoitumisen aste sekä muut olennaiset tiedot). Samojen parametrien avulla olisi kuvailtava myös ne ainesosaryhmät, joita ei voida yksilöidä erikseen. Lisäksi kaikki muut vaaraluokitukseen vaikuttavat ainesosat on yksilöitävä nimen ja tyyppillisen pitoisuuden perusteella, vaikka niiden pitoisuus olisi vähäinen.

4.3.2.3 Entsyymit

Entsyymejä tuotetaan useimmiten mikro-organismien käymisen avulla, mutta joskus myös kasveista tai eläimistä. Käymis- tai uuttamisprosessin ja sitä seuraavan puhdistusvaiheen tuloksena syntynyt nestemäinen entsyymitiiviste sisältää veden lisäksi aktiivisen entsyymiproteiinin ja muita ainesosia, jotka koostuvat käymisprosessin jäämistä. Niitä ovat esimerkiksi proteiinit, peptidit, aminohapot, hiilihydraatit, lipidit ja epäorgaaniset suolat.

Entsyymiproteiinia ja käymis- tai uuttamisprosessista peräisin olevia ainesosia on pidettävä yksilöintitarkoitusten mukaisena aineena lukuun ottamatta vettä, joka voidaan erottaa aineesta ilman että se vaikuttaa entsyymiproteiinin pysyvyyteen tai muuttaa sen koostumusta.

Entsyymiaine sisältää yleensä 10–80 painoprosenttia entsyymiproteiinia. Muiden ainesosien prosenttiosuus vaihtelee; se määräytyy käytetyn organismin, käymisaineen ja käymisprosessin toiminnallisten parametrien sekä sovelletun jatkopuhdistuksen mukaan, mutta yleensä koostumus on jäljempänä olevassa taulukossa esitetyn vaihteluvälin mukainen.

Aktiivinen entsyymiproteiini	10-80 %
Muut proteiinit + peptidit ja aminohapot	5-55 %
Hiilihydraatit	3-40 %
Lipidit	0-5 %
Epäorgaaniset suolat	1-45 %
Yhteensä	100 %

Entsyymiainetta on pidettävä UVCB-aineena sen vaihtelevuuden ja osittain tuntemattoman koostumuksen vuoksi. Entsyymiproteiinia on pidettävä UVCB-aineen ainesosana. Hyvin puhdistetut entsyymit voidaan yksilöidä koostumukseltaan tarkasti määritellyiksi aineiksi (jotka koostuvat yhdestä tai useammasta ainesosasta), ja ne on yksilöitävä vastaavalla tavalla.

EINECS-luettelossa entsyymien keskeinen tunnistetieto on katalyyttinen toiminta. Entsyymit on lueteltu yleisinä kirjauksina ilman tarkempia eritelmiä tai kirjauksia, joissa olisi ilmoitettu lähdeorganismi tai substraatti.

Esimerkkejä		
EY-numero	EINECS-nimi	CAS-numero
278-547-1	Proteinaasi, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Proteinaasi, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Elastaasi (sian haima)	39445-21-1
262-402-4	Mannanaasi	60748-69-8

Euroopan komission tilaamassa entsyymitutkimuksessa ehdotettiin, että entsyymit yksilöitäisiin kansainvälisen entsyymien nimikkeistöjärjestelmän mukaan (IUBMB, kansainvälinen biokemian ja molekyylibiologian liitto).²³ Näissä toimintaohjeissa noudatetaan tätä toimintatapaa, koska sen avulla entsyymit voidaan yksilöidä järjestelmällisemmin, yksityiskohtaisemmin ja kattavammin kuin EINECS-luettelossa.

1. Nimeämiskäytäntö

Entsyymit nimetään IUBMB:n nimeämiskäytäntöjen mukaan.

IUBMB:n luokitusjärjestelmässä on yksilöllinen nelinumeroinen koodi kutakin entsyymityyppiä ja katalyyttista toimintoa varten (esimerkiksi 3.2.1.1 α -amylaasia varten)²⁴. Kukin numero voi koostua entsyymeistä, joiden aminohappojakso ja alkuperä vaihtelevat mutta joiden entsyymitoiminta on identtistä. Aineen yksilöimisessä on käytettävä IUBMB:n nimikkeistön mukaista nimeä ja numeroa. IUBMB:n nimikkeistössä entsyymit luokitellaan kuuteen keskeiseen ryhmään:

- o 1. Oksidoreduktaasit
- o 2. Transferaasit
- o 3. Hydrolaasit
- o 4. Lyaasit
- o 5. Isomeraasit
- o 6. Ligaasit

Seuraavassa esimerkissä kuvataan IUBMB-nimikkeistön mukaan tehtyä kirjausta.

EC 3.4.22.33

Hyväksytty nimi: hedelmäbromelaiini

UBA 2000: Itävallan ympäristöministeriö. Entsyymejä koskevan tiedon kerääminen. Loppuraportti.

Itävallan ympäristöviraston ja yliopistojen välisen tekniikan, työn ja kulttuurin tutkimuskeskuksen yhteistyöhanke (IFF/IFZ). Sopimus nro B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

²⁴ Termejä "EC number" (entsyymikomitean numero) ja "IUBMB number" (IUBMB-numero) käytetään usein synonyymeinä. Väärinkäsitysten välttämiseksi on suositeltavaa käyttää termiä "IUBMB number", joka tarkoittaa IUBMB:n nelinumeroista koodia.

Reaktio: Proteiinien hydrolyysi; erittäin spesifi peptidisidosten osalta. Bz-Phe-Val-Arg[†] NHMec on hyvä synteettinen substraatti, mutta se ei vaikuta Z-Arg-Arg-NHMec:iin (vrt. kantabromelaiini).

Muu nimi (muut nimet): mehubromelaiini, ananaasi, bromelaasi, bromeliini, ekstranaasi, mehubromelaiini, pinaasi, ananasentsyymi, traumanaasi, hedelmäbromelaiini FA2

Huomautuksia: Peräisin ananaskasvista, *Ananas comosus*. Kanan kystatiini estää sitä hieman. Toista kysteiiniendopeptidaasia, jolla on sama vaikutus pieniin molekyylisubstraatteihin, pinguinaiinia (aiemmin EC 3.4.99.18), saadaan kasvista nimeltä *Bromelia pinguin*, mutta pinguinaiini eroaa hedelmäbromelaiinista siinä, että kanan kystatiini estää sitä [4].²⁵ Kuuluu peptidaasiryhmään C1²⁶ (papaiiniryhmä). Aiemmin EC 3.4.22.5, kuuluu kirjaukseen EC 3.4.22.4, CAS-numero: 9001-00-7

Linkit muihin tietokantoihin:

[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)

Yleiset viitteet:

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

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

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

Esimerkkejä entsyymien luokittelusta IUBMB-järjestelmän mukaan

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

Proteaasit on numeroitu seuraavien perusteiden mukaan:

3.	Hydrolaasit
3.4	Vaikuttavat peptidisidoksiin (peptidaaseihin), alaryhmät:
3.4.1	α-amino-akyyli-peptidihydrolaasit (nyt EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidyyl-aminohappohydrolaasit (nyt EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptidihydrolaasit (nyt EC 3.4.13)
3.4.4	Peptidyylipeptidihydrolaasit (uudelleenluokitus kohtaan EC 3.4)

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

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

3.4.11	Aminopeptidaasit
3.4.12	Peptidyyliminohappohydrolaasit tai akyyliaminohappohydrolaasit (uudelleenluokitus kohtaan 3.4)
3.4.13	Dipeptidaasit
3.4.14	Dipeptidyylipeptidaasit ja tripeptidyylipeptidaasit
3.4.15	Peptidyylidipeptidaasit
3.4.16	Seriini-tyyppin karboksipeptidaasit
3.4.17	Metallikarboksipeptidaasit
3.4.18	Kysteiini-tyyppin karboksipeptidaasit
3.4.19	Omegapeptidaasit
3.4.21	Seriiniendopeptidaasit
	Tietyt entsyymit yksilöidään seuraavasti:
3.4.21.1	Kymotrypsiini
3.4.21.2	Kymotrypsiini C
3.4.21.3	Metridiini
3.4.21.4	Trypsiini
3.4.21.5	Trombiini
3.4.21.6	Hyytymistekijä Xa
3.4.21.7	Plasmiini
3.4.21.8	Kuuluu nyt kohtiin EC 3.4.21.34 ja EC 3.4.21.35
3.4.21.9	Enteropeptidaasi
3.4.21.10	Akrosiini
3.4.21.11	Kuuluu nyt kohtiin EC 3.4.21.36 ja EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-lyyttinen endopeptidaasi
...	
3.4.21.105	

3.4.99 Endopeptidaasit, joiden katalyysimekanismia ei tunneta			
Esimerkkejä EINECS-luettelosta, IUBMB-numero lisätty			
EY-numero	EINECS-nimi	CAS-numero	IUBMB-numero
278-547-1	Proteinaasi, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisiini	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Sellulaasi	9012-54-8	3.2.1.4

2. Tunnisteet

Entsyymiaineet yksilöidään niiden sisältämän entsyymiproteiinin (IUBMB-nimikkeistö) ja muiden käymisprosessin mukaisten ainesosien perusteella. Entsyymiproteiinia lukuun ottamatta kunkin muun ainesosan pitoisuus ei yleensä ole enempää kuin yhden prosentin. Jos näiden tiettyjen ainesosien koostumusta ei tunneta, ne voidaan yksilöidä ryhmäkohtaisesti (esimerkiksi proteiinit, peptidit, aminohapot, hiilihydraatit, lipidit ja epäorgaaniset suolat). Yksittäiset ainesosat on kuitenkin ilmoitettava, jos niiden identiteetit tunnetaan, tai jos niiden pitoisuus on 10 prosenttia tai enemmän tai jos ne ovat oleellisia luokituksen ja merkintöjen ja/tai PBT-arvioinnin kannalta²⁷.

Entsyymiproteiinit

Tiivisten entsyymiproteiinit on yksilöitävä seuraavilla tunnisteilla:

- IUBMB-numero
- IUBMB-järjestelmän mukaiset nimet (systeminen nimi, entsyyminimet, synonyymit)
- IUBMB-nimikkeistön merkinnät
- reaktio ja reaktiotyyppi
- EY-numero ja nimi, jos tarpeen
- CAS-numero ja CAS-nimi, jos saatavilla.

Entsyymin aiheuttama reaktio on yksilöitävä. Tämän reaktion määrittää IUBMB.

Esimerkki

.alfa-amylaasi: polysakkaridi, joka sisältää seuraavia aineita: .alfa.-(1-4)-sidoksiset glukoosiyksiköt + H₂O = malto-oligosakkaridit; 1,4-.alfa.-d-glukosididosten endohydrolyysi polysakkarideissa, jotka sisältävät vähintään kolme 1,4-.alfa.-sidoksista d-glukoosiyksikköä.

Reaktiotyyppi on ilmoitettava entsyymiluokan mukaisesti. Se voi olla hapettuminen, pelkistäminen, eliminaatio, lisäys tai reaktion nimi.

Esimerkki

.alfa-amylaasi: O-glykosidisidosten hydrolyysi (endohydrolyysi).

Muut ainesosat kuin entsyymiproteiini

Kaikki ainesosat, joiden pitoisuus on ≥ 10 painoprosenttia tai jotka ovat oleellisia luokituksen ja merkintöjen tai PBT-arvioinnin kannalta²⁸, on yksilöitävä. Sellaiset aineet, joiden pitoisuus on vähemmän kuin 10 prosenttia, voidaan ilmoittaa kemiallisena ryhmänä. Niiden ominaispitoisuus (tai -pitoisuudet) tai pitoisuuden vaihteluvälit on ilmoitettava esimerkiksi näin:

- (glyko)proteiinit
- peptidit ja aminohapot
- Hiilihydraatit
- Lipidit
- epäorgaaninen materiaali (esimerkiksi natriumkloridi tai muut epäorgaaniset suolat).

Jos entsyymitiivisteeseen muita ainesosia ei ole mahdollista yksilöidä riittävästi, on ilmoitettava tuotanto-organismien nimi (suku ja kanta tai geneettinen tyyppi, jos tarpeen) kuten muidenkin biologista alkuperää olevien UVCB-aineiden osalta.

Jos saatavilla, täydentäviä parametreja voidaan ilmoittaa, esimerkiksi toiminnallisia parametreja (pH-arvo, optimaalinen lämpötila ja vaihteluvälit), kineettisiä parametreja (tietty aktiivisuus tai puoliintumisaika) sekä tietoja ligandeista, substraateista, tuotteista ja kofaktoreista.

Katso lisätietoja PBT-arvioinnista ja keskeisistä pitoisuusrajoista REACH-asetuksen täytäntöönpanohankkeessa laaditun asiakirjan 3.2 kemikaaliturvallisuusarviointia koskevasta kohdasta.

5. Aineen samuuden selvittämisen perusteet

Kun selvitetään, voidaanko eri valmistajien/maahantuojien aineita pitää samoina vai ei, on noudatettava muutamia sääntöjä. Näitä sääntöjä, joita sovellettiin EINECS-numeroiden määrittämisessä, on pidettävä aineen yksilöimisen ja nimeämisen yleisinä perusteina, joiden avulla on mahdollista löytää tämän tietyn aineen muut rekisteröijät ^{5, 6, 16, 29, 30}. Aineita, joiden ei katsota olevan samoja, voidaan kuitenkin pitää rakenteellisesti samankaltaisina asiantuntijalausannon perusteella. Tietojen yhteiskäytön tulisi kuitenkin olla näiden aineiden osalta mahdollista, jos se on tieteellisesti perusteltua. Tätä ei kuitenkaan käsitellä näissä toimintaohjeissa, vaan *tietojen yhteiskäyttöä koskevissa toimintaohjeissa*.

- Olisi sovellettava "≥ 80 %" -sääntöä yhdestä ainesosasta koostuviin aineisiin sekä usean ainesosan muodostavien aineiden määritelmää.

Aineita ei erotella teknisen, puhtauteen liittyvän tai analyttisen laadun perusteella. Tämä tarkoittaa sitä, että "saman" aineen puhtaus- tai epäpuhtausprofiili voi olla erilainen sen laadun mukaisesti. Koostumukseltaan tarkasti määriteltyjen aineiden on kuitenkin sisällettävä samat pääainesosat ja vain tuotantoprosessista peräisin olevia epäpuhtauksia (katso tarkemmat tiedot luvusta 4.2) sekä lisäaineita, jotka ovat tarpeen aineen pysyvyyden säilyttämiseksi.

- Yhdisteiden hydratoituja ja vedettömiä muotoja on pidettävä rekisteröinnin kannalta samana aineena.

Esimerkkejä			
Nimi ja kaava	CAS-numero	EY-numero	Sääntö
Kuparisulfaatti (Cu · H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Rikkihappo, kupari(2+)suola (1:1), pentahydraatti (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Aine sisältyy sen vedettömän muodon rekisteröintiin (EY-numero: 231-847-6)

Hydratoidulla ja vedettömällä muodolla on eri kemialliset nimet ja eri CAS-numerot.

- Happoja tai emäksiä ja niiden suoloja on pidettävä eri aineina.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
201-186-8	Peretikkahappo C ₂ H ₄ O ₃	Tätä ainetta ei pidetä samana kuin esimerkiksi sen natriumsuolaa (EINECS 220-

Vollmer ja muut (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, s. 113–122.

Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, ECB web-site; Geiss ja muut. 1992, Vollmer ja muut. 1998, Rasmussen ja muut. 1999.

220-624-9	Natriumglykolaatti C ₂ H ₄ O ₃ . Na	624-9). Tätä ainetta ei pidetä samana kuin esimerkiksi sen vastaavaa happoa (EINECS 201-186-8).
202-426-4	2-kloorianiliini C ₆ H ₆ ClN	Tätä ainetta ei tule pitää samana kuin esimerkiksi 2-kloorianiliinihydrobromidia (1:1) (C ₆ H ₆ ClN . HBr).

- Yksittäisiä suoloja (esimerkiksi natrium tai kalium) on pidettävä eri aineina.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
208-534-8	Natriumbentsoaatti C ₇ H ₅ O ₂ . Na	Tätä ainetta ei pidetä samana kuin esimerkiksi kaliumsuolaa (EINECS 209-481-3).
209-481-3	Kaliumbentsoaatti C ₇ H ₅ O ₂ . K	Tätä ainetta ei pidetä samana kuin esimerkiksi natriumsuolaa (EINECS 208-534-8).

- Haaratuneita tai lineaarisia alkyyliketjuja on pidettävä eri aineina.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
295-083-5	Fosforihappo, dipentyyliesteri, haاراتunut ja lineaarinen	Ainetta ei pidetä samana kuin yksittäisiä aineita (fosforihappo, dipentyyliesteri, haاراتunut tai fosforihappo, dipentyyliesteri, lineaarinen).

- Haaratuneet ryhmät on mainittava nimessä sellaisinaan. Aineisiin, jotka sisältävät alkyyliryhmiä ilman muita tietoja niistä, kuuluvat vain haاراتumattomat lineaariset ketjut, ellei muuta ole mainittu.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
306-791-1	Rasvahapot, C12–16	Vain aineita, joissa on lineaarisia ja haarautumattomia alkyyliryhmiä, pidetään samana aineena.
279-420-3	Alkoholit, C12–14	
288-454-8	Amiinit, C12-18-alkyyylimetyyli	

- Aineita, jotka sisältävät täydentävillä etuliitteillä tai termeillä (kuten iso-, neo-, haarautunut jne.) kuvattavia alkyyliryhmiä, ei pidetä samoina kuin aineita, joiden kuvauksissa ei käytetä näitä tarkennuksia.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
266-944-2	Glyseridit, C ₁₂₋₁₈ Tämä aine yksilöidään SDA-järjestelmän mukaisen ainenimen perusteella: C12-C18 trialkyylyglyseridi ja SDA-ilmoitusnumero: 16-001-00	Tätä ainetta ei pidetä samana kuin C ₁₂₋₁₈ -iso Aine, joka sisältää tyydyttyneitä alkyyliketjuja, jotka voivat olla haarautuneita mistä tahansa kohdasta.

- Ilman tarkempaa määrittelyä hapoissa tai alkoholeissa jne. olevien alkyyliketjujen katsotaan edustavan vain tyydyttyneitä ketjuja. Tyydyttymättömät ketjut on määritettävä sellaisenaan, ja niitä pidetään eri aineina.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
200-313-4	Steariinihappo, puhdas C18H36O2	Tätä ainetta ei pidetä samana kuin öljyhappo, puhdas C18H34O2 (EINECS 204-007-1).

- Aineet, joissa on kiraliakeskuksia

Aineesta, jossa on yksi kiraliakeskus, voi olla olemassa vasen- ja oikeakätisiä eli peilikuvamuotoja (enantiomeereja). Jos päinvastaista osoittavia tietoja ei ole, oletetaan, että aine on näiden kahden muodon tasavertainen (raseeminen) seos.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
201-154-3	2-klooripropaani-1-oli	Yksittäisiä enantiomeereja (R)-2-klooripropaani-1-oli ja (S)-2-klooripropaani-1-oli ei pidetä samanlaisina tämän kirjauksen tarkoituksia varten.

Rasemaatteja pidetään useammasta ainesosasta koostuvina aineina. Jos ainetta on rikastettu yhdellä enantiomeerimuodolla, sovelletaan yhdestä- tai useasta ainesosasta muodostuvaa ainetta koskevia sääntöjä, eli aine on isomeerien pitoisuusalueista riippuen yhdestä tai useasta ainesosasta muodostuva aine.

Aineista, joissa on useampia kiraliakeskuksia, voi olla olemassa 2ⁿ-muotoja (n-kirjain tarkoittaa kiraliakeskusten lukumäärää). Näillä eri muodoilla voi olla erilaisia fysikaalis-kemiallisia, toksikologisia ja/tai ympäristömyrkyllisiä ominaisuuksia toisiinsa nähden. Niitä on pidettävä eri aineina.

- Epäorgaaniset katalyytit

Epäorgaanisia katalyytteja pidetään seoksina. Yksilöintitarkoituksia varten metallien ainesosia tai metalliyhdisteitä on pidettävä yksittäisinä aineina (ilman käyttötarkoituksen erittelyä).

Esimerkkejä		
	Nimi	Sääntö
	Kobolttioksidin alumiinioksidikatalyytti	Yksilöitävä erikseen seuraavasti: - kobolttidioksidi - kobolttitrioksidi - alumiinioksidi - alumiinikobolttioksidi.

- Entsyymitiivisteitä, joiden IUBMB-numero on sama, voidaan pitää samana aineena siitä huolimatta, että niissä on käytetty eri tuotanto-organismeja, mikäli vaaraominaisuudet eivät eroa toisistaan merkittävästi ja mikäli niiden perusteella voidaan antaa sama luokitus.

Useammasta ainesosasta koostuvat aineet

Direktiivillä 67/548/ETY säänneltiin aineiden saattamista markkinoille. Aineen tuotantotapa ei ollut oleellista. Näin ollen markkinoilla oleva useammasta ainesosasta koostuva aine kuului EINECS-luetteloon, jos *kaikki* yksittäiset ainesosat oli merkitty EINECS-luetteloon. Esimerkiksi isomeerisista difluoribentseeniseoksista oli oltava seuraavat EINECS-kirjaukset: 1,2-difluoribentseeni (206-680-7), 1,3-difluoribentseeni (206-746-5) ja 1,4-difluoribentseeni (208-742-9), vaikka isomeeriseosta sinänsä ei ollut merkitty EINECS-luetteloon.

REACH-asetus sen sijaan edellyttää valmistetun aineen rekisteröintiä. On päätettävä tapauskohtaisesti, missä määrin "valmistuksen" määritelmä kattaa erilaiset aineen

valmistuksen vaiheet (esimerkiksi erilaiset puhdistus- tai tislauvaiheet). Jos on valmistettu useammasta ainesosasta koostuva aine, se on rekisteröitävä (ellei se kuulu yksittäisten ainesosien mukaiseen rekisteröintiin, katso luku 4.2.2.4), eli jos valmistetaan esimerkiksi isomeerista difluoribentseeniseosta, rekisteröitävä aine on "difluoribentseeni" isomeerisena seoksena. Useammasta ainesosasta koostuvaa ainetta ei tarvitse testata sellaisenaan, jos aineen vaaraprofiilia voidaan kuvata riittävästi yksittäisiä ainesosia koskevien tietojen perusteella. Jos yksittäiset isomeerit (1,2-difluoribentseeni, 1,3-difluoribentseeni ja 1,4-difluoribentseeni) valmistetaan ensin ja sekoitetaan vasta myöhemmin, yksittäiset isomeerit on rekisteröitävä, ja isomeeriseosta pidetään seoksena.

Useammasta ainesosasta koostuvaa ainetta, jonka pääainesosat ovat A, B ja C, ei pidetä samana kuin useammasta ainesosasta koostuvaa ainetta, jonka pääainesosat ovat A ja B, tai ainetta, joka on A:n, B:n, C:n ja D:n reaktiomassa.

- Useammasta ainesosasta koostuvaa ainetta ei pidetä samana kuin sellaista ainetta, joka koostuu vain yksittäisten ainesosien alaryhmästä.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
207-205-6	2,5-difluoritolueeni	Näitä kahta ainetta ei pidetä samoina kuin isomeeriset difluoritolueeniseokset, koska nämä kaksi ainetta ovat vain kaikkien mahdollisten isomeerien alaryhmä.
207-211-9	2,4-difluoritolueeni	

- Useammasta ainesosasta koostuvan aineen rekisteröinti ei kata yksittäisiä ainesosia.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
208-747-6	1,2-dibromieteeni	Tämä aine on cis- ja trans-isomeerien seos. Isomeeriseoksen rekisteröinti ei kata yksittäisiä aineita, jotka ovat siis (1Z)-1,2-dibromieteeni ja (1E)-1,2-dibromieteeni.

UVCB-aineet

- UVCB-ainetta, jonka ainesosien jakauma on kapea, ei pidetä samana kuin sellaista UVCB-ainetta, jonka koostumus on laajempi, ja päinvastoin.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
288-450-6	Amiinit, C12-18-alkyyli, asetaatit	Aineita "amiinit, C12-14-alkyyli, asetaatit" tai "amiinit, C12-20-alkyyli, asetaatit" tai "amiinit, dodekyyli (C12-alkyyli), asetaatit" tai aineita, joissa on parillinen määrä alkyyliketjuja, ei pidetä samoina kuin tätä ainetta.

- Ainetta, jota määrittää tietty laji/suku, ei pidetä samana aineena toisesta lajista/suvusta eristetyn aineen kanssa.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
296-286-1	Glyseridit, auringonkukkaöljy di-	Tätä ainetta ei pidetä samana kuin "glyseridit, soija di- (EINECS: 271-386-8)" tai samana kuin "glyseridit, tali di- (EINECS: 271-388-9)"
232-401-3	Pellavansiemenöljy, epoksidoitu	Tätä ainetta ei pidetä samana aineena kuin "pellavansiemenöljy, oksidoitu (EINECS: 272-386-8)" tai samana aineena kuin "pellavansiemenöljy, maleoitu (EINECS: 268-897-3)" tai samana aineena kuin "risiiniöljy, epoksidoitu (ei merkitty EINECS-luetteloon)".

- Puhdistettua uutetta tai tiivistettä pidetään eri aineena kuin uutetta.

Esimerkkejä		
EY-numero	Nimi	Sääntö
232-299-0	Rapsiöljy Uuteaineet ja niiden fysikaalisesti muunnellut johdokset. Se koostuu pääasiassa eruka-, linoli- ja öljyrasvahappojen glyserideistä. (Brassica napus, Cruciferae)	Aine "(Z)-dokos-13-eenihappo (erukahappo)" on rapsiöljy-aineen ainesosa. Erukahappoa ei pidetä samana aineena kuin rapsiöljy, koska se eristetään puhtaana aineena rapsiöljystä. Erukahapolla on oma EINECS-kirjaus (204-011-3). Palmitiinihapon, öljyhapon, linolihapon, linoleenihapon, erukahapon ja eikoseenihapon eristettyä seosta ei pidetä samana aineena kuin rapsiöljyä, koska nämä ainesosat eivät edusta koko öljyä.

6. Aineen tunnistetieto tiedustelussa

Aineiden yksilöimistä ja nimeämistä koskevia ohjeita on näiden toimintaohjeiden luvussa 4. Näitä ohjeita on noudatettava sen määrittämiseksi, voidaanko aineiden katsoa olevan samoja REACH- ja CLP-asetusten tarkoituksia varten. Tätä käsitellään tarkemmin jäljempänä aineita koskevan tiedustelun yhteydessä.

Asetuksen 4 artiklan mukaan valmistaja tai maahantuoja voi, samalla kun sillä säilyy täysi vastuu REACH-asetuksen mukaisten velvoitteidensa noudattamisesta, nimetä ulkopuolisen edustajan huolehtimaan kaikista III osaston mukaisista menettelyistä, joihin liittyy muiden valmistajien tai maahantuojien kanssa käytäviä neuvotteluja.

Kaikkien aineiden osalta mahdollisilla rekisteröijillä on velvollisuus tiedustella kemikaalivirastolta, onko rekisteröintiä jo haettu samalle aineelle (REACH-asetuksen 26 artikla). Tiedustelun on sisällettävä seuraavat tiedot:

- mahdollisen rekisteröijän tiedot REACH-asetuksen liitteessä VI olevassa 1 jaksossa määritetyn mukaisesti käyttötiloja lukuun ottamatta
- aineen tunnistetiedot, siten kuin liitteessä VI olevassa 2 jaksossa täsmennetään
- ne tietovaatimukset, jotka edellyttäisivät mahdollisen rekisteröijän tekevän uusia tutkimuksia selkärankaisilla
- ne tietovaatimukset, jotka edellyttäisivät mahdollisen rekisteröijän tekevän uusia tutkimuksia.

Mahdollisen rekisteröijän on ilmoitettava aineen tunnistetiedot ja nimi näiden toimintaohjeiden luvussa 4 esitettyjen sääntöjen mukaisesti.

Virasto tutkii, onko sama aine rekisteröity jo aiemmin. Myös se tehdään näiden toimintaohjeiden luvussa 4 esitettyjen sääntöjen mukaisesti. Tulos ilmoitetaan mahdolliselle rekisteröijälle, ja siitä tiedotetaan myös aiemmille tai muille mahdollisille rekisteröijille.

Lisätietoja tiedustelun tekemisestä on *Tietojen yhteiskäyttöä koskevissa toimintaohjeissa* ja kemikaaliviraston asiaa koskevalla verkkosivustolla:

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

7. Esimerkkejä

Seuraavilla sivuilla esitetyillä esimerkeillä on tarkoitus ainoastaan havainnollistaa, miten näissä toimintaohjeissa esitetyjä ohjeita voidaan soveltaa. Ne eivät ole esimerkkejä REACH-asetusta koskevista velvollisuuksista.

Tarkastellut esimerkit ovat seuraavat:

- "Dietyyliperoksidikarbonaatti" on esimerkki yhdestä ainesosasta koostuvasta aineesta, joka sisältää liuotinta, joka toimii myös stabiloivana aineena (ks. luku 7.1).
- "Tsolimidiini" on esimerkki aineesta, joka voidaan määrittää yhdestä tai useammasta ainesosasta koostuvaksi aineeksi (ks. luku 7.2).
- Valmistusreaktion aikana muodostunut "isomeeriseos" on esimerkki useammasta ainesosasta koostuvasta aineesta (ks. luku 7.3). Tämä aine sisältyi aiemmin EINECS-luetteloon merkittyihin yksittäisiin isomeereihin.
- "Hajuste AH" on esimerkki aineesta, jota tuotetaan erilaatuisena ja jota voidaan kuvailla viiden pitoisuusalueeltaan vaihtelevan ainesosan reaktiomassana (luku 7.4). Se on myös esimerkki perustellusta poikkeuksesta 80 prosentin ja 10 prosentin kynnsarvoista.
- Epämetalliset "mineraalit", kuten montmorilloniitti, on esimerkki tarkasti määritellystä aineesta, jonka fysikaalisia ominaisuuksia on kuvailtava yksityiskohtaisemmin, ja niitä kuvataan luvussa 7.5.
- "Eteerinen laventeliöljy" on esimerkki kasveista saatavasta UVCB-aineesta (luku 7.6).
- "Krysanteemiöljy ja siitä eristetyt isomeerit" on esimerkki luonnollista alkuperää olevasta, jatkokäsittelystä UVCB-aineesta (luku 7.7).
- "Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti" on esimerkki koostumukseltaan vaihtelevasta UVCB-aineesta, jota ei voida määritellä täysin (luku 7.8).
- "Kvaternaariset ammoniumyhdisteet" on esimerkki aineista, joiden hiiliketjun pituus vaihtelee (luku 7.9).
- "Öljytuotteiden" kahta esimerkkiä, bensiinisekoitusta ja kaasuöljyjä, tarkastellaan luvussa 7.10.
- Luvussa 7.11 esitetään kaksi esimerkkiä siitä, miten lakkaasi- ja amylaasientsyymit voidaan yksilöidä.

7.1. Dietyyliperoksidikarbonaatti

"Dietyyliperoksidikarbonaattia" (EY 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) valmistetaan isododekaania (EY 250-816-8, CAS 31807-55-3) sisältävänä 18-prosenttisena liuoksena. Isododekaani toimii myös räjähdysominaisuuksia stabiloivana aineena. Enimmäispitoisuus, jolla varmistetaan aineen turvallinen käsittely, on 27 prosenttia.

Miten edellä kuvailtu aine on yksilöitävä ja nimettävä sen rekisteröimiseksi?

REACH-asetuksessa aineen määritelmän ulkopuolelle jäävät liuottimet, jotka voidaan erottaa vaikuttamatta aineen pysyvyyteen tai muuttamatta sen koostumusta. Koska isododekaani toimii edellä mainitussa tapauksessa myös stabilointiaineena, eikä sitä voida erottaa kokonaan aineen räjähtävien ominaisuuksien vuoksi, isododekaania on pidettävä lisäaineena eikä ainoastaan liuottimena. Ainetta on kuitenkin pidettävä useammasta ainesosasta koostuvana aineena. Siksi aine on rekisteröitävä liuoksena, jonka isododekaanipitoisuus on pieni, jolla taataan turvallinen käsittely:

Dietyyliperoksidikarbonaatti (pitoisuuden yläraja: 27 %). Isodekaani on ilmoitettava kohdassa "lisäaineet", ja sen stabiloiva vaikutus on määriteltävä tarkemmin.

7.2. TSOLIMIDIINI

Valmistettu metanoliliuos sisältää "tsolimidiinia" (EY 214-947-4, CAS 1222-57-7, C₁₄H₁₂N₂O₂S) ja "imidatsolia" (EY 206-019-2, CAS 288-32-4, C₃H₄N₂). Kun liukeneva "metanoli" on poistettu ja valmistusprosessi on optimoitu, aineen puhtausaste on 74–86 prosenttia tsolimidiinia ja 4-12 prosenttia imidatsolia.

Miten edellä kuvailtu aine on yksilöitävä ja nimettävä sen rekisteröimiseksi?

REACH-asetuksessa aineen määritelmän ulkopuolelle jäävät liuottimet, jotka voidaan erottaa vaikuttamatta aineen pysyvyyteen tai muuttamatta sen koostumusta. Edellä mainitussa tapauksessa metanoli voidaan erottaa aineesta helposti, ja liuotinta sisältämätön aine on rekisteröitävä.

Aineen katsotaan yleisesti olevan yhdestä ainesosasta koostuva aine, jos yhden pääaineesosan osuus on vähintään 80 prosenttia. Aineen katsotaan yleisesti olevan useammasta ainesosasta koostuva aine, jos useamman kuin yhden pääaineesosan osuus on vähintään 10 prosenttia ja alle 80 prosenttia. Edellä esitetty esimerkki on rajatapaus, sillä kynnyksarvot ylittyvät. Siksi aineen voidaan katsoa olevan yhdestä ainesosasta koostuva aine eli "tsolimidiini" tai useammasta ainesosasta koostuva aine eli "tsolimidiinin" ja "imidatsolin" reaktiomassa.

Tällaisessa rajatapauksessa aineen pääaineesosien ominaispitoisuuden perusteella voidaan määritellä, miten ainetta kuvaillaan parhaiten:

(1) (1) Jos tsolimidiinin ominaispitoisuus on 77 prosenttia ja imidatsolin 11 prosenttia, on suositeltavaa pitää ainetta tsolimidiinin ja imidatsolin reaktiomassana.

(2) (2) Jos tsolimidiinin ominaispitoisuus on 85 prosenttia ja imidatsolin 5 prosenttia, on suositeltavaa pitää ainetta yhdestä ainesosasta koostuvana aineena eli "tsolimidiininä".

7.3. Isomeeriseos

Tarkasteltava aine on valmistusreaktion aikana muodostuneiden kahden isomeerin seos (reaktiomassa). Yksittäiset isomeerit on ilmoitettu EINECS-luettelossa. Direktiivillä 67/548/ETY säänneltiin aineiden saattamista markkinoille. Koska aineen valmistustavalla ei ole tässä yhteydessä merkitystä, kahden yksittäisen isomeerin EINECS-luetteloon tehdyt merkinnät käsittävät seoksen. REACH-asetuksessa edellytetään valmistettujen aineiden rekisteröintiä. On määritettävä tapauskohtaisesti, missä määrin "valmistuksen" määritelmä kattaa aineen valmistuksen eri vaiheet. Jos isomeeriseos rekisteröidään useammasta ainesosasta koostuvaksi aineeksi (luvun 4.2.2 ohjeen mukaisesti), itse ainetta ei tarvitse testata, mikäli aineen vaaraprofiili voidaan kuvailla riittävän tarkasti yksittäisten ainesosien tietojen perusteella.

1. Nimi ja muut tunnistetiedot

Esimerkkejä	
(Aineen) IUPAC-nimi tai muu kansainvälinen kemiallinen nimi	2,2'-[[[4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanolin ja 2,2'-[[[5-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanolin reaktiomassa
(Aineen) muut nimet	2,2'-[[[metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanoli Etanoli, 2,2'-[[[metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bis-:n ja veden reaktiomassa Etanoli, 2,2'-[[[metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bis- (9CI) isomeeriseos
(Aineen) EY-numero EY-nimi EY-kuvaus	Aineella ei ole EY-numeroa, sillä isomeerien seosta ei ole merkitty EINECS-luetteloon. Ainesosien (279-502-9, 279-501-3) EINECS-numerot kattavat kuitenkin aineen.
(Aineen) CAS-numero CAS-nimi	ei saatavilla ei saatavilla
EY-numero (ainesosa A) EY-nimi EY-kuvaus	279-502-9 2,2'-[[[4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanoli /
EY-numero (ainesosa B) EY-nimi EY-kuvaus	279-501-3 2,2'-[[[4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanoli /
CAS-numero (ainesosa A) CAS-nimi	80584-89-0 Etanoli, 2,2'-[[[4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bis-
CAS-numero (ainesosa B) CAS-nimi	80584-88-9 Etanoli, 2,2'-[[[4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bis-
Muu tunnistekoodi Viite	ENCS-numero 5-5917

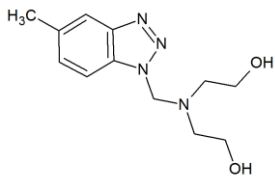
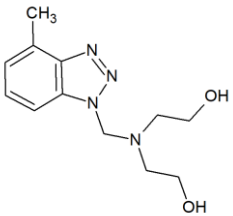
2. Koostumustiedot – pääainesosat

Pääainesosat						
	IUPAC-nimi	CAS-numero	EY-numero	Molekyylikaava Hillin menetelmä	Ominaispitoisuus (% p/p)	Pitoisuuksien vaihteluväli (% p/p)
A	Etanoli, 2,2'-[[[(4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	Etanoli, 2,2'-[[[(4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Pääainesosat	
	Muut nimet
A	2,2'-[[[(4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanoli
B	2,2'-[[[(4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanoli

Pääainesosat		
	EY-nimi	EY-kuvaus
A	2,2'-[[[(4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanoli	/
B	2,2'-[[[(4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bisetanoli	/

Pääainesosat		
	CAS-nimi	CAS-numero
A	Etanoli, 2,2'-[[[(4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bis-	80584-89-0
B	Etanoli, 2,2'-[[[(4-metyyli-1H-bentsotriatsoli-1-yl)metyyli]imino]bis-	80584-88-9

Pääainesosat			
	Molekyylikaava, CAS-menetelmä	Rakennekaava	SMILES-koodi
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Pääainesosat		
	Molekyylipaino [g/mol-1]	Molekyylipainoalue
A	250	/
B	250	/

7.4. Hajuste AH

Hajuste AH koostuu gamma-(iso-alfa)-metyylijononista ja sen isomeereista. Sitä tuotetaan kolmea laatua (A, B ja C), jotka eroavat isomeerien suhteen perusteella.

Seuraavassa taulukossa esitetään yleiskuvaus eri laatujen koostumuksesta.

Hajusteen AH eri laatujen koostumus				
Pitoisuusalue [%]	Laatu A	Laatu B	Laatu C	Kokonaisvaihteluväli
gamma-(iso-alfa)-metyylijononi	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta-(iso-beta)-metyylijononi	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa-n-metyylijononi	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma-n-metyylijononi	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0,5-4
beta-n-metyylijononi	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15	0,5-15
pseudo-metyylijononit	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3	0,5-3

Aineen yksilöimiseksi on useita vaihtoehtoja:

- Laatu A sisältää vähintään 80-prosenttisesti gamma-(iso-alfa)-metyylijononi-isomeeria, ja sitä voidaan pitää yhdestä ainesosasta koostuvana aineena, joka muodostuu gamma-(iso-alfa)-metyylijononi-isomeerista ja muista isomeereista epäpuhtauksina.
- Laadut B ja C sisältävät alle 80 prosenttia gamma-(iso-alfa)-metyylijononi-isomeeria ja vähintään 10 prosenttia muita isomeereja. Siksi niitä voidaan pitää useammasta ainesosasta koostuvina aineina:
 - Laatu B: gamma-(iso-alfa)-metyylijononin (65-75 prosenttia) ja alfa-n-metyylijononin (10-20 prosenttia) sekä muiden epäpuhtauksina esiintyvien isomeerien reaktiomassa.
 - Laatu C: gamma-(iso-alfa)-metyylijononin (50-60 prosenttia) ja alfa-n-metyylijononin (20-30 prosenttia) sekä muiden epäpuhtauksina esiintyvien isomeerien reaktiomassa.

Koostumus vaihtelee, ja isomeerin osuus on toisinaan vähintään 10 prosenttia (jolloin sitä pidetään yleensä pääainesosana) ja toisinaan alle 10 prosenttia (jolloin sitä pidetään yleensä epäpuhtautena).

Eri laadut voidaan rekisteröidä erikseen. Tällöin tehtäisiin kolme rekisteröintiä. Tietojen samankaltaisuusvertailu (read-across) voi kuitenkin olla perusteltua.

Myös seuraavat vaihtoehdot ovat mahdollisia:

- Yksi rekisteröinti yhdestä ainesosasta koostuvana aineena, jolla on kaksi alalaatua. Tällöin alalaadut poikkeavat 80 prosentin säännöstä (ks. luku 4.2.1).

- Yksi rekisteröinti viiden isomeerin määriteltynä reaktiomassana (useammasta ainesosasta koostuva aine). Tällöin muutamat isomeerit (pääainesosat) poikkeavat 10 prosentin kynnyksarvosta, jonka mukaan pääainesosat erotetaan epäpuhtauksista (ks. luku 4.2.2).
- Yksi rekisteröinti määriteltynä reaktiomassana, jolloin kunkin isomeerin vaihteluväli kattaa koostumuksen vaihtelun alueen.

Seuraavat seikat on ehkä syytä ottaa huomioon:

- Kolmella laadulla on samat tai hyvin samankaltaiset fysikaalis-kemialliset ominaisuudet.
- Kolmella laadulla on samankaltaiset käyttö- ja altistumisskenaariot.
- Kaikilla laaduilla on sama vaaraluokitus ja -merkintä, ja käyttöturvallisuustiedotteiden ja turvallisuusraporttien sisältö on sama.
- Saatavilla olevat testitiedot (ja tulevat testit) kattavat kolmen laadun vaihtelun alueen.

Seuraavassa esimerkissä tarkastellaan viiden isomeerin reaktiomassaksi määritellyn aineen (useammasta ainesosasta koostuvan aineen) yksilöimistä. Asia on perusteltava, koska 80 prosentin säännöstä (ks. luku 4.2.1) ja 10 prosentin kynnyksarvosta poiketaan (useammasta ainesosasta koostuvan aineen määritelmä, ks. luku 4.2.2). Koska jokaista laatua tuotetaan erikseen, kunkin kolmen laadun koostumus on määriteltävä rekisteröintiaineistossa. Virallisten vaatimusten mukaan on tehtävä vähintään kaksi rekisteröintiä: 1) gamma-(iso-alfa)-metyylijononi ja 2) gamma-(iso-alfa)-metyylijononin ja alfa-n-metyylijononin reaktiomassa.

Aineen tunnistetiedot

Hajustetta AH tuotetaan kolmena laatuna (A, B ja C), joiden laadullinen koostumus on sama mutta määrällinen koostumus eri. Kaikki kolme laatua kuvaillaan useammasta ainesosasta koostuvan aineen yhdessä rekisteröintiaineistossa. Vaikka tämä viittaa siihen, ettei 80 ja 10 prosentin määritelmää sovelleta tarkasti, rekisteröiminen useammasta ainesosasta koostuvana aineena on perusteltua, sillä 1) saatavilla olevat testitiedot kattavat vaihtelun kolmessa laadussa 2) kolme laatua ovat fysikaalis-kemiallisesti hyvin samankaltaisia 3) kaikilla laaduilla on sama vaaraluokitus ja -merkintä (käyttöturvallisuustiedotteet ovat siten samat) ja 4) kolmen laadun käyttö- ja altistumisskenaariot ovat samanlaiset (ja siten kemikaaliturvallisuusraportit ovat samanlaiset).

1. Nimi ja muut tunnistetiedot

IUPAC-nimi tai muu kansainvälinen kemiallinen nimi	Seuraavien reaktiomassat: 3-metyyli-4-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yyli)but-3-en-2-oni; 3-metyyli-4-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yyli)but-3-en-2-oni; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yyli)pent-1-en-3-oni; 1-(6,6-metyyli-2-metyyleenisykloheks-1-yyli)pent-1-en-3-oni; 1-(2,6,6-trimetyyli-1-sykloheksen-1-yyli)pent-1-en-3-oni
--	--

Muut nimet	Metyylijononi-gamma laatu A Metyylijononi-gamma laatu B Metyylijononi-gamma laatu C
EY-numero	ei saatavilla
EY-nimi	/
EY-kuvaus	/
CAS-numero	ei saatavilla
CAS-nimi	/

2. Koostumustiedot – pääainesosat

Teoriassa lisäenantiomeerit ovat mahdollisia. Tässä yhteydessä analysoidaan kuitenkin seuraavat isomeerit:

Pääainesosat						
	IUPAC-nimi	CAS-numero	EY-numero	Molekyylikava Hillin menetelmä	Vähimmäispitoisuus (% p/p)	Enimmäispitoisuus (% p/p)
A	3-metyyli-4-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yl)but-3-en-2-oni	127-51-5	204-846-3	C14H22O	50	85
B	3-metyyli-4-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yyli)but-3-en-2-oni;	79-89-0	201-231-1	C14H22O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yl)pent-1-en-3-oni	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
D	1-(6,6-metyyli-2-metyyleenisykloheks-1-yl)pent-1-en-3-oni	ei saatavilla	ei saatavilla	C14H22O	0,5	4

E	1-(2,6,6-trimetyyli-1-sykloheksen-1-yl)pent-1-en-3-oni	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15
----------	--	----------	-----------	---------	-----	----

Pääainesosat**Muut nimet**

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

Pääainesosat**EY-nimi****EY-kuvaus**

A	3-metyyli-4-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yl)-3-buten-2-oni	/
B	3-metyyli-4-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yl)-3-buten-2-oni	/
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yl)pent-1-en-3-oni	/
D	1-(2,6,6-trimetyyli-1-sykloheksen-1-yl)pent-1-en-3-oni	/
E	1-(2,6,6-trimetyyli-1-sykloheksen-1-yl)pent-1-en-3-oni	/

Pääainesosat**CAS-nimi****CAS-numero**

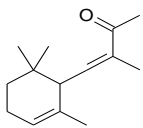
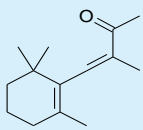
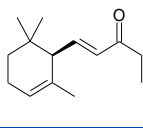
A	3-buten-2-oni, 3-metyyli-4-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yl)-	127-51-5
B	3-buten-2-oni, 3-metyyli-4-(2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yl)-	79-89-0

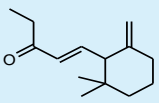
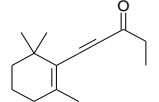
C	1-penten-3-oni, 1-[(1R)-2,6,6-trimetyyli-2-sykloheksen-1-yl]-, (1E)-	127-42-4
D	ei saatavilla	ei saatavilla
E	1-penten-3-oni, 1-(2,6,6-trimetyyli-1-sykloheksen-1-yl)-	127-43-5

Pääainesosat

	Muu tunnistekoodi	Viite
A	2714 07.036	FEMA EU:n aromiaineluettelo
B	07.041	EU:n aromiaineluettelo
C	2711 07.009	FEMA EU:n aromiaineluettelo
D	ei saatavilla	ei saatavilla
E	2712 07.010	FEMA EU:n aromiaineluettelo

Pääainesosat

	Molekyylikaava CAS-menetelmä	Rakennekaava	SMILES-koodi
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)C</chem>

D	C ₁₄ H ₂₂ O		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC
E	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

Pääainesosat

	Molekyylipaino /g mol ⁻¹	Molekyyliainoalue
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Koostumustiedot – epäpuhtaudet ja lisäaineet**Epäpuhtaudet**

	IUPAC-nimi	CAS-numero	EY-numero	Molekyylikaava	Ominaispi-toisuus (% p/p)	Pitoisuuksien vaihteluväli (% p/p)
F						
määrittelemättömien epäpuhtauksien määrä: määrittelemättömien epäpuhtauksien kokonaispitoisuus:				11 (pseudo-metyylijononit) 0,5–3 % p/p		

Lisäaineet

	IUPAC-nimi	CAS-numero	EY-numero	Molekyylikaava	Ominaispi-toisuus (% p/p)	Pitoisuuksien vaihteluväli (% p/p)
G	Butyylihydroksitolueeni (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0,1	0,05–0,15

4. Eri laatuja koskevat tiedot

Jäljempänä esitetään viiden pääainesosan kolmen eri laadun vaihteluvälit:

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

7.5. Mineraalit

Mineraali määritellään maankuoressa esiintyväksi yhdistelmäksi epäorgaanisia ainesosia. Sillä on sille ominainen kemiallinen koostumus, kidemuoto (erittäin kiteisestä amorfiseen) ja fysikaalis-kemialliset ominaisuudet.

Mineraalit on vapautettu rekisteröintivelvollisuudesta, jos ne ovat luonnossa esiintyvää ainetta koskevan määritelmän mukaisia (REACH-asetuksen 3 artiklan 39 kohta) ja jos niitä ole muunnettu kemiallisesti (REACH-asetuksen 3 artiklan 40 kohta). Tämä koskee mineraaleja, joiden kemiallinen rakenne pysyy muuttumattomana, vaikka se olisi käynyt läpi kemiallisen prosessin tai käsittelyn taikka sitä olisi käsitelty fysikaalis-mineralogisessa muuntoprosessissa, esimerkiksi epäpuhtauksien poistamiseksi.

Jotkin mineraalit voidaan yksilöidä niiden kemiallisen koostumuksen perusteella (ks. yhdestä ja useammasta ainesosasta koostuva aine, luvut 4.2.1 ja 4.2.2), kun taas joidenkin mineraalien kemiallinen koostumus ei yksinään riitä tällaisten aineiden yksilöimiseksi (ks. luku 4.2.3).

Toisin kuin muut yhdestä tai useammasta ainesosasta koostuvat aineet, useat mineraalit on yksilöitävä niiden kemiallisen koostumuksen ja (esim. röntgendiffraktion avulla määritetyn) sisäisen rakenteen perusteella, sillä ne kuvaavat yhdessä mineraalin sisältöä ja määrittävät

sen fysikaalis-kemialliset ominaisuudet.

Kuten muidenkin useammasta ainesosasta koostuvien aineiden yhteydessä, myös mineraalin yksilöimisessä on käytettävä CAS-numeroa (ts. epäorgaanisten ainesosien yhdistelmä). Epäorgaanisten ainesosien (sitien kuin ne on määritelty systemaattisessa mineralogiassa) CAS-numeroita käytetään kuvaamaan eri ainesosia. Yksittäisen epäorgaanisen ainesosan (yhdestä ainesosasta koostuvan aineen) valmistuksessa aine on yksilöitävä kyseisen aineen CAS-numeron perusteella. Esimerkiksi:

- Kaoliini-mineraali (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) koostuu periaatteessa primäärisistä ja sekundäärisistä kaoliiniiteista (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), jotka ovat hydratoitua alumiinisilikaattisavea.

Jos kaoliinia käsitellään jalostusprosessissa kaoliinin yhden ainesosan, esim. kaoliiniittien, valmistamiseksi, aineen CAS-/EINECS-numero olisi EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Bentoniitti-mineraali (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), jonka kuvaus EINECS-luettelossa on "Kolloidisavi. Koostuu pääasiassa montmorilloniitista.", sisältää suuren määrän epäorgaanista ainesosaa, jonka nimi on montmorilloniitti (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), mutta ei vain sitä.

Jos tuotetaan puhdasta montmorilloniittia (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), olisi käytettävä CAS-numeroa, jotta aine voidaan yksilöidä montmorilloniitiksi.

On korostettava, että bentoniittia (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) ja montmorilloniittia (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) ei pidetä samana aineena.

Päätelmänä voidaan todeta, että mineraali nimetään yleensä sen epäorgaanisen ainesosan tai epäorgaanisten ainesosien mukaan. Niitä voidaan pitää yhdestä tai useammasta ainesosasta koostuvina aineina (ks. lukujen 4.2.1 ja 4.2.2 yleiset ohjeet). Joitakin mineraaleja ei voida yksilöidä niiden kemiallisen koostumuksen perusteella, vaan niiden riittävän tarkka yksilöiminen edellyttää, että fysikaalisia ominaisuuksia tai käsittelyparametreja luonnehditaan tarkemmin (ks. luku 4.2.3). Seuraavassa taulukossa esitetään muutamia esimerkkejä.

Esimerkkejä mineraaleista

Nimi	CAS	EINECS	Lisäkuvaus
Kristobaliitti	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (kidejärjestelmä: kuutiollinen/tetragoninen)
Kvartsi	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (kidejärjestelmä: trigoninen/heksagonaalinen)
Piimaa	61790-53-2	-	Kutsutaan myös diatomiitiksi ja Celiteksi Kuvaus: Pehmeä, piipitoinen kiintoaine, joka koostuu pienien esihistoriallisten vesikasvien runkoaineksesta. Sisältää pääasiassa piitä.
Dolomiitti	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Maasälpäryh män mineraalit	68476-25-5	270-666-7	Epäorgaaninen aine, joka on korkeassa lämpötilassa kalsinoimalla saatu tuote, joka sisältää vaihtelevia määriä alumiinioksidia, bariumoksidia, kalsiumoksidia, magnesiumoksidia, piioksidia ja strontiumoksidia, jotka ovat sekoittuneet homogeenisesti ja ionisesti kiteiseksi matriisiksi.
Talkki	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Vermikuliitti	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)

Mineraaleilta vaaditut analyysitiedot

Alkuainekokoonpano	Kemiallisen koostumuksen perusteella saadaan yleiskuva mineraalin koostumuksesta riippumatta ainesosien määrästä ja niiden pitoisuuksista mineraalissa. Oksideista ilmaistaan kemiallinen koostumus.
Spektritiedot (XRD tai vastaava)	Röntgendiffraktiolla tai muilla tekniikoilla voidaan yksilöidä mineraaleja niiden kidehilarakenteen perusteella. Tyypillinen XRD tai sopivat vaihtoehtoiset tiedot, joiden avulla mineraali yksilöidään, ilmoitetaan yhdessä analyysimenetelmän lyhyen kuvauksen tai kirjallisuusviitteen kanssa.
Tyypilliset fysikaalis-kemialliset ominaisuudet	Mineraaleilla on tyypillisiä fysikaalis-kemiallisia ominaisuuksia, joiden avulla niiden yksilöinti voidaan saattaa loppuun. Tällaisia ovat: <ul style="list-style-type: none"> - - hyvin alhainen kovuus - - paisumiskyky - - diatomiitin muodot (optinen mikroskooppi) - - erittäin suuri tiheys - - pinta-ala (typpiadsorptio).

7.6. Eteerinen öljy Lavandin grosso

Eteeriset öljyt ovat kasveista saatavia aineita. Näin ollen eteerisiä öljyjä voidaan myös luonnehtia kasviperäisiksi aineiksi.

Kasviperäiset aineet ovat yleensä monimutkaisia luonnonaineita, jotka on saatu soveltamalla kasviin tai sen osiin uuttamisen, tislauksen, pusertamisen, jakotislauksen, puhdistamisen, tiivistämisen tai käyttämisen kaltaista käsittelyä. Tällaisten aineiden koostumus vaihtelee kohteensa suvun, lajin, kasvuolosuhteiden ja korjuuajan sekä käsittelyprosessin mukaan.

Eteeriset öljyt voidaan määrittellä pääainesosiensa mukaan, kuten useammasta ainesosasta koostuvat aineet yleensäkin. Eteeriset öljyt voivat kuitenkin koostua jopa useasta sadasta ainesosasta, jotka voivat vaihdella merkittävästi useiden seikkojen (esim. suku, laji, kasvuolosuhteet, korjuu-aika, käytetyt prosessit) mukaan. Siksi pääainesosien kuvaus ei yleensä ole riittävä tällaisten UVCB-aineiden yksilöimiseksi. Eteerisiä öljyjä on kuvailtava kasvilähteen ja käsittelyprosessin mukaan, kuten on esitetty luvussa 4.3.1 (käyttämällä UVCB:n alalajia 3).

Eteerisiä öljyjä varten on usein saatavilla teollisia standardeja (monien eteeristen öljyjen osalta myös ISO-standardeja). Standardeja koskevia tietoja voidaan esittää lisätietoina. Aineen yksilöinnin on kuitenkin perustuttava valmistettuun aineeseen.

Jäljempänä esitetyssä esimerkissä kuvaillaan "eteeristä öljyä nimeltä Lavandin grosso", josta on laadittu ISO-standardi (ISO 8902-1999).

1. Nimet ja muut tunnistetiedot

Lähde

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

Prosessi

Aineen valmistamiseen käytettyjen (bio)kemiallisten reaktioprosessien kuvaus:

Lavandula hybrida grosson (Lamiaceae) kukintojen vesihöyrytisläus ja veden erottaminen eteerisestä öljystä.

Erottaminen on spontaani fysikaalinen prosessi, joka tapahtuu yleensä erottimessa (keittopullossa), jonka avulla öljy on helppo eristää. Tislausprosessin tässä vaiheessa lämpötila on noin 40 °C.

Nimi

IUPAC-nimi tai muu kansainvälinen kemiallinen nimi	<i>Lavandula hybrida grosson</i> (Lamiaceae) eteerinen öljy
EY-numero EY-nimi EY-kuvaus	297-385-2 Laventeli, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , uute Uuttuvat aineet ja niiden fysikaalisesti muunnetut johdannaiset, kuten tinktuurat, jähmeät uutteen (concretes), vahaa poistamalla saadut nesteet (absolutes), eteeriset öljyt, oleohartsit, terpeenit, terpeenittömät jakeet, tisleet, jäännökset jne., joita saadaan seuraavasta: <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³¹ .
CAS-numero CAS-nimi	93455-97-1 Laventeli, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , uute

³¹ "Labiatae" ja "Lamiaceae" ovat synonyymeja.

2. Koostumustiedot – tunnetut ainesosat

Tunnetut ainesosat					
	Kemiallinen nimi EY CAS IUPAC muu	Numero EY CAS	mol Molekyyli kaava Hillin menetel mä	Ominaispit oisuus % (p/p)	Pitoisuuk sien vaihteluv äli % (p/p)
A	EY linalyyliasettaatti CAS 1,6-oktadien-3-oli, 3,7- dimetyyli-, asetaatti IUPAC 3,7-dimetyyliokta-1,6-dien- 3-yyliasettaatti	EY 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
B	EY linalooli CAS 1,6-oktadien-3-oli, 3,7- dimetyyli- IUPAC 3,7-dimetyyliokta-1,6-dieeni- 3-oli	EY 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24 – 35
C	EY bornan-2-oni CAS bisyklo[2.2.1] heptan-2-oni, 1,7,7-trimetyyli- IUPAC 1,7,7- trimetyyllibisyklo[2.2.1]-2- heptanoni Muu kamferi	EY 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
D	EY sineoli CAS 2-oksabisyklo [2.2.2]oktaani, 1,3,3-trimetyyli- IUPAC 1,3,3-trimetyyli-2- oksabisyklo[2.2.2]oktaani Muu 1,8-sineoli	EY 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7

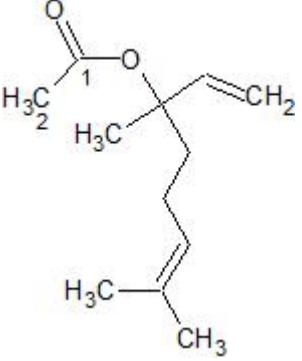
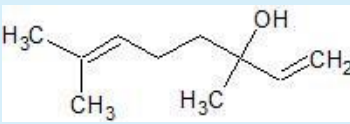
E	<p>EY p-ment-1-en-4-oli</p> <p>CAS 3-sykloheksen-1-oli, 4-metyyli-1-(1-metyylietyyli)-</p> <p>IUPAC 1-(1-metyylietyyli)-4-metyyli-3-sykloheksen-1-oli</p> <p>Muu terpineeni-4-oli</p>	<p>EY 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5-5
F	<p>EY 2-isopropenyli-5-metyyliheks-4-enyyliasettaatti</p> <p>CAS4-heksen-1-oli, 5-metyyli-2-(1-metyylietenyyli)-, asetaatti</p> <p>IUPAC 2-(1-metyylietenyyli)-5-metyyliheks-4-en-1-oli</p> <p>Muu (±)-Lavanduloliasetaatti</p>	<p>EY 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5-3
G	<p>EY DL-borneoli</p> <p>CAS bisyklo[2.2.1]heptan-2-oli, 1,7,7-trimetyyli-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetyylibisyklo[2.2.1]heptan-2-oli</p> <p>Muu borneoli</p>	<p>EY 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5-3
H	<p>EY karyofylleeni</p> <p>CAS bisyklo[7.2.0]undekan-4-eeni, 4,11,11-trimetyyli-8-metyyleeni-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC(1R,4E,9S)-4,11,11-trimetyyli-8-metyyleeni bisyklo[7.2.0]undekan-4-eeni</p> <p>Muut trans-beta-karyofylleeni</p>	<p>EY 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1-2,5

I	EY (E)-7,11-dimetyyli-3-metyyleenidodeka-1,6,10-trieeni CAS 1,6,10-dodekatrieeni, 7,11-dimetyyli-3-metyyleeni-, (6E)- IUPAC (E)-7,11-dimetyyli-3-metyyleeni-1,6,10-dodekatrieeni Muut trans-beta-farneseeni	EY 242-582-0 CAS 18794-84-8	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2-2
J	EY (R)-p-menta-1,8-dieeni CAS sykloheksen, 1-metyyli-4-(1-metyylietenyyli)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-metyyli-4-(1-metyylietenyyli)syklohekseeni Muut limoneeni	EY 227-813-5 CAS 5989-27-5	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5-1,5
K	EY 3,7-dimetyyliokta-1,3,6-trieeni CAS 1,3,6-oktatrieeni, 3,7-dimetyyli- IUPAC 3,7-dimetyyliokta-1,3,6-trieeni Muut cis-beta-osimeeni	EY 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5-1,5

Tunnetut ainesosat ≥ 10 %

Tunnetut ainesosat		
	EY-nimi	EY-kuvaus
A	linalyyliasettaatti C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	linaloli C ₁₀ H ₁₈ O	

Tunnetut ainesosat		
	CAS-nimi	Asiaan liittyvät CAS-numerot
A	linalyyliasettaatti C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linaloli C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Tunnetut ainesosat			
	Molekyylikaava CAS-menetelmä	Rakennekaava	SMILES-koodi
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Tunnetut ainesosat		
	Molekyylipaino	Molekyylipainoalue
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Krysanteemiöljy ja siitä eristetyt isomeerit

Yritys valmistaa krysanteemiöljyä, joka on saatu *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositaeen kukintojen ja lehtien murskaamisen jälkeen uuttamalla käyttäen liuotinta, joka koostuu veden ja etanolin seoksesta (1:10). Uuttamisen jälkeen liuotin poistetaan ja "puhdasta" uutetta jalostetaan jatkokäsittelyssä, jonka tuloksena saadaan lopullinen krysanteemiöljy.

Uutteesta eristetään lisäksi kaksi isomeeria seuraavien reaktiomassana:

jasmoliini I:

(Syklopropanikarboksyylihappo, 2,2-dimetyyli-3-(2-metyyli-1-propenyli)-, (1S)-2-metyyli-4-okso-3-(2Z)-2-pentenyli-2-syklopenten-1-yyliesteri, (1R,3R)-; CAS-numero 4466-14-2), ja

jasmoliini II

(Syklopropanikarboksyylihappo, 3-[(1E)-3-metoksi-2-metyyli-3-okso-1-propenyli]-2,2-dimetyyli-, (1S)-2-metyyli-4-okso-3-(2Z)-2-pentenyli-2-syklopenten-1-yyliesteri, (1R,3R)-; CAS-numero 1172-63-0

Yritys on päättänyt myös syntetisoida jasmoliini I:n ja II:n isomeerisen reaktiomassan.

Yritys kysyy seuraavaa:

1. Miten krysanteemiöljy yksilöidään rekisteröintiä varten?
2. Kattaako öljyn rekisteröinti eristettyjen isomeerien jasmoliini I:n ja II:n reaktiomassan?
3. Voidaanko kahden isomeerin syntetisoitua seosta ja krysanteemiöljystä eristettyjen isomeerien seosta pitää samana seoksena?

1. Miten krysanteemiöljy yksilöidään rekisteröintiä varten?

Krysanteemiöljyä pidetään UVCB-aineena, jota ei voida yksilöidä riittävän tarkasti sen kemiallisen koostumuksen perusteella (ks. yksityiskohtaiset ohjeet luvusta 4.3). Muut yksilöintiparametrit, kuten lähde ja prosessi, ovat ehdottoman tärkeitä. Krysanteemiöljy on biologista alkuperää oleva aine, joka on yksilöitävä niiden lajien ja organismin osien perusteella, joista sitä saadaan, sekä jalostusprosessin perusteella (uuttaminen käyttämällä liuotinta). Ainesosien kemiallinen koostumus ja tunnistetiedot on kuitenkin ilmoitettava siltä osin kuin ne ovat tiedossa.

Seuraavat tiedot ovat välttämättömiä, jotta aine voidaan yksilöidä riittävän tarkasti:

Aineen nimi	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i>, Compositae; murskatuista kukinnoista ja lehdistä veden ja etanolin (1:10) avulla uuttamalla saatu öljy
Lähde	
Suku, laji, alalaji	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae
Öljyyn käytetty kasvin osa	Kukinnot ja lehdet

Prosessi				
Valmistusmenetelmä	Murskaus ja uuttaminen			
Uuttamisessa käytetty liuotin	Vesi ja etanoli (1:10)			
Koostumustiedot – tunnetut ainesosat % (p/p)				
Ainesosan nimi	EY-nro	CAS-nro	Min %	Max %
Pyretriini I: 2-metyyli-4-okso-3-(penta-2,4-dienyyli)syklopent-2-enyyli [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-krysantemaatti	204-455-8	121-21-1	30	38
Pyretriini II: 2-metyyli-4-okso-3-(penta-2,4-dienyyli)syklopent-2-enyyli [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-metoksi-2-metyyli-3-oksoprop-1-enyyli)-2,2-dimetyylisyklopropanikarboksylaatti	204-462-6	121-29-9	27	35
Sineriini I: 3-(but-2-enyyli)-2-metyyli-4-oksosyklopent-2-enyyli 2,2-dimetyyli-3-(2-metyyliprop-1-enyyli)syklopropanikarboksylaatti	246-948-0	25402-06-6	5	10
Sineriini II: 3-(but-2-enyyli)-2-metyyli-4-oksosyklopent-2-enyyli 2,2-dimetyyli-3-(3-metoksi-2-metyyli-3-oksoprop-1-enyyli)syklopropanikarboksylaatti	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmoliini I: 2-metyyli-4-okso-3-(pent-2-enyyli)syklopent-2-enyyli [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetyyli-3-(2-metyyliprop-1-enyyli)syklopropanikarboksylaatti	ei ole	4466-14-2	4	10

Jasmoliini II: 2-metyyli-4-okso-3-(pent-2- enyyli)syklopent-2-en-1-yyli [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]- 2,2-dimetyyli-3-(3-metoksi-2- metyyli-3-oksoprop-1- enyyli)syklopropanikarboksylaatti	ei ole	1172-63-0	4	10
Aine sisältää lisäksi enintään 40 ainesosaa, joiden pitoisuus on alle 1 prosenttia.				

Aine voidaan yksilöidä myös tarkasti määritellyksi useammasta ainesosasta koostuvaksi aineeksi, jolla on kuusi pääaineesosaa (pyretriini I:n, pyretriini II:n, sineriini I:n, sineriini II:n, jasmoliini I:n ja jasmoliini II:n reaktiomassaksi).

Ainetta pidettäisiin "luonnossa esiintyvänä aineena", jos valmistusmenetelmä on ainoastaan "murskaaminen", ja se vapautettaisiin rekisteröintivelvollisuudesta, jollei se täytä direktiivin 67/548/ETY mukaisia vaaralliseksi luokittelun kriteerejä.

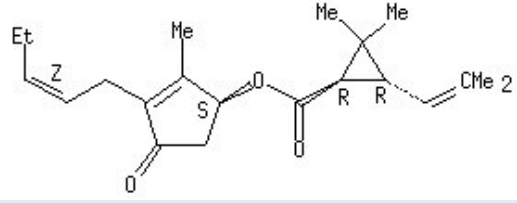
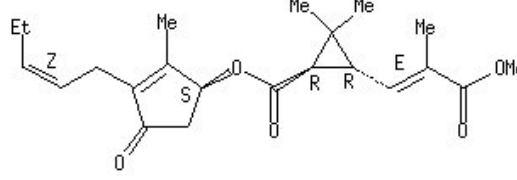
2. Kattaako öljyn rekisteröinti eristettyjen isomeerien jasmoliini I:n ja II:n reaktiomassan?

"*Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae oilin" rekisteröinti ei kata eristettyjen isomeerien jasmoliini I:n ja II:n reaktiomassaa, sillä UVCB-aine ei kata yksittäisiä ainesosia ja päinvastoin. Jasmoliini I:n ja II:n reaktiomassaa pidetään eri aineena.

Jasmoliini I:n ja II:n reaktiomassaa voidaan pitää useammasta ainesosasta koostuvana aineena (ks. yksityiskohtainen ohje luvusta 4.2.3), jossa on kaksi pääaineesosaa.

Seuraavat tiedot ovat välttämättömiä, jotta aine voidaan yksilöidä riittävän tarkasti:

Aineen IUPAC-nimi	Seuraavien reaktiomassat: 2-metyyli-4-okso-3-(pent-2-enyyli)syklopent-2-enyyli [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimetyyli-3-(2-metyyli-3- enyyli)syklopropanikarboksylaatti) ja 2-metyyli-4-okso-3-(pent-2-enyyli)syklopent-2-en-1-yyli [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetyyli-3-(3-metoksi-2-metyyli-3- oksoprop-1-enyyli)syklopropanikarboksylaatti)
Muu nimi	Jasmoliini I:n ja II:n reaktiomassa
Aineen puhtaus	95–98 % (p/p)
Koostumustiedot – pääaineesosat % (p/p)	

Ainesosan nimi	EY-nro	CAS-nro	Min %	Max %
Jasmoliini I: 2-metyyli-4-okso-3-(pent-2-enyyli)syklopent-2-enyyli [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetyyli-3-(2-metyyliprop-1-enyyli)syklopropanikar boksylaatti	ei ole	4466-14-2	40	60
Molekyylikaava				
Rakennekaava Molekyylipaino		C ₂₂ H ₃₀ O ₅ M = 374 g/mol		
Jasmoliini II: 2-metyyli-4-okso-3-(pent-2-enyyli)syklopent-2-en-1-yyli [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetyyli-3-(3-metoksi-2-metyyli-3-oksoprop-1-enyyli)syklopropanikar boksylaatti	ei ole	1172-63-0	35	65
Molekyylikaava				
Rakennekaava Molekyylipaino		C ₂₁ H ₃₀ O ₃ M = 330 g/mol		

3. Voidaanko kahden isomeerin syntetisoitua seosta (reaktiomassaa) ja krysantheemiöljystä eristettyjen isomeerien seosta pitää samana seoksena?

Jos kyse on kemiallisesti tarkasti määritellyistä aineista, joita voidaan kuvailla riittävän tarkasti ainesosien perusteella, on merkityksentöntä, onko aine eristetty uutteesta vai syntetisoitu kemiallisessa prosessissa. Jasmoliini I:n ja II:n syntetisoitua reaktiomassaa voidaan siten pitää samana aineena kuin Chrysanthemumista eristettyä isomeeriseosta, vaikka ne olisi saatu käyttämällä eri valmistusprosesseja, mikäli seoksen puhtaus ja pääainesosien pitoisuusalue ovat samat.

4. Päätelmä

Tarkastellut kaksi ainetta yksilöidään seuraavasti:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; murskatuista kukinnoista ja lehdistä veden ja etanolin (1:10) avulla uuttamalla saatu öljy
2. Isomeerien jasmoliini I:n ja jasmoliini II:n reaktiomassa aineen valmistusprosessista riippumatta.

Jos edellä mainittuja aineita käytetään *ainoastaan* kasvinsuojelu- ja biosidituotteissa, niitä pidetään REACH-asetuksen (15 artiklan) nojalla rekisteröitävinä aineina.

7.8. Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti

Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti (3:1) on UVCB-aine, jonka isopropyloidun osan vaihtelevuutta ei voida määrittää täysin.

1. Nimi ja muut tunnistetiedot

IUPAC-nimi tai muu kansainvälinen kemiallinen nimi	Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti (3:1)
Muut nimet	Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti (3:1) (kun propyleenin ja fenolin moolisuhde on 1:1)
EY-numero	273-066-3
EY-nimi	Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti (3:1)
EY-kuvaus	/
CAS-numero	68937-41-7
CAS-nimi	Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti (3:1)

2. Koostumustiedot – pääainesosat

Pääainesosat					
IUPAC-nimi	CAS-numero	EY-numero	Molekyylik aava Hillin menetelmä	Ominaispi toisuus (% p/p)	Pitoisuuk sien vaihteluv äli (% p/p)
Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Määrittelem ätön		

Pääainesosat	
EY-nimi	EY-kuvaus
Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti (3:1)	/
CAS-nimi	CAS-numero
Fenoli, isopropyloitu, fosfaatti (3:1)	68937-41-7

7.9. Kvaternaariset ammoniumyhdisteet

Yritys syntetisoi seuraavia aineita:

Aine A

Kvaternaariset ammoniumyhdisteet, di-C₁₀₋₁₈-alkyyliidimetyyli, kloridit

EY-numero 294-392-2

CAS-numero 91721-91-4

Hiiliketjun pituuksien jakauma:

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

Kvaternaariset ammoniumyhdisteet, dikookosalkyyliidimetyyli, kloridit

EY-numero 263-087-6

CAS-numero 61789-77-3

Yritys ei tiedä aineen tarkkaa koostumusta.

Aine C

Didodekyylidemetyyliammoniumbromidi

Aine D

Didodekyylidimetyyliammoniumkloridi

Aine E

Ainetta E valmistetaan didodekyylidimetyyliammoniumbromidin ja didodekyylidimetyyliammoniumkloridin reaktiomassana (aineen C ja D reaktiomassana).

Aine F

Kvaternaariset ammoniumyhdisteet, di-C₁₄₋₁₈-alkyylidimetyyliammonium, kloridit

EY-numero 268-072-8

CAS-numero 68002-59-5

Hiiliketjun pituuksien jakauma:

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

Aine G

Kvaternaariset ammoniumyhdisteet, di-C₄₋₂₂-alkyylidimetyyli, kloridit

Hiiliketjun pituuksien jakauma (yksinkertainen indeksointipilkku viittaa kaksoissidokseen, kaksinkertainen indeksointipilkku yhteen kolmoissidokseen):

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

Yritys käyttää nimeämiseen toistaiseksi ainoastaan ainetta B (kvaternaariset ammoniumyhdisteet, dikookosalkyylidimetyylikloridit, EY-numero 263-087-6, CAS-numero 61789-77-3), sillä se soveltuu parhaiten kaikille aineille (aineet A–G). Yritys haluaa tietää, voidaanko kaikki aineet (A–G) kattaa yhdellä aineen B rekisteröinnillä.

1. Yleiset huomautukset

Rasvoista ja öljyistä tai synteettisistä substituuteista johdettujen hiilivetyjen (parafiinit, olefiinit) yksilöinnin perustana käytetään hiiliketjun pituuksien jakaumaa, alkuperää (alkyylikuvaaja), toiminnallista ryhmää (toiminnallisuuskvaaja), esim. ammonium, ja anioneja/kationeja (suolakuvaaja), esim. kloridi. Ketjun pituuden jakauma, kuten C₈₋₁₈, viittaa siihen, että aine on

tydyttynyt

lineaarinen (haarautumaton)

ja sisältää kaikki hiililuvut (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈), kun taas kapea jakauma ei kata laajaa vaihteluväliä ja päinvastoin.

Muutoin aine on ilmoitettava seuraavasti:

tydyttymätön (C₁₆ tyydyttymätön)

haaroittunut (C₁₀ haaroittunut)

parillinen (C₁₂₋₁₈ parillinen)

Alkuperän mukaan määriteltyjen hiiliketjujen on katettava lähteen jakauma, esim. talialkyyliamiinit.

Talialkyyliamiinit ovat 99-prosenttisesti primaarisia lineaarisen ketjun alkyyliamiineja, joiden hiiliketjun pituuden jakauma on seuraava (Ullmann, 1985) [yksinkertainen indeksointipilkku viittaa kaksoissidokseen, kaksinkertainen indeksointipilkku yhteen kolmoissidokseen]:

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

2. Miten krysanteemiöljy yksilöidään rekisteröintiä varten?

Jokaista ainetta verrataan aineeseen B (jota on käytetty toistaiseksi nimeämiseen) sen määrittämiseksi, voidaanko näitä kahta ainetta pitää samana aineena.

Aineiden A ja B vertaaminen

Aineen B kookoksen hiiliketjun pituuksien jakauma voi olla seuraava (Ullmann, 1985) [yksinkertainen indeksointipilkku viittaa kaksoissidokseen, kaksinkertainen indeksointipilkku yhteen kolmoissidokseen]:

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

Aineen A hiiliketjun pituuksien jakauma poikkeaa siten aineen B kookoksen hiiliketjun pituuksien jakaumasta. Koska näiden kahden aineen laadullinen ja määrällinen koostumus poikkeaa toisistaan merkittävästi, niitä ei voida pitää samana aineena.

Aineiden B ja C vertaaminen

Aine B "kvaternaariset ammoniumyhdisteet, dikookosalkyyliidimetyyli, kloridit" on sellaisten ainesosien seos, joiden hiiliketjujen pituudet vaihtelevat (C₆–C₁₈ parillinen, lineaarinen, tyydyttynyt ja tyydyttymätön), kun taas aine C muodostuu vain yhdestä ainesosasta, jolla on yksi määritelty ja tyydyttynyt hiiliketju (C₁₂) ja eri anioni (bromidi). Siksi aineita C ja B ei voida pitää samana aineena.

Aineiden B ja D vertaaminen

Aine B "kvaternaariset ammoniumyhdisteet, dikookosalkyyliidimetyyli, kloridit" on sellaisten ainesosien seos, joiden hiiliketjujen pituudet vaihtelevat (C₆–C₁₈ parillinen, lineaarinen, tyydyttynyt ja tyydyttymätön), kun taas aine D muodostuu vain yhdestä ainesosasta, jolla on yksi määritelty ja tyydyttynyt hiiliketju (C₁₂) ja sama anioni (kloridi). Aineilla B ja D on eri nimet, eikä niitä voida pitää samana aineena, sillä tiettyä ainesosaa sisältävä seos ei kata yksittäistä ainesosaa ja päinvastoin.

Aineiden B ja E vertaaminen

Aine E on aineiden C ja D seos. Molemmilla on tyydyttynyt hiiliketju, jonka pituus on C₁₂, mutta niillä on eri anionit (bromidi ja kloridi). Aine B "kvaternaariset ammoniumyhdisteet, dikookosalkyyliidimetyyli, kloridit" on sellaisten ainesosien seos, joiden hiiliketjujen pituudet vaihtelevat (C₆–C₁₈ parillinen, lineaarinen, tyydyttynyt ja tyydyttymätön) ja jotka sisältävät anionina kloridin. Aine E määritellään kuitenkin siten, että sen hiiliketjun pituus on C₁₂ ja se sisältää bromidin lisäänionina. Siksi aineita B ja E ei voida pitää samana aineena. Aine E on siten rekisteröitävä erikseen.

Aineiden B ja F vertaaminen

Aine F "kvaternaariset ammoniumyhdisteet, di-C₁₄₋₁₈-alkyyliidimetyyliammonium, kloridit" on sellaisten ainesosien seos, joiden hiiliketjujen pituudet vaihtelevat (C₁₄–C₁₈ parillinen tai pariton, lineaarinen ja tyydyttynyt). Aine F poikkeaa aineesta B koostumuksen ja hiiliketjun

pituuden jakauman vaihtelualueen osalta. Aineen F hiiliketjun pituuden jakauma on kapea, ja lisäksi sillä on C₁₅- ja C₁₇-hiiliketjut. Siksi aineita B ja F ei voida pitää samana aineena.

Aineiden B ja G vertaaminen

Aineet B ja G vaikuttavat hyvin samankaltaisilta, sillä niiden hiiliketjun pituuden jakauman vaihteluväli on lähes sama. Aine G sisältää kuitenkin lisäksi hiiliketjun pituudet C₄, C₂₀ ja C₂₂. Aineen G hiiliketjun pituuksien jakauma kattaa siten laajemman vaihteluvälin kuin aineen B. Siksi aineita B ja G ei voida pitää samana aineena.

3. Päätelmä

Hiilivetyjä (parafiinit, olefiinit) voidaan pitää samana aineena vain, jos kaikki kolme kuvaajaa (alkyyli, toiminnallisuus ja suola) ovat samoja.

Edellä esitetystä esimerkistä kuvaajat poikkeavat kulloinkin toisistaan. Siksi aineen B rekisteröinti ei kata kaikkia aineita.

7.10. Maaöljyn ainesosat

Luvun 4.3.2 erityisiä UVCB-aineita koskevien ohjeiden pohjalta esitetään kaksi esimerkkiä.

7.10.1. Bensiinisekoitus (C4-C12)

1. Nimi ja muut tunnistetiedot

Nimi

IUPAC-nimi tai muu kansainvälinen kemiallinen nimi	Teollisuusbensiini (maaöljy), katalyyttisesti reformoitu
---	--

Lähde

Virran alkuperän yksilöinti tai kuvaus	Raakaöljy
---	-----------

Prosessi

Jalostusprosessin kuvaus	Katalyyttinen reformointiprosessi
Hiililuvun vaihteluväli	C4-C12
Kiehumispisteen vaihteluväli tai raja-arvo	30-220 °C

Muut fysikaaliset ominaisuudet, esim. viskositeetti	alle 7 mm ² /s 40 °C:ssa (viskositeetti)
EY-numero	273-271-8
CAS-numero	68955-35-1
EY-nimi/CAS-nimi	Teollisuusbensiini (maaöljy), katalyyttisesti reformoitu
EY-kuvaus/CAS-kuvaus	Katalyyttisen reformointiprosessin tuotteita tislaamalla saatu hiilivetyjen monimutkainen seos. Koostuu hiilivedyistä, joiden hiililuku on pääasiassa välillä C4–C12 ja jotka kiehuvat likimäärin välillä 30–220 °C (90–430°F). Sisältää suhteellisen suuren osan aromaattisia hiilivetyjä, joiden ketjut ovat haarautuneita. Tämä virta saattaa sisältää 10 tilavuusprosenttia tai enemmän bentseeniä.

2. Koostumustiedot

Tunnetut ainesosat			
IUPAC-nimi	CAS-numero	EY-numero	Pitoisuuksien vaihteluväli (% p/p)
Bentseeni	71-43-2	200-753-7	1-10
Tolueeni	108-88-3	203-625-9	20-25
Ksyleeni	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Kaasuöljyt (maaöljy)

1. Nimi ja muut tunnistetiedot

IUPAC-nimi tai muu kansainvälinen kemiallinen nimi	Kaasuöljyt (maaöljy), raskas atmosfäärinen
---	--

Lähde

Virran alkuperän yksilöinti tai kuvaus	Raakaöljy
---	-----------

Prosessi

Jalostusprosessin kuvaus	Atmosfäärinen tislau
Hiililuvun vaihteluväli	C7–C35
Kiehumispisteen vaihteluväli tai raja-arvo	121–510 °C
Muut fysikaaliset ominaisuudet, esim. viskositeetti	20 mm ² /s 40 °C:ssa (viskositeetti)
EY-numero CAS-numero EY-nimi/CAS-nimi EY-kuvaus/CAS-kuvaus	272-184-2 68783-08-4 Kaasuöljyt (maaöljy), raskas atmosfäärinen Raakaöljyä tislaamalla saatu hiilivedyjen monimutkainen seos. Koostuu hiilivedyistä, joiden hiililuku on pääasiassa välillä C7–C35 ja jotka kiehuvat likimäärin välillä 121–510 °C (250–950 °F)

2. *Kemiallinen koostumus*

Tietoa ei saatavilla.

7.11. Entsyymit

Luvun 4.3.2.3 tiettyjä UVCB-aineita koskevien ohjeiden pohjalta esitetään kaksi entsyymitiivisteitä koskevaa esimerkkiä: subtilisiini (yksilöinti IUBMB-nimikkeistön + muiden ainesosien mukaan) ja α -amylaasi (yksilöinti IUBMB-nimikkeistön + valmistusorganismien mukaan)

7.11.1. Subtilisiini

Entsyymiproteiini	Subtilisiini
IUBMB-numero	3.4.21.62
IUBMB-nimikkeistön nimet (Systemaattinen nimi, entsyymin nimi, synonyymejä)	Subtilisiini alcalase; alcalase 0.6L; alcalase 2.5L; ALK-enzyme; bacillopeptidase A; bacillopeptidase B; Bacillus subtilis alkaline proteinase biopraxe; biopraxe AL 15; biopraxe APL 30; colistinase; (ks. myös huomautukset); subtilisin J; subtilisin S41; subtilisin Sendai; subtilisin GX; subtilisin E; jne.
IUBMB-nimikkeistön merkinnät	Subtilisiini on seriiniendopeptidaasi, tyyppiesimerkki peptidaasiryhmästä S8 . Se ei sisällä kysteiinin jäämiä (vaikka niitä esiintyy homologissa entsyymeissä). Lajimuunnoksia ovat: subtilisin BPN' (myös subtilisin B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse, Nagarse proteinase, subtilisin Novo, bacterial proteinase Novo ja subtilisin Carlsberg (subtilisin A, subtilopeptidase A, alcalase Novo). Aiemmin EY 3.4.4.16; sisällytetty EY-numeroon 3.4.21.14. Erilaiset <i>Bacillus subtilis</i> -kannat ja muut <i>Bacillus</i> -lajit [1,3] tuottavat samankaltaisia entsyymejä.
Reaktio	Peptididisidoksestaan spesifisten proteiinien hydrolyysi ja preferenssi suuriin varauksettomiin jäämiin P1:ssä. Hydrolysoi peptidiamideja.
Reaktiotyyppi	Hydrolaasit; vaikuttaa peptididisidoksiin (peptidaasit); Seriiniendopeptidaasit
EY-numero	232-752-2
EY-nimi	Subtilisiini
CAS-numero	9014-01-1

CAS-nimi	Subtilisiini
Entsyymiproteiinitiviste	26 %
Muut ainesosat	
muut proteiinit, peptidit ja aminohapot	39 %
Hiilihydraatit	11 %
Lipidit	1 %
Epäorgaaniset suolat	23 %
Lisäparametrit	
Substraatit ja tuotteet	proteiinit tai oligopeptidit, vesi peptidit

7.11.2. α -amylaasi

Entsyymiproteiini	α-amylaasi
IUBMB-numero	3.2.1.1
IUBMB-nimikkeistön nimet (Systemaattinen nimi, entsyymin nimi, synonyymejä)	1,4- α -D-glucan glucanohydrolase; glycogenase, α -amylase; alpha-amylase, endoamylase, Taka-amylase A.
IUBMB-nimikkeistön merkinnät	Reagoi tärkeinäineeseen, glykokeeniin ja niihin liittyviin polysakkarideihin ja oligosakkarideihin sattumanvaraisesti; α -konfiguraatiossa kehittyy pelkistäviä ryhmiä. Käsite " α " liittyy vapautuvan vapaan sokeriryhmän alkuperäiseen anomeeriseen konfiguraatioon eikä hydrolysoidun sidoksen konfiguraatioon.

Reaktio	1,4- α -D-glukoosisidosten endohydrolyysi polysakkarideissa, jotka sisältävät vähintään kolme 1,4- α -sidoksilla toisiinsa liittynyttä D-glukoosiyksikköä
Reaktiotyyppi	hydrolaasit, glykosidaasit, glykosidaasit eli entsyymit, jotka hydrolysoivat O- ja S-glykosyyliyhdisteitä
EY-numero	232-565-6
EY-nimi	Amylaasi, α -
CAS-numero	9000-90-2
Asiaan liittyvät CAS-numerot	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (kaikki poistettu)
CAS-nimi	Amylaasi, α -
Entsyymiproteiinitiviste	37 %
Muut ainesosat	
muut proteiinit, peptidit ja aminohapot	30 %
Hiilihydraatit	19 %
Epäorgaaniset suolat	14 %
Lisäparametrit	
Substraatit ja tuotteet	tärkkelysaine, glykogeeni, vesi polysakkaridi, oligosakkaridi

Liite I - Tukimateriaalia

Tämä liite sisältää luettelon verkkosivustoista, tietokannoista ja käsikirjoista, jotka voivat olla hyödyllisiä etsittäessä IUPAC-, CAS- ja EY-nimiä, CAS- ja EY-numeroita, molekyylikaavoja ja rakennekaavoja, SMILES-merkinnät ja muut aineen yksilöimiseksi tarvittavat parametrit mukaan luettuina. Tietoihin ei ole sisällytetty kaupallisia tietokantoja ja ohjausvälineitä.

Yleistä		
Aineen tunnisteparametri	Lähde	Lähteen kuvaus
U.S. Department of Health and Human Services	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Tietokantojen ja välineiden kokonaisuus, jonka avulla käyttäjät voivat hakea kemiallista tietoa aineista.
Perkin Elmer Informatics	https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	Maksuton tietokanta, josta saa tietoa kemiallisista rakenteista ja fysikaalisista ominaisuuksista ja joka sisältää hyperlinkkejä asiaan liittyviin tietoihin.
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Kemian ohjelmisto; Accord Alphabetical Product Listing

Nimi ja muut tunnistetiedot		
Aineen tunnisteparametri	Lähde	Lähteen kuvaus
IUPAC-nimi	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	IUPAC:n virallinen verkkosivu
	https://iupac.qmul.ac.uk/	IUPAC:n kemiallinen nimikkeistö ja suositukset (IUPAC:n alainen)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	IUPAC:n tärkeimmät nimikkeistöjulkaisut, päivitetty 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	IUPAC:n tärkeimmät nimikkeistöjulkaisut, päivitetty 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	IUPAC:n tärkeimmät nimikkeistöjulkaisut, päivitetty heinäkuussa 2005.
IUPAC-nimi	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	IUPAC:n tärkeimmät nimikkeistöjulkaisut
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Johdanto kaikentyypisiin yhdisteisiin
IUPAC-nimi	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Kaupallinen tietokonepohjainen nimeämishjelma, josta voi olla hyötyä suhteellisen monimutkaisten rakenteiden nimeämisessä. Saatavilla myös ilmaisohjelma pieniä molekyyliä varten (IUPAC:n suosittelema)

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Orgaanista kemiaa koskeva IUPAC:n nimikkeistö (IUPAC:n suosittelu)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Kattava luettelo hyväksytyistä orgaanisten yhdisteiden triviaalinimistä ja puolisystemaattisista nimistä
	http://www.chemexper.com/	ChemExper Chemical Directory - tietokannan tavoitteena on luoda internetiin yleinen ja maksuton kemikaalitietokanta. Tietokanta sisältää kemikaalien nimet ja niiden fysikaaliset ominaisuudet. Kuka tahansa voi antaa ja hakea kemikaaleihin liittyvää tietoa verkkoselaimella.
IUBMB-nimikkeistö	https://iubmb.qmul.ac.uk/	IUBMB:n biokemiallinen nimikkeistötietokanta (IUBMB:n alainen)
Muut nimet	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Colour Index Generic Names, Colour Index International, neljäs sähköinen painos
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients), Official Personal Care Products Councilin verkkosivu
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	US EPA:n tietokanta aineista, joiden hiiliketjun pituudet vaihtelevat (alkyylien vaihteluvälit CX-Y-koodin avulla)
Muut tunnisteet	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	CE-standardit, virallinen eurooppalainen CE-verkkosivusto
EY-numero	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	EY-luettelo, haku EINECS-, ELINCS- ja NLP-luettelosta ja direktiivin 67/548/ETY liitteestä I
CAS-numero	http://www.cas.org	CAS:n virallinen verkkosivu

	http://www.chemistry.org	American Chemical Societyn virallinen verkkosivu
--	---	--

Molekyyli- ja rakennekaava

Aineen tunnisteparametri	Lähde	Lähteen kuvaus
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html	Maksuton SMILES-generaattori
Molekyylipaino ja SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsSketch, ilmaisohjelma (saatavilla myös kaupalliseen käyttöön)
Useita fysikaalis-kemiallisia parametreja	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ on EPA:n Office of Pollution Prevention Toxicsin ja Syracuse Research Corporationin (SRC) kehittämä Windows®-pohjainen ohjelma, jonka avulla voidaan arvioida aineiden fysikaalis-kemiallisia ominaisuuksia ja aineiden käyttäytymistä ympäristössä.
Tiettyjä aineita koskevaa tukimateriaalia	Kysymyksiä ja vastauksia – ECHA Alakohtainen tuki aineen tunnistamista varten – ECHA	Tukea tiettyjen aineiden nimeämiseen ja luonnehtimisen lähestymistapoihin on ECHAN verkkosivustolla ja kysymyksissä ja vastauksissa.

Liite II - Aineen tunnisteparametreja koskeva tekninen opas

Tässä liitteessä esitetyt tiedot on tarkoitettu toimintaohjeen niille käyttäjille, jotka eivät ole perehtyneet nimikkeistön teknisiin sääntöihin, eri rekisterinumeroiden käyttöön tai molekyyli- ja rakennetietojen tai spektritietojen merkintäsääntöihin jne.

Liitteessä johdatellaan aiheeseen esittämällä yhteenveto pääperiaatteista ja neuvotaan käyttäjää, miten löytää alkuperäiset lähteet tietojen täydentämiseksi.

Tämä yhteenveto on yksinkertaistettu versio, jonka ei ole tarkoitus olla kattava eikä tyhjentävä. Tiedot eivät myöskään ole riittävän yksityiskohtaisia ammattikäyttäjän tarpeisiin. Yhteenvetoa ei tule pitää virallisena lähteenä.

1 Nimi (nimet) IUPAC-nimikkeistössä tai muussa kansainvälisessä nimikkeistössä

Rekisteröimistä varten on annettava englanninkielinen IUPAC-nimi tai muu tarkasti määritelty kansainvälisesti hyväksytty aineen nimi.

IUPAC-nimi perustuu IUPAC:n eli International Union of Pure and Applied Chemistryn määrittämään kansainvälisen standardin mukaiseen kemialliseen nimikkeistöön (ks. asiaa koskevat viitteet liitteestä 1). IUPAC:n nimikkeistön avulla voidaan nimetä järjestelmällisesti sekä orgaaniset että epäorgaaniset kemialliset aineet. IUPAC:n nimikkeistössä käytetään etuliitteitä, päätteitä ja sanan sisäisiä liitteitä aineen toiminnallisten ryhmien tyyppin ja sijainnin kuvailemiseksi.

penta-1,3-dien-1-oli, tässä esimerkissä:

etuliite on **penta-1,3-**

sanan sisäinen liite on **-di** ja

pääte on **-oli**

en- on nimen perusosa, kantanimi.

Säännöstöä on kehitetty useiden vuosien aikana, ja se muuttuu jatkuvasti, jotta otetaan huomioon uudet molekyylien ainesosat ja mahdollisesti havaitut ristiriitaisuudet tai epäselvyydet. IUPAC:n laatimia sääntöjä voidaan soveltaa ainoastaan tarkasti määriteltyihin aineisiin.

Jäljempänä esitetään IUPAC-nimen rakennetta koskevia yleisiä ohjeita. Näiden toimintaohjeiden luvussa 4 esitetyt ohjeet sisältävät yksityiskohtaisempia tietoja.

1.1 Orgaaninen aine

Vaihe 1 Määritä C-atomien määrä hiiliatomien pisimmässä jatkuvassa ketjussa. Tämän luvun perusteella muodostetaan kantanimen ensimmäinen osa eli etuliite:

Hiiliatomien määrä	Kanta
1	met-

2	et-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	heks-
7	hept-
8	okt-
N

Vaihe 2 Määritä ketjun tyydyttyneisyys. Ketjun tyydyttyneisyyden perusteella määritetään kantanimen toinen osa eli päätte:

tyydyttyneisyys	Sidokset	Pääte
Tyydyttymätön	Kaksoissidos Kolmoissidos	-eeni -yyini
Tyydyttynyt	-	-aani

Jos kyse on kaksois- tai kolmoissidoksesta, sidosten määrä merkitään sisäisellä "mono-", "di-", "tri-" jne. liitteellä ennen päätettä:

Penteeni, jossa on 2 kaksoissidosta: pentadieeni

Vaihe 3 Yhdistä etuliite, päätte ja lisäosat kantanimen

Huomautus: Kantanimenä voidaan käyttää myös IUPAC:n hyväksymiä triviaalinimiä ja puolisystemaattisia nimiä:

bentseeni, tolueni jne.

Vaihe 4 Käytä jäljempänä esitettyä taulukkoa:

- Yksilöi substituentit ja/tai toiminnalliset ryhmät: edellä 1 kohdassa yksilöityyn hiiliatomien ketjuun liittyneet hiiliryhvät tai muut ryhmät.
- Määritä aineiden ja/tai toiminnallisten ryhmien prioriteettijärjestys.
- Lisää ensimmäisen substituentin/toiminnallisen ryhmän päätte ja muiden päätteet prioriteettijärjestyksessä.
- Lisää muiden substituenttien ja toiminnallisten ryhmien etuliite aakkosjärjestyksessä.

Prioriteettijärjestys	Ryhmä	Kaava	Pääte	Etuliite
1	Carboxylic acid (karboksyylihapot)	R-COOH	oic acid (-happo)	Carboxy (karboksi)
2	Ester (esterit)	R-CO-O-R	oate (-aatti)	-
3	Amide (amidit)	R-CONH ₂	amide (-amidi)	Carbamoyl (karbamoyyli)
4	Cyanide (syanidit)	R-CN	nitrile (-nitrili)	Cyano (syaani)
5	Aldehyde (aldehydit)	R-CHO	al (-aali)	Oxo (okso)
6	Ketone (ketonit)	R-CO-O-R	-one (-oni)	Oxo (okso)
7	Alcohol (alkoholit)	R-OH	ol (-oli)	Hydroxyl (hydroksyyli)
8	Thiol (tiolit)	R-SH	-thiol (-tioli)	Sulfanyl (sulfanyyli)
9	Amine (amiinit)	R-NH ₂	amine (-amiini)	Amino (amino)

1.2 Epäorgaaninen aine

1.2.1 Yksinkertaisten epäorgaanisten aineiden nimeäminen

Epäorgaaniset aineet nimetään sovittujen sääntöjen (IUPAC red book, ks. viite kohdassa 7.1) perusteella. Perussäännöt ovat seuraavat:

1 Yksiatomiset anionit nimetään käyttämällä päätettä -ide (-idi):

O²⁻ on oksidi

2 Yksinkertaisten ioniyhdisteiden nimenä käytetään kationin nimeä, jonka perään liitetään anionin nimi. Jos kationin varaus on suurempi kuin yksi, varaukset kirjoitetaan suluisissa roomalaisilla numeroilla heti alkuaineen nimen jälkeen:

Cu²⁺ on kupari(II)

3 Hydraatit nimetään ioniyhdisteen nimen mukaan, johon liitetään numeerinen etuliite ja -hydrate (-hydraatti). Numeeriset etuliitteet ovat mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, deca- (mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, heksa-, hepta-, okta-, nona-, deka-):

CuSO₄ on "5H₂O kupari(II) sulfaattipentahydraatti"

Huomautus: Aineita rekisteröitäessä hydraatteja ja tapauksen mukaan tietyn metallisuolan vedetöntä muotoa pidetään "samoina aineina".

4 Epäorgaaniset molekyyliyhdisteet nimetään lisäämällä etuliite (ks. hydraatit) kunkin alkuaineen eteen. Aine, jolla on suurin elektronegatiivisuus, kirjoitetaan viimeiseksi ja nimeen lisätään liite -ide (-idi):

CO₂ on hiilidioksidi, ja CCl₄ on hiilitetrakloridi.

5 Hapot nimetään sen anionin mukaan, jota muodostuu, kun happo liukenee veteen. Vaihtoehtoja on useita:

Jos hapon liuetessa veteen se hajoaa anioniksi, jonka nimi on "x"--ide" ("x"-idi), happo nimetään seuraavasti: hydro-"x"-ic acid" ("x"-vetyhappo):

vetykloridihappo muodostaa kloridianionia.

Jos happo hajoaa veteen liuetessaan anioniksi, jonka nimi on "x"-ate" ("x"-aatti), happo nimetään seuraavasti: hydro-"x"-ic acid" ("x"-vetyhappo):

Kloorihappo hajoaa veteen klooraattianioneiksi.

Jos happo hajoaa veteen liuetessaan hajoaa anioniksi, jonka nimi on "x"-ite ("x"-iitti), happo nimetään seuraavasti: "x"-ous acid ("x"-hapoke):

kloorihapoke hajoaa kloriittianioneiksi.

1.2.2 Mineralogisten faasien nimeäminen

Monimutkaiset mineralogiset faasit sisältävät yleensä vähintään kolmen aineen yhdistelmän. Useimmat faaseissa esiintyvät alkuaineet ovat yhdistyneinä happeen, ja yksilöimisen yksinkertaistamiseksi monimutkaisia yhdisteitä pidetään mineralogiassa oksidien muodostumina, joista osa on emäksisiä ja osa happamia. Esimerkiksi silikaatit on ollut tapana esittää joko oksidien määrän summana tai silikaattihapon suoloina tai alumiinisilikaattihappoina. Vastaavasti kalsiumortosilikaatti voidaan esittää muodossa 2CaO.SiO₂, erillisten oksidien yhdistelmänä tai muodossa Ca₂SiO₄, ortosilikaattihapon kalsiumsuolana H₄SiO₄. Tämä koskee myös muita monimutkaisia mineraalioksideja, jotka nimetään lisäämällä etuliite kunkin oksidin nimen eteen (esim. Ca₃SiO₅ = trikalsiumsilikaatti = 3CaO.SiO₂). Muutamilla teollisuuden aloilla käytäntöä on yksinkertaistettu edelleen yhdistekaavan lyhentämiseksi. Esimerkiksi portlandklinkkerin tapauksessa 2CaO.SiO₂ (kalsiumortosilikaatti tai dikalsiumsilikaatti) lyhennetään muotoon C₂S, jossa C = CaO ja S = SiO₂. Monimutkaisten mineralogisten faasien nimeämisessä tai yksilöimisessä on suositeltavaa tutustua mineralogian tai teollisuudenalan asiaa koskeviin teksteihin.

1.3 Luonnontuotteet ja niihin liittyvät ainesosat

IUPAC on laatinut luonnontuotteita varten useita systemaattista nimeämistä koskevia sääntöjä. Tiivistettynä se tarkoittaa sitä, että luonnosta saatujen aineiden nimi perustuu aina kun mahdollista sen organismin heimon, suvun tai lajin nimeen, josta aine on saatu:

***Hypothecalia Exemplare* -nimisen hypoteettisen proteiinin osalta nimet perustuvat hypothecalia- ja exemplare-sanoihin, esimerkiksi Horse Exemplare.**

Jos mahdollista, nimestä olisi ilmevä luonnontuotteen tunnettu tai todennäköinen jakauma. Jos tarpeen, myös luokkaa tai lahkoa voidaan käyttää aineen nimen perustana, jos aine esiintyy useissa lähiheimoissa. Jos luonnontuotteen rakennetta ei tunneta, sen nimen ei pidä sisältää orgaanisessa nimikkeistössä käytettyjä etuliitteitä, päätteitä tai nimensisäisiä liitteitä:

N-termiin lisätty Horse Exemplaren kondensaatiotuote, valarine

Monet luonnossa esiintyvät aineet kuuluvat tarkasti määriteltyihin rakenneluokkiin, joita voidaan kuvailla toisiinsa läheisesti liittyvien lähtörakenteiden avulla; toisin sanoen kukin voidaan johtaa perusrakenteesta. Tällaisten luonnossa esiintyvien aineiden ja niiden johdannaisen systemaattinen nimi voi perustua asianmukaisen lähtörakenteen nimeen.

Tunnettuja lähtöaineita ovat alkaloidit, steroidit, terpenoidit ja vitamiinit

Lähtörakenteesta tulee näkyä useimmille kyseisen luokan aineille yhteinen viivakaava. Luonnossa esiintyvät aineet tai niiden johdannaiset nimetään lähtörakenteen mukaan käyttämällä etuliitteitä, päätteitä tai nimen sisäisiä liitteitä ilmaisemaan seuraavia:

- viivakaavaa koskevat muutokset
- viivakaavan atomien korvaaminen
- hydraatitilaa koskevat muutokset, jotka ilmenevät lähtörakenteen nimestä
- atomit tai ryhmät, joilla korvataan lähtörakenteen vetyatomit
- konfiguraatiot, jotka eivät näy lähtörakenteen nimestä tai jotka näkyvät, mutta joihin on tehty muutoksia.

Tiamiinikloridi tunnetaan myös nimellä B₁-vitamiini

Yksityiskohtaista tietoa luonnontuotteiden ja niihin liittyvien tuotteiden systemaattisesta nimeämisestä saa ottamalla yhteyttä IUPAC:iin (ks. liite 1).

1.4 IUPAC-nimeä ei voida johtaa

Jos tietyistä aineista ei voida johtaa IUPAC-nimeä, voidaan käyttää kyseisiä aineita koskevaa muuta kansainvälisesti tunnustettua nimikkeistöä, kuten:

- Mineraalit ja malmit - mineralogiset nimet
- Maaöljyn ainesosat
- Colour Index Generic Names -järjestelmä³;
- Öljyn lisäaineet
- INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients)⁴
- SDA (Soap and Detergent Association) - pinta-aktiivisten aineiden nimet⁵
- jne.

2 Muut nimet

REACH-asetuksen mukaisen rekisteröimisen yhteydessä on hyödyllistä ilmoittaa kaikki merkitykselliset nimet ja/tai yleiset tunnisteet kaikilla niillä kielillä, joilla ainetta markkinoidaan EU:ssa (esim. kaupanimet). Tällaisia ovat kaupanimet, synonyymit, lyhenteet jne.

- <http://www.colour-index.com>, Colour Index International, neljäs sähköinen painos
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, Personal Care Products Council, virallinen verkkosivu

- <http://www.cleaninginstitute.org/>, American Cleaning Institute (ACI), virallinen verkkosivu.

3 EINECS-, ELINCS- tai NLP-luettelon (EY-luettelo) EY-numero

EY-numero eli EINECS-, ELINCS- tai NLP-numero on Euroopan unionissa käytetty aineen virallinen numero. EY-numero voidaan saada virallisista EINECS-, ELINCS ja NLP-julkaisuista ja Euroopan kemikaaliviraston virallisista julkaisuista.

EY-numero muodostuu seitsemästä numerosta, jotka esitetään muodossa $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$. Ensimmäinen numero määräytyy sen luettelon mukaan, johon aine kuuluu:

Luettelo	EY-numeron ensimmäinen numero
EINECS	2 tai 3
ELINCS	4
NLP	5

4 CAS-numero ja -nimi

American Chemical Society (ACS) alainen Chemical Abstracts Service (CAS) määrittää CAS-nimen ja -numeron jokaiselle CAS:n rekisteritietokantaan syötettävälle kemikaalille. CAS:n asiantuntijoiden yksilöimille ainutkertaisille aineille osoitetaan nimet ja numerot jaksollisessa järjestyksessä. Jokaisella CAS-rekisteriin kirjatulla aineella on CAS-nimikkeistön mukainen nimi, jonka ACS hyväksyy nimikkeistöä käsittelevän ACS-komitean suosituksesta (ks. viitteet lisäyksessä 1).

4.1 CAS-nimi

CAS-nimi on Chemical Abstract Service -rekisterissä annettu nimi, joka ei ole sama kuin IUPAC-nimi. CAS-nimikkeistö perustuu tiettyihin kriteereihin, jotka eivät ole aina riittäviä aineen nimen johtamiseksi. Siksi on yleensä suositeltavaa ottaa yhteyttä Chemical Abstract Service -rekisteriin oikean CAS-nimen saamiseksi.

Nimikkeistöä koskevat perussäännöt ovat tiivistettynä seuraavat:

- Aineen pääosa valitaan perusosaksi.
- Substituentit ilmoitetaan perusosan jälkeen, ja tätä kutsutaan käänteiseksi järjestykseksi.
- Jos ainesosia on useita, ne luetellaan aakkosjärjestyksessä (etuliitteet mukaan luettuina):

o-xyleeni-3-oli on bentseeni, 1,2-dimetyyli, 3-hidroksi,

4.2 CAS-numero

CAS-numerot voidaan saada Chemical Abstract Service -rekisteristä.

CAS-numero muodostuu vähintään viidestä numerosta, jotka on jaettu kolmeen osaan, jotka on erotettu yhdysviivalla. Toinen osa muodostuu aina kahdesta numerosta ja kolmas osa yhdestä numerosta.

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

CAS-numero voidaan tarkistaa tarkistussumman avulla:

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

Tarkistussumman perusteella voidaan todeta CAS-numeron oikeellisuus.

5 Muut tunnistekoodit

Aineelle voidaan antaa myös muita kansainvälisesti tunnustettuja tunnistekodeja, kuten:

- tullinumero
- YK-numero
- väri-indeksinumero (Colour Index Number)
- väriaineen numero (Dye number)

6 Molekyylikaava, rakennekaava ja SMILES

6.1 Molekyylikaava

Molekyylikaavan avulla yksilöidään jokainen alkuainetyyppi kemiallisen merkin perusteella ja kunkin tällaisen alkuaineen atomien määrä aineen yksittäisessä molekyylissä.

Molekyylikaava on esitettävä (perinteisen) Hillin järjestelmän ja CAS-järjestelmän mukaisesti, jos tämä eroaa Hillin järjestelmän mukaisesta kaavasta.

Hillin menetelmää sovellettaessa voidaan noudattaa seuraavia vaiheita:

1. Yksilöidään alkuaineet ja luetellaan kemialliset merkit.

2. Järjestetään alkuaineet oikeaan järjestykseen:

a. Hiiltä sisältävät aineet:

Mainitaan jokaisen alkuaineen kemiallinen merkki seuraavassa järjestyksessä:

(1) hiili

(2) vety

(3) Muut alkuaineiden merkit aakkosjärjestyksessä:

pentaani: C5H12

penteeni: C5H10

pentanoli: C5H12O

b. Aineet, jotka eivät sisällä hiiltä:

Jokainen alkuaine ilmoitetaan aakkosjärjestyksessä:

vetykloridihappo: ClH

3. Jos alkuaineen atomien määrä on suurempi kuin yksi, atomien määrä ilmoitetaan kemiallisen merkin alaindeksissä.

4. Lisätään tiedot, jotka eivät koske päärakennetta, molekyylikaavan loppuun erotettuna pisteellä tai pilkulla:

natriumbentsoaatti on C7H6O2, natriumsuola
kuparisulfaattidihydraatti on CuO4S.2H2O

Jos tiettyyn aineeseen ei voida soveltaa Hillin menetelmää, molekyylikaava on esitettävä toisin, esimerkiksi käyttämällä empiiristä kaavaa, joka on yksinkertainen kuvaus atomeista ja atomien suhteesta molekyyliässä, tai CAS-kaavaa (ks. näiden toimintaohjeiden luku 4).

6.2 Rakennekaava ja kiderakenteen kuvaus

Rakennekaavalla esitetään havainnollisesti molekyylien sijainti aineessa ja niiden suhde toisiinsa. Rakennekaavasta on käytävä ilmi atomien, ionien tai ryhmien sijainti ja niiden välisten sidosten luonne. Se kattaa myös isomerian, kuten cis-/trans-isomeria, kiraalisuus, enantiomeerit jne.

Rakennekaava voidaan esittää eri muodoissa: molekyylikaavana ja/tai rakennekaaviona.

- *Rakennekaava molekyylikaavana*

1. Merkitään kaikki alkuaineet ryhmittäin ja esiintymisjärjestyksessä:

n-pentaani: CH3CH2CH2CH2CH3

2. Jokainen ainesosa kirjoitetaan sulkeisiin välittömästi sen atomin jälkeen, johon se on sitoutunut:

2-metyylibutaani: CH3CH(CH2)CH2CH3

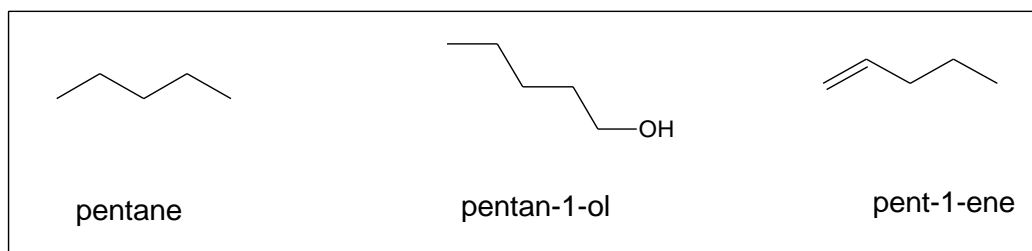
3. Osoitetaan kaksois- tai kolmoissidokset kyseisten alkuaineryhmien välillä:

pent-1-eeni: CH2=CHCH2CH2CH3

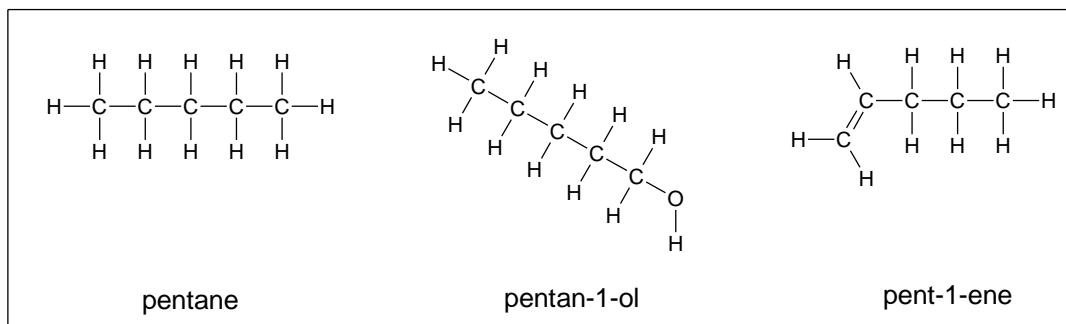
- *Rakennekaava rakennekaaviona*

Rakennekaaviossa alkuaineet ja niiden väliset sidokset havainnollistetaan kaksi- tai kolmiulotteisessa kuvassa. Useat menetelmät ovat mahdollisia:

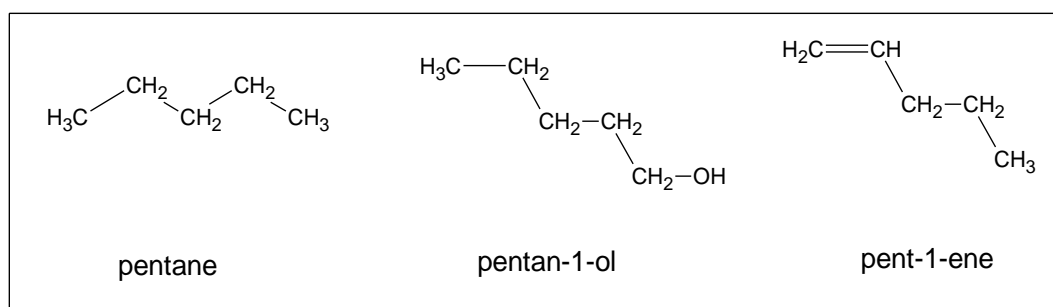
1. Merkitään kaikki alkuaineet, jotka eivät sisällä hiiltä, ja tällaisiin alkuaineisiin liittynyt vety.



2. Merkitään kaikki alkuaineet nimeltä.



3. Merkitään hiili ja vety ryhminä (esim. CH₃), kaikki alkuaineet, jotka eivät sisällä hiiltä, ja kaikki vedyt, jotka eivät ole liittyneet hiileen.

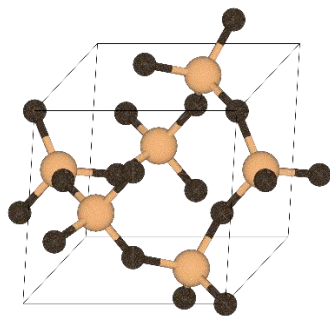


- Rakennekaava molekyylikaavana:

1. Anna molekyylikaava:

SiO₂

2. Anna aineen kiderakenne



3. Anna mineraloginen ja/tai kristallografinen nimi kidejärjestelmän³² ja kidehuokan perusteella:

α-kvartsi [*β*-kvartsi] / **kidejärjestelmä:** trigoninen – heksagonaalinen, **kidehuokka:** trigoninen-trapetsohedraalinen 3.2

³² kuutiollinen/tetragoninen/ortorombinen/romboedrinen (tai trigoninen)/heksagonaalinen/monokliininen/trikliininen

6.3 SMILES-kaava

SMILES on kirjainlyhenne sanoista Simplified Molecular Input Line Entry Specification.³³ Tätä kemiallista kaavaa käytetään kuvaamaan molekyytirakennetta merkkijonolla. SMILES-järjestelmässä molekyylin nimi ja sen rakenne ovat yleensä synonyymeja: sen avulla voidaan esittää epäsuorasti kaksiulotteinen kuva molekyytirakenteesta. Koska kaksiulotteinen kemiallinen rakenne voidaan laatia monella eri tavalla, yhdellä molekyyllillä on useita oikeita SMILES-kaavoja. SMILES perustuu molekyylin valenssirakenteen esittämiseen; siksi se ei sovellu sellaisten molekyylien kuvailemiseen, joita ei voida esittää valenssirakenteen avulla.

SMILES-kaava koostuu alkuainemerkeinä ilmaistuista atomeista, sidoksista, haarautumisen osoittamiseen käytetyistä sulkumerkeistä sekä numeroista, joita käytetään syklisissä rakenteissa. SMILES-kaavan avulla molekyytirakenne esitetään kuvaajana, jolla voidaan osoittaa kiraalisuus. SMILES-kaavaa, jolla kuvataan ainoastaan rakenteen sidoksia ja atomeja, kutsutaan yleiseksi SMILES-kaavaksi, kun taas SMILES-kaavaa, joka sisältää isotooppiset ja kiraaliset eritelvät, kutsutaan isomeeriseksi SMILES-kaavaksi.

SMILES-kaava perustuu useisiin perussääntöihin, jotka ovat tiivistetysti seuraavat:

1. Atomeja kuvataan niiden merkkien avulla.
2. Jokainen atomi, vetyä lukuun ottamatta, määritetään itsenäisesti;
 - a. "Orgaanisen osajoukon" alkuaineet B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br ja I kirjoitetaan ilman sulkumerkkejä ja ilman niihin liitettyä H:ta, jos H:n arvo vastaa ekspanssiivisten sidosten mukaista pienintä normaalivalenssia (valensseja):

"Orgaanisen osajoukon" alkuaine	"Pienin normaalivalenssi"
B	3
C	4
N	3 ja 5
O	2
P	3 ja 5
S	2, 4 ja 6
F	1

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.

Cl	1
Br	1
I	1

- b. "Orgaanisen osajoukon" alkuaineet merkitään sulkumerkkeihin, jos H:n arvo ei vastaa pienintä normaalivalenssia:

Ammoniumkationi on NH₄⁺

- c. Muut alkuaineet kuin "orgaanisen osajoukon" alkuaineet merkitään sulkumerkkeihin ja niihin liittyneet vedyt osoitetaan.

3. Alifaattiset atomit merkitään suuraakkosin, aromaattiset atomit pienaakkosin:

bentseeni on c1ccccc1 ja sykloheksaani C1CCCC1

4. Vety ilmoitetaan ainoastaan seuraavissa tapauksissa:

- varautunut vetyioni eli protoni [H⁺]
- vedyt ovat liittyneet toisiinsa vetyihin eli molekylaarinen vety, [H][H]
- vedyt, jotka ovat liittyneet muuhun kuin toiseen atomiin, esim. vetysidokset
- vedyn isotoopit, esim. deuterium ([²H]);
- jos vety on liittynyt kiraaliseen atomiin.

5. Neljä perussidosta esitetään seuraavasti:

Sidostyyppi	SMILES-kaava
Yksinkertainen	- (ei tarvitse merkitä)
Kaksoissidos	=
Kolmoissidos	#
Aromaattinen	Pienaakkosin

6. Substituentit merkitään sulkumerkkeihin heti niiden atomien jälkeen, joihin ne ovat liittyneet:

2-metyylibutaani on CC(C)CC

- a. Substituentit merkitään aina heti kyseisten atomien perään; niitä ei voi merkitä kaksois- tai kolmoissidosta osoittavan merkin perään:

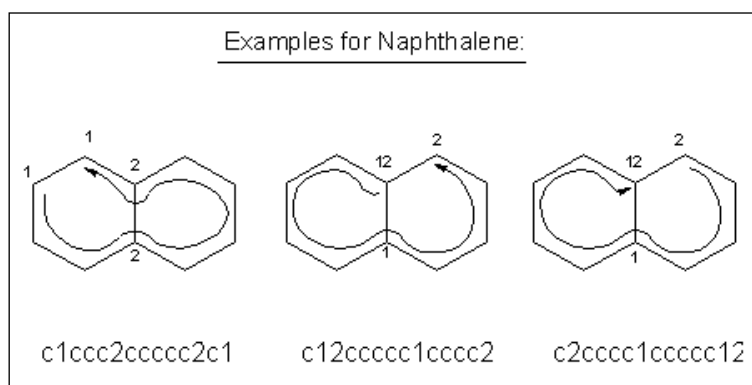
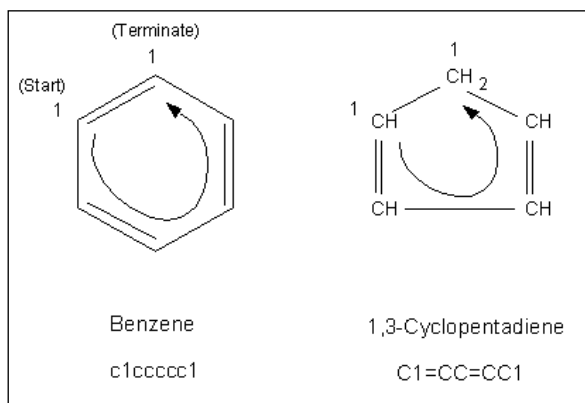
pentaanihappo on CCCCC(=O)O

- b. Substituenttien sisäiset substituentit ovat sallittuja:

2-(1-metyylietyyli)butaani on CC(C(C)C)CC

7. Syklisissä rakenteissa lukuja 1–9 käytetään syklin alkavan ja päättyvän atomin osoittamiseen.

- Kunkin renkaan alkavan ja päättyvän atomin osoittamiseen käytetään samaa lukua. Alkavan ja päättyvän atomin on liityttävä toisiinsa.
- Luvut merkitään heti atomien perään alkamisen ja päättymisen osoittamiseksi.
- Alkavaan tai päättyvään atomiin voidaan liittää kaksi peräkkäistä lukua.



- Yhdisteet, jotka eivät ole liittyneet toisiinsa, merkitään yksittäisiksi rakenteiksi tai ioneiksi ja ne erotetaan pisteellä ("."). Pisteellä (".") erotetut vierekkäiset atomit eivät ole sitoutuneet toisiinsa suoraan vaan esim. Van der Waalsin sidoksella:

aminopropenihydrokloridi on C=CC(N).HCl

- Isomeerirakenne määritetään käyttämällä keno- ja vinoviivoja "\" ja "/". Isomeerirakenne osoitetaan kahden isomeerisidoksen välisellä kiertosuunnalla (cis = "/ \", trans = "/ /"). SMILES-kaavoissa käytetään paikallista kiraalisuutta, minkä vuoksi kiraalisuus on määritettävä tarkasti:

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

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

- Enantiomeerit tai kiraalisuus merkitään "@"-merkillä. "@"-merkillä osoitetaan, että kiraaliatomia seuraavat naapuriatomit on lueteltu vastapäivään. "@@"-merkillä osoitetaan, että atomit on lueteltu myötäpäivään. Kiraaliatomi ja "@"-merkki merkitään sulkumerkkeihin:

2-kloro-2-hydroksipropaanihappo, jonka

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

- Isotoopit ilmaistaan siten, että atomimerkin eteen lisätään luku, joka vastaa atomin integraalimassaa. Atomimassa voidaan määritellä ainoastaan

sulkumerkkeihin:

hiili-13 on [13C] ja happi-18 on [18O]

SMILES-kaavan määrittämiseksi on saatavilla useita työkaluja (SMILES-generaattorit) (ks. liite 1).

7 Optista aktiivisuutta koskevat tiedot

Optisella aktiivisuudella tarkoitetaan epäsymmetristen aineiden ominaisuutta, joka saa aikaan valon polarisaatiotason kääntymisen. Tällaisia aineita ja niiden peilikuvia kutsutaan enantiomeereiksi, ja niillä on yksi tai useampi kiraliakeskus. Vaikka enantiomeerien geometrinen rakenne vaihtelee, niillä on samat kemialliset ja fysikaaliset ominaisuudet. Koska erityyppiset enantiomeerit vaikuttavat polarisoituneeseen valoon eri tavalla, optista aktiivisuutta voidaan käyttää sen osoittamiseksi, mikä enantiomeeri sisältyy näytteeseen, ja siten myös aineen puhtauden määrittämiseksi. Kiertymisen voimakkuus on molekyylin luontainen ominaisuus.

Enantiomeerit kiertävät aina vastapäivään: ne polarisoivat valoa samassa määrin mutta vastakkaisiin suuntiin. Enantiomeeriseoksen optinen aktiivisuus on siten osoitus näiden kahden enantiomeerin suhteesta. Jos enantiomeeriseoksen suhde on 50-50, sen optinen aktiivisuus on 0.

Kierto määräytyy pitoisuuden, näyteputken pituuden, lämpötilan ja valonlähteen aallonpituuden mukaan.

Optista aktiivisuutta voidaan siten käyttää parametrina, jonka avulla tunnistetaan epäsymmetrinen aine. Se on myös ainoa parametri, jonka avulla aine voidaan erottaa sen peilikuvasta. Siksi aineen optinen aktiivisuus on ilmoitettava tarpeen mukaan.

Aineelle ominaista optista aktiivisuutta kutsutaan ominaiskierroksi. Ominaiskierto määritellään siten, että se on valon havaittu kierto 5 896 ångströmin etäisyydellä, kun kulkumatka on 1 dm ja näytteen pitoisuus 1 g/ml. Ominaiskierto lasketaan jakamalla havaittu kierto kulkumatkan pituuden (dm) ja pitoisuuden (g/ml) tulolla.

Optinen aktiivisuus voidaan mitata useilla eri menetelmillä. Yleisimmät menetelmät ovat seuraavat:

- Optinen kierto: mitataan näytteen läpi kulkeneen valosäteen polarisaatiotason kierto.
- Sirkulaarinen dikroismi - mitataan, miten näyte absorboi oikealle ja vasemmalle polarisoitunutta valoa.

Jos aine kiertää valoa oikealle (myötäpäivään, dextrorotatory), se merkitään "+"-merkillä. Jos aine kiertää valoa vasemmalle (vastapäivään, laevorotatory), se merkitään "-"-merkillä.

8 Molekyylipaino tai molekyylipainon vaihteluväli

Molekyylipainolla tarkoitetaan aineen molekyylin painoa ilmaistuna atomimassayksiköinä (amu) tai moolimassana (g/mole). Molekyylipaino voidaan laskea aineen molekyylikaavasta: se on molekyylin sisältämien atomien atomipainojen summa. Jos kyse on tietyistä proteiinien tai määrittelemättömien reaktioseosten kaltaisista molekyyleistä, joille ei voida määrittää yhtä molekyylipainoa, voidaan ilmoittaa molekyylipainon vaihtelualue.

Aineiden molekyylipainon määrittämiseksi voidaan käyttää useita menetelmiä:

- Kaasumaisten aineiden molekyylipainon määrittämiseksi voidaan käyttää Avogadron lakia, jonka mukaan tietyissä lämpötila- ja paineolosuhteissa tietty määrä mitä tahansa kaasua sisältää tietyn määrän kaasumolekyylejä

$$PV = nRT = NkT$$

n = moolien määrä

R = yleinen kaasuvakio = 8,3145 J/mol K

N = molekyylilien määrä

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

k = R/NA

NA = Avogadron luku = $6,0221 \times 10^{23}$ /mol.

- Nesteiden ja kiinteiden aineiden molekyylipaino voidaan laskea määrittämällä niiden vaikutukset liuoksen sulamispisteeseen, kiehumispisteeseen, höyrynpaineeseen tai osmoottiseen paineeseen.
- Massaspektrometria on hyvin tarkka mittausmenetelmä.
- Monimutkaisten ja molekyylipainoltaan raskaiden aineiden molekyylilien, kuten proteiinien tai virusten, molekyylipaino voidaan määrittää mittaamalla esimerkiksi sedimentaatioaste ultrasentrifugissa tai valonsironta.
- Saatavilla on useita työkaluja, joiden avulla molekyylipaino voidaan laskea aineen rakennekaavion tai molekyylikaavan perusteella (ks. liite 1).

9 Aineen koostumus

Jokaisen aineen koostumus on ilmoitettava pääainesosien, lisäaineiden ja epäpuhtauksien yhdistelmänä näiden toimintaohjeiden 4 luvussa esitettyjen sääntöjen ja perusteiden mukaisesti.

Jokainen ainesosa, lisäaine tai epäpuhtaus on yksilöitävä asianmukaisesti ilmoittamalla seuraavat tiedot:

- nimi (IUPAC-nimi tai, ellei ole käytettävissä, muu kansainvälisesti hyväksytty nimi)
- CAS-numero (jos saatavilla)
- EY-numero (jos saatavilla).
- kaikki muut käytettävissä olevat tunnisteen

Jokaisen ainesosan, ainesosaryhmän, lisäaineen tai epäpuhtauden osalta pitäisi antaa mahdollisuuksien mukaan kaupallisille erille ominainen pitoisuus prosentteina (mieluiten painon tai tilavuuden mukaan). Ilmoitettujen arvojen yhteenlasketun määrän on oltava 100 prosenttia. Ylempi ja alempi pitoisuusraja, kuten kaupallisen aineen vaihteluväli, on aina ilmoitettava.

10 Spektritiedot

Spektritietoja tarvitaan yhdestä ainesosasta koostuvan aineen ilmoitetun rakenteen vahvistamiseksi tai sen varmistamiseksi, ettei reaktioseos ole valmiste. Spektritietojen määrittämiseksi on saatavilla useita menetelmiä (ultravioletti, infrapuna, ydinmagneettinen resonanssi tai massaspektri). Kaikkia menetelmiä ei voida käyttää eri aineyryppien kanssa. Toimintaohjeissa annetaan mahdollisuuksien mukaan ohjeita erityyppisiä aineita koskevien asianmukaisten spektritietojen ilmoittamiseksi (ECB, 2004; ECB, 2005).

Useiden hyvin tunnettujen menetelmien yhteydessä on ilmoitettava seuraavat tiedot itse spektritiedoissa tai liitteissä:

Ultravioletin ja näkyvän valon spektroskopia (UV-VIS-spektri)

- aineen tunnistetiedot
- liuotin ja pitoisuus
- vaihtelualue
- piikkien sijainti (ja epsilon-arvot)
- hapon vaikutus
- alkalien vaikutus

Infrapunaspektroskopia (IR-spektri)

- aineen tunnistetiedot
- keskiarvo
- vaihtelualue
- tulokset (ilmoitetaan yksilöimisen kannalta merkitykselliset piikit esim. sormenjälkialueen tulkinta).

Ydinmagneettinen resonanssispektroskopia (NMR-spektri)

- aineen tunnistetiedot
- ydin ja taajuus
- liuotin
- tarpeen mukaan sisäiset tai ulkoiset viitteet
- tulokset (ilmoitetaan aineen yksilöimisen kannalta merkitykselliset tiedot ja liuotinta ja epäpuhtauksia koskevat tiedot)
- ¹H NMR -spektrin integrointikäyrä on esitettävä
- heikkojen NMR-piikkien voimakkuutta on lisättävä vertikaalisesti ja monimutkaisia kuvioita on laajennettava.

Massaspektroskopia (MS-spektri)

- aineen tunnistetiedot
- kiihdytysjännite
- syöttömenetelmä (suorasyöttö, kaasukromatografia (GC) jne.)
- ionisointimenetelmä (elektronipommitus (EI), kemiallinen ionisaatio, kenttädesorptio jne.)
- molekyyli-ioni (M)
- aineen yksilöimisen kannalta merkittävät sirpaleionit (fragmentit)
- rakenteen yksilöimisen kannalta merkitykselliset m/z-arvot tai piikit
- monimutkaisia kuvioita on laajennettava.

Röntgendiffraktion massaspektroskopia (XRD-spektri)

- aineen tunnistetiedot
- jännite
- virta
- röntgenlähde ja mahdolliset kirjallisuusviitteet, joiden avulla aineessa esiintyvä(t) kiteinen (kiteiset) faasi(t) voidaan tunnistaa

Ainakin seuraavat vaatimukset on täytettävä, jos käytössä on XRD-menetelmä aineessa olevien kiteisten tai amorfisten faasien ja määrien tunnistamiseen ja määrittämiseen:

- kuvaus käytetyistä jalostusmenetelmistä ja sisäisistä standardeista
- hyvyysluvun arvo, josta kuvastuu mallinnetun/viitteellisen diffraktiokuvion välinen sopivuus
- mitattu malli sekä asteikko hyvyysluvun arvosta (esim. 0–1 tai 0–100).

Myös muita tieteellisesti tunnustettuja menetelmiä voidaan käyttää, jos aineen tunnistetiedot, esim. sisäinen rakenne, voidaan vahvistaa spektritietojen avulla.

Spektrin ymmärtäminen ja/tai tulkitseminen edellyttää yleisesti seuraavaa:

- kuvaus näytteen valmistelusta
- ilmoitetaan tarpeen mukaan merkittävät aallonpituudet tai muut tiedot
- annetaan lisätietoja, esim. lähtöaineiden spektristä
- ilmoitetaan käytetyt liuottimet ja/tai muut menetelmiä koskevat merkitykselliset tiedot, kuten edellä on esitetty
- toimitetaan selkeät jäljennökset (alkuperäisten sijaan), joihin on merkitty asianmukaisesti käytetyt asteikot
- annetaan tietoa käytetyistä ainepitoisuuksista
- varmistetaan, että voimakkaimmat aineeseen liittyvät piikit ovat lähellä asteikon täysimääräistä arvoa.

11 Korkean erotuskyvyn nestekromatografia, kaasukromatografia

Ainetyypin mukaan aineen koostumuksen vahvistamiseksi on toimitettava kromatogrammi. Asianmukaisella kromatogrammilla vahvistetaan esimerkiksi reaktioseoksen epäpuhtaudet, lisäaineet ja ainesosat. Kaksi parhaiten tunnettua seoksien erottamiseen ja yksilöimiseen käytettyä menetelmää ovat kaasukromatografia (GC) ja korkean erotuskyvyn nestekromatografia (HPLC). Nämä kaksi menetelmää perustuvat liikkuvan ja kiinteän faasin väliseen vuorovaikutukseen, jonka avulla voidaan erottaa seoksen ainesosat.

GC/HPLC-kromatogrammeja varten on ilmoitettava seuraavat tiedot joko itse kromatogrammissa tai liitteissä (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC

- aineen tunnistetiedot
- kolonnin ominaisuudet, kuten halkaisija, täyteaine, pituus
- lämpötila, myös mahdollinen lämpötila-alue
- liikkuvan faasin koostumus, myös mahdollinen vaihteluväli
- aineen pitoisuusalue
- visualisointimenetelmä, esim. UV-VIS
- tulokset (ilmoita aineen yksilöimisen kannalta merkitykselliset piikit);

GC

- aineen tunnistetiedot

- kolonnin ominaisuudet, kuten halkaisija, täyteaine, pituus
- lämpötila, myös mahdollinen lämpötila-alue
- injektio­lämpötila
- kantajakaasu ja kantajakaasun paine
- aineen pitoisuusalue
- visualisointimenetelmä, esim. MS
- piikin yksilöinti
- tulokset (ilmoita aineen yksilöimisen kannalta merkitykselliset piikit).

12 Analyysimenetelmien kuvaus

REACH-asetuksen *liitteessä VI* vaaditaan, että rekisteröijän on esitettävä aineen yksilöimisessä sekä tarvittaessa epäpuhtauksien ja lisäaineiden yksilöimisessä käytettyjen analyysimenetelmien kuvaus ja/tai asianmukaiset kirjallisuusviitteet. Näiden tietojen on oltava riittäviä, jotta menetelmiä voidaan käyttää myös muissa laboratorioissa.

Liite III – Aineen yksilöiminen ja tietojen yhteistoimitus

Näiden toimintaohjeiden keskeinen osa on niiden yleisten periaatteiden esittäminen, joiden mukaan mahdollisten rekisteröijien on toimittava, kun ne yksilöivät oikeushenkilökohtaisia rekisteröitäviä aineitaan. Tässä liitteessä mahdollisille rekisteröijille annetaan käytännön ohjeita siitä, miten aineen yksilöimistä koskevia periaatteita sovelletaan määritettäessä yhteisrekisteröintiin liittyvän aineen tunnistetietoja ja niiden laajuutta kollektiivisesti REACH-asetuksen ”yksi aine, yksi rekisteröinti” -periaatteen mukaisesti. Lisätietoja yhteistoimitukseen liittyvistä velvollisuuksista ja tietojen yhteiskäyttömenettelystä on tietojen yhteiskäyttöä koskevissa toimintaohjeissa, jotka ovat osoitteessa <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>. Yhteisrekisteröinnissä noudatetaan samoja keskeisissä ohjeissa esitettyjä aineen yksilöinnin periaatteita aineen tyyppin mukaisesti yhden aineen tunnistetietojen osalta.

REACH-asetuksen 11 artiklan 1 kohdan ja 19 artiklan 1 kohdan ensimmäisissä osissa esitetään ”useiden rekisteröijien tietojen yhteistoimitusta” koskeva vaatimus. Näissä säännöksissä edellytetään, että ”jos yksi tai useampi valmistaja aikoo valmistaa ja/tai yksi tai useampi maahantuojaja aikoo tuoda maahan ainetta yhteisössä”, aineen ominaisuuksiin ja sen luokitukseen liittyvät tiedot ”toimittaa yksi toisen (muiden) hyväksyntänsä antavan (antavien) valmistajan (valmistajien) tai maahantuojan (maahantuojien) suostumuksella toimiva valmistaja tai maahantuojaja, jäljempänä 'päärekisteröijä'”.

Tietojen toimittamisesta yhteisesti ja tietojen yhteiskäytöstä annetussa komission täytäntöönpanoasetuksessa (EU) 2016/9 vahvistetaan ja konsolidoidaan tunnistetiedoiltaan saman aineen useiden rekisteröijien velvollisuus toimittaa tietyt tiedot yhteisesti. Käytännössä tietojen yhteistoimitus tarkoittaa sitä, että osapuolet sopivat aineen tunnistetietojen rajoista ja laajuudesta. Tätä kutsutaan aineen tunnistetietoprofiiliksi (substance identity profile, SIP). Tunnistetietoprofiilin tarkoituksena on määrittää aineelle rajat, joiden mukaan rekisteröijät sopivat, mitkä tiedot sisältyvät tietojen yhteistoimitukseen. Tämä koskee myös rekisteröijä, jotka ovat jättäytyneet pois tiettyjen tietojen yhteistoimituksesta.

Rekisteröintiin sisältyvien aineen tunnistetietojen laajuudesta sopiminen on siis tietojen yhteistoimituksen ennakoedellytys. Aineen tunnistetietojen laajuutta ja niitä tietoja, joihin ne perustuvat, koskeva avoimuus on yhteistoimituksessa keskeistä. Aineen laajuus tai aineen tunnistetietoprofiili on esitettävä selvästi päärekisteröijän aineistossa kaikkien muiden rekisteröijien puolesta, mutta kukin rekisteröijä ilmoittaa koostumustiedot erikseen.

Jäljempänä on yksinkertainen havainnollistava esimerkki (

Kuva 2) siitä, miten yksittäiset rekisteröijät laativat EU:ssa valmistettavien tai EU:hun tuotavien kemikaalien aineen tunnistetietoprofiilin. Siinä kuvataan rekisteröitävän aineen yksilöiminen, tietojen kokoaminen eri koostumuksista, tietojen koostaminen ja niiden toimittaminen IUCLID-tiedostomuodossa olevassa rekisteröintiaineistossa. Esimerkki koskee yksinkertaista tarkasti määriteltyä yhdestä ainesosasta koostuvaa ainetta. Monimutkaisempien aineiden osalta tunnistetietoprofiilin laatimisprosessissa voidaan joutua toistamaan kuvan vaiheet 3 ja 5.

Mahdollisten rekisteröijien neuvotteluissa tunnistetietoprofiili voidaan dokumentoida esimerkiksi Word-asiakirjassa tai Excel-laskentataulukossa. Sovitut tiedot kirjataan niihin, ja ne toimitetaan yhteistoimituksen kaikkien jäsenten ja mahdollisten jäsenten saataville. Jotkin toimialajärjestöt ovat laatineet tunnistetietoprofiilin laatimista varten malleja, joita

monet rekisteröijät ovatkin käyttäneet (esimerkiksi Cefic-malli³⁴). Toiset ovat puolestaan dokumentoineet asiaankuuluvat tiedot Word-asiakirjaan tai verkkosivulle, jonka konsortio on perustanut kyseisen aineen rekisteröintiä koskevaa työskentelyä varten.

2. Rekisteröintiä varten toimitettuja tietoja vastaavan aineen tunnistetietojen ja laajuuden määrittäminen

Vaiheet, joiden mukaan useat mahdolliset rekisteröijät voivat määrittää aineen tunnistetiedot, jotka vastaavat niiden yhteisesti toimitettavia tietoja, on esitetty kaaviossa Kuva 2 (vaiheet 1–4) yksinkertaisten tarkasti määriteltyjen aineiden osalta.

Jokainen yksittäinen mahdollinen rekisteröijä määrittää velvollisuutensa sen mukaan, mitä se valmistaa/toimittaa 3 artiklan 1 kohdassa olevan aineen määritelmän perusteella ja soveltamalla aineen tunnistetietoja koskevia periaatteita, jotka on esitetty näiden toimintaohjeiden keskeisessä osassa (vaiheet 1 ja 2,

Kuva 2).

Sen jälkeen jokainen mahdollinen rekisteröijä voi tarkistaa, ovatko muut mahdolliset rekisteröijät päätyneet samaan nimeen ja muihin tunnistetietoihin (vaihe 3). Tämän lähtökohdan perusteella mahdolliset rekisteröijät voivat kollektiivisesti soveltaa näiden toimintaohjeiden keskeisiä periaatteita määrittäessään rajoja aineen tunnistetiedoille, jotka vastaavat yhteisesti toimitettavia tietoja eli aineen tunnistetietoprofiilia (vaihe 4).

Tunnistetietoprofiilissa kuvataan yleisesti aineen laajuus sen koostumusta koskevien tietojen (mukaan luettuina kaikki muut oleelliset parametrit, kuten morfologia, esimerkiksi fyysinen olomuoto ja muoto), nimen ja muiden sellaisten tunnistetietojen osalta, jotka ovat merkityksellisiä luokituksen ja yhteisesti toimitettavien vaaratietojen kannalta. Tunnistetietoprofiilin laatimisessa ei tulisi noudattaa liian konservatiivista lähestymistapaa, jotta vältettäisiin kilpailijoiden poissulkeminen tietojen yhteistoimituksesta.

Tunnistetietoprofiili muodostaa sisäisen linkin aineen tunnistetietojen ja yhteisesti toimitettavien vaaratietojen välille. Jos profiili laaditaan riittävän varhaisessa vaiheessa, se voi helpottaa tietojen luomis-/keruuvaihetta rekisteröintivelvollisuuksia täytettäessä (kuvattu tietovaatimuksia ja kemikaaliturvallisuusarviointia koskevissa toimintaohjeissa; vaihe 5,

Kuva 2 jäljempänä). Näin varmistetaan, että luodut tai kerätyt tiedot kattavat aineen tunnistetiedot niiden koko laajuudessa.

Kuten keskeisten ohjeiden osioissa 4.2.3 ja 4.3 on selostettu monimutkaisemmista aineista, mahdolliset rekisteröijät käyttävät koostumustietojen yhteydessä yleensä muitakin parametreja ja/tai kuvaajia (esimerkiksi lähteen/prosessin kuvausta) vaiheissa 1–3, ja tällaiset hyväksytyt lisätiedot voidaan sisällyttää myös tunnistetietoprofiiliin (vaihe 4). Toisinaan aineen tunnistetietojen ja yhteisesti toimitettavien vaaratietojen välinen yhteys tulee täysin selväksi vasta, kun osa saatavilla olevista vaaratiedoista tai ne kaikki on kerätty. Vaiheet 3–5 voidaan joutua tarvittaessa toistamaan riippuen aineen tunnistetietojen monimutkaisuudesta ja vaiheessa 5 kerätyistä tiedoista. Näin on

³⁴ Tunnistetietoprofiili kuvattiin alun perin Ceficin päärekisteröijille laatimassa oppaassa "Guidance for Lead Registrants", joka on saatavana osoitteessa <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Esimerkkejä tätä mallia käyttäneiden rekisteröijien laatimista tunnistetietoprofiileista on esimerkiksi ReachCentrumin verkkosivustolla osoitteessa <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

esimerkiksi silloin, kun tietyt koostumukset sisältävät sellaisia aineosia, jotka edellyttävät luokitusta ja merkintöjä ja/tai PBT-arviointia. Tunnistetietoprofiili voi sisältää useamman kuin yhden koostumusprofiilin, jotta aineen tunnistetietojen rajat voidaan kuvata asianmukaisesti.

Tunnistetietoprofiilista on voitava saada yleisiä tietoja, joiden avulla voidaan määrittää rajat aineen tunnistetiedoille, jotka vastaavat yhteisesti toimitettuja tietoja:

- aineen nimi
- muut tunnisteet (esimerkiksi CAS- ja EY-numerot, molekyyli- ja rakennetiedot, kuvaus tarpeen mukaan), jotka kattavat kaikki kyseisen aineen useat rekisteröijät
- koostumustiedot:
 - aineen yksilöimisen kannalta merkityksellisten aineosien tunnistetiedot ja niiden pitoisuusalueet
 - yleinen luettelo aineen yksilöimisen kannalta merkityksellisten stabilointiaineiden tunnistetiedoista (ja niiden pitoisuusalueet tarvittaessa)
 - yleinen luettelo aineen tyyppin kannalta merkityksellisistä muista parametreista (esimerkiksi lähdeprosessin kuvaajat joistakin UVCB-aineista).

On tärkeää, että kaikki yhteistoimituksen rekisteröijät hyväksyvät parametrin, joilla tietojen yhteistoimitukseen liittyvien aineen tunnistetietojen rajat määritetään, ja että ne dokumentoidaan selvästi tunnistetietoprofiilissa. Tunnistetietoprofiilia saatetaan joutua muuttamaan tai laajentamaan uuden mahdollisen rekisteröijän pyynnöstä, jos rekisteröijät katsovat, että osa yhteisesti toimitettavista tiedoista tai ne kaikki ovat oleellisia myös uuden rekisteröijän valmistaman tai maahantuoman aineen kannalta.

Tunnistetietoprofiili ei saa johtaa siihen, että rekisteröijien välillä jaetaan liikesalaisuuksia tai että tällaisia tietoja paljastetaan kolmansille osapuolille tietojen yhteistoimituksen yhteydessä. Jos yhteistoimituksen rekisteröijien on jaettava mahdollisia liikesalaisuuksia, jotta ne voivat laatia tunnistetietoprofiilin täsmällisesti, ne voivat käyttää uskottua miestä tietojen yhteiskäyttöä koskevissa toimintaohjeissa esitetyn mukaisesti.

3. Käytännön ohjeet aineen tunnistetietoprofiilin dokumentoinnista

Tarkasti määriteltyjen aineiden ja UVCB-aineiden tunnistetietoja koskevat yleiset periaatteet on esitetty keskeisissä ohjeissa. Jäljempänä annetaan muutamia käytännön ohjeita siitä, miten näitä periaatteita sovelletaan kollektiivisesti. Keskeisten ohjeiden mukaan yleisistä periaatteista on mahdollista poiketa. Se kuitenkin edellyttää, että rekisteröijät pystyvät osoittamaan tunnistetietojen ja yhteisesti toimitettavien vaaratietojen välisen sisäisen linkin.

3.1 Tarkoin määritellyt aineet

Tarkasti määriteltyjen aineiden kanssa on noudatettava ≥ 80 % (p/p) -periaatetta yhdestä ainesosasta koostuvan aineen tunnistetietojen osalta ja < 80 %, > 10 % -periaatetta monesta ainesosasta koostuvan aineen tunnistetietojen osalta, kun määritetään pääainesosaa (-osia), pitoisuusalueita ja epäpuhtauksia. Tämä koskee jokaista yksittäistä rekisteröijää ja kollektiivisesti useita rekisteröijä, kun tunnistetietoprofiilia määritetään. Tunnistetietoprofiiliin hyväksytyt epäpuhtausprofiilit on erityisesti ilmoitettava. Jos tunnistetietoprofiili sisältää sellaisia epäpuhtauksia, jotka vaikuttavat luokitukseen ja merkintöihin ja/tai PBT-arviointiin, niiden rekisteröijien, joita nämä epäpuhtaudet koskevat, on otettava ne huomioon tietojen keräämisen vaiheessa (vaihe 5). Asianmukaiset liitteiden VII–XI tiedot voidaan toimittaa yhteisesti tai erikseen REACH-asetuksen 11 artiklan 3 kohdan mukaisesti (ns. poisjättäytymismahdollisuudet).

Ilmoitettavissa pitoisuusarvoissa on otettava huomioon pitoisuusalue koko yhteistoimituksen laajuudelta.

Jos aineesta on ilmoitettava myös muita parametreja, jotta aineen tunnistetiedot voitaisiin dokumentoida yksiselitteisesti, jokaisen rekisteröijän on sovellettava periaatteita, jotka on esitetty näiden toimintaohjeiden keskeisen osan luvussa 4.2.3. On myös selvítettävä, antaako näiden parametrien vaihtelevuus aihetta luokituksen tai yhteisesti toimitettavien vaaratietojen mukauttamiseen. Sitä kannattaa miettiä myös yhteistoimitukseen liittyvää tunnistetietoprofiilia määrittäessä. Aineen tunnistetietoprofiiliin voi esimerkiksi olla tarpeen sisällyttää ne parametrit (esimerkiksi fyysinen olomuoto ja/tai morfologiset parametrit, kuten huokoisuus, hiukkaskoko ja hiukkasten muoto), jotka voivat vaikuttaa vaaraprofiilin määrittämisessä oleellisiin ominaisuuksiin (kuten liukoisuuteen, reaktiivisuuteen, myrkyllisyyteen hengitettynä jne.). Jos näin tehdään, tunnistetietoprofiiliin sisältyvien parametrien yleiset vaihteluvälit on esitettävä avoimesti (esimerkiksi hiukkaskoon vaihteluväli kaikkien rekisteröijien osalta ja luettelo hiukkasten muodosta (muodoista) ja pintakemiasta). Näin varmistetaan, että tunnistetietoprofiiliin liittyvät yhteisesti toimitettavat vaaratiedot ovat kattavat.

Myös epäorgaanisten kemikaalien kidevaiheen erot voivat antaa aihetta erilaisiin vaaraprofiiliin liittyviin pohdintoihin, jotka koskevat näitä vaiheita (esimerkiksi kvartsi, kristobaliitti, amorfinen pii). Kun otetaan huomioon eri vaiheisiin liittyvien ominaisuuksien mahdolliset erot, näiden aineiden mahdollisten rekisteröijien kannattaa pohtia, toimitetaanko kaikki vaiheet ja eri vaiheisiin liittyvät vaaratiedot kattava yksi yhteinen rekisteröinti vai eri yhteisrekisteröinnit eri vaiheista (aineen eri tunnistetiedot). Kummassakin tapauksessa nämä vaiheet on lueteltava tunnistetietoprofiilissa, ja asiaan liittyvissä liitteiden VII–XI mukaisissa tiedoissa on käsiteltävä kaikkia rekisteröinnin vaiheita. Näin varmistetaan, että tiedot kattavat tunnistetietoprofiilin sen koko laajuudelta.

Todettakoon, että koostumuksilla voi olla erilaiset epäpuhtaus- ja/tai vaaraprofiilit. Nämä erot eivät kuitenkaan välttämättä tarkoita sitä, etteikö näitä koostumuksia voitaisi rekisteröidä samassa rekisteröinnissä.

3.2 UVCB-aineet

UVCB-aineiden yksilöiminen saattaa olla tavallista haastavampaa. Siksi selkeästä dokumentaatiosta on paljon apua, kun päätetään aineen tunnistetiedoista yhteistä rekisteröintiä varten. Jokaisen mahdollisen rekisteröijän on otettava näiden toimintaohjeiden keskeisessä osassa olevat ohjeet huomioon yksitellen, ja sen jälkeen samoja periaatteita on sovellettava kollektiivisesti. On huomattava, että jos pitoisuusalueet kootaan tunnistetietoprofiiliin, tuloksena voi olla profiili, jossa pitoisuusalueet ovat siinä määrin laajoja, ettei ainetta voida enää pitää yhtenä aineena.

Keskeisissä ohjeissa esitetyn mukaisesti joidenkin UVCB-aineiden yksilöimisen perusteena ovat pikemminkin lähde ja niiden valmistuksessa käytetty prosessi kuin suoraan niiden aineosien tunnistetiedot ja pitoisuusalueet. Tällöin muut kuvaajat korvaavat aineosien tunnistetiedot ja niiden pitoisuusalueet. Mahdolliset rekisteröijät voivat kuvata valmistusprosessia lähteen ja prosessin kannalta niin laajasti kuin on tarpeen, jotta aine voidaan yksilöidä. Kuvaus voi sisältää kaikki muut parametrit/ominaisuudet, joita rekisteröijät pitävät merkityksellisinä aineensa tunnistetietojen kannalta (ks. esimerkiksi keskeisten ohjeiden Taulukko5). Yhteisessä rekisteröinnissä kuvauksia jaetaan vain sen mukaan, mikä on tarpeen, jotta voidaan sopia UVCB-aineen tunnistetietojen laajuudesta rekisteröintiä varten. Mahdolliset rekisteröijät voivat soveltaa keskeisissä ohjeissa esitettyjä periaatteita sekä yksitellen että kollektiivisesti. Tunnistetietoprofiilissa lähde- ja

prosessiparametrit ilmoitetaan siis yleisesti siten, että ne kattavat yksittäisten rekisteröijien koostumukset kokonaan. Katso tästä kaaviokuva, Kaavio 3.

Kuten keskeisissä ohjeissa on todettu, lähteen ja prosessin perusteella yksilöityjen aineiden yhteydessä mikä tahansa merkittävä muutos lähteessä tai prosessissa todennäköisesti johtaa siihen, että aineen tunnistetiedot muuttuvat, jolloin se on rekisteröitävä erikseen. Tästä periaatteesta poikkeaminen tarkoittaa sitä, että rekisteröijien on voitava osoittaa, että jokainen prosessin ja lähteen yhdistelmä tuottaa koostumuksia, jotka voidaan hyväksyä samaan yhteisrekisteröintiin. Lähdemateriaalien ja prosessin ja/tai prosessiolosuhteiden pienemmät vaihtelut voidaan ottaa huomioon tunnistetietoprofiilissa. Rekisteröijien on oltava yhtä mieltä siitä, että jokainen prosessin ja lähteen yhdistelmä tuottaa koostumuksia, jotka ovat siinä määrin samanlaisia, että ne on mielekästä sisällyttää yhden aineen tunnistetietoihin. Lisäksi tulee varmistaa, että vaaratiedot ovat asianmukaiset tunnistetietoprofiilin koko vaihtelualueen osalta. Rekisteröijien on myös pystyttävä perustelemaan, että vaaratiedot, jotka on määrää toimittaa yhteisesti, ovat merkityksellisiä kaikkien näiden koostumusten osalta, tai että niitä muokataan tarvittaessa siten, että tietoja toimitetaan tiettyjen koostumusten osalta erikseen REACH-asetuksen 11 artiklan 3 kohdan nojalla (poisjättäytyminen).

Jotta voitaisiin osoittaa, että tiedot ovat asiaankuuluvia jokaisen prosessin ja lähteen yhdistelmän kannalta, yhdistelmät on dokumentoitava tunnistetietoprofiilissa selkeästi, jotta myös nykyisiin ja tuleviin yhteisrekisteröinnin osallistujiin sovellettavat valinta-/poisjättökriteerit saadaan dokumentoitua.

Muuntyyppisten UVCB-aineiden (ks. keskeisten ohjeiden luku 4.3.2) osalta mahdolliset rekisteröijät voivat käyttää myös koostumusta ja muita parametreja koskevien kuvaajien yhdistelmää tarpeen mukaan. Esimerkiksi joidenkin oleokemikaalien koostumus vaihtelee aineosien alkyyliketjun pituuden jakauman vaihtelun mukaan, ja alkyyliketjun pituuden jakaumaa voidaan käyttää yksilöinnissä lisäkuvaajana. Tietojenvaihtofoorumissa valittu toimintatapa on dokumentoitava selvästi tunnistetietoprofiilissa.

3.3 Aineen tunnistetietoprofiili

On kaikkien tietojen yhteistoimitukseen osallistuvien rekisteröijien vastuulla sopia aineen yksilöinnissä käytettävistä parametreista ja dokumentoida ne selvästi tunnistetietoprofiilissa. Jos normaaleista aineen tunnistetietoja koskevista periaatteista poiketaan kollektiivisesti, se on dokumentoitava selvästi. Koska tunnistetietoprofiilissa dokumentoidaan myös valinta-/poisjättökriteerit, tietojenvaihtofoorumissa on varmistettava, että sovellettavat kriteerit ovat selkeät ja että merkitykselliset liitteiden VII–XI mukaiset kerätyt/tuotetut tiedot todistettavasti kattavat kaikki hyväksytyt koostumusprofiilit.

Jos mahdolliset rekisteröijät sisällyttävät yksitellen tunnistetietoprofiiliinsa 3 artiklan 1 kohdassa tarkoitettuja stabiiloivia lisäaineita, niiden tunnistetiedoista ja pitoisuusalueista on sovittava, ja ne on ilmoitettava tunnistetietoprofiilissa selvästi.

Tietojenkeruuvaiheessa on otettava huomioon myös liitteiden VII–XI tietovaatimusten täyttämiseksi tarvittavien tietojen tuottamisessa/keräämisessä käytettyjen testimateriaalien asianmukaisuus. Tunnistetietoprofiilin kattamien koostumusten edustavuutta koskevien päätelmien perusteet on dokumentoitava teknisessä aineistossa ja sisällytettävä siihen. Tämä on tärkeää etenkin sellaisten monimutkaisten aineiden tunnistetiedoissa, jotka kattavat laaja-alaisen koostumusprofiilin.

Mahdolliset rekisteröijät voivat todeta tiedonkeruun aikana, että niiden tunnistetietoprofiili on liian laaja ja ettei se sovellu kyseisen aineen tunnistetietojen kannalta edustavien vaaratietojen yhteistoimitukseen. Tällöin mahdolliset rekisteröijät voivat päättää jakaa

tietojenvaihtofoorumin, jotta ne voivat käsitellä kahta tai useampaa ainetta erikseen³⁵. Kullekin aineelle laaditaan oma tunnistetietoprofiili. Lisäksi kunkin aineen vaaratiedoille tehdään oma yhteistoimitus, ja vaaratietojen pitää edustaa nimenomaan kyseisiä aineen tunnistetietoja. Syyt, joiden vuosi tietyt vaaratiedot eivät edusta tiettyjä aineen tunnistetietojen parametreja, on dokumentoitava tunnistetietoprofiilissa selkeästi jokaisen erillisen rekisteröinnin osalta. Tässä vaiheessa kyseiset mahdolliset rekisteröijät voivat myös katsoa, että koostumusprofiileja on tarkennettava niiden aineosien ja/tai epäpuhtauksien perusteella, jotka edellyttävät luokitusta ja merkintöjä, PBT-arviointia jne.

Niiden mahdollisten rekisteröijien, jotka aikovat liittyä muiden mahdollisten rekisteröijien yhteisrekisteröintiin, jota ei ole vielä tehty mutta jota koskeva tunnistetietoprofiili on jo valmis, on selvitettävä, ovatko niiden aineen tunnistetiedot tunnistetietoprofiilin rajojen mukaiset. Jos näin ei ole, niiden on neuvoteltava ja sovittava mahdollisten rekisteröijien kanssa, onko profiilia joko laajennettava, jotta uuden jäsenen tiedot voidaan sisällyttää siihen, tai onko katsottava, etteivät uudet tiedot sisälly profiilin laajuuteen.

Tunnistetietoprofiilia on muokattava, jos aineella, jonka mahdollinen rekisteröijä aikoo rekisteröidä, on sellaisia aineen tunnistetietoihin liittyviä parametreja, jotka voivat muuttaa yhteisesti toimitettavien vaaratietojen edustavuutta. Tällaisista parametreista (esimerkiksi tietty epäpuhtaus, eri koostumussuhde, eri vaihe, eri hiukkaskoko jne.) on esitettävä erityisperustelut. Avoimuuden vuoksi tällainen parametri on määritettävä tunnistetietoprofiilissa.

Yksittäistapauksissa mahdolliset ja nykyiset rekisteröijät voivat päättää, etteivät yhteisesti toimitettavat vaaratiedot loppujen lopuksi ole edustavia mahdollisen rekisteröijän aineen kannalta poikkeavien tunnistetietoparametrien vuoksi, koska ne eivät ole tunnistetietoprofiilin hyväksytyissä rajoissa. Tällöin mahdollisen rekisteröijän on toimitettava erillinen rekisteröinti joko yhdessä muiden sellaisten rekisteröijien kanssa, joiden aineen tunnistetiedoissa käytetään tätä parametria, tai yksilöllisesti, jos muita samoja tunnistetietoja käyttäviä rekisteröijä ei ole.

4. Aineen tunnistetietoprofiilin ilmoittaminen rekisteröintiaineistossa

Kun mahdolliset rekisteröijät ovat keränneet/tuottaneet kaikki liitteiden VII–XI mukaiset tiedot aineestaan (vaihe 5

Kuva 2), tietopaketti on valmis toimitettavaksi virastolle IUCLID-tiedostomuodon mukaisissa aineistoissa (vaihe 6

Kuva 2). Jotta tunnistetietoprofiili voidaan ilmoittaa IUCLID-tiedostomuodossa, nimi ja muut tunnisteet, koostumustiedot ja muut tarvittavat parametrit ilmoitetaan IUCLID-osioissa 1.1 ja 1.2.

Aineen tunnistetietoprofiili	Ilmoitettu IUCLIDissa
Nimi ja muut tunnistetiedot	Kaikkien aineistojen osio 1.1
Koostumustiedot ja muut tarvittavat parametrit	Päärekisteröijän aineiston osio 1.2

³⁵ EINECS-luettelon merkitystä aineen tunnistetietojen määrittämisessä REACH-asetuksen mukaisesti koskevia pohdintoja on CARACALin asiakirjassa, joka on hyväksytty REACH- ja CLP-asetuksiin liittyvien toimivaltaisten viranomaisten (CARACAL) neljännessä kokouksessa: CA/74/2009 rev.2 "Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)".

Tunnistetietoprofiilin nimi ja muut tunnisteet ilmoitetaan kaikkien aineistojen osiossa 1.1. Päärekisteröijä ilmoittaa tunnistetietoprofiilin koostumustiedot ja muut tarvittavat tiedot aineistonsa osion 1.2 kohdassa "boundary composition of the substance" (ainetta rajaava koostumus)³⁶. Päärekisteröijän on toimitettava myös kaikki oleelliset liitteiden VII–XI mukaiset tiedot osioissa 4–14 (jos perusteltuja poisjättäytymisiä yhdestä tai useammasta tietovaatimuksesta ei ole) kaikkien rekisteröijien puolesta.

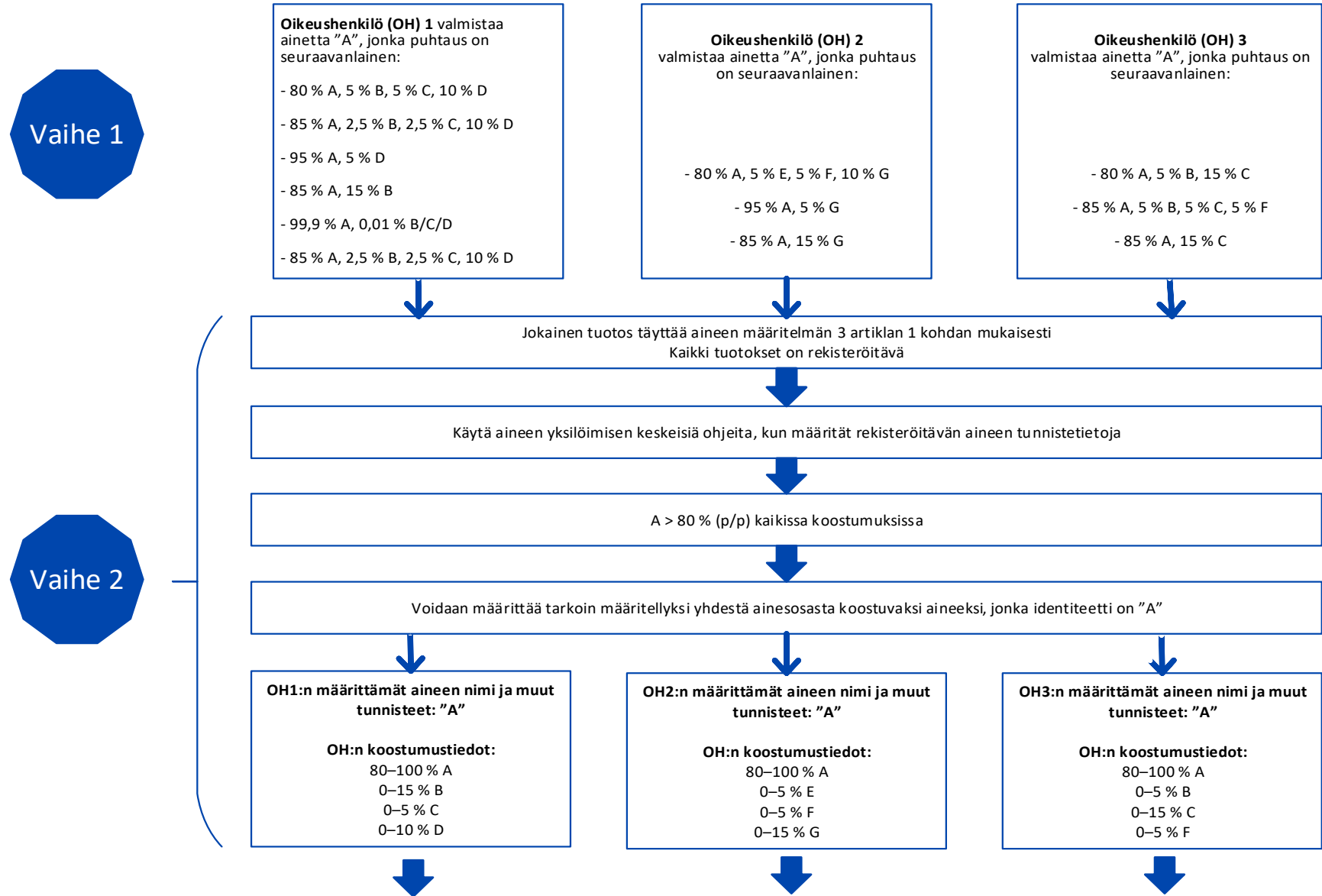
Jokainen rekisteröijä (myös päärekisteröijä) ilmoittaa omaan oikeushenkilöönsä liittyvät koostumustiedot aineesta, jota se valmistaa tai tuo maahan, oman aineistonsa osiossa 1.2. Tämä tarkoittaa sitä, että päärekisteröijä ilmoittaa sekä tunnistetietoprofiilin koostumustiedot että omaan oikeushenkilöönsä liittyvät koostumustiedot aineistonsa osiossa 1.2, kun taas muut rekisteröijät ilmoittavat omat koostumustietonsa itse. Jokaisen vakiorekisteröinnin on myös sisällettävä oleelliset analyysitiedot IUCLIDin osiossa 1.4.

Kunkin rekisteröijän on osoitettava, että sen valmistaman tai maahantuoman aineen koostumustiedot sisältyvät tunnistetietoprofiiliin kohdassa "rajaava koostumus" ilmoitetun mukaisesti, ja että ne sisältyvät myös päärekisteröijän aineistossa toimitettuihin liitteiden VII–XI mukaisiin tietoihin (jos perusteltuja poisjättäytymisiä ei ole).

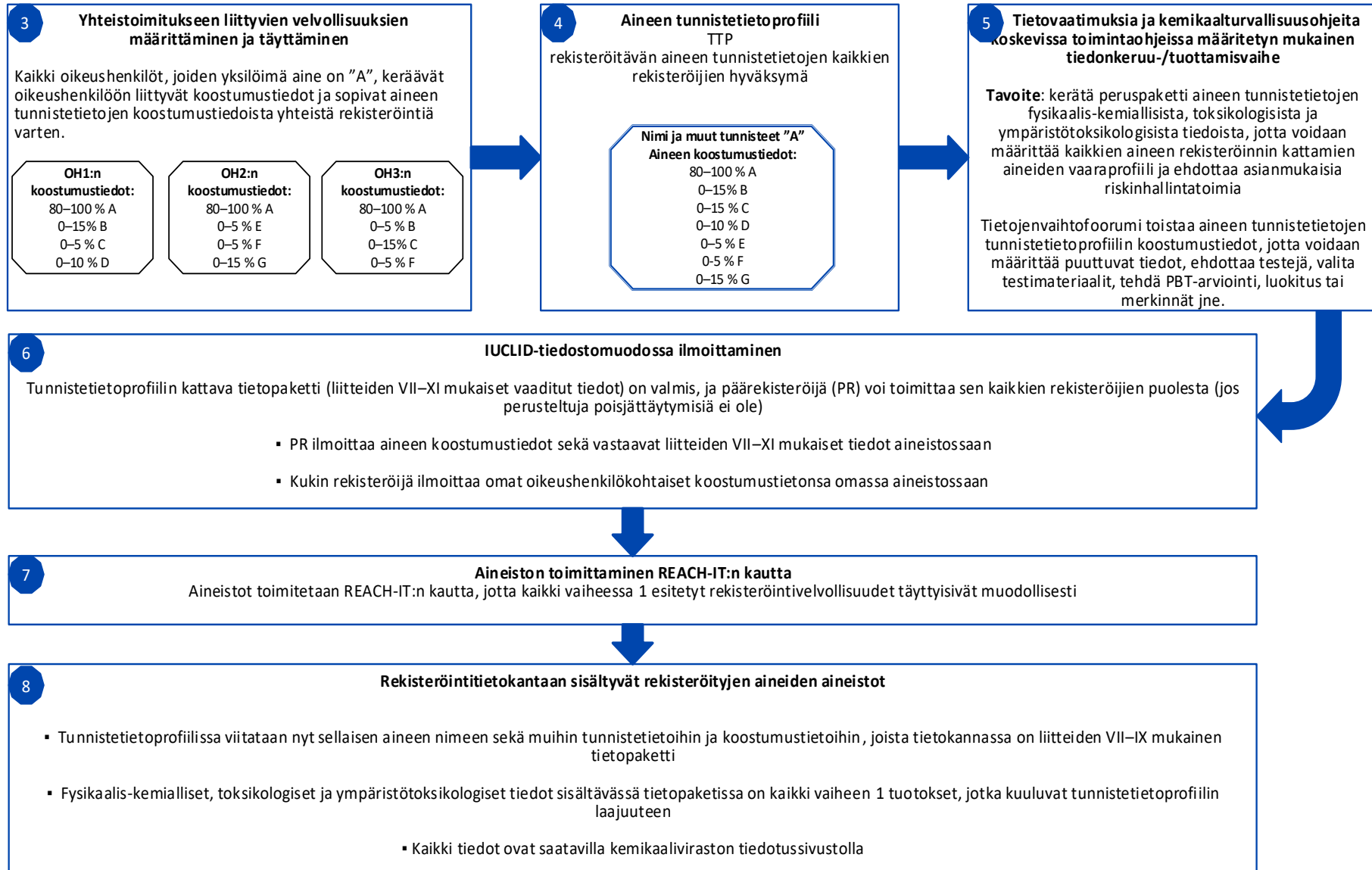
Teknisiä ohjeita siitä, miten koostumustiedot ilmoitetaan IUCLID-tiedostomuodossa, on IUCLID-manuaaleissa (<http://echa.europa.eu/manuals>).

Kuva 2 (seuraava sivu) Yhteenvetokaavio vaiheista, joiden mukaan mahdolliset rekisteröijät toimivat määrittäessään rekisteröintivelvollisuutensa (1), laatiessaan yhtä ainetta koskevan tunnistetietoprofiilinsa (4) ja toimittaessaan rekisteröintinsä, jotta niiden aineen rekisteröintiä koskevat velvollisuudet täyttyisivät muodollisesti (8).

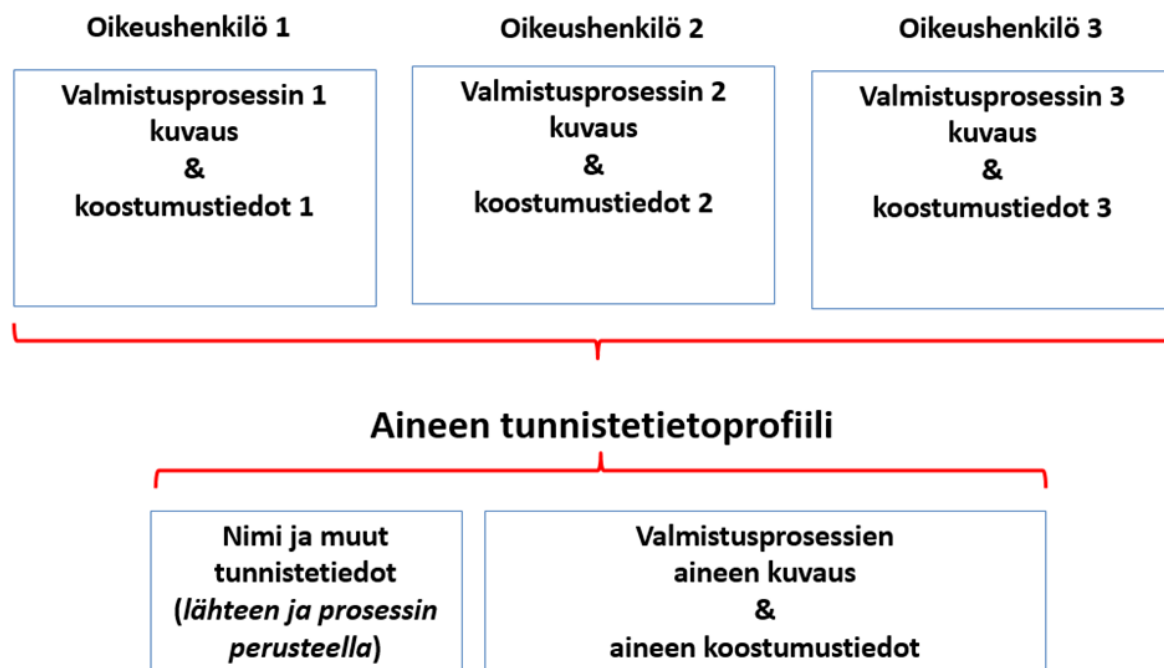
³⁶Ohjeet siitä, miten "ainetta rajaava koostumus" ilmoitetaan, on julkaisussa "Rekisteröinti- ja PPORD-aineistojen laatiminen", joka on osoitteessa <http://echa.europa.eu/manuals>.



Huomautus kuvasta: Aineen tunnistetiedot on esitetty yksinkertaisesta yhdestä ainesosasta koostuvasta aineesta, jotta se olisi helpompi visuaalisoida. Monimutkaisempien aineiden osalta vaiheet ovat samat, mutta tunnistetietojen määrittämisessä voidaan käyttää myös muita elementtejä ja/tai koostumustietoja korvaavia tietoja. Tunnistetioprofiiliin määrittämiseen voi sisältyä vaiheiden 3–5 toistoa.



Kaavio 3: Havainnollistava kaavio sellaisen UVCB-tyyppisen aineen tunnisteprofiilin määrittämisestä (vaihe 4 kuvassa 2), joka on yksilöity yksittäisen oikeushenkilön lähde- ja prosessikuvauksista saatujen lähde- ja prosessikuvaajien perusteella.



EUROPEAN CHEMICALS AGENCY (EUROOPAN KEMIKAALIVIRASTO)
PL 400, 00121 HELSINKI
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://echa.europa.eu)