

Guida per l'identificazione e la denominazione delle sostanze in ambito REACH e CLP



Versione: 1.2
Marzo 2012

AVVISO LEGALE

Il presente documento contiene una serie di informazioni sugli obblighi derivanti dai regolamenti REACH e CLP e sulle relative modalità di adempimento. Tuttavia, si ricorda agli utenti che i testi dei regolamenti REACH e CLP sono gli unici veri riferimenti legali e che le informazioni contenute nel presente documento non costituiscono un parere legale. L'Agenzia europea per le sostanze chimiche declina ogni responsabilità per quanto riguarda il contenuto del presente documento.

CLAUSOLA DI ESCLUSIONE DELLA RESPONSABILITÀ

Questa è una traduzione di lavoro di un documento originariamente pubblicato in inglese. Il documento originale è disponibile sul sito Internet dell'ECHA.

Guida per l'identificazione e la denominazione delle sostanze in ambito REACH e CLP

Riferimento: ECHA-11-G-10.1-IT
Data di pubblicazione: marzo 2012
Lingua: IT

© Agenzia europea per le sostanze chimiche, 2012
Copertina © Agenzia europea per le sostanze chimiche

La riproduzione è autorizzata con citazione della fonte nella seguente forma "Fonte: Agenzia europea per le sostanze chimiche, <http://echa.europa.eu/>", e previa notifica scritta all'unità di comunicazione ECHA (publications@echa.europa.eu).

Per inviare eventuali osservazioni o domande relative al presente documento, utilizzare il modulo per la richiesta di informazioni (riportando il riferimento e la data di pubblicazione) al servizio di helpdesk dell'ECHA. Il modulo per la richiesta di informazioni è reperibile alla pagina Contatti dell'ECHA all'indirizzo: http://echa.europa.eu/about/contact_en.asp

AGENZIA EUROPEA PER LE SOSTANZE CHIMICHE

Indirizzo postale: Casella postale 400, FI-00121 Helsinki, Finlandia
Indirizzo: Annankatu 18, Helsinki, Finlandia

INTRODUZIONE

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

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

Cronologia del documento

Versione	Commento	Data
Versione 1	Prima edizione	Giugno 2007
Versione 1.1	<p>Rettifica</p> <p>La rettifica comprende i seguenti adeguamenti: correzioni editoriali, sostituzione delle informazioni aggiornate, correzione di esempi e introduzione di riferimenti aggiornati (in forma di note a piè di pagina), volte a migliorarne la leggibilità.</p> <p>Tali adeguamenti, tuttavia, non vanno a modificare le prescrizioni a carico dell'industria.</p> <p>Le principali modifiche sono indicate nell'appendice 3.</p>	Novembre 2011
Version2 1.2	<p>Rettifica</p> <p>La definizione di "sostanza soggetta a un regime transitorio" è stata adeguata alla definizione del regolamento (CE) n. 1907/2006 così come introdotta dal regolamento (CE) n. 1354/2007 del Consiglio e dalla rettifica, GU L 36, 5.2.2009, p.84 (1907/2006).</p> <p>Notare che le modifiche della versione 1.1 e 1.2 sono consolidate in una singola versione tradotta 1.2 per le lingue diverse dall'inglese.</p>	Marzo 2012

SOMMARIO

1	GENERALE	1
1.1	OBIETTIVI.....	1
1.2	AMBITO DI APPLICAZIONE.....	2
1.3	STRUTTURA DELLA GUIDA.....	3
2	DEFINIZIONI E ABBREVIAZIONI	4
2.1	ABBREVIAZIONI.....	4
2.2	DEFINIZIONI.....	5
3	QUADRO PER L'IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE NELL'AMBITO DEI REGOLAMENTI REACH E CLP	8
3.1	DEFINIZIONE DI SOSTANZA.....	8
3.2	INVENTARIO CE.....	8
3.2.1	Il ruolo dell'Inventario CE all'entrata in vigore del regolamento REACH.....	10
3.2.2	I numeri in elenco dopo l'entrata in vigore del REACH.....	10
3.3	REQUISITI PER L'IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE IN REACH E CLP.....	11
4	GUIDA PER L'IDENTIFICAZIONE E LA DENOMINAZIONE DELLE SOSTANZE IN AMBITO REACH E CLP	13
4.1	INTRODUZIONE.....	13
4.2	SOSTANZE DALLA COMPOSIZIONE BEN DEFINITA.....	17
4.2.1	Sostanza mono-componente.....	18
4.2.2	Sostanza multi-componente.....	20
4.2.3	Sostanze dalla composizione chimica definita e altri identificatori principali.....	24
4.3	SOSTANZE UVCB.....	25
4.3.1	Indicazioni generali sulle sostanze UVCB.....	26
4.3.2	Tipi specifici di sostanze UVCB.....	34
5	CRITERI PER VERIFICARE SE LE SOSTANZE SONO IDENTICHE	43
6	IDENTITÀ DELLE SOSTANZE NELL'AMBITO DELLA PREREGISTRAZIONE (TARDIVA) E DELLA RICHIESTA	48
6.1	PREREGISTRAZIONE (TARDIVA).....	48
6.2	RICHIESTA.....	48
7	ESEMPI	50
7.1	PEROSSIDICARBONATO DI DIETILE.....	50
7.2	ZOLIMIDINA.....	51
7.3	MISCELA DI ISOMERI.....	51
7.4	AROMA AH.....	54
7.5	MINERALI.....	59
7.6	OLIO ESSENZIALE DI LAVANDIN GROSSO.....	61
7.7	OLIO DI CRISANTEMO E RELATIVI ISOMERI ISOLATI.....	65
7.8	FENOLO, ISOPROPILATO, FOSFATO.....	69
7.9	COMPOSTI DI AMMONIO QUATERNARIO.....	69

7.10 SOSTANZE DERIVATE DAL PETROLIO	73
7.10.1 Corrente per la miscelazione della benzina (C4-C12).....	73
7.10.2 Gasoli (petrolio).....	74
7.11 ENZIMI	75
7.11.1 Subtilisina.....	75
7.11.2 -Amilasi	77
8 DESCRIZIONE DELLE SOSTANZE IN IUCLID 5.....	78
8.1 PRINCIPI GENERALI	78
8.1.1 Inventari	79
8.1.2 Insieme di dati sulla sostanza (sezioni 1.1, 1.2, 1.3 e 1.4 di IUCLID).....	82
8.2 ESEMPI SULLE MODALITÀ DI COMPILAZIONE DI IUCLID 5.....	84
8.2.1 Sostanza mono-componente	85
8.2.2 Sostanza multi-componente.....	86
8.2.3 Sostanza definita mediante la sua composizione chimica più altri identificatori	88
8.2.4 Sostanza UVCB	89
8.3 COMUNICAZIONE DELLE INFORMAZIONI ANALITICHE	90
9 APPENDICE I – STRUMENTI ORIENTATIVI	92
10 APPENDICE II – GUIDA TECNICA IN BASE AL PARAMETRO DI IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE	95
11 APPENDICE III - AGGIORNAMENTO DEL DOCUMENTO	111

Tabelle

Tabella 2.1: abbreviazioni.....	4
Tabella 2.2: definizioni.....	5
Tabella 3.1: parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito di REACH a norma dell' <i>allegato VI</i> punto 2	12
Tabella 4.1: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze ben definite simili.....	14
Tabella 4.2: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze UVCB	15

1 GENERALE

Il regolamento REACH [regolamento (CE) n. 1907/2006] stabilisce un sistema per la registrazione, la valutazione, l'autorizzazione e la restrizione delle sostanze chimiche e istituisce l'Agenzia europea per le sostanze chimiche (ECHA) responsabile dell'attuazione del regolamento¹.

Il regolamento CLP [regolamento (CE) n. 1272/2008] è il nuovo regolamento europeo relativo alla classificazione, all'etichettatura e all'imballaggio delle sostanze chimiche e delle miscele². La legislazione introduce, in tutta l'UE, un nuovo sistema per la classificazione e l'etichettatura delle sostanze chimiche sulla base del Sistema mondiale armonizzato delle Nazioni Unite (UN GHS).

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

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

Il documento comprende orientamenti specifici per differenti tipi di sostanze.

Il presente documento orientativo trova applicazione nell'identificazione e denominazione delle sostanze regolate ai sensi di REACH e del regolamento CLP.

1.1 OBIETTIVI

L'obiettivo del presente documento è quello di fornire orientamenti ai fabbricanti e agli importatori in merito alla registrazione e alla dichiarazione dell'identità di una sostanza nell'ambito dei regolamenti REACH e CLP. Quale importante strumento critico per l'identificazione delle sostanze il documento orientativo offre indicazioni su come assegnare alla

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

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

sostanza una denominazione nonché su quando più sostanze possono essere considerate identiche nell'ambito di REACH e CLP. L'identificazione di sostanze identiche è importante ai fini del processo di preregistrazione (tardiva) delle sostanze soggette a regime transitorio, delle richieste, della condivisione dei dati, della trasmissione congiunta dei dati, della notifica all'inventario delle classificazioni e delle etichettature nonché dell'armonizzazione della classificazione ed etichettatura.

È opportuno che l'identificazione delle sostanze sia condotta da esperti del settore. Per le parti all'interno del settore che hanno maturato poca esperienza nell'ambito dell'identificazione delle sostanze, come appendice al presente documento orientativo sono offerte ulteriori indicazioni sui parametri di identificazione.

Inoltre, nel presente documento sono elencati alcuni link a strumenti per il supporto della caratterizzazione e del controllo dell'identità chimica di una sostanza.

1.2 AMBITO DI APPLICAZIONE

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

A norma dell'*articolo 10* di REACH, ai fini della registrazione è necessario che l'identità della sostanza sia registrata utilizzando i parametri specificati nella sezione 2 dell'*allegato VI* al regolamento REACH (cfr. **tabella 3.1**). Parametri simili (come indicato nelle sezioni da 2.1 a 2.3.4 dell'*allegato VI* di REACH) sono necessari anche per la registrazione dell'identità di una sostanza ai fini della notifica a norma dell'*articolo 40, paragrafo 1*, del CLP. Il presente documento di orientamento è incentrato sull'adeguata identificazione delle sostanze che rientrano nella definizione legale di sostanza fornita da REACH e CLP e fornisce una serie di indicazioni sui parametri per l'identificazione delle sostanze riportati nella sezione 2 dell'*allegato VI* al regolamento REACH. Le informazioni fornite sull'identità delle sostanze devono essere sufficienti per consentirne l'identificazione. Uno o più parametri di identificazione delle sostanze possono essere omessi se non è tecnicamente possibile o non sembra necessario, dal punto di vista scientifico, fornire le informazioni richieste. Le motivazioni di tali omissioni devono essere indicate in modo chiaro e basate su una giustificazione scientifica.

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

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

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

norma di REACH (cfr. *articolo 2* di REACH). Anche le sostanze elencate nell'*allegato IV* di REACH e le sostanze rispondenti a determinati criteri di cui all'*allegato V* di REACH sono esentate dall'obbligo di registrazione. Si noti che, sebbene una sostanza possa essere esentata dalla registrazione, ciò non significa necessariamente che detta sostanza sia esentata da altri Titoli presenti nel regolamento REACH o dalle prescrizioni stabilite dal regolamento CLP.

1.3 STRUTTURA DELLA GUIDA

Nel capitolo 1 sono offerte informazioni di base quali gli obiettivi e l'ambito di applicazione della presente guida mentre nel capitolo 2 possono essere reperite le abbreviazioni e le definizioni utilizzate. Le informazioni inerenti il quadro normativo per l'identificazione delle sostanze, per esempio la definizione e le prescrizioni in materia di informazione delle sostanze presenti nel testo legale, sono riportate nel capitolo 3.

Nel capitolo 4 è fornita una guida pratica all'identificazione e denominazione delle sostanze.

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

Il capitolo 5 offre indicazioni volte a stabilire se le sostanze possono essere considerate o meno identiche. Il capitolo 6 offre indicazioni sull'identità delle sostanze nell'ambito dei processi di richiesta e di preregistrazione (tardiva).

Inoltre, nel capitolo 7, sono stati elaborati alcuni esempi dettagliati, utilizzando la guida pratica del capitolo 4, volti a mostrare come l'industria possa lavorare utilizzando le indicazioni presenti all'interno di questo documento orientativo.

Infine il capitolo 8 fornisce orientamenti sulla descrizione delle sostanze in IUCLID 5.

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

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

L'appendice III mostra le principali modifiche apportate a ciascuna nuova versione della guida.

2 DEFINIZIONI E ABBREVIAZIONI

2.1 ABBREVIAZIONI

Nella **tabella 2.1** sono elencate e chiarite le principali abbreviazioni utilizzate in questa guida.

Tabella 2.1: abbreviazioni

Abbreviazioni	Significato
AAS	Spettroscopia ad adsorbimento atomico
AISE	Associazione internazionale dei saponi, detergenti e prodotti di manutenzione
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP	Regolamento (CE) n. 1272/2008 relativo alla classificazione, all'etichettatura e all'imballaggio delle sostanze e delle miscele
CE	Commissione europea
EINECS	Inventario europeo delle sostanze chimiche esistenti a carattere commerciale
ELINCS	Lista europea delle sostanze chimiche notificate
ENCS	Sostanze chimiche nuove ed esistenti (Giappone)
ESIS	Sistema europeo di informazione sulle sostanze chimiche
UE	Unione europea
GC	Gas Cromatografia
GHS	Sistema globale armonizzato
HPLC	Cromatografia liquida ad alte prestazioni
InChI	Identificatore internazionale delle sostanze chimiche IUPAC
INCI	Nomenclatura internazionale degli ingredienti cosmetici
IR	Infrarossi
ISO	Organizzazione internazionale per la standardizzazione
IUCLID	Banca dati internazionale uniforme di informazioni sulle sostanze chimiche
IUBMB	Unione internazionale di biochimica e biologia molecolare
IUPAC	Unione internazionale della chimica pura e applicata
MS	Spettroscopia di massa
NLP	No Longer Polymer (Non più polimero)
NMR	Risonanza magnetica nucleare
ppm	Parti per milione
REACH	Registrazione, valutazione, autorizzazione e restrizione delle sostanze chimiche
SIEF	Forum per lo scambio di informazioni sulle sostanze
SMILES	Simplified molecular input line entry specification
TSCA	Legge per il controllo delle sostanze tossiche (USA)
UVCB	Sostanze di composizione sconosciuta o variabile, prodotti di una reazione complessa o materiali biologici
UV/VIS	Ultravioletti/visibili
p/p	Peso/peso
XRD	Diffrazione ai raggi X
XRF	Fluorescenza ai raggi X

2.2 DEFINIZIONI

Nella **tabella 2.2** sono elencate e chiarite le principali definizioni utilizzate in questa guida.

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

Tabella 2.2: definizioni

Definizione	Descrizione
Additivo	Sostanza che è stata intenzionalmente aggiunta per stabilizzare la sostanza ³ .
Lega*	Un materiale metallico, omogeneo su scala macroscopica, composto da due o più elementi combinati in modo tale da non poter essere facilmente separati con processi meccanici. Le leghe sono considerate miscele speciali.
Articolo*	Un oggetto al quale durante la produzione viene data una forma, una superficie o un disegno speciali che determinano la sua funzione in misura più elevata di quanto non lo faccia la sua composizione chimica.
Impronta cromatografica	Rappresentazione della composizione di una sostanza a partire dalla distribuzione caratteristica dei costituenti in un cromatogramma analitico.
Componente	Sostanza aggiunta intenzionalmente per formare una miscela.
Costituente	Ogni singola specie presente in una sostanza che può essere caratterizzata dalla sua identità chimica unica.
Inventario CE	Sebbene non definito legalmente dal regolamento REACH, l'inventario CE è costituito dai tre elenchi europei indipendenti e giuridicamente approvati delle sostanze presenti nei precedenti quadri normativi UE delle sostanze chimiche: EINECS, ELINCS ed elenco NLP (non più polimeri). Le voci presenti nell'inventario CE sono costituite da una denominazione chimica e un numero (nome CE e numero CE), un numero CAS, una formula molecolare (se disponibile) e una descrizione (per alcuni tipi di sostanze).
Numero CE	Il numero CE è l'identificatore numerico delle sostanze nell'inventario CE.
Impurità	Una componente indesiderata presente in una sostanza allo stato di fabbricazione. Esso può avere origine dai materiali di partenza oppure essere il risultato di reazioni secondarie o incomplete durante il processo di fabbricazione. Benché sia presente nella sostanza finale, essa non è stata aggiunta intenzionalmente.

³ In altri settori un additivo può avere anche altre funzioni, per esempio regolatore del pH o agente colorante. Tuttavia, nel regolamento REACH e nel presente TGD (documento di guida tecnica) un additivo è un agente stabilizzante.

Definizione	Descrizione
Sostanza intermedia*	<p>Una sostanza fabbricata, consumata o utilizzata per essere trasformata, mediante un processo chimico, in un'altra sostanza (in seguito denominata <i>sintesi</i>):</p> <p>a) <i>sostanza intermedia non isolata</i>, una sostanza intermedia che durante la sintesi non è intenzionalmente rimossa (tranne che per il prelievo di campioni) dalle apparecchiature in cui la sintesi ha luogo. Tali apparecchiature comprendono il recipiente di reazione con i suoi accessori e le apparecchiature attraverso cui la sostanza o le sostanze passano durante un processo a flusso continuo o a lotti, nonché le tubazioni mediante cui la sostanza o le sostanze sono trasferite da un recipiente a un altro in cui si produce la fase successiva della reazione; non comprendono invece il serbatoio o altri recipienti in cui la sostanza o le sostanze sono conservate dopo essere state fabbricate;</p> <p>b) <i>sostanza intermedia isolata in sito</i>, una sostanza intermedia che non presenta le caratteristiche che definiscono una sostanza intermedia non isolata e nel caso in cui la fabbricazione della sostanza intermedia e la sintesi di una o più altre sostanze derivate da essa avvengono nello stesso sito, gestito da una o più persone giuridiche;</p> <p>c) <i>sostanza intermedia isolata trasportata</i>, una sostanza intermedia che non presenta le caratteristiche che definiscono una sostanza intermedia non isolata e che è trasportata tra altri siti o fornita ad altri siti;</p>
IUCLID	Banca dati internazionale uniforme di informazioni sulle sostanze chimiche. IUCLID è una banca dati e un sistema di gestione per l'amministrazione dei dati sulle sostanze chimiche.
Numero in elenco	Numero attribuito automaticamente da REACH-IT. Viene applicato a tutte le presentazioni valide in entrata (per esempio preregistrazioni, PPORD, richieste, registrazioni, notifiche di classificazione ed etichettatura). Un numero in elenco non ha valenza legale ed è utilizzato esclusivamente all'interno dell'ECHA come identificatore tecnico per la gestione delle presentazioni.
Componente principale	Un costituente, che non è un additivo o un'impurezza, in una sostanza che costituisce una parte significativa di tale sostanza ed è pertanto usato nella denominazione e nell'identificazione dettagliata della sostanza.
Fabbricazione*	La produzione o l'estrazione di sostanze allo stato naturale.
Miscela*	Miscela o soluzione costituita da due o più sostanze.
Monomero*	Una sostanza in grado di formare legami covalenti con una sequenza di molecole aggiuntive, uguali o diverse, nelle condizioni della pertinente reazione di formazione del polimero utilizzata per quel particolare processo.
Sostanza mono-componente	Come regola generale, una sostanza, definita dalla sua composizione, in cui un componente principale è presente in una concentrazione minima pari all'80% (p/p).
Sostanza multi-componente	Come regola generale una sostanza, definita dalla sua composizione, in cui più di un componente principale è presente in una concentrazione $\geq 10\%$ (p/p) e $< 80\%$ (p/p).
Sostanza non soggetta a un regime transitorio	Una sostanza che richiede la registrazione che non usufruisce del regime transitorio previsto per sostanze soggette a un regime transitorio ai sensi del REACH.
Sostanza non modificata chimicamente*	Una sostanza la cui struttura chimica rimane immutata, anche se è stata soggetta ad un processo o trattamento chimico o trasformazione mineralogica fisica, ad esempio al fine di rimuovere le impurezze.

Definizione	Descrizione
Sostanza notificata	Una sostanza per la quale è stata presentata una notifica e che potrebbe essere immessa sul mercato a norma della direttiva 67/548/CEE.
Sostanza soggetta a un regime transitorio*	Una sostanza che soddisfa almeno uno dei seguenti criteri: (a) è elencata nell'inventario europeo delle sostanze chimiche esistenti a carattere commerciale (EINECS); b) è stata fabbricata nella Comunità o nei paesi che hanno aderito all'Unione europea il 1° gennaio 1995, il 1° maggio 2004 o il 1° gennaio 2007, ma non immessa sul mercato dal fabbricante o dall'importatore, almeno una volta nei quindici anni precedenti l'entrata in vigore del presente regolamento, a condizione che ne sia fornita la prova documentale; c) è stata immessa sul mercato nella Comunità o nei paesi che hanno aderito all'Unione europea il 1° gennaio 1995, il 1° maggio 2004 o il 1° gennaio 2007, dal fabbricante o dall'importatore prima dell'entrata in vigore del presente regolamento ed è stata considerata notificata a norma dell' <i>articolo 8, paragrafo 1</i> , primo trattino, della direttiva 67/548/CEE nella versione dell'articolo 8, paragrafo 1 risultante dalla modifica apportata dalla direttiva 79/831/CEE, ma non corrisponde alla definizione di polimero contenuta nel presente regolamento, a condizione che il fabbricante o l'importatore disponga di una prova documentale di ciò, compresa una prova attestante che la sostanza è stata immessa sul mercato da qualsiasi fabbricante o importatore tra il 18 settembre 1981 e il 31 ottobre 1993 incluso;
Polimero*	Una sostanza le cui molecole sono caratterizzate dalla sequenza di uno o più tipi di unità monomeriche. Tali molecole devono essere distribuite su una gamma di pesi molecolari in cui le differenze di peso molecolare siano principalmente attribuibili a differenze nel numero di unità monomeriche. Un polimero comprende: a) una maggioranza ponderale semplice di molecole contenenti almeno tre unità monomeriche aventi un legame covalente con almeno un'altra unità monomerica o altro reagente; b) meno di una maggioranza ponderale semplice di molecole dello stesso peso molecolare. Nel contesto di questa definizione, per "unità monomerica" s'intende la forma sottoposta a reazione di un monomero in un polimero.
Sostanza*	Un elemento chimico e i suoi composti allo stato naturale o ottenuti mediante qualsiasi processo di fabbricazione, comprendenti eventuali additivi necessari per preservare la sua stabilità ed eventuali impurezze derivanti dal processo utilizzato, ma esclusi eventuali solventi che possono essere separati senza influenzare la stabilità della sostanza o il cambiamento della sua composizione.
Sostanza presente in natura*	Una sostanza presente in natura in quanto tale, non lavorata o lavorata solo con mezzi manuali, meccanici o gravitazionali, per dissoluzione in acqua, per flottazione, per estrazione con acqua, per distillazione a vapore o per riscaldamento unicamente per eliminare l'acqua, o estratta dall'aria con qualsiasi mezzo.

* Definizioni secondo l'*articolo 3* del regolamento REACH.

3 QUADRO PER L'IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE NELL'AMBITO DEI REGOLAMENTI REACH E CLP

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

Il presente capitolo descrive la definizione delle sostanze in REACH e nel CLP (capitolo 3.1), fornisce una guida generica all'uso dell'inventario CE derivante dai precedenti quadri normativi sulle sostanze chimiche (capitolo 3.2) e offre ulteriori informazioni di base sulle prescrizioni in materia di identificazione delle sostanze derivanti da REACH (capitolo 3.3).

3.1 DEFINIZIONE DI SOSTANZA

L'*articolo 3, paragrafo 1* di REACH e l'*articolo 2, paragrafo 7* del CLP forniscono la definizione di sostanza:

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

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

3.2 INVENTARIO CE

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

Le sostanze presenti sul mercato europeo tra il 1° gennaio 1971 e il 18 settembre 1981 sono elencate nell'inventario europeo delle sostanze chimiche esistenti a carattere commerciale (EINECS)^{4, 5, 6}.

⁴ EINECS si basa sull'inventario ECOIN (European COre Inventory) a cui l'industria può presentare una dichiarazione supplementare sulle sostanze (secondo i criteri per la dichiarazione delle sostanze per EINECS). ECOIN è stato creato fondendo diversi elenchi di sostanze chimiche che si presumeva fossero presenti sul mercato europeo (per esempio TSCA). L'EINECS è stato pubblicato il 15 giugno 1990 e comprende più di 100 000 sostanze. Nel corso d'uso dell'inventario, sono stati identificati diversi errori (errori di stampa, per esempio denominazioni chimiche, formule o numeri di registrazione CAS errati), per tale ragione il 1° marzo 2002 è stata pubblicata una correzione.

⁵ Versione non riservata del manuale sulle decisioni per l'applicazione del sesto e del settimo emendamento alla

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

Le sostanze notificate e immesse sul mercato dopo il 18 settembre 1981 sono elencate nella lista europea delle sostanze chimiche notificate (ELINCS).⁵ Questo inventario (lista) comprende tutte le sostanze notificate fino al 31 maggio 2008 ai sensi della direttiva 67/548/CEE e sue relative modifiche. Tali sostanze sono dette "nuove sostanze", in quanto al 18 settembre 1981 non erano ancora state immesse sul mercato comunitario. La Commissione europea, dopo una revisione condotta dalle autorità competenti degli Stati membri (MSCA), attribuiva un numero ELINCS a ciascuna sostanza. Contrariamente all'EINECS, l'ELINCS non comprende un numero CAS fra le sue voci ma piuttosto il numero di notifica attribuito dalla MSCA, il nome commerciale (se disponibile), la classificazione e la denominazione IUPAC per le sostanze classificate. I numeri ELINCS sono anch'essi numeri a sette cifre che però iniziano sempre per 4 (4xx-xxx-x).

I polimeri erano esclusi dall'inserimento nell'EINECS ed erano soggetti a regole speciali nell'ambito della direttiva 67/548/CEE^{7, 8}. Il termine "polimero" è stato ulteriormente definito nel 7° emendamento della direttiva 67/548/CEE (direttiva 92/32/CEE). In seguito all'attuazione di tale definizione, alcune sostanze che venivano considerate polimeri, conformemente alle norme EINECS che prevedevano l'obbligo di notifica, non erano più considerate polimeri ai sensi del settimo emendamento. Poiché tutte le sostanze che non sono elencate nell'EINECS erano soggette a notifica, tutte le sostanze "No-Longer Polymers" (NLP) teoricamente dovrebbero essere state notificate. Tuttavia il Consiglio dei ministri ha chiarito che per questo tipo di sostanze, i no-longer polymers, non è richiesta una notifica retroattiva. Alla Commissione è stato richiesto di redigere un elenco di No-Longer Polymers (elenco NLP). Le sostanze da includere in questo elenco erano quelle presenti sul mercato UE tra il 18 settembre 1981 (data dell'entrata in vigore della direttiva 79/831/CEE, sesta modifica della direttiva 67/548/CEE) e il 31 ottobre 1993 (data di entrata in vigore della direttiva 92/32/CEE, settima modifica della direttiva 67/548/CEE) e che soddisfacevano il requisito secondo cui erano considerate polimeri ai sensi delle regole di notifica relative all'EINECS ma che non erano più considerate polimeri in base alla settima modifica. L'elenco NLP non è esaustivo. Le sostanze presenti nell'elenco NLP sono identificate mediante una denominazione chimica, un numero CAS e un numero a sette cifre chiamato numero NLP. Un numero NLP inizia sempre per 5 (5xx-xxx-x).

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

È possibile reperire informazioni su queste sostanze sul sito web del Centro comune di ricerca della Commissione europea (<http://esis.jrc.ec.europa.eu/>). In futuro un inventario delle sostanze registrate sarà gestito e pubblicato dall'Agenzia europea per le sostanze chimiche.

direttiva 67/548/CEE (direttive 79/831/CEE e 92/32/CEE) dell'Ufficio europeo delle sostanze chimiche (2005). EUR 20519 EN. Versione aggiornata del giugno 2005.

⁶ Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) Inventario EINECS delle sostanze presenti sul mercato comunitario. Tox Env Chem Vol. 37, pag. 21-33.

⁷ Notifica di nuove sostanze chimiche a norma della direttiva 67/548/CEE concernente la classificazione, l'imballaggio e l'etichettatura delle sostanze pericolose dell'Ufficio europeo delle sostanze chimiche (2003). Elenco No Longer Polymer. EUR 20853 EN.

⁸ Rasmussen K, Christ G and Davis JB (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC (Registrazione di polimeri in conformità della direttiva 67/548/CEE). Tox Env Chem Vol. 67, pagg. 251-261.

3.2.1 Il ruolo dell'Inventario CE all'entrata in vigore del regolamento REACH

L'inventario CE può essere utilizzato come strumento, da fabbricanti e importatori, per decidere se una sostanza è soggetta a regime transitorio o meno. Pertanto l'inventario CE aiuterà i fabbricanti e gli importatori a capire *quando* è richiesta la registrazione di una sostanza e se sono necessarie una preregistrazione (tardiva) o una richiesta.

Il regolamento REACH stabilisce differenti procedure per la registrazione di sostanze "esistenti" (soggette a regime transitorio) (secondo quanto definito dall'*articolo 3, paragrafo 20*) e "nuove" ("non soggette a regime transitorio") nonché per la condivisione dei relativi dati⁹.

Se una sostanza è stata precedentemente notificata in conformità della direttiva 67/548/CEE e, di conseguenza, è presente nell'elenco ELINCS, ai fini di REACH (*articolo 24*) la notifica trasmessa sarà considerata come una registrazione. Queste sostanze sono considerate già registrate dal rispettivo fabbricante o importatore che ha presentato la notifica e non è necessario che questi esegua una registrazione iniziale. Ciononostante, il fabbricante/l'importatore ha l'obbligo di mantenere la registrazione aggiornata. Ulteriori fabbricanti/importatori di una sostanza presente nell'elenco ELINCS (non contemplata da una precedente/i notifica/notifiche) sono tenuti a eseguire la registrazione (come per le sostanze non soggette a un regime transitorio) e a stabilire una condivisione dei dati con il dichiarante precedente. Nella Guida alla registrazione, disponibile sul sito web dell'ECHA nella sezione dedicata alle guide all'indirizzo http://guidance.echa.europa.eu/guidance_en.htm, sono fornite ulteriori indicazioni sull'argomento.

3.2.2 I numeri in elenco dopo l'entrata in vigore del REACH

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

Contrariamente a quanto accade per le voci EINECS, ELINCS e NLP, i numeri in elenco non si basano su una prescrizione legale né sono stati pubblicati nella Gazzetta ufficiale dell'Unione europea. Pertanto i numeri in elenco non hanno la stessa rilevanza dei numeri CE, con i quali condividono esclusivamente il formato numerico. La loro rilevanza ha solo valore amministrativo e non normativo. Ancora più importante, la maggior parte dei numeri in elenco e l'identificazione delle sostanze a essi ricollegata non sono mai state sottoposte a una verifica volta a stabilirne la correttezza e la validità o a controllare se le indicazioni descritte in questo documento siano state rispettate.

Per questa ragione, è stato inizialmente stabilito di non rilasciare al pubblico i numeri in elenco prima che questi siano stati sottoposti a verifica da parte dell'ECHA. Tuttavia, dato che durante il periodo di preregistrazione sono state preregistrate all'incirca 40 000 sostanze prive di un numero CE, l'ECHA ha deciso di pubblicare l'elenco delle sostanze preregistrate corredato dei numeri in elenco, in modo da facilitare la formazione dei SIEF.

⁹ La definizione di sostanze "soggette a regime transitorio" e sostanze "non soggette a un regime transitorio" è fornita nella Guida alla registrazione.

È necessario sottolineare che alla stessa sostanza possono essere attribuiti numeri in elenco differenti qualora per essa siano utilizzati identificatori diversi (per esempio il nome). Ciò è dovuto alla natura completamente automatica del processo che non prevede l'intervento umano. Di conseguenza, è anche possibile che un numero in elenco venga attribuito a una sostanza presente negli elenchi EINECS, ELINCS o NLP se durante una trasmissione all'ECHA mediante REACH-IT viene utilizzato un nome di una sostanza diverso da quello utilizzato nell'inventario CE.

I numeri in elenco iniziano sempre per 6, 7 o 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

A una sostanza identificata nel fascicolo/nella presentazione da un numero CAS, che non è collegata a un numero CE o a un altro numero in elenco già attribuito dall'ECHA, viene assegnato un numero in elenco che inizia per 6.

A una sostanza per la quale nel fascicolo è stato indicato esclusivamente il nome, che non può essere collegata a un nome presente nell'inventario CE o a un nome in elenco, viene attribuito un numero in elenco che comincia per 9.

I numeri in elenco che cominciano per 7 sono attribuiti nel corso del processo di richiesta (*articolo 26* di REACH) dopo la verifica dell'identificazione della sostanza. Queste voci corrispondono a un'identità della sostanza affidabile e verificata.

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

3.3 REQUISITI PER L'IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE IN REACH E CLP

In conformità del regolamento REACH, quando è richiesta una registrazione questa deve includere informazioni sull'identificazione della sostanza come specificato al punto 2 dell'*allegato VI*. Queste informazioni devono essere adeguate e sufficienti a consentire l'identificazione di ogni sostanza. Se non è tecnicamente possibile, o non sembra scientificamente necessario, fornire informazioni su uno o più parametri per l'identificazione della sostanza, i motivi devono essere dichiarati chiaramente come indicato nella *nota 1* dell'*allegato VI*.

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

Una panoramica dei parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito del REACH, *allegato IV*, è fornita nella **tabella 3.1**.

Tabella 3.1: parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito di REACH a norma dell'*allegato VI* punto 2

2.	IDENTIFICAZIONE DELLA SOSTANZA Per ogni sostanza le informazioni fornite dovranno essere sufficienti a identificare ciascuna sostanza. Se non è tecnicamente possibile o non sembra necessario, dal punto di vista scientifico, fornire informazioni su uno o più dei punti elencati di seguito, occorre indicarne chiaramente la ragione.
2.1	Denominazione o altro identificatore di ogni sostanza
2.1.1	<i>Denominazione nella nomenclatura IUPAC o altre denominazioni chimiche internazionali</i>
2.1.2	<i>Altre denominazioni (nome corrente, nome commerciale, abbreviazione)</i>
2.1.3	<i>Numero EINECS o ELINCS (se disponibile e appropriato)</i>
2.1.4	<i>Numero e nome CAS (se disponibili)</i>
2.1.5	<i>Altro codice d'identità (se disponibile)</i>
2.2	Informazioni relative alla formula molecolare e strutturale di ogni sostanza
2.2.1	<i>Formula molecolare e strutturale (compresa la notazione Smiles, se disponibile)</i>
2.2.2	<i>Informazioni sull'attività ottica e sul rapporto tipico degli (stereo) isomeri (se applicabili e appropriate)</i>
2.2.3	<i>Peso molecolare o intervallo di peso molecolare</i>
2.3.	Composizione di ogni sostanza
2.3.1	<i>Grado di purezza (%)</i>
2.3.2	<i>Natura delle impurità, inclusi isomeri e sottoprodotti,</i>
2.3.3	<i>Percentuale di impurità principali (significative)</i>
2.3.4	<i>Natura e ordine di grandezza (... ppm, ... %) degli additivi (ad esempio agenti stabilizzanti o inibitori)</i>
2.3.5	<i>Dati spettrali (ultra-violetti, infra-rossi, risonanza magnetica nucleare o spettro di massa)</i>
2.3.6	<i>Cromatogramma liquido ad alta prestazione, cromatogramma a gas,</i>
2.3.7	<i>Descrizione dei metodi analitici o dei riferimenti bibliografici appropriati per l'identificazione della sostanza e, quando appropriato, per l'identificazione di impurità e additivi. Queste informazioni devono essere sufficienti a consentire la riproduzione dei metodi.</i>

4 GUIDA PER L'IDENTIFICAZIONE E LA DENOMINAZIONE DELLE SOSTANZE IN AMBITO REACH E CLP

4.1 INTRODUZIONE

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

L'identificazione delle sostanze dovrebbe essere basata quanto meno sui parametri d'identificazione elencati nell'*allegato IV*, punto 2, di REACH (cfr. **tabella 3.1**). Pertanto qualunque sostanza deve essere identificata mediante una combinazione dei parametri identificativi appropriati:

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

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

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

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

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

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

Le regole per l'identificazione e la denominazione di "sostanze ben definite" con un solo costituente sono diverse da quelle per le "sostanze ben definite" con uno o più costituenti. A fronte

della varietà dei tipi di sostanze classificabili tra le sostanze “UVCB”, vengono descritte regole diverse per l’identificazione e la denominazione.

Nelle **tabelle 4.1** e **4.2**, gli identificatori principali sono elencati per diversi esempi dei vari tipi di sostanze. Questi esempi sono raggruppati in modo che le similitudini e le differenze per l’identificazione delle sostanze siano facilmente riconosciute.

Le **tabelle 4.1** e **4.2** non costituiscono un elenco completo di tutti i possibili tipi di sostanze. Questo raggruppamento di sostanze con regole di identificazione e denominazione non dovrebbe essere considerato come un sistema di categorizzazione ufficiale per le sostanze ma come un aiuto pratico per applicare adeguatamente le regole specifiche e per trovare le indicazioni appropriate all'interno del presente documento.

Tabella 4.1: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze ben definite simili

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

Tabella 4.2: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze UVCB

Caratteristiche comuni	Esempi o casi rappresentativi	Identificatori principali			
		Fonte	Processo	Altri identificatori	
Sostanze UVCB (Sostanze di composizione sconosciuta o variabile, prodotti di una reazione complessa o materiali biologici) [Capitolo 4.3]	Materiali biologici (B)	Estratti di materiali biologici, per es. fragranze naturali, oli naturali, coloranti naturali e pigmenti	<ul style="list-style-type: none"> • Piante o specie animale e famiglia • Parte di pianta/animale 	<ul style="list-style-type: none"> • Estrazione • Frazionamento, concentrazione, isolamento, purificazione, ecc. • <u>Derivazione*</u> 	<ul style="list-style-type: none"> • Composizione nota o generica • Impronte cromatografiche e di altro tipo • Riferimento alle norme • Colour Index
		Macromolecole biologiche complesse, per es. enzimi, proteine, frammenti di DNA o RNA, ormoni, antibiotici		<ul style="list-style-type: none"> • Indice standard degli enzimi • Codice genetico • Configurazione stereochimica • Proprietà fisiche • Funzione/attività • Struttura • Sequenza di aminoacidi 	
		Prodotti di fermentazione Antibiotici, biopolimeri, miscele di enzimi, vinacce (prodotti di fermentazione dello zucchero), ecc.	<ul style="list-style-type: none"> • Mezzo di coltura • Microrganismi applicati 	<ul style="list-style-type: none"> • Fermentazione • Isolamento di prodotti • Fasi di purificazione 	<ul style="list-style-type: none"> • Tipo di prodotti: per es. antibiotici, biopolimeri, proteine, ecc. • Composizione nota
	Sostanze chimiche o minerali di composizione scarsamente definita, complessa o variabile (UVC)	Miscele di reazione con composizione scarsamente prevedibile e/o variabile	<ul style="list-style-type: none"> • Materiali di partenza 	<ul style="list-style-type: none"> • <u>Tipo di reazione chimica</u>, per es. esterificazione, alchilazione, idrogenazione 	<ul style="list-style-type: none"> • Composizione nota • Impronte cromatografiche e di altro tipo • Riferimento alle norme
		<ul style="list-style-type: none"> • Frazioni o distillati, per es. sostanze petrolifere • Argilla, per es. bentonite • Catrami 	<ul style="list-style-type: none"> • Greggio • Carbone/Torba • Gas minerali • Minerali 	<ul style="list-style-type: none"> • Frazionamento, distillazione • <u>Conversione di frazioni</u> • Processi fisici • Residui 	<ul style="list-style-type: none"> • Intervalli dei limiti massimi • Intervallo di lunghezza della catena • Rapporto aromatici/alifatici • Composizione nota • Indice standard
		Concentrati o fusi, per es. minerali metallici o residui di vari processi di fusione o metallurgici, per es. scorie	<ul style="list-style-type: none"> • Minerali metallici 	<ul style="list-style-type: none"> • Fusione • Trattamento al calore • Processi metallurgici vari 	<ul style="list-style-type: none"> • Composizione nota o generica • Concentrazione di metalli

* I processi sottolineati indicano la sintesi di nuove molecole

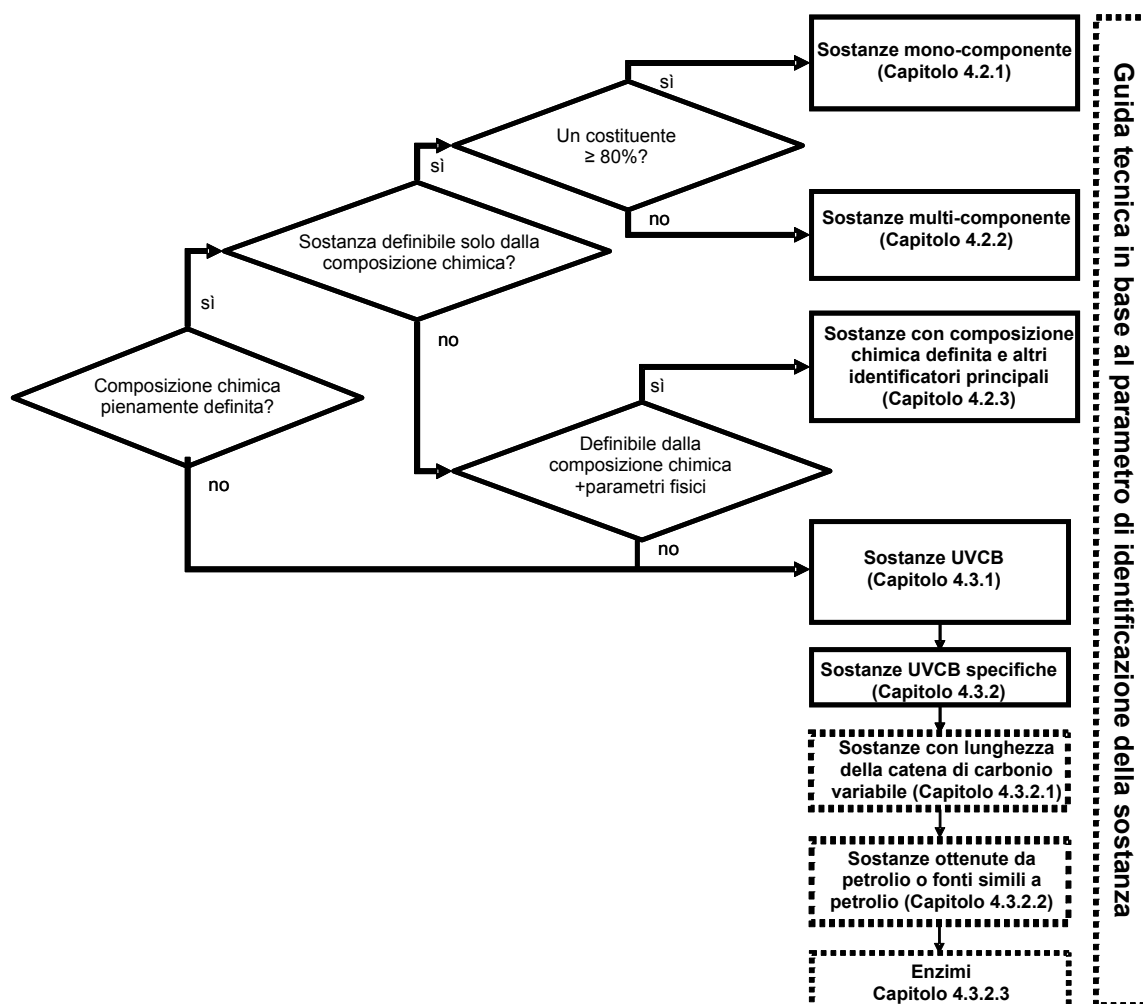
Il presente capitolo è diviso in sottocapitoli che contengono indicazioni specifiche per l'identificazione dei vari tipi di sostanze. Una legenda ai capitoli appropriati è fornita nella **figura 4.1**.

La legenda in **figura 4.1** è basata su criteri che sono "regole empiriche". Il dichiarante ha la responsabilità di selezionare il capitolo più appropriato e di registrare l'identità della sostanza in linea con le regole e i criteri relativi a quel tipo di sostanza.

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

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

Figura 4.1:legenda ai capitoli e alle appendici del documento per ottenere indicazioni adeguate relative ai diversi tipi di sostanza



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

4.2 SOSTANZE DALLA COMPOSIZIONE BEN DEFINITA

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

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

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

Tutti i costituenti (a eccezione degli additivi) che non sono il/i costituente/i principale/i nella sostanza mono-componente o in una sostanza multi-componente sono considerati impurezze. Sebbene in alcuni settori sia prassi generale usare il termine "tracce", nel presente documento si usa solo il termine "impurezze".

I differenti costituenti hanno differenti requisiti di identificazione:

- i costituenti principali contribuiscono alla denominazione della sostanza e ciascun costituente principale deve essere completamente specificato mediante tutti gli identificatori pertinenti;
- le impurezze non contribuiscono alla denominazione della sostanza e devono essere specificate solo dal nome, numero CAS e numero CE e/o formula molecolare.
- gli additivi contribuiscono alla composizione della sostanza (ma non alla designazione) e andrebbero sempre identificati integralmente.

Si usano alcune convenzioni per distinguere tra sostanze mono-componente e multi-componente:

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

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

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

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

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

Normalmente, le impurezze presenti in una concentrazione $\geq 1\%$ dovrebbero essere specificate. Tuttavia, le impurezze pertinenti ai fini della classificazione e/o della valutazione PBT¹⁰ devono sempre essere specificate, indipendentemente dalla concentrazione. Come regola generale, le informazioni sulla composizione dovrebbero essere completate al 100%.

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

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

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

4.2.1 Sostanza mono-componente

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

4.2.1.1 Convenzione per la denominazione

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

4.2.1.2 Identificatori

Una sostanza mono-componente è identificata mediante la denominazione chimica e altri identificatori (inclusa la formula molecolare e di struttura) del costituente principale e l'identità chimica delle impurezze e/o degli additivi, e la loro concentrazione o concentrazioni e l'intervallo o gli intervalli di concentrazione tipici, dimostrati mediante informazioni spettroscopiche e analitiche.

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

Componente principale	Contenuto (%)	Impurità	Contenuto (%)	Identità della sostanza
m-xilene	91	o-xilene	5	m-xilene
o-xilene	87	m-xilene	10	o-xilene

Normalmente, il costituente principale è presente in concentrazione $\geq 80\%$ e dovrebbe essere specificato completamente mediante tutti i suddetti parametri. Le impurezze presenti in concentrazione $\geq 1\%$ dovrebbero essere specificate almeno mediante uno dei seguenti identificatori: nome chimico (nome IUPAC e/o CAS), numero CAS e numero CE e/o formula molecolare. Le impurezze che sono pertinenti per la classificazione e/o per la valutazione PBT¹¹ devono sempre essere specificate dagli stessi identificatori, indipendentemente dalla loro concentrazione.

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

La "regola dell'80%" è stata applicata per la notifica di nuove sostanze (direttiva 67/548/CEE). Può essere vista come una "regola empirica". Tuttavia gli scostamenti da questa regola dell'80% devono essere giustificati. Possibili esempi di scostamento giustificato sono:

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

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

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

Indicazioni su come descrivere le sostanze mono-componente in IUCLID 5 sono offerte nel capitolo 8.2.1. Informazioni aggiuntive possono essere anche reperite nel Manuale per la presentazione dei dati - Parte 18: "Come segnalare l'identità di una sostanza in IUCLID 5 per la registrazione ai sensi di REACH".

4.2.1.3 Informazioni analitiche

Sono necessari dati spettrali sufficienti per confermare la struttura di una sostanza mono-componente. Possono essere adatti numerosi metodi spettroscopici, in particolare la spettroscopia di assorbimento UV/visibile (UV/Vis), la spettroscopia a infrarossi (IR), la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR) e la spettroscopia di massa (MS). Per le

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

sostanze inorganiche, può risultare più opportuno l'utilizzo della diffrazione a raggi X (XRD), la fluorescenza a raggi X (XRF) o la spettroscopia di assorbimento atomico (AAS).

I metodi cromatografici, come la gascromatografia (GC) o la cromatografia liquida ad alte prestazioni (HPLC), sono necessari per confermare la composizione della sostanza. Se del caso, si possono usare anche altre tecniche valide di separazione dei costituenti.

I metodi spettroscopici e analitici sono soggetti a cambiamenti continui. Pertanto è responsabilità del dichiarante presentare dati spettrali e analitici appropriati.

4.2.2 Sostanza multi-componente

Una sostanza multicomponente è una sostanza, definita dalla sua composizione quantitativa, in cui più di un componente principale è presente in un intervallo di concentrazione compreso tra $\geq 10\%$ (p/p) e $< 80\%$ (p/p). Una sostanza multi-componente è il risultato di un processo di fabbricazione¹².

Il regolamento REACH richiede la registrazione di una sostanza così come prodotta. Se una sostanza multi-componente è fabbricata, tale sostanza multi-componente deve essere registrata¹³ ¹⁴. Si deve decidere caso per caso in che misura le diverse fasi di produzione della sostanza sono contemplate nella definizione di "fabbricazione". Tutte le sostanze coperte precedentemente da EINECS (per esempio le sostanze multi-componente erano coperte se tutti i singoli costituenti principali erano elencati in EINECS) sono qualificate come sostanze soggette a regime transitorio. Non occorre testare la sostanza in quanto tale se il profilo di pericolo della sostanza può essere sufficientemente descritto mediante le informazioni relative ai singoli costituenti.

4.2.2.1 Convenzione per la denominazione

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

4.2.2.2 Identificatori

Una sostanza multi-componente è identificata mediante il nome chimico e gli identificatori della sostanza in quanto tale, nonché dalla composizione chimica quantitativa e qualitativa (identità chimica, inclusa la formula molecolare e di struttura) dei costituenti, ed è dimostrata mediante informazioni analitiche.

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

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

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

Esempio				
Componente principale	Contenuto (%)	Impurità	Contenuto (%)	Identità della sostanza
m-xilene o-xilene	50 45	p-xilene	5	Massa di reazione dello m-xilene e dello o-xilene

Per le sostanze multi-componente la composizione chimica è nota e più di un costituente principale è pertinente ai fini dell'identificazione della sostanza. Inoltre, la composizione chimica della sostanza è prevedibile, così come i valori e gli intervalli tipici. I costituenti principali devono essere specificati completamente mediante tutti i parametri pertinenti. La somma delle concentrazioni tipiche dei costituenti principali ($\geq 10\%$) e delle impurezze ($< 10\%$) deve essere pari al 100%.

Per la corretta applicazione della regola del 10% e dell'80%, sostanze aggiunte intenzionalmente, per esempio i regolatori di pH o gli agenti coloranti, non devono essere incluse nel bilancio di massa.

Le impurezze presenti in concentrazione $\geq 1\%$ dovrebbero essere specificate almeno mediante uno dei seguenti identificatori: nome chimico, numero CAS e numero CE e/o formula molecolare. Le impurezze che sono pertinenti ai fini della classificazione e/o della valutazione PBT devono sempre essere specificate dagli stessi identificatori, indipendentemente dalla loro concentrazione.

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

Secondo le regole del presente documento di orientamento, questa è una sostanza multi-componente. Sebbene l'intervallo di un costituente sia $> 80\%$, ciò accade solo occasionalmente e la composizione tipica è $< 80\%$.

Occasionalmente risulta vantaggioso considerare una sostanza come una sostanza multi-componente anche quando un costituente è presente a concentrazioni $\geq 80\%$. Per esempio, una sostanza contiene due costituenti, uno all'85% e l'altro al 10%, e l'equilibrio è rappresentato dalle impurezze. Entrambi i costituenti contribuiscono e sono essenziali per l'effetto tecnico desiderato della sostanza. In questo caso, nonostante un costituente sia presente a una concentrazione $> 80\%$, la sostanza può essere descritta come una sostanza a due costituenti.

Indicazioni su come descrivere le sostanze multi-componente in IUCLID 5 sono offerte nel capitolo 8.2.2. Informazioni aggiuntive possono essere anche reperite nel Manuale per la presentazione dei dati - Parte 18: "Come segnalare l'identità di una sostanza in IUCLID 5 per la registrazione ai sensi di REACH".

4.2.2.3 Informazioni analitiche

Nei casi in cui i dati spettrali forniscono informazioni sulla composizione della sostanza multi-componente, queste informazioni dovrebbero essere riportate. Possono risultare adatti numerosi metodi spettroscopici, in particolare la spettroscopia di assorbimento UV/visibile (UV/VIS), la spettroscopia a infrarossi (IR), la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR) e la spettroscopia di massa (MS). Per le sostanze inorganiche, può risultare più

opportuno l'utilizzo della diffrazione a raggi X (XRD), la fluorescenza a raggi X (XRF) o la spettroscopia di assorbimento atomico (AAS).

L'utilizzo di metodi cromatografici, come la gascromatografia (GC) o la cromatografia liquida ad alte prestazioni (HPLC), sono necessari per confermare la composizione della sostanza. Se del caso, si possono usare anche altre tecniche valide di separazione dei costituenti.

I metodi spettroscopici e analitici sono soggetti a cambiamenti continui. Pertanto è responsabilità del dichiarante presentare dati spettrali e analitici appropriati.

4.2.2.4 Registrazione di singoli costituenti di una sostanza multi-componente

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

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

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

Sostanza C

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

Sostanza D

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

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

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

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

Esempio 1:

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

Sostanza 1: 50% C e 25 % D e 25 % E, 1100 tpa

Sostanza 2: 50% C e 50 % D 500 tpa

Anche in questo caso il prodotto di reazione è il punto iniziale: le due sostanze dovrebbero essere registrate come sostanze multi-componente. Se si segue l'approccio della registrazione dei singoli costituenti¹⁵, si dovrebbe applicare quanto segue:

La dichiarazione della sostanza D in questo caso sarà:

Tonnello: $(25\% * 1100) + (50\% * 500) = 525$ tpa

La determinazione delle prescrizioni in materia di informazione si basa sulla prescrizione più severa. In questo caso: >1000 tpa, poiché il tonnello totale della sostanza multi-componente "C+D+E" è superiore a 1000 tpa.

Nota: in questo esempio le sostanze C ed E dovrebbero essere registrate di conseguenza.

Esempio 2:

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

Sostanza 3: 65% G e 15 % H e 20 % I, 90 tpa

Sostanza 4: 60% G e 40 % H, 90 tpa

Dichiarazione della sostanza G:

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

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

Nota: in questo esempio le sostanze H e I dovrebbero essere registrate di conseguenza.

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

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

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

4.2.3 Sostanze dalla composizione chimica definita e altri identificatori principali

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

Esempi

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

Gli attuali sviluppi nelle nanotecnologie ed esami approfonditi dei pericoli correlati possono determinare la necessità in futuro di informazioni aggiuntive sulle sostanze. Lo stato attuale dello sviluppo non è sufficientemente maturo per includere nel presente documento indicazioni sull'identificazione delle sostanze in nanoforma.

4.2.3.1 Convenzione per la denominazione

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

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

4.2.3.2 Identificatori

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

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

Esempi di identificatori principali aggiuntivi specifici possono essere forniti per i minerali specifici, in quanto i minerali hanno proprietà fisico-chimiche caratteristiche che consentono il completamento della loro identificazione, per esempio: bassissima durezza per il talco, capacità

di rigonfiamento della bentonite, forme della diatomite, altissima densità della barite e area superficiale (assorbimento di azoto).

Indicazioni su come descrivere le sostanze dalla composizione chimica definita e con altri identificatori principali in IUCLID 5 è fornita nel Capitolo 8.2.3.

4.2.3.3 Informazioni analitiche

Devono essere fornite le stesse informazioni analitiche presentate per le sostanze mono-componente (cfr. capitolo 4.2.1) o per le sostanze multi-componente (cfr. capitolo 4.2.2). Per le sostanze per le quali i dati spettrali, cromatogrammi GC o HPLC, non sono sufficienti per l'identificazione, si devono fornire informazioni derivanti da altre tecniche analitiche, per esempio diffrazione a raggi X per i minerali, analisi elementare ecc. Il criterio è quello di fornire informazioni sufficienti per confermare la struttura della sostanza.

4.3 SOSTANZE UVCB

Le sostanze dalla composizione sconosciuta o variabile, i prodotti di reazioni complesse o i materiali biologici^{16,17,18} chiamate anche sostanze UVCB, non possono essere sufficientemente identificate dalla loro composizione chimica poiché:

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

Di conseguenza, le sostanze UVCB richiedono altri tipi di informazioni per la loro identificazione, oltre a quanto si conosce sulla loro composizione chimica.

Dalla **tabella 4.2** si può vedere che gli identificatori principali per i vari tipi di sostanze UVCB sono correlati alla fonte della sostanza e al processo usato; oppure appartengono ad un gruppo di "altri identificatori principali" (per esempio "impronte cromatografiche o di altro tipo"). Il numero e il tipo di identificatori indicati nella **tabella 4.2** rappresentano un'illustrazione della variabilità dei tipi e non devono essere considerati come una panoramica completa. Quando la composizione chimica per esempio di un prodotto di reazioni complesse o di una sostanza di origine biologica è nota, la sostanza dovrebbe essere identificata come sostanza mono-componente o multi-componente, a seconda del caso. Se una sostanza viene definita come UVCB ne consegue che nessuna modifica rilevante relativa alla materia di origine o al processo potrà condurre alla formazione di una sostanza diversa che dovrebbe essere nuovamente registrata. Se una miscela di reazione è identificata come una "sostanza multi-componente", la sostanza può derivare da una fonte differente e/o da processi differenti nella misura in cui la composizione della sostanza finale rimane entro l'intervallo specificato. Pertanto una nuova registrazione non sarebbe richiesta.

¹⁶ Rasmussen K, Pettauer D, Vollmer G et al. (1999) Compilazione dell'EINECS: descrizioni e definizioni utilizzate per le sostanze UVCB. Tox Env Chem Vol. 69, pagg. 403-416.

¹⁷ Registrazione all'inventario TSCA (Toxic Substances Control Act) dell'EPA statunitense (2005-B) per l'associazione di due o più sostanze: prodotti di una reazione complessa.

¹⁸ Registrazione all'inventario TSCA (Toxic Substances Control Act) dell'EPA statunitense (2005-D) per sostanze di composizione sconosciuta o variabile, prodotti di una reazione complessa o materiali biologici: sostanze UVCB.

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

4.3.1 Indicazioni generali sulle sostanze UVCB

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

4.3.1.1 Informazioni sulla composizione chimica

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

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

Per una sostanza UVCB, tutti i costituenti *noti* e tutti i costituenti presenti in concentrazioni $\geq 10\%$, dovrebbero essere specificati almeno mediante denominazione IUPAC inglese e preferibilmente da un numero CAS; si dovrebbero indicare anche le concentrazioni e gli intervalli di concentrazione tipici dei costituenti noti. I costituenti pertinenti ai fini della classificazione e/o della valutazione PBT¹⁹ della sostanza devono sempre essere identificati dagli stessi identificatori, indipendentemente dalla loro concentrazione.

I costituenti sconosciuti dovrebbero essere identificati, se possibile, mediante una descrizione generica della loro natura chimica. Gli additivi dovrebbero essere completamente specificati in modo simile a quello descritto per le sostanze ben definite.

4.3.1.2 Parametri di identificazione principali: nome, fonte e processo

Dato che la composizione chimica da sola non è sufficiente per l'identificazione, la sostanza deve in genere essere identificata tramite il suo nome, la sua origine o fonte e le fasi più importanti effettuate durante la lavorazione. Anche altre proprietà della sostanza possono essere importanti identificatori, come identificatori generici pertinenti (per esempio il punto di ebollizione) o come identificatori cruciali per gruppi specifici di sostanze (per esempio l'attività catalitica per gli enzimi).

¹⁹ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i limiti di concentrazione pertinenti sono disponibili nella Guida alle prescrizioni in materia di informazione e valutazione della sicurezza chimica, capitolo R11: valutazione PBT.

1. Convenzione per la denominazione

In generale il nome di una sostanza UVCB è una combinazione di fonte e processo nello schema generico: prima la fonte poi il/i processo/i.

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

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

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

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

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

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

2. Fonte

La fonte può essere suddivisa in due gruppi:

2.1. Fonti di natura biologica

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

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

2.2. Fonti chimiche o minerali

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

3. Processo

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

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

– Sintesi

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

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

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

– Raffinazione

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

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

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

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

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

Esempi	
Numero CE	Denominazione CE
283-659-9	Stagno, residui di fusione
	Descrizione CE Sostanza risultante dall'uso e dalla produzione di stagno e delle sue leghe ottenuta da fonti primarie e secondarie, incluse sostanze intermedie vegetali riciclate. È costituita principalmente da composti di stagno e può contenere altri metalli non ferrosi residui e relativi composti.
293-693-6	Farina di soia, estraz. delle proteine Residuo
	Descrizione CE Sottoprodotto contenente principalmente carboidrati, prodotto mediante estrazione etanolica di semi di soia sgrassati.

- per gli estratti, si devono indicare il metodo di estrazione, il solvente usato per l'estrazione e altre condizioni pertinenti (per esempio temperatura/intervallo di temperatura).

- per la lavorazione combinata, oltre alle informazioni sulla fonte si deve specificare ogni fase del processo (in modo generico). Questa lavorazione combinata è particolarmente pertinente nel caso di derivazioni chimiche.

Esempi:

- o Una pianta è prima estratta, l'estratto è distillato e la frazione distillata dell'estratto vegetale è usata per la derivazione chimica. La sostanza risultante può essere ulteriormente purificata. Il prodotto purificato può infine essere ben definito mediante la sua composizione chimica e non occorre identificare la sostanza come UVCB. Se il prodotto deve ancora essere considerato come UVCB, la lavorazione combinata può essere descritta come un "derivato chimico purificato di una frazione distillata dell'estratto vegetale".

Se l'ulteriore lavorazione di un estratto include solo la derivazione fisica, la composizione cambierà ma senza la sintesi intenzionale di nuove molecole. Ciononostante la variazione della composizione risulta in una sostanza differente, per esempio un distillato o un precipitato dell'estratto vegetale.

- o Per la produzione di prodotti derivati del petrolio, la derivazione chimica e il frazionamento sono spesso usati in combinazione. Per esempio, la distillazione del petrolio seguita da cracking genera una frazione del materiale di partenza e anche nuove molecole. Pertanto, in tal caso, entrambi i tipi di processi dovrebbero essere identificati oppure il distillato dovrebbe essere specificato come il materiale di partenza del cracking. In particolare ciò si applica ai derivati del petrolio che risultano spesso da una combinazione di processi. Tuttavia per l'identificazione delle sostanze derivate dal petrolio si può usare un sistema specifico separato (vedere capitolo 4.3.2.2).

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

4. Altri parametri per l'identificazione delle sostanza

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

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

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

Indicazioni specifiche sulle regole e sui criteri concernenti l'uso del nome, della fonte e delle informazioni sul processo per l'identificazione delle sostanze UVCB sono incluse in seguito per vari tipi di fonti e processi. Nei paragrafi seguenti sono descritti quattro sottotipi di sostanze

UVCB come una combinazione di fonti biologiche o chimiche/minerali e di processi (sintesi o raffinazione).

Orientamenti su come descrivere le sostanze UVCB in IUCLID 5 sono forniti nel capitolo 8.2.4.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

I minerali come la bentonite o il carbonato di calcio possono essere lavorati per esempio mediante dissoluzione acida e/o precipitazione chimica o in colonne a scambio ionico. Quando la composizione chimica è completamente definita, i minerali dovrebbero essere identificati secondo le indicazioni fornite nella parte appropriata del capitolo 4.2. Se minerali sono lavorati unicamente mediante metodi meccanici, per esempio mediante triturazione, setacciatura,

centrifugazione, flottazione e così via, essi continuano a essere considerati gli stessi minerali estratti dalla miniera. I minerali che sono prodotti attraverso un processo di fabbricazione possono, ai fini dell'identificazione²⁰, essere considerati uguali ai loro equivalenti naturali purché la composizione sia simile e il profilo di tossicità identico.

Un parametro identificativo principale delle sostanze di origine non biologica è la descrizione della/e fase/i di processo pertinente/i.

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

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

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

4.3.1.3 Informazioni analitiche

Nei casi in cui i dati spettrali forniscono informazioni sulla composizione della sostanza UVCB, queste informazioni dovrebbero essere riportate. Per la generazione degli spettri si usano numerosi metodi spettroscopici (UV/VIS, infrarossi, risonanza magnetica nucleare o spettro di massa). I metodi e gli approfondimenti sulle modalità di utilizzo di questi metodi sono soggetti a mutamenti continui. Pertanto è responsabilità del dichiarante presentare dati spettrali appropriati.

Un cromatogramma che possa essere usato come un'impronta deve essere fornito per caratterizzare la composizione della sostanza. Se del caso, si possono usare anche altre tecniche valide di separazione dei costituenti.

4.3.2 Tipi specifici di sostanze UVCB

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

4.3.2.1 Sostanze con variazioni nelle lunghezze della catena di carbonio

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

²⁰ Lo stesso approccio per l'identificazione dei minerali presenti in natura o prodotti chimicamente non significa necessariamente che siano uguali le prescrizioni legali (per es. esenzioni dalla registrazione).

Identificatori e convenzione per la denominazione

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

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

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

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

Descrittore alchilico

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

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

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

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

4.3.2.2 Sostanze ottenute dal petrolio o da fonti simili al petrolio

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

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

1. Convenzione per la denominazione

Per l'identificazione delle sostanze derivate dal petrolio, si raccomanda di assegnare il nome in base a un sistema di nomenclatura stabilito²¹. Questo nome è costituito solitamente dal processo di raffinazione, dalla fonte della corrente e dalla composizione o caratteristiche generali. Se la sostanza contiene una percentuale p/p > 5 % di idrocarburi ad anelli aromatici condensati di 4 – 6 elementi, queste informazioni devono essere incluse nella descrizione. Per le sostanze derivate dal petrolio con un numero EINECS, si deve usare il nome indicato nell'inventario CE.

2. Identificatori

I termini e le definizioni per l'identificazione delle sostanze derivate dal petrolio in genere includono la fonte della corrente, il processo di raffineria, la composizione generale, il numero di atomi di carbonio, l'intervallo di ebollizione o altre caratteristiche fisiche appropriate, e il tipo di idrocarburo predominante.²¹

²¹ US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Addendum I all'elenco di sostanze chimiche candidate. Termini generali che contemplano le correnti dei processi di raffineria del petrolio. US EPA, Ufficio per le sostanze tossiche, Washington DC 20460.

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

Sebbene la composizione chimica non sia l'identificatore principale delle sostanze UVCB, si devono indicare i costituenti principali noti ($\geq 10\%$) e la composizione deve essere descritta in termini generici, per esempio intervallo di peso molecolare, alifatici o aromatici, grado di idrogenazione e altre informazioni essenziali. Inoltre, qualsiasi altro costituente a una concentrazione inferiore che influisca sulla classificazione di pericolo deve essere identificato con nome e concentrazione tipica.

4.3.2.3 Enzimi

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

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

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

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

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

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

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

Uno studio sugli enzimi commissionato dalla commissione europea suggeriva di identificare gli enzimi in base al sistema internazionale per la nomenclatura degli enzimi, IUBMB (Unione internazionale di biochimica e biologia molecolare)²². Questo approccio è stato adottato nel presente documento e consentirà un'identificazione più sistematica, dettagliata e completa degli enzimi rispetto a EINECS.

1. Convenzione per la denominazione

Gli enzimi sono denominati secondo le convenzioni di nomenclatura IUBMB.

Il sistema di classificazione IUBMB fornisce un unico numero a quattro cifre per ciascun tipo di enzima e funzione catalitica (per es. 3.2.1.1 per -amilasi)²³. Ogni numero può comprendere enzimi di origine e sequenza di aminoacidi variabili ma la funzionalità enzimatica è identica. Il nome e il numero della nomenclatura IUBMB dovrebbero essere usati per l'identificazione della sostanza. La nomenclatura IUBMB classifica gli enzimi in sei gruppi principali:

1. ossidoreduttasi
2. trasferasi
3. idrolasi
4. liasi
5. liomerasi
6. ligasi

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

CE 3.4.22.33

Nome accettato: bromelina del frutto

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

Altro/i nome/i: bromelina del succo; ananasi; bromelasi; bromelina; extranasi; bromelina del succo; pinasi; enzima dell'ananas; traumanasi; bromelina del frutto FA2

²² UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Raccolta di informazioni sugli enzimi. Relazione finale. Cooperazione fra la Federal Environment Agency Austria e l'Inter-University Research Center for Technology, Work and Culture (IFF/IFZ). Contratto n. B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

²³ I termini "numero CE" (≡ numero della Commissione per l'enzima) e "numero IUBMB" sono spesso usati come sinonimi. Per evitare fraintendimenti, si raccomanda di usare il termine "numero IUBMB" per il codice a quattro numeri dell'IUBMB.

Commenti: dalla pianta dell'ananas, *Ananas comosus*. Scarsamente inibita dalla cistatina di pollo. Un'altra endopeptidasi della cisteina, con un'azione simile sui piccoli substrati molecolari, la pinguinaina (precedentemente CE 3.4.99.18), è ottenuta dalla pianta relativa, *Bromelia pinguin*, ma la pinguinaina differisce dalla bromelina del frutto in quanto è inibita dalla cistatina di pollo [4].²⁴ Nella [famiglia di peptidasi C1](#) (famiglia della papaina). Precedentemente CE 3.4.22.5 e inclusa in CE 3.4.22.4, numero di registrazione CAS: 9001-00-7.

Link ad altre banche dati: [BRENDA](#), [EXPASY](#), [MEROPS](#),

Riferimenti generali:

Sasaki, M., Kato, T. e Iida, S. Antigenic determinant common to four kinds of thiol proteases of plant origin. *J. Biochem. (Tokyo)* 74 (1973) 635-637. [Medline UI: [74041600](#)]

Yamada, F., Takahashi, N. e Murachi, T. Purification and characterization of a proteinase from pineapple fruit, fruit bromelain FA2. *J. Biochem. (Tokyo)* 79 (1976) 1223-1234. [Medline UI: [76260156](#)]

Ota, S., Muta, E., Katanita, Y. e Okamoto, Y. Reinvestigation of fractionation and some properties of the proteolytically active components of stem and fruit bromelains. *J. Biochem. (Tokyo)* 98 (1985) 219-228. [Medline UI: [86008148](#)]

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

Esempi per la classificazione degli enzimi secondo il sistema IUBMB

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

Le proteasi sono numerate secondo i seguenti criteri:

3. Idrolasi

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

- 3.4.1 α -aminoacil-peptide idrolasi (ora in CE 3.4.11)
- 3.4.2 Peptidil-amino-acido idrolasi (ora in CE 3.4.17)
- 3.4.3 Dipeptide idrolasi (ora in CE 3.4.13)
- 3.4.4 Peptidil peptide idrolasi (ora riclassificate in CE 3.4)
- 3.4.11 Aminopeptidasi
- 3.4.12 Peptidilamino-acido idrolasi o Acilamino-acido idrolasi (ora riclassificate in 3.4)
- 3.4.13 Dipeptidasi
- 3.4.14 Dipeptidil-peptidasi e tripeptidil-peptidasi
- 3.4.15 Peptidil-dipeptidasi
- 3.4.16 Carbossipeptidasi tipo serina
- 3.4.17 Metallocarbossipeptidasi
- 3.4.18 Carbossipeptidasi tipo cisteina
- 3.4.19 Omega peptidasi
- 3.4.21 Serina endopeptidasi

Inoltre sono identificati ulteriori enzimi specifici:

- 3.4.21.1 chimotripsina
- 3.4.21.2 chimotripsina C
- 3.4.21.3 metridina
- 3.4.21.4 tripsina
- 3.4.21.5 trombina
- 3.4.21.6 fattore di coagulazione Xa
- 3.4.21.7 plasmina
- 3.4.21.8 ora coperta da CE 3.4.21.34 ed CE 3.4.21.35
- 3.4.21.9 enteropeptidasi
- 3.4.21.10 acrosina
- 3.4.21.11 ora coperta da CE 3.4.21.36 ed CE 3.4.21.37
- 3.4.21.12 12 a-litica endopeptidasi

...

3.4.21.105

3.4.99 Endopeptidasi dal meccanismo catalitico sconosciuto

Esempi da EINECS con numero IUBMB aggiunto

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

2. Identificatori

Le sostanze enzimatiche sono identificate mediante la proteina enzimatica contenuta (nomenclatura IUBMB) e gli altri costituenti ottenuti tramite fermentazione. Oltre alla proteina enzimatica, ogni specifico costituente non è solitamente presente in concentrazioni superiori all'1%. Se le identità di questi costituenti specifici non sono note, possono essere indicate in un approccio per gruppi (cioè proteine, peptidi, aminoacidi, carboidrati, lipidi e sali inorganici). Tuttavia, i costituenti devono essere indicati se le loro identità sono note e devono essere identificati se la loro concentrazione supera il 10 % o se sono pertinenti ai fini della classificazione ed etichettatura e/o della valutazione PBT²⁵.

Proteine enzimatiche

Le proteine enzimatiche nel concentrato dovrebbero essere identificate mediante

- Numero IUBMB
- Nomi forniti dall'IUBMB (nome sistematico, nomi degli enzimi, sinonimi)
- Commenti forniti dall'IUBMB
- Reazione e tipi di reazione
- Numero e nome EC, se del caso
- Numero e nome CAS, se disponibili

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

Esempio

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

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

Esempio

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

Costituenti diversi dalle proteine enzimatiche

Tutti i costituenti presenti in concentrazioni ≥ 10 % (p/p) o pertinenti ai fini della classificazione ed etichettatura e/o della valutazione PBT ²⁶ dovrebbero essere identificati. L'identità dei costituenti in quantità minore del 10% può essere indicata come gruppo chimico. La/e loro concentrazione/i o intervalli di concentrazione tipici devono essere indicati, cioè:

²⁵ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i relativi criteri possono essere reperite nella Guida alle prescrizioni in materia di informazione e valutazione della sicurezza chimica nel capitolo R.11: Valutazione PBT.

²⁶ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e sui limiti di concentrazione pertinenti possono essere reperiti nella sezione per la valutazione della sicurezza chimica del RIP 3.2 TGD sulla valutazione PBT

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

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

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

5 CRITERI PER VERIFICARE SE LE SOSTANZE SONO IDENTICHE

Per verificare se le sostanze di diversi fabbricanti/importatori possono essere considerate o meno identiche, si devono rispettare alcune regole. Le regole che sono state applicate per EINECS dovrebbero essere considerate come una base comune per identificare e denominare una sostanza e quindi trovare un potenziale co-dichiarante per tale particolare sostanza.^{5, 6, 16, 27, 28} Le sostanze che non sono considerate uguali possono, comunque, essere ritenute strutturalmente correlate facendo ricorso al giudizio di un esperto. La condivisione dei dati può, in ogni caso, essere possibile per tali sostanze se scientificamente giustificata. Tuttavia, questo argomento non è l'oggetto del presente documento ed è trattato nella Guida alla condivisione dei dati.

- Si dovrebbe applicare la regola "≥ 80%" per le sostanze mono-componente nonché la regola "< 80%/≥ 10%" per le sostanze multi-componente.

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

- Ai fini della registrazione gli idrati e le forme anidre dei composti devono essere considerati come la stessa sostanza.

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

Le forme idrate e anidre hanno diversi nomi chimici e diversi numeri CAS. Nel Manuale per la presentazione dei dati, Parte 18: Come segnalare l'identità di una sostanza in IUCLID 5 per la registrazione ai sensi di REACH, sono fornite informazioni dettagliate su come utilizzare la disposizione specifica di cui all'*allegato V*, paragrafo 6, del regolamento REACH per la registrazione di forme idrate di una sostanza.

²⁷ Vollmer et al. (1998) Compilazione dell'EINECS: descrizioni e definizioni utilizzate per sostanze, impurezze e miscele. Tox Env Chem Vol. 65, pagg. 113-122.

²⁸ Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, ECB web-site; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999.

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

Esempi		
Numero CE	Nome	Norma
201-186-8	Acido peracetico C ₂ H ₄ O ₃	Questa sostanza non deve essere considerata identica per es. al suo sale sodico (EINECS 220-624-9)
220-624-9	Glicolato di sodio C ₂ H ₄ O ₃ . Na	Questa sostanza non deve essere considerata identica al suo acido corrispondente (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-Cloroanilina C ₆ H ₆ ClN	Questa sostanza non deve essere considerata identica per es. a 2-cloroanilina bromidrato (C ₆ H ₆ ClN . HBr)

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

Esempi		
Numero CE	Nome	Norma
208-534-8	Benzoato di sodio C ₇ H ₅ O ₂ . Na	Questa sostanza non deve essere considerata identica per es. al sale di potassio (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Benzoato di potassio C ₇ H ₅ O ₂ . K	Questa sostanza non deve essere considerata identica per es. al sale di sodio (EINECS 208-534-8)

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

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

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

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

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

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

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

Esempi		
Numero CE	Nome	Norma
200-313-4	Acido stearico, puro C ₁₈ H ₃₆ O ₂	Questa sostanza non deve essere considerata uguale all'acido oleico, puro, C ₁₈ H ₃₄ O ₂ (EINECS 204-007-1)

- Sostanze con centri chirali

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

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

Quando una sostanza è stata arricchita con una singola forma enantiomerica, si applicano le regole per le sostanze multi-componente. Allo stesso modo anche i racemi sono considerati come sostanze multi-componente.

Le sostanze con centri chirali multipli possono esistere in forme 2n (dove n è il numero di centrichirali). Queste diverse forme possono avere diverse proprietà fisico-chimiche, tossicologiche e/o ecotossicologiche. Dovrebbero essere considerate sostanze separate.

- Catalizzatori inorganici.

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

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

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

Sostanza multi-componente

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

REACH invece prescrive la registrazione della sostanza fabbricata. Si deve decidere caso per caso in che misura le diverse fasi durante la produzione della sostanza sono coperte dalla definizione di "fabbricazione" (per es. diverse fasi di purificazione o distillazione). Se si produce una sostanza multi-componente questa deve essere registrata (a meno che non sia coperta da registrazione dei singoli costituenti, cfr. capitolo 4.2.2.4); per esempio se si produce la miscela isomerica difluorobenzene, si deve quindi registrare "difluorobenzene", come miscela isomerica. Tuttavia, per le sostanze multi-componente non occorre testare la sostanza in quanto tale se il profilo di pericolo della sostanza può essere sufficientemente descritto dalle informazioni sui singoli costituenti. Se i singoli isomeri 1,2-difluorobenzene, 1,3-difluorobenzene e 1,4-difluorobenzene sono prodotti e miscelati in seguito, si devono registrare i singoli isomeri e la miscela isomerica è considerata come una miscela.

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

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

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

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

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

Sostanze UVCB

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

Esempi		
Numero CE	Nome	Norma
288-450-6	Ammine, C ₁₂₋₁₈ -alchil, acetati	Le sostanze “ammine, C ₁₂₋₁₄ -alchil, acetati” o “ammine, C ₁₂₋₁₄ -alchil, acetati” o “ammine, dodecil (C ₁₂ -alchil), acetati” o le sostanze con solo catene alchiliche pari non sono considerate uguali a questa sostanza

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

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

- Un estratto purificato o un concentrato sono considerati sostanze diverse dall'estratto.

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

6 IDENTITÀ DELLE SOSTANZE NELL'AMBITO DELLA PREREGISTRAZIONE (TARDIVA) E DELLA RICHIESTA

Nel capitolo 4 del presente documento sono fornite indicazioni sull'identificazione e la denominazione delle sostanze. Queste indicazioni dovrebbero essere seguite per determinare se le sostanze possono essere considerate uguali ai fini dei regolamenti REACH e CLP. Esse sono ulteriormente approfondite in seguito per la preregistrazione (tardiva) delle sostanze soggette a regime transitorio e la richiesta di sostanze non soggette a regime transitorio.

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

6.1 PREREGISTRAZIONE (TARDIVA)

Il processo di preregistrazione (tardiva) ha lo scopo di raccogliere i potenziali dichiaranti della stessa sostanza per evitare la duplicazione degli studi, in particolare la sperimentazione sugli animali vertebrati. La preregistrazione (tardiva) si applica solo alle sostanze soggette a un regime transitorio.

Maggiori informazioni sulla preregistrazione (tardiva) possono essere reperite nella Guida alla condivisione dei dati all'indirizzo http://guidance.echa.europa.eu/guidance_en.htm.

6.2 RICHIESTA

Nel caso di sostanze non soggette a un regime transitorio, o sostanze soggette a un regime transitorio non ancora sottoposte a registrazione preliminare, i dichiaranti potenziali hanno il dovere, prima di effettuare la registrazione, di accertarsi presso l'Agenzia se è già stata presentata una registrazione per la stessa sostanza (*articolo 26 del REACH*). La richiesta deve comprendere:

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

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

L'Agenzia deve stabilire se la stessa sostanza è stata precedentemente registrata. Anche questo deve avvenire applicando le regole definite nel capitolo 4 del presente documento. Il

risultato è ricomunicato al dichiarante potenziale ed eventuali dichiaranti precedenti o altri dichiaranti potenziali vengono informati in merito.

Maggiori informazioni sul processo di richiesta possono essere reperite nella Guida alla condivisione dei dati all'indirizzo http://guidance.echa.europa.eu/guidance_en.htm e nella sezione dedicata del sito web dell'ECHA: http://echa.europa.eu/reachit/inquiry_en.asp.

7 ESEMPI

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

Sono inclusi gli esempi seguenti:

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

7.1 PEROSSIDICARBONATO DI DIETILE

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

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

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

perossidicarbonato di dietile (limite superiore di concentrazione: 27%; concentrazione tipica: 22%) 27%). L'isodecano dovrebbe essere registrato sotto "Additivi" e dovrebbe esserne specificata la funzione di stabilizzante.

7.2 ZOLIMIDINA

La soluzione metanolica fabbricata contiene "zolimidina" (CE 214-947-4; CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) e "imidazolo" (CE 206-019-2; CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Dopo la rimozione del solvente "metanolo" e l'ottimizzazione del processo di fabbricazione, la sostanza presenta ancora un ampio intervallo di purezza di 74 – 86% zolimidina e 4-12% imidazolo.

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

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

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

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

(1) se la concentrazione tipica della zolimidina è del 77% e dell'imidazolo è dell'11%, si raccomanda di considerare la sostanza una massa di reazione di zolimidina e imidazolo;

(2) Se la concentrazione tipica della zolimidina è dell'85% e dell'imidazolo è del 5%, si raccomanda di considerare la sostanza come una sostanza mono-componente "zolimidina".

7.3 MISCELA DI ISOMERI

La sostanza in questione è una miscela (massa di reazione) di due isomeri formati durante la reazione di fabbricazione. I singoli isomeri erano riportati in EINECS. La direttiva 67/548/CEE regolava l'immissione delle sostanze sul mercato. Poiché il metodo di produzione della sostanza non era significativo, la miscela era coperta dalle voci EINECS dei due singoli isomeri.

Il regolamento REACH richiede la registrazione delle sostanze fabbricate. Si deve decidere caso per caso in che misura le diverse fasi durante la produzione della sostanza sono contemplate nella definizione di "fabbricazione". Se la miscela isomerica è registrata come una sostanza multi-componente (seguendo le indicazioni del capitolo 4.2.2), non occorre testare la sostanza in quanto tale, se il profilo di pericolo della sostanza può essere sufficientemente descritto dalle informazioni sui singoli costituenti. Si dovrebbe tuttavia fare riferimento alle voci EINECS dei singoli isomeri per dimostrare lo stato di sostanza soggetta a un regime transitorio.

1. Nome e altri identificatori

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

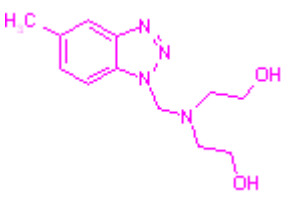
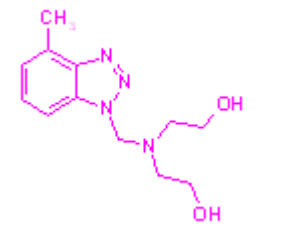
2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

Costituenti principali						
	Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol. metodo Hill	Conc. Tipica (%p/p)	Intervallo di conc. (%p/p)
A	Etanolo 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
B	Etanolo 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

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

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

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

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

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

7.4 AROMA AH

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

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

Composizione delle diverse qualità dell'aroma AH

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

Esistono diverse opzioni per l'identificazione della sostanza:

- la qualità A contiene almeno l'80% dell'isomero gamma (iso-alfa) del metil ionone e potrebbe quindi essere considerata come una sostanza mono-componente basata sull'isomero gamma (iso-alfa) metil ionone con gli altri isomeri come impurezze.

- Le qualità B e C contengono meno dell'80% di isomero gamma (iso-alfa) del metil ionone e $\geq 10\%$ degli altri isomeri. Pertanto potrebbero essere considerate come sostanze multi-componente:
 - Qualità B: una massa di reazione di gamma(iso-alfa) metil ionone (65–75%) e alfa-n-metil ionone (10-20%) con gli altri isomeri come impurezze.
 - Qualità C: una massa di reazione di gamma(iso-alfa) metil ionone (50-60%) e alfa-n-metil ionone (20-30%) con gli altri isomeri come impurezze.

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

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

In alternativa si può considerare:

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

Può essere importante considerare che

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

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

Identificazione della sostanza

L'aroma AH è prodotto in tre diverse qualità (A, B e C) con la stessa composizione qualitativa ma con composizione quantitativa diversa. Tutte e tre le qualità sono descritte in un solo fascicolo di registrazione per una sostanza multi-componente. Sebbene ciò implichi che le regole dell'80% e del 10% non siano applicate rigorosamente, la registrazione come sostanza multi-componente è giustificata poiché (1) i dati di sperimentazione disponibili coprono la

variabilità delle tre qualità, (2) le tre qualità hanno proprietà fisico-chimiche molto simili, (3) tutte le qualità hanno la stessa classificazione ed etichettatura di pericolo (pertanto le schede di sicurezza sono identiche) e (4) le tre qualità hanno scenari di uso ed esposizione simili (pertanto relazioni sulla sicurezza chimica simili).

1. Nome e altri identificatori

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

2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

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

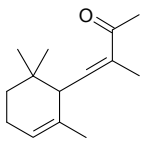
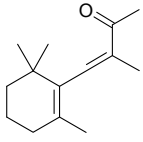
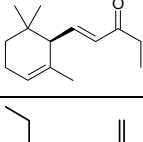
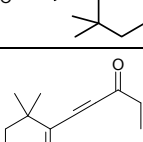

Costituenti principali						
	Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol. metodo Hill	Conc. minima (%p/p)	Conc. massima (%p/p)
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)but-3-en-2-one	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)but-3-en-2-one	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	30
D	1-(6,6-metil-2-metilenecicloesen-1-il)pent-1-en-3-one	non disponibile	non disponibile	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	15

Costituenti principali	
	Altre denominazioni:
A	alfa-iso-metilionone; gamma metilionone
B	beta-iso-metilionone; delta metilionone
C	alfa-n-metilionone
D	gamma-n-metilionone
E	beta-n-metilionone

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

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

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

Costituenti principali			
	Formula molecolare Metodo CAS	Formula strutturale	Codice SMILES
A	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C
B	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C
C	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC
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

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

3. Informazioni sulla composizione – impurezze e additivi

Impurezze						
	Denominazione e IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol.	Conc. Tipica (%p/p)	Intervallo di conc. (%p/p)
F						
numero di impurezze non specificate:				11 (pseudometilioni)		
concentrazione totale di impurezze non specificate:				0,5 – 3%p/p		
Additivi						
	Denominazione IUPAC	Numero CAS	Numero CE	Formula mol.	Conc. Tipica (%p/p)	Intervallo di conc. (%p/p)
G	Idrossitoluene butilato (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05 – 0,15

4. Informazioni sulle diverse qualità

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

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

7.5 MINERALI

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

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

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

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

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

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

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

- Il minerale bentonite (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) è descritto in EINECS come “un’argilla colloidale”. Consiste principalmente di montmorillonite contiene in elevate proporzioni il costituente inorganico montmorillonite (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) ma non solo.

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

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

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

Esempi di minerali

Nome	CAS	EINECS	Descrizione aggiuntiva ²⁹
Cristobalite	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (struttura cristallina: simmetria cubica)
Quarzo	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (struttura cristallina: simmetria romboedrica)
Diatomite	61790-53-2	-	Nota anche come diatomite, kieselgur e celite Descrizione: solido siliceo tenero composto da scheletri di piccole piante acquatiche preistoriche. Contiene principalmente silice.
Dolomite	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Minerali del gruppo dei feldspati	68476-25-5	270-666-7	Una sostanza inorganica che è il prodotto di reazione di una calcinazione ad alta temperatura in cui ossido di alluminio, ossido di bario, ossido di calcio, ossido di magnesio, ossido di silicio e ossido di stronzio in quantità variabili sono omogeneamente e ionicamente interdiffusi per formare una matrice cristallina.
Talco	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Vermiculite	1318-00-9	-	(Mg _{0,33} [Mg _{2,3} (Al _{0,1} Fe _{0,1}) _{0,1}](Si _{2,33-3,33} Al _{0,67-1,67})(OH) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O)

²⁹Definizione fornita nella direttiva 2001/30/CE della Commissione (GU L 146, del 31.05.2001, pag.1)

Informazioni analitiche prescritte per i minerali

Composizione elementare	La composizione chimica fornisce una panoramica generale della composizione del minerale indipendentemente dal numero di costituenti e dalle loro proporzioni nel minerale. Per convenzione la composizione chimica è espressa per ossidi.
Dati spettrali (XRD o equivalente)	La XRD o altre tecniche possono identificare i minerali in base alla loro struttura cristallografica. Dovrebbero essere indicati i picchi XRD o IR caratteristici che identificano il minerale unitamente a una breve descrizione del metodo analitico o a riferimenti bibliografici.
Proprietà fisico-chimiche tipiche	I minerali hanno proprietà fisico-chimiche caratteristiche che consentono di completarne l'identificazione, per es.(microscopio ottico) – Altissima massa volumica - Area superficiale (assorbimento di azoto) - Bassissima durezza - Capacità di rigonfiamento - Forme della diatomite (microscopio ottico) - Densità molto elevata - Area superficiale (assorbimento di azoto)

7.6 OLIO ESSENZIALE DI LAVANDIN GROSSO

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

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

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

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

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

1. Nomi e altri identificatori

Fonte

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

Processo

Descrizione dei processi di reazione (bio)chimici usati per la fabbricazione della sostanza:
Distillazione in vapore acqueo di fiori di <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) e successiva separazione dell'acqua dall'olio essenziale;
La successiva separazione è un processo fisico spontaneo, che solitamente ha luogo in un separatore (un "pallone") il quale consente il facile isolamento dell'olio separato. La temperatura in questo stadio del processo di distillazione è di circa 40 °C.

Nome

Denominazione IUPAC o altra denominazione chimica internazionale	Olio essenziale di <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
Numero CE	297-385-2
Nome CE	Lavanda, <i>Lavendula hybrida grosso</i> , est.,
Descrizione CE	Estratti e loro derivati fisicamente modificati come tinture, calci, assolute, oli essenziali, oleoresine, terpeni, frazioni prive di terpeni, distillati, residui ecc., ottenuti da <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³⁰ .
Numero CAS	93455-97-1
Nome CAS	Lavanda, <i>Lavendula hybrida grosso</i> , est.

2. Informazioni sulla composizione – costituenti noti

Costituenti noti					
	Denominazione chimica:	Numero	Formula mol.	Conc. tipica	Intervallo di
	CE	EC	metodo Hill	% (p/p)	conc. %
	CAS	CAS			(p/p)
	IUPAC				
	Altro				
A	CE linalil acetato	CE 204-116-4	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
	CAS 1,6-ottadien-3-olo, 3,7-dimetil-, acetato	CAS 115-95-7			
	IUPAC 3,7-dimetil otta-1,6-dien-3-il acetato				
B	CE linalolo	CE 201-134-4	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24 – 35
	CAS 1,6-ottadien-3-olo, 3,7-dimetil-	CAS 78-70-6			
	IUPAC				

³⁰ "Labiatae" e "Lamiaceae" sono sinonimi


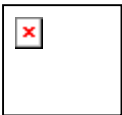
	3,7-dimetil otta-1,6-dien-3-olo				
C	<p>CE Bornan-2-one</p> <p>CAS Biciclo[2.2.1] eptan-2-one, 1,7,7-trimetil-</p> <p>IUPAC 1,7,7-Trimetilbiciclo[2.2.1]-2-eptanone</p> <p>Altro canfora</p>	<p>CE 200-945-0</p> <p>CAS 76-22-2</p>	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
D	<p>CE Cineolo</p> <p>CAS 2-ossabicyclo [2.2.2]ottano, 1,3,3-trimetil-</p> <p>IUPAC 1,3,3-trimetil-2-ossabicyclo[2.2.2]ottano</p> <p>Altro 1,8-cineolo</p>	<p>CE 207-431-5</p> <p>CAS 470-82-6</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7
E	<p>CE P-ment-1-en-4-olo</p> <p>CAS 3-cicloesen-1-olo, 4-metil-1-(1-metiletil)-</p> <p>IUPAC 1-(1-metiletil)-4-metil-3-cicloesen-1-olo</p> <p>Altro terpinen-4-olo</p>	<p>CE 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5 – 5
F	<p>CE 2-isopropenil-5-metiles-4-enil acetato</p> <p>CAS 4-esen-1-olo, 5-metil-2-(1-metiletenil)-, acetato</p> <p>IUPAC 2-(1-metiletenil)-5-metiles-4-en-1-olo</p> <p>Altro - (±)-Lavandulolo acetato</p>	<p>CE 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5 – 3
G	<p>CE DL-borneolo</p> <p>CAS Biciclo[2.2.1] eptan-2-olo, 1,7,7-trimetil-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetil</p>	<p>CE 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5 – 3

	biciclo[2.2.1]eptan-2-olo Altro borneolo				
H	CE Cariofillene CAS Biciclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimetil-8-metilene-, (1R,4E,9S)- IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metilene biciclo[7.2.0]undec-4-ene Altro trans-beta-cariofillene	CE 201-746-1 CAS 87-44-5	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1 – 2,5
I	CE (E)-7,11-dimetil-3-metilenedodeca-1,6,10-triene CAS 1,6,10-dodecatriene, 7,11-dimetil-3-metilene-, (6E)- IUPAC (E)-7,11-dimetil-3-metilene-1,6,10-dodecatriene Altro trans-beta-farnesene	CE 242-582-0 CAS 18794-84-8	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2 – 2
J	CE (R)-p-menta-1,8-diene CAS cicloesen, 1-metil-4-(1-metiletenil)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-metil-4-(1-metiletenil)cicloesene Altro limonene	CE 227-813-5 CAS 5989-27-5	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5 – 1,5
K	CE 3,7-dimetilotta-1,3,6-triene CAS 1,3,6-ottatriene, 3,7-dimetil- IUPAC 3,7-dimetilotta-1,3,6-triene Altro cis-beta-ocimene	CE 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5 – 1,5

Costituenti noti ≥ 10%

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

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

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

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

7.7 OLIO DI CRISANTEMO E RELATIVI ISOMERI ISOLATI

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

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

Jasmolina I

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

Jasmolina II

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

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

L'azienda pone le seguenti domande:

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

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

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

Le seguenti informazioni sono considerate necessarie per identificare sufficientemente la sostanza:

Nome della sostanza	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; olio ottenuto da fiori e foglie tritati mediante estrazione con acqua:etanolo (1:10)			
Fonte				
Genere, specie, sottospecie	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae			
Parte della pianta usata per l'olio	Fiori e foglie			
Processo				
Metodi di fabbricazione	Triturazione seguita da estrazione			
Solvente usato per l'estrazione	Acqua:etanolo (1:10)			
Informazioni sulla composizione – costituenti noti in % (p/p)				
Nome del costituente	Numero CE	Numero CAS	Min %	Max %
Piretrina I: 2-metil-4-osso-3-(penta-2,4-dienil) ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-crisantemato	204-455-8	121-21-1	30	38
Piretrina II: 2-metil-4-osso-3-(penta-2,4-dienil) ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)-2,2-dimetilciclopropancarbossilato	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerina I: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-ossociclopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerina II: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-ossociclopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-	204-454-2	121-20-0	8	15

enil)ciclopropano carbossilato				
Jasmolina I: 2-metil-4-osso-3-(penta-2-enil) ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	nessuno	4466-14-2	4	10
Jasmolina II: 2-metil-4-osso-3-(penta-2-enil) ciclopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	nessuno	1172-63-0	4	10
Inoltre la sostanza contiene fino a 40 costituenti inferiori all'1%				

Si può anche considerare di identificare la sostanza come una sostanza multi-componente ben definita con sei costituenti principali (Massa di reazione di Piretrina I, Piretrina II, Cinerina I, Cinerina II, Jasmolina I e Jasmolina II).

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

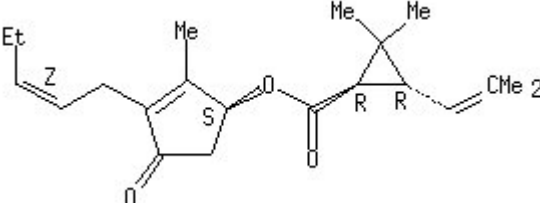
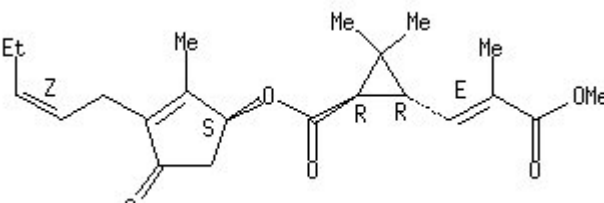
2. La massa di reazione degli isomeri isolati di Jasmolina I e II è coperta dalla registrazione dell'olio?

La massa di reazione degli isomeri isolati Jasmolina I e II non è coperta dalla registrazione dell'olio di *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae", in quanto il/i singolo/i costituente/i non è/sono contemplato/i dall'intera sostanza UVCB e viceversa. La massa di reazione di Jasmolina I e II è considerata una sostanza diversa.

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

Le seguenti informazioni sono considerate necessarie per identificare sufficientemente la sostanza:

Denominazione IUPAC della sostanza	Massa di reazione di (2-metil-4-osso-3-(penta-2-enil) ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropancarbossilato) e (2-metil-4-osso-3-(penta-2-enil) ciclopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)ciclopropancarbossilato)
Altra denominazione	Massa di reazione di Jasmolina I e Jasmolina II
Purezza della sostanza	95 – 98% (p/p)

Informazioni sulla composizione – costituenti principali in % (p/p)				
Nome del costituente	Numer o CE	Numero CAS	Min %	Max %
Jasmolina I: 2-metil-4-osso-3-(penta-2-enil) ciclopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	nessuno	4466-14-2	40	60
Formula molecolare Formula strutturale Peso molecolare		 $C_{22}H_{30}O_5$ M = 374 g/mol		
Jasmolina II: 2-metil-4-osso-3-(penta-2-enil) ciclopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)ciclopropancarbossilato	nessuno	1172-63-0	35	65
Formula molecolare Formula strutturale Peso molecolare		 $C_{21}H_{30}O_3$ M = 330 g/mol		

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

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

4. Conclusione

Sono identificate due sostanze:

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

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

7.8 FENOLO, ISOPROPILATO, FOSFATO

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

1. Nome e altri identificatori

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

2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

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

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

7.9 COMPOSTI DI AMMONIO QUATERNARIO

Un'azienda sintetizza le seguenti sostanze:

Sostanza A

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

Numero CE 294-392-2

Numero CAS 91721-91-4

Distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio:

C ₁₀	10%
C ₁₁	5.5%
C ₁₂	12%
C ₁₃	7.5%
C ₁₄	18%
C ₁₅	8%
C ₁₆	24%
C ₁₇	7%
C ₁₈	8%

Sostanza B

Composti di ammonio quaternario, dicocco alchildimetil, cloruri

Numero CE 263-087-6

Numero CAS 61789-77-3

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

Sostanza C

Bromuro di didodecildimetilammonio

Sostanza D

Cloruro di didodecildimetilammonio

Sostanza E

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

Sostanza F

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

Numero CE 268-072-8

Numero CAS 68002-59-5

Distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio:

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

Sostanza G

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

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

C4	0.5%
C6	3.0%
C8	6.0%
C10	10.0%
C12	12.0%
C14	24.0%
C16	20.0%
C18	16.0%
C18'	2.0%
C18''	0.5%
C20	4.0%
C22	2.0%

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

1. Osservazioni generali

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

saturi

lineari (non ramificati)

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

Altrimenti dovrebbe essere indicato nel modo seguente:

insaturi (C₁₆ insaturi)

ramificati (C₁₀ ramificati)

numero pari (C₁₂₋₁₈ numeri pari)

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

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

C12	1%
C14	3%

C14'	1%
C15	0.5%
C16	29%
C16'	3%
C17	1%
C18	23%
C18'	37%
C18''	1.5%

2. Come identificare le sostanze ai fini della registrazione?

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

Confronto tra le sostanze A e B

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

C6	0.5%
C8	8%
C10	7%
C12	50%
C14	18%
C16	8%
C18	1.5%
C18'	6%
C18''	1%

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

Confronto tra le sostanze B e C

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

Confronto tra le sostanze B e D

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

Confronto tra le sostanze B ed E

La sostanza E è una miscela delle sostanze C e D. Entrambe hanno una catena satura di lunghezza C₁₂ ma anioni diversi (bromuro e cloruro). La sostanza B "Composti di ammonio quaternario, dicocco alchilidimetil, cloruri" descrive una miscela di costituenti con catene di

carbonio di differenti lunghezze (da C₆ a C₁₈ pari, lineari, sature e insature) e il cloruro come anione. Tuttavia, la sostanza E è descritta solo dalla catena di carbonio di lunghezza C₁₂ con il bromuro come anione aggiuntivo. Pertanto le sostanze B ed E non possono essere considerate uguali. Di conseguenza per la sostanza E è necessaria una registrazione separata.

Confronto tra le sostanze B e F

La sostanza F “Composti di ammonio quaternario, di-C₁₄₋₁₈-alchilidimetilammonio, cloruri” è una miscela di costituenti con catene di carbonio di diverse lunghezze (da C₁₄ a C₁₈ pari e dispari, lineari e sature). La sostanza F differisce nella composizione e nell'intervallo della distribuzione della catena di carbonio rispetto alla sostanza B. La sostanza F ha una distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio ristretta e in aggiunta le catene di carbonio C₁₅ e C₁₇. Pertanto le sostanze B e F non possono essere considerate uguali.

Confronto tra le sostanze B ed G

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

3. Conclusione

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

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

7.10 SOSTANZE DERIVATE DAL PETROLIO

Usando le indicazioni per le sostanze UVCB specifiche riportate nel capitolo 4.3.3.2, sono inclusi due esempi.

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

1. Nome e altri identificatori

Nome

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

Fonte

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

Processo

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

2. Informazioni sulla composizione

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

7.10.2 Gasoli (petrolio)

1. Nome e altri identificatori

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

Fonte

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

Processo

Descrizione del processo di raffineria	Distillazione atmosferica
Intervallo del carbonio	C7-C35
Intervallo o limiti massimi del punto di ebollizione	Da 121°C a 510°C
Altre proprietà fisiche, per es. viscosità	20 mm ² /s a 40°C (Viscosità)
Numero CE Numero CAS Nome CE/Nome CAS	272-184-2 68783-08-4 Gasoli (petrolio), pesanti, distillazione atmosferica

Descrizione CE/Descrizione CAS	Una combinazione complessa di idrocarburi ottenuta per distillazione del petrolio grezzo. È costituita da idrocarburi con numero di atomi di carbonio prevalentemente nell'intervallo C7-C35, e punto di ebollizione nell'intervallo 121°C-510°C (250°F-950°F) ca.
---------------------------------------	--

2. Composizione chimica

Nessuna informazione disponibile.

7.11 ENZIMI

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

7.11.1 Subtilisina

Proteina enzimatica

Subtilisina

Numero IUBMB

3.4.21.62

Denominazioni fornite dall'IUBMB

(Nome sistemico, nome dell'enzima, sinonimi)

Subtilisina;
alcalasi; alcalasi 0,6L; alcalasi 2,5L; enzima ALK;
bacillopeptidasi A; bacillopeptidasi B; bioprasi,
proteinasii alcalina da *Bacillus subtilis*; bioprasi
AL 15; bioprasi APL 30; colistinasi;(cfr. anche
commenti); subtilisina J; subtilisina S41;
subtilisina Sendai; subtilisina GX; subtilisina E;
ecc.

Commenti forniti dall'IUBMB

La subtilisina è una serina endopeptidasi, esempio tipico della [famiglia di peptidasi S8](#). Non contiene alcun residuo di cisteina (sebbene questi si trovino in enzimi omologhi). Le varianti della specie includono la subtilisina BPN' (anche subtilisina B, subtilopeptidasi B, subtilopeptidasi C, Nagarse, proteinasi Nagarse, subtilisina Novo, proteinasi batterica Novo) e subtilisina Carlsberg (subtilisina A, subtilopeptidasi A, alcalasi Novo). Precedentemente CE 3.4.4.16 e inclusa in CE 3.4.21.14. Enzimi simili sono prodotti da vari ceppi di *Bacillus subtilis* e altre specie di *Bacillus* [1,3]

Reazione

Idrolisi delle proteine con un'ampia specificità per i legami peptidici, e una preferenza per un grande residuo senza carica in P1. Idrolizza peptidi ammidici

Tipo di reazione

Idrolasi;
agente sui legami peptidici (peptidasi);

Numero CE	Serina endopeptidasi 232-752-2
Nome CE	Subtilisina
Numero CAS	9014-01-1
Nome CAS	Subtilisina
Concentrazione enzimatica della proteina	26%
<u>Altri costituenti</u>	
Altre proteine, peptidi e aminoacidi	39%
Carboidrati	11%
Lipidi	1%
Sali inorganici	23%
<u>Ulteriori parametri</u>	
Substrati e prodotti	proteine od oligopeptidi, acqua peptidi

7.11.2 α -Amilasi

<u>Proteina enzimatica</u>	α -Amilasi
Numero IUBMB	3.2.1.1
Denominazioni fornite dall'IUBMB (Nome sistemico, nome dell'enzima, sinonimi)	1,4- α -D-glucano glucanoidrolasi; glicogenasi; α -amilasi; alfa-amilasi; endoamilasi; Taka-amilasi A
Commenti forniti dall'IUBMB	Agisce su amido, glicogeno e polisaccaridi e oligosaccaridi correlati in maniera causale; gruppi riducenti sono liberati nella configurazione α . Il termine " α " si riferisce alla configurazione anomerica iniziale del gruppo di zucchero libero rilasciato e non alla configurazione del legame idrolizzato.
Reazione	Endrolisi dei legami 1,4- α -D-glucosidici in polisaccaridi contenenti tre o più unità di D-glucosio con legami 1,4- α
Tipo di reazione	idrolasi; glicosidasi; Glicosidasi, cioè enzimi che idrolizzano composti O-glicosilati ed S-glicosilati
Numero CE	232-565-6
Nome CE	Amilasi, α -
Numero CAS	9000-90-2
Numeri CAS correlati	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (tutti cancellati)
Nome CAS	Amilasi, α -
Concentrazione della proteina enzimatica	37%
<u>Altri costituenti</u>	
Altre proteine, peptidi e aminoacidi	30%
Carboidrati	19%
Sali inorganici	14%
<u>Ulteriori parametri</u>	
Substrati e prodotti	amido; glicogeno; acqua; polisaccaride; oligosaccaride;

8 DESCRIZIONE DELLE SOSTANZE IN IUCLID 5

La presente sezione illustra in che modo i diversi tipi di sostanze – mono-componente, multi-componente, sostanze definite dalla loro composizione chimica più altri identificatori e sostanze UVCB – possono essere descritte in IUCLID 5. Informazioni dettagliate su come descrivere tipi differenti di sostanze in IUCLID 5 sono fornite nel Manuale per la presentazione dei dati - Parte 18: “Come segnalare l’identità di una sostanza in IUCLID 5 per la registrazione ai sensi di REACH”.

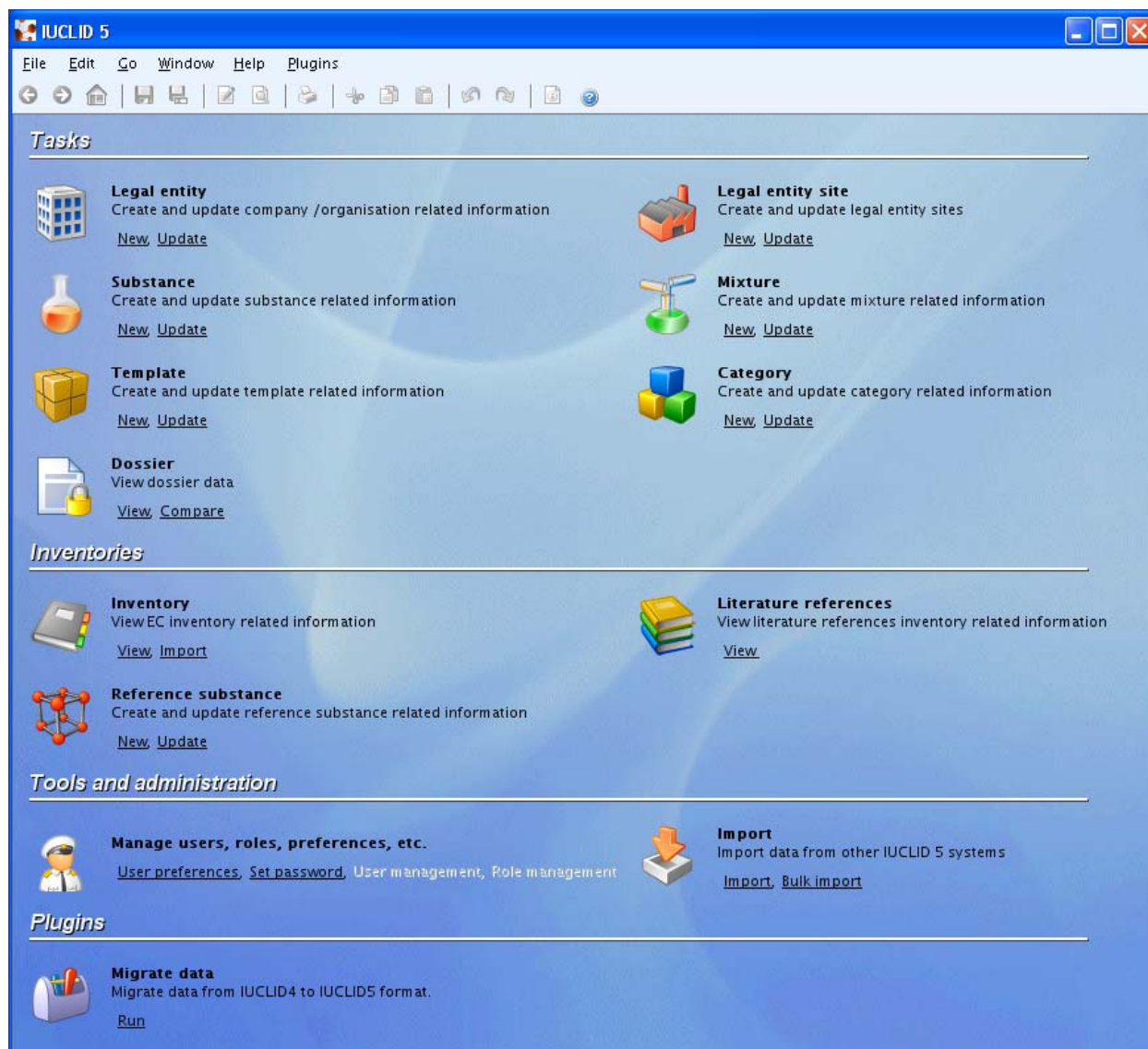
8.1 PRINCIPI GENERALI

In IUCLID 5 ci sono tre parti importanti relative all’identificazione di una sostanza:

l’inventario CE sotto la voce “**Inventories**” (inventari);

l’inventario “**Reference Substance**” (sostanza di riferimento) in “**Inventories**”;

Sezione 1.1 e 1.2 di un insieme di dati sulla sostanza (“**Substance**”).



8.1.1 Inventari

La sezione Inventory contiene l'Inventario CE (per spiegazioni cfr. capitolo 3.3) gestito a livello centrale e fornito dalla Commissione europea/Agenzia europea per le sostanze chimiche, e l'inventario Reference Substance, che è un inventario locale gestito e aggiornato dagli utilizzatori sulle loro installazioni a seconda del caso.

Selezionando la scheda EC Inventory, l'utente può cercare e visualizzare dati dell'inventario (vale a dire numero CE, numero CAS, nomi EC ecc.). Queste informazioni sono di sola lettura.

La scheda Reference Substance consente all'utilizzatore di accedere al suo inventario locale di costituenti che userà per fornire l'identificazione della sua sostanza così come fabbricata, cioè impurezze e additivi inclusi.

In altre parole, nell'inventario Reference Substance sono creati e gestiti a livello centrale i blocchi predefiniti della sostanza. Le Reference Substances possono essere riutilizzate, se del caso, per varie sostanze.

Esempio

Se una sostanza è costituita da: 91% di 1,2-dimetilbenzene con 1,3-dimetilbenzene come impurezza al 5%, entrambi i costituenti 1,2-dimetilbenzene e 1,3-dimetilbenzene devono essere definiti nell'inventario Reference Substance. Le informazioni immesse sono quindi salvate e gestite nell'inventario. Nel caso in cui gli stessi costituenti appaiano in un'altra sostanza in percentuali diverse, compariranno già nell'inventario locale e le informazioni possono essere facilmente riutilizzate

Le figure sottostanti mostrano la sezione Reference Substance di IUCLID 5. Sono suddivise in immagini separate, sebbene in IUCLID si tratti di un'unica schermata.

Reference substance – Parte I

The screenshot shows a web form titled "Reference substance: 95-47-6 / o-xylene". It is divided into several sections:

- General information:** A text field for "Reference substance name" containing "95-47-6 / o-xylene".
- EC inventory:**
 - "EC number" field: 202-422-2
 - "CAS number" field: 95-47-6
 - "EC name" field: o-xylene
 - "Molecular formula" field: C8H10
 - "Description" field: (empty)
- No EC information available:** A "Justification" field (empty).

La figura "Reference substance - Parte I" include:

- Reference substance name (Nome della sostanza di riferimento)

Questo nome può essere scelto liberamente (in questo caso 95-47-6/1,2-dimetilbenzene).

- EC inventory (Inventario CE)

Il link all'inventario CE di sola lettura, include informazioni quali il numero CE.

- No EC information available (Nessuna informazione CE disponibile)

Un elenco di selezione in cui è possibile specificare il motivo (giustificazione) per l'assenza di informazioni nell'inventario CE (per es. non applicabile, non ancora assegnato).

Reference substance – Parte II

CAS information

CAS number: 95-47-6

CAS name: o-Xylene

IUPAC name

1,2-dimethylbenzene

Description

Synonyms

Name
o-xylol
ortho-xylene
o-dimethylbenzene
o-methyltoluene
ortho-xylene

Add... Edit... Delete

Related CAS information

CAS name	CAS number	Justification
m-xylene	108-38-3	isomer
p-xylene	106-42-3	isomer
mixture of xylenes	1330-20-7	mixture of isomers

Add... Edit... Delete

La figura “Reference substance - Parte II” include:

- CAS information (Informazioni CAS - numero CAS e nome CAS) include le informazioni pertinenti (Related CAS information)

Come regola generale, si dovrebbe fornire il numero CAS correlato al numero CE. Se esiste più di un numero CAS (per es. numeri CAS cancellati o numeri CAS della stessa sostanza usati in differenti sistemi legislativi per descrivere la sostanza in conformità delle aspettative di tali sistemi), indicare l'altro numero o gli altri numeri CAS come numeri CAS correlati;

- IUPAC name (denominazione IUPAC);

Si noti che il nome (chimico) in lingua inglese delle sostanze dovrebbe essere specificato nel campo “IUPAC name”. Questo campo dovrebbe essere usato anche per le sostanze UVCB che sono descritte mediante fonte e processo;

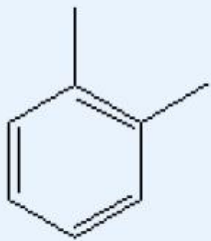
- Campo relativo alla descrizione per informazioni aggiuntive

Eventuali informazioni aggiuntive pertinenti ai fini della descrizione della sostanza dovrebbero essere indicate in questo campo, per es. per sostanze UVCB o minerali;

- Synonyms (Sinonimi);

In questo campo si possono indicare anche denominazioni IUPAC in altre lingue.

Reference substance – Parte III

Molecular formula	C ₈ H ₁₀
Molecular weight range	106.165
SMILES notation	Cc1ccccc1C
InChI	InChI=1/C ₈ H ₁₀ /c1-7-5-3-4-6-8(7)2/h3-6H,1-2H3
Structural formula	
Remarks	

Buttons: Load... Zoom... Delete

La figura “Reference substance - Parte III” include:

- Molecular formula (Formula molecolare);

La formula molecolare deve essere indicata secondo il metodo Hill.

- Molecular weight, including range (Peso molecolare, incluso l'intervallo)
- SMILES notation (Notazione SMILES);
- InChI code (Codice InChI);
- Structural formula (Formula strutturale) in forma di immagine.

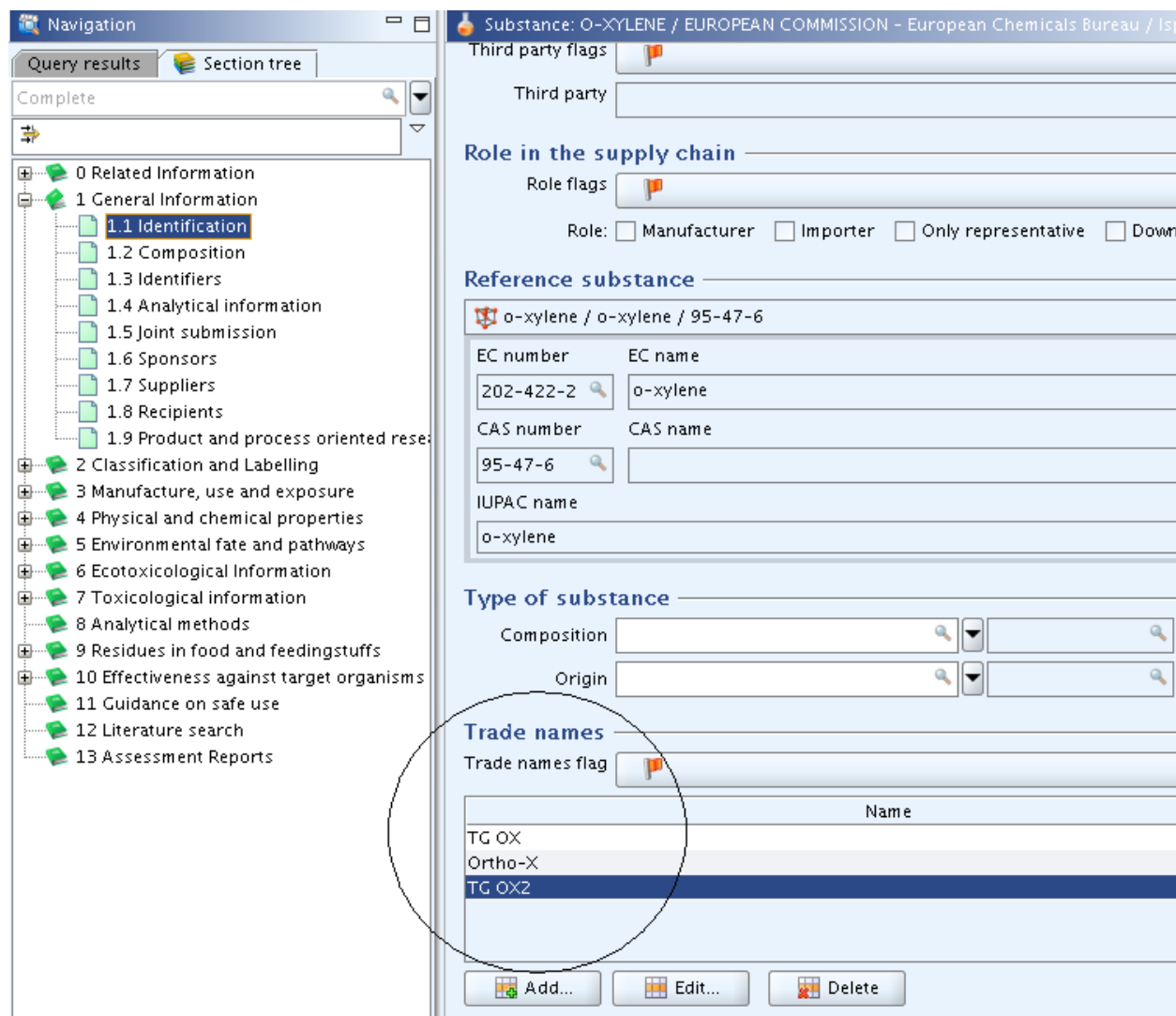
8.1.2 Insieme di dati sulla sostanza (sezioni 1.1, 1.2, 1.3 e 1.4 di IUCLID)

L'insieme di dati di IUCLID 5 contiene tutti i dati relativi a una sostanza quali record di studio dell'end point, informazioni sulla classificazione e l'etichettatura e l'identità chimica inclusa la composizione della sostanza. I dati sono raggruppati in 11 sezioni.

L'insieme di dati sulla sostanza può essere creato, ricercato, visualizzato e aggiornato nella scheda “Substance”.

Nell'insieme di dati sulla sostanza, sono forniti nelle sezioni 1.1 e 1.2 i dettagli sull'identificazione e la composizione della sostanza.

Identificazione della sostanza – Parte I



La Sezione 1.1 (Substance identification - Identificazione della sostanza) include

- Reference Substance (Sostanza di riferimento)

Il link alla sostanza di riferimento cui si riferisce la sostanza dovrebbe essere creato qui. La sostanza è denominata di conseguenza.

- Type of substance (Tipo di sostanza)

Da un elenco di selezione è possibile scegliere il tipo di sostanza, per es. sostanza mono-componente.

- Trade names (Nomi commerciali)

Tutti i nomi commerciali interni ed esterni possono essere riportati qui.

La sezione 1.2 (Substance composition - Composizione della sostanza) include una descrizione della composizione della sostanza, inclusi i link alle Reference Substances

pertinenti come blocchi predefiniti. Qui sono indicati tutti i costituenti (per es. costituenti principali, impurezze) delle sostanze così come fabbricate e gli additivi. Nel Capitolo 8.2 sono forniti degli esempi, comprese indicazioni dettagliate su come compilare la sezione 1.2 di IUCLID 5.

La **sezione 1.3 (Identifiers - Identificatori)** contiene informazioni per identificare le sostanze da un punto di vista informatico, per es. un utilizzatore può specificare l'identificatore che sta usando in un altro sistema IT come un sistema per schede di dati di sicurezza. Ciò migliora lo scambio di dati tra IUCLID 5 e altri sistemi. Ciò, tuttavia, non costituisce parte dell'identificazione delle sostanze come descritta nel presente documento.

La sezione 1.3 dà anche la possibilità di memorizzare i numeri di identificazione che sono distribuiti da programmi normativi diversi (per es. il numero di registrazione REACH). Anche queste informazioni non costituiscono parte dell'identificazione delle sostanze come descritta nel presente documento.

Identificazione della sostanza – Parte II

La **sezione 1.4 (Analytical information - Informazioni analitiche)** contiene le informazioni analitiche della sostanza, comprese le informazioni sulla sua attività ottica.

8.2 ESEMPI SULLE MODALITÀ DI COMPILAZIONE DI IUCLID 5

Nel capitolo 8.2.1 è fornito un esempio sulle modalità di compilazione di IUCLID 5 per una sostanza mono-componente, nel capitolo 8.2.2 è offerto un esempio per una sostanza multi-componente, nel capitolo 8.2.3 per una sostanza definita mediante la sua composizione chimica più altri identificatori e nel capitolo 8.2.4 è presentato un esempio per una sostanza UVCB.

8.2.1 Sostanza mono-componente

Esempio: Sostanza mono-componente			
Nome	1,2-dimetilbenzene		
Componente principale	Contenuto tipico % (p/p)	Contenuto inferiore % (p/p)	Contenuto superiore % (p/p)
1,2-dimetilbenzene	91	88	93
Impurezze			
1,3-dimetilbenzene	5	2	7
1,4-dimetilbenzene	2	0,5	3
acqua	2	0,5	3

Nella sezione 1.1 è fornito il nome della sostanza. Secondo il presente documento di orientamento questa sostanza è una sostanza mono-componente denominata “1,2-dimetilbenzene”. In IUCLID 5, ciò significa che l’insieme di dati sulla sostanza dovrebbe essere collegato alla sostanza di riferimento 1,2-dimetilbenzene nella sezione 1.1.

The screenshot displays the IUCLID 5 interface for substance identification. On the left, a navigation tree lists sections from 0 to 5, with '1.1 Substance identification' highlighted. The main panel shows the 'Substance identification' section with fields for 'Chemical name' (o-Xylene), 'Legal entity flags', 'Legal entity' (European Chemicals Bureau / Ispra / Italy), 'Role in the supply chain' (Role flags, Role: Manufacturer, Importer, Sole representative, Downstream user), 'Reference substance' (circled in red, containing 'o-xylene / 1,2-methylbenzene / o-xyelene / 95-47-6'), and 'Type of substance' (Composition: mono constituent substance, Origin).

Nella sezione 1.2 è definita la composizione della sostanza:

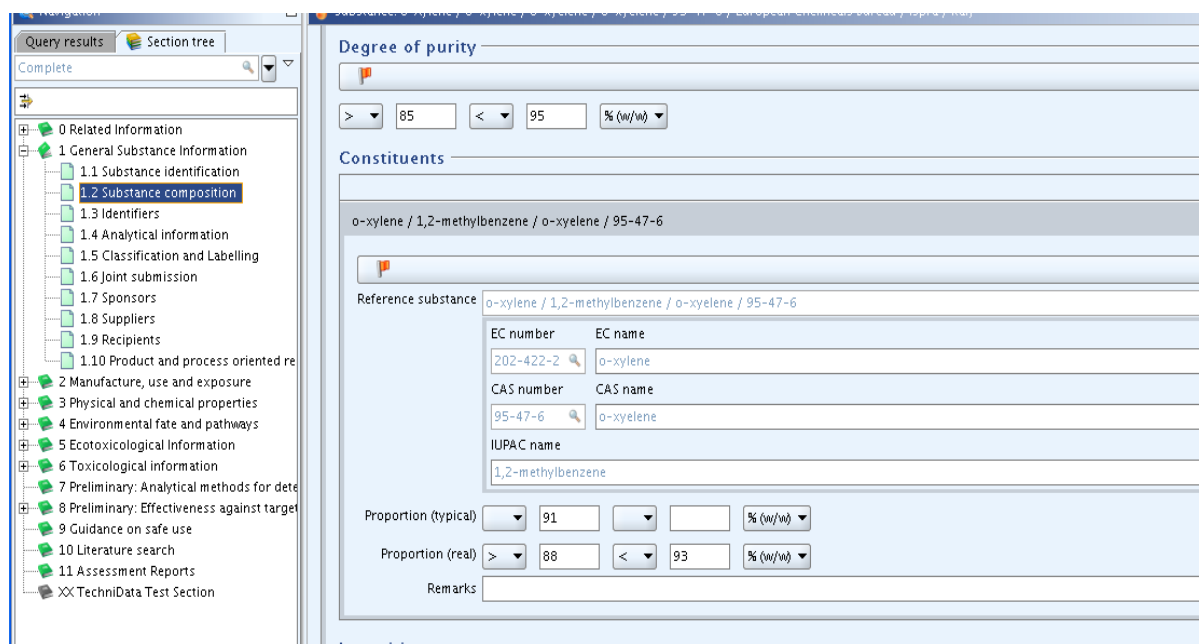
- Degree of purity (Grado di purezza)

Per una sostanza mono-componente, il grado di purezza del costituente principale (normalmente $\geq 80\%$) dovrebbe essere indicato in questo campo (limite massimo e minimo).

- Constituents (Costituenti)

Per una sostanza mono-componente, gli identificatori chimici (numero CE e nome CE, numero CAS e nome CAS, denominazione IUPAC) sono indicati qui. L’identità chimica è definita dal link alla sostanza di riferimento.

Il campo “remarks” (osservazioni) può essere usato per qualsiasi informazione. Dovrebbe essere usato per le giustificazioni in caso di scostamenti dalla regola dell’80% (cfr. capitolo 4.2.2).



- Impurities (Impurezze)

Le impurezze presenti in concentrazione $\geq 1\%$ (od oltre un eventuale limite di concentrazione inferiore, se pertinente per la classificazione delle sostanze) dovrebbero essere specificate mediante almeno uno degli identificatori chimici (numero CE e nome CE, numero CAS e nome CAS, denominazione IUPAC). L'identità chimica è definita dal link alla sostanza di riferimento. Per ogni impurezza la concentrazione (tipica e intervallo) deve essere indicata in % (p/p).

Se noti, il numero e la concentrazione totale delle impurezze non specificate devono essere specificati per rendere completa la concentrazione totale fino a raggiungere il 100%.

- Additives (Additivi)

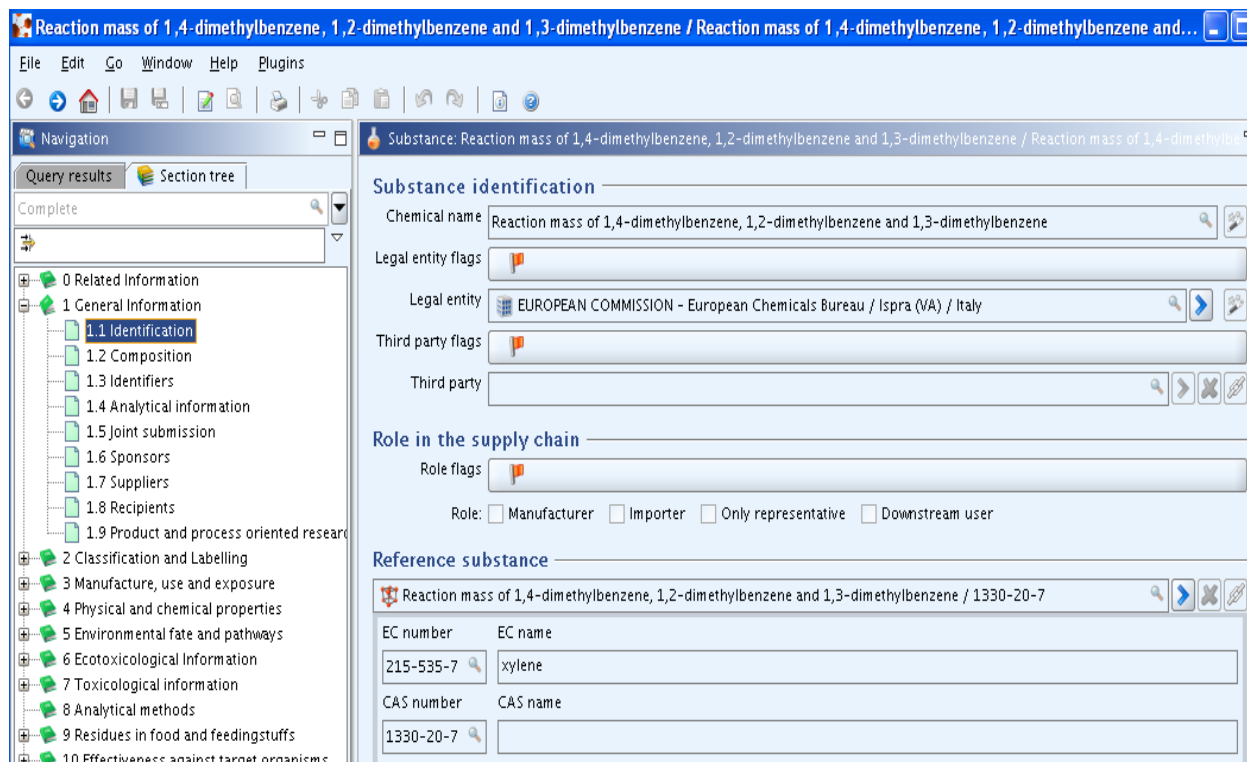
Tutti gli additivi presenti (necessari per la stabilizzazione della sostanza) devono essere specificati mediante gli identificatori chimici (numero CE e nome CE, numero CAS e nome CAS, denominazione IUPAC). L'identità chimica è definita dal link alla sostanza di riferimento. Per ogni additivo la concentrazione (tipica e intervallo) deve essere indicata in % (p/p). La funzione di stabilizzatore dell'additivo deve essere specificata.

8.2.2 Sostanza multi-componente

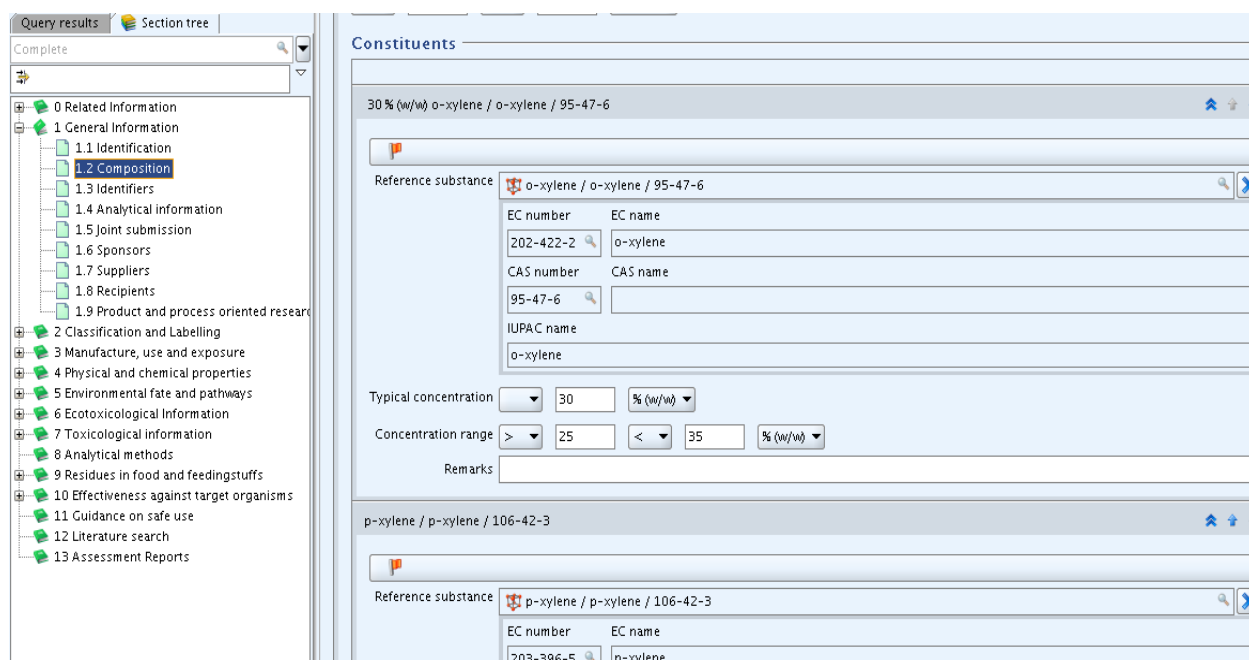
Esempio: Sostanza multi-componente			
Nome	Massa di reazione di 1,4-dimetilbenzene, 1,2-dimetilbenzene e 1,3-dimetilbenzene		
Costituenti principali	Contenuto tipico % (p/p)	Contenuto inferiore % (p/p)	Contenuto superiore % (p/p)
1,4-dimetilbenzene	35	30	40
1,2-dimetilbenzene	30	25	35
1,3-dimetilbenzene	25	20	30
Impurezze			
acqua	10	5	12

Secondo il presente documento di orientamento, questa sostanza è una sostanza multi-componente con tre costituenti principali, denominata “Massa di reazione di 1,4-dimetilbenzene, 1,2-dimetilbenzene e 1,3-dimetilbenzene”. L’acqua è un solvente residuo che non può essere ulteriormente separato dalla sostanza e dovrebbe essere considerata un’impurezza e non un costituente principale.

In IUCLID 5, ciò significa che l’insieme di dati sulla sostanza dovrebbe essere collegato alla sostanza di riferimento “Massa di reazione di 1,4-dimetilbenzene, 1,2-dimetilbenzene e 1,3-dimetilbenzene” (cfr. sezione 1.1).



Per ogni costituente, additivo e impurezza, l’identità chimica, la concentrazione tipica e l’intervallo di concentrazione sono specificati nella sezione 1.2. Il grado di purezza, anch’esso riportato nella sezione 1.2, deve corrispondere all’intervallo di concentrazione generale dei costituenti principali. L’identità chimica è definita dal link alla sostanza di riferimento.



8.2.3 Sostanza definita mediante la sua composizione chimica più altri identificatori

In alcuni casi altri identificatori principali sono necessari per assicurare un'identificazione unica della sostanza (cfr. capitolo 4.2.4). Questi parametri aggiuntivi sono diversi per ciascun genere di sostanza all'interno del tipo. Tuttavia, il parametro aggiuntivo è cruciale per l'identificazione della sostanza. Per esempio, per i minerali è importante associare i risultati della composizione elementare con i dati spettrali per identificare la composizione mineralogica e la struttura cristallina, che sono quindi confermati dalle proprietà fisiche e chimiche caratteristiche (cfr. anche esempio nel capitolo 7.3).

Proprietà fisico-chimiche, quali:

- struttura cristallina (rivelata dalla diffrazione a raggi X)
- forma
- durezza
- capacità di rigonfiamento
- densità
- area superficiale
- ecc.

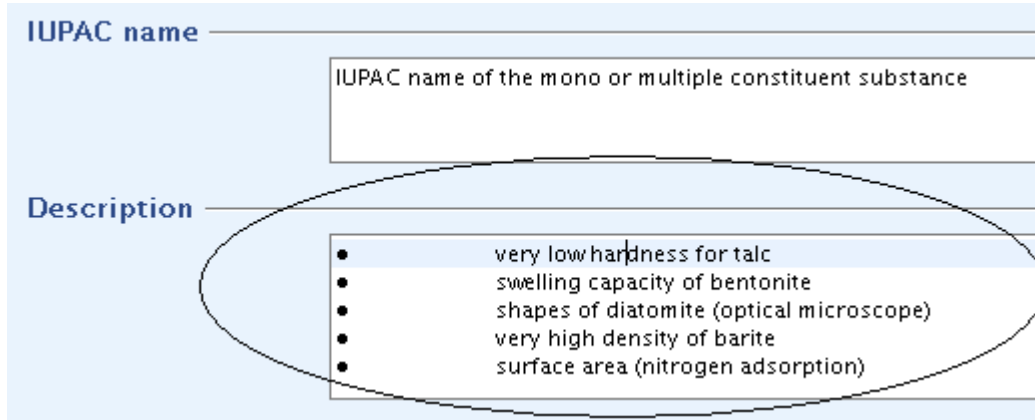
Esempio: sostanza definita mediante la sua composizione chimica più altri identificatori

Identificatori principali aggiuntivi specifici possono essere forniti per i minerali specifici, in quanto i minerali hanno proprietà fisico-chimiche caratteristiche che consentono il completamento della loro identificazione, per esempio:

- bassissima durezza del talco

–	capacità di rigonfiamento della bentonite
–	forme della diatomite (microscopio ottico)
–	altissima densità della barite
–	area superficiale (assorbimento dell'azoto)

Questo tipo di informazioni dovrebbe essere fornito nel campo della descrizione della sostanza di riferimento a cui l'insieme di dati è collegato (sezione 1.1 di IUCLD 5).



8.2.4 Sostanza UVCB

Le sostanze UVCB non possono essere specificate in modo univoco mediante la denominazione IUPAC dei costituenti, in quanto non tutti i costituenti possono essere identificati, oppure possono essere specificate genericamente ma con una mancanza di specificità dovuta alla variabilità della composizione esatta. I principali identificatori delle sostanze UVCB sono correlati alla fonte della sostanza e al processo usato. A causa della mancanza di differenziazione tra costituenti e impurezze, i termini “costituenti principali” e “impurezze” non dovrebbero essere usati per le sostanze UVCB.

Tuttavia, la composizione chimica e l'identità dei costituenti devono essere indicate per quanto note. Spesso la descrizione della composizione può essere fornita in modo più generico, per esempio “acidi grassi lineari C8-C16” o “etossilati di alcol con alcoli C10-C14 e 4-10 unità di etossilato”.

Per specificare una sostanza UVCB si applica lo stesso sistema descritto per le sostanze mono- e multi-componente. La sostanza stessa è specificata mediante una sostanza di riferimento così come i costituenti noti.

È importante notare che quando si definisce la sostanza come sostanza di riferimento, il nome (chimico) della sostanza UVCB dovrebbe essere specificato nel campo “IUPAC name” (sebbene una sostanza UVCB raramente abbia una denominazione IUPAC “classica”). Il campo “Description” dovrebbe essere usato per informazioni aggiuntive (per es. le condizioni di reazione, i materiali di partenza impiegati).

Esempio: Sostanza UVCB	
Nome	distillati (carbone), frazione benzolo ad alta temperatura
Descrizione	Distillato derivante dalla distillazione frazionata di carbone ad alta temperatura, con una temperatura di distillazione approssimativa compresa tra i 30°C e i 180°C (86°F to 356°F). Composto principalmente da idrocarburi alifatici e aromatici C4 - C6 con disolfuro di carbonio, ciclopentadiene e una piccola quantità di solfuro di idrogeno.

EC inventory

EC number: 310-300-6 CAS number: 185323-42-6

EC name: distillates (coal), high-temperature, benzole fraction

Molecular formula:

Description: The distillate from the fractional distillation of high-temperature coal having an approximate distillation range of 30°C to 180°C (86°F to 356°F). Composed primarily of C4 to C6 alifatic and aromatic hydrocarbons with carbon disulfide, cyclopentadiene and some hydrogen sulfide.

No EC information available

Justification:

Reference substance information

CAS information

CAS number: 185323-42-6

CAS name: distillates (coal), high-temperature, benzole fraction

IUPAC name

The name of the UVCB should be reported in this field. In this case "distillates (coal), high-temperature, benzole fraction".
Also when no IUPAC name can be derived, the name of the substance should be reported in this field

Description

The description of any additional information should go into this field, in this case.:
The distillate from the fractional distillation of high-temperature coal having an approximate distillation range of 30°C to 138°C (86°F to 356°F). Composed primarily of C4 to C6 alifatic and aromatic hydrocarbons with carbon disulfide, cyclopentadiene and some hydrogen sulfide.

Per l'insieme di dati sulla sostanza si applica quanto descritto per le sostanze mono- e multi-componente. L'insieme di dati sulla sostanza è collegato alla sostanza di riferimento che definisce la sostanza nella sezione 1.1.

1 General Substance Information

- 1.1 Substance identification
- 1.2 Substance composition
- 1.3 Identifiers
- 1.4 Analytical information
- 1.5 Classification and Labelling
- 1.6 Joint submission
- 1.7 Sponsors
- 1.8 Suppliers
- 1.9 Recipients

Legal entity: European Chemicals Bureau / Ispra / Italy

Role in the supply chain

Role flags:

Role: Manufacturer Importer Sole representative

Reference substance

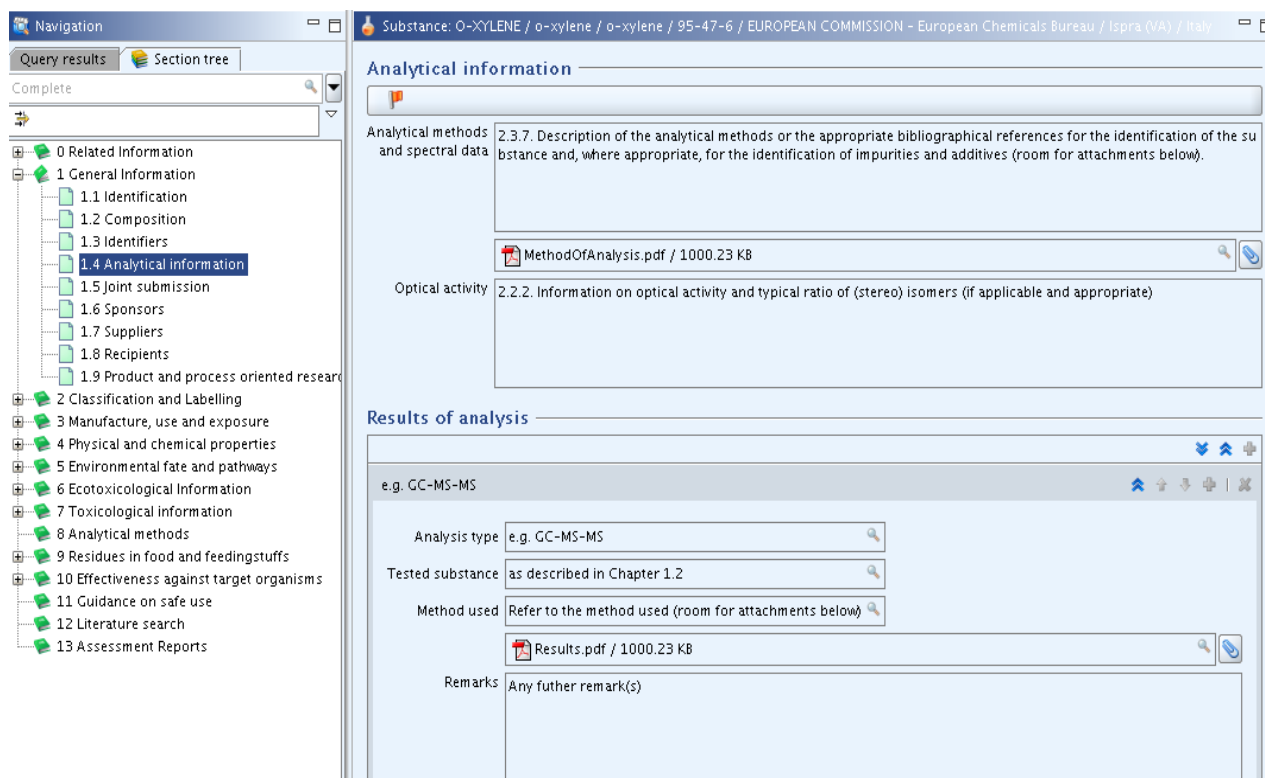
Example for UVCB / The name of the UVCB should be reported in this field.

I costituenti noti sono definiti mediante le appropriate sostanze di riferimento come descritto per le sostanze mono- e multi-componente. Sotto l'intestazione "Impurity" della sezione 1.2 non dovrebbe essere riportato alcun costituente.

8.3 COMUNICAZIONE DELLE INFORMAZIONI ANALITICHE

Le informazioni analitiche sono riportate nel capitolo 1.4. Questo capitolo è formato da due parti:

- informazioni analitiche
- risultati dell'analisi



Questa suddivisione è direttamente correlata alle prescrizioni di REACH (*allegato VI*):

Informazioni analitiche:

- Metodi analitici: in questo campo si dovrebbe fornire una descrizione dei metodi analitici (REACH, *allegato VI*, 2.3.7). In caso di testi lunghi è possibile allegare una documentazione.
- Attività ottica: in questo campo si dovrebbero fornire informazioni sull'attività ottica e il rapporto tipico degli (stereo) isomeri, se applicabili e appropriate (REACH, *allegato VI*, 2.2.2).

Risultati dell'analisi:

Il blocco relativo ai risultati dell'analisi è volto a fornire all'utilizzatore informazioni sui risultati dell'analisi relativa all'identificazione e consentire a questi di allegare elementi quali i cromatogrammi. Può essere usato per fornire dati spettrali (REACH, *allegato VI*, 2.3.5) o cromatografici (REACH, *allegato VI*, 2.3.6).

9 APPENDICE I – STRUMENTI ORIENTATIVI

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

Generale		
Parametro di identificazione della sostanza	Fonte	Descrizione della fonte
Dipartimento della sanità e i servizi sociali degli Stati Uniti	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	Famiglia di banche dati e strumenti per aiutare gli utilizzatori nella ricerca di informazioni chimiche
Cambridgesoft	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	Banca dati gratuita che fornisce strutture chimiche, proprietà fisiche e collegamenti ipertestuali a informazioni pertinenti
Accelrys	http://accelrys.com/products/informatics/	Software chimico; elenco alfabetico dei prodotti Accord
Syrres	http://www.syrres.com/what-we-do/products-services.aspx	Ricerche online gratuite delle seguenti banche dati: banca dati sul destino ambientale; KOW (Log P online); PHYSPROP (Proprietà fisiche)

Nome e altri identificatori		
Parametro di identificazione della sostanza	Fonte	Descrizione della fonte
Denominazione IUPAC	http://www.iupac.org o, più specifici: http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html#inorganic (inorganico) http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html (generale)	Sito web IUPAC ufficiale
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	Nomenclatura chimica e raccomandazioni IUPAC (sotto l'autorità di IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC, aggiornamento previsto nel 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC, aggiornamento previsto nel 2006.

Nome e altri identificatori		
Parametro di identificazione della sostanza	Fonte	Descrizione della fonte
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC, aggiornamento previsto a luglio 2005.
Denominazioni e IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Volume introduttivo in cui sono contemplati tutti i tipi di composti
Denominazioni e IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Programma computerizzato commerciale di denominazione che può essere molto utile per denominare strutture di moderata complessità. Disponibile anche in forma gratuita per piccole molecole (raccomandato da IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Nomenclatura IUPAC di chimica organica (raccomandato da IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Elenco completo dei nomi approvati trascurabili e semi-sistematici dei composti organici
	http://www.chemexper.com/	La Directory chimica ChemExper ha lo scopo di creare una banca dati comune e gratuitamente accessibile sulle sostanze chimiche su Internet. Questa banca dati contiene sostanze chimiche con le loro caratteristiche fisiche. Chiunque può presentare informazioni sulle sostanze chimiche e recuperare informazioni con un browser web
Nomenclatura IUBMB	http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/ or http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb	Banca dati IUBMB sulla nomenclatura biochimica (sotto l'autorità dell'IUBMB)
Altre denominazioni	http://www.colour-index.org	Nomi generici Colour Index, Colour Index Internazionale, Quarta Edizione Online
	http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp	INCI (Nomenclatura internazionale degli ingredienti cosmetici), sito web ufficiale del Personal Care Products Council
	http://www.epa.gov/oppt/existingchemicals/pubs/tscainventory/alkyl-rg.pdf	EPA statunitense Sostanze contenenti lunghezze delle catene di carbonio variabili (intervalli alchilici utilizzando la notazione CX-Y)
Altri identificatori	http://www.cenorm.be	Norme CE, sito CE europeo ufficiale
Numero-CE	http://esis.jrc.ec.europa.eu/	ESIS: ricerca su EINECS, ELINCS, NLP e allegato I di 67/548/CEE

Nome e altri identificatori		
Parametro di identificazione della sostanza	Fonte	Descrizione della fonte
Numero CAS	http://www.cas.org	Sito web ufficiale del servizio di registrazione CAS
	http://www.chemistry.org	Sito web ufficiale della American Chemical Society

Formula molecolare e strutturale		
Parametro di identificazione e della sostanza	Source	Descrizione della fonte
SMILES	http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/	Generatore gratuito di SMILES
Peso molecolare e SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, in forma gratuita (disponibile anche commercialmente)
Numerosi parametri fisico-chimici	http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm	La EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ è una suite basata su Windows® sulle proprietà fisico/chimiche e i modelli di stima del destino ambientale sviluppata dall'Office of Pollution Prevention Toxics e Syracuse Research Corporation (SRC) dell'EPA.

10 APPENDICE II – GUIDA TECNICA IN BASE AL PARAMETRO DI IDENTIFICAZIONE DELLE SOSTANZE

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

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

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

1 Nome/i nella nomenclatura IUPAC o altra nomenclatura internazionale

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

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

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

il prefisso è **penta-1,3-**

l'infisso è **-di** e

il suffisso è **-olo**

en- è la base del nome, la radice.

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

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

1.1 Sostanza organica

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

Numero di atomi di carbonio	Radice
1	meta-
2	eta-
3	propa-
4	buta-
5	penta-
6	esa-
7	epta-
8	otta-
n

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

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

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

Pentene con 2 legami doppi: pentadiene

Fase 3 Combinare prefisso, suffisso e aggiunte alla radice;

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

Benzene, toluene, ecc.

Fase 4 Usare la tabella seguente:

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

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

1.2 Sostanza inorganica

1.2.1 Denominazione di sostanze inorganiche semplici

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

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

O²⁻ è ossido

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

Cu²⁺ è rame(II)

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

CuSO₄ · 5H₂O è "rame(II) solfato pentaidrato"

Nota bene: ai fini della registrazione gli idrati e, quando applicabile, la forma anidra di un particolare sale metallico sono considerati "sostanze identiche".

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

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

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

- a se, quando disciolto in acqua, l'acido si dissocia in un anione con il nome di "x"-uro, l'acido è denominato acido idro-"x"-ico:

l'acido idroclorico forma un anione cloruro.

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

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

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

l'acido cloroso si dissocia in anioni clorito.

1.2.2 Denominazione delle fasi mineralogiche

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

1.3 Prodotti naturali e relativi componenti

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

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

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

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

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

**Strutture primarie ben note sono alcaloidi, steroidi,
terpenoidi e vitamine**

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

- modifiche alla struttura scheletrica

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

Il cloruro di tiamina è anche noto come vitamina B₁

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

1.4 Denominazione IUPAC impossibile da derivare

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

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

2 Altre denominazioni

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

3. <http://www.colour-index.org>, Colour Index Internazionale, Quarta Edizione Online
4. <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, sito web ufficiale del Personal Care Products Council
5. <http://www.cleaning101.com>, sito web ufficiale di SDA

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

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

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

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

4 Nome CAS e numero CAS

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

4.1 Nome CAS

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

In breve, le regole di nomenclatura di base sono:

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

o-Xilene-3-olo è Benzene, 1,2-dimetil, 3-idrossi,

4.2 Numero CAS

I numeri CAS possono essere ottenuti dal Chemical Abstracts Service.

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

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

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

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

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

5 Altri codici identificativi

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

- numero ONU;

- numero del Colour Index;
- numero di tintura;
- eccetera.

6 Formula molecolare, formula di struttura e SMILES

6.1 Formula molecolare

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

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

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

1. identificare gli elementi ed elencare i simboli chimici;
2. disporre gli elementi nell'ordine corretto:
 - a. Sostanze contenenti carbonio:
Ogni elemento è menzionato secondo il suo simbolo chimico, nella seguente sequenza:
 - (1) Carbonio;
 - (2) Idrogeno;
 - (3) Altri simboli degli elementi in ordine alfabetico:

Pentano: C₅H₁₂

Pentene: C₅H₁₀

Pentano: C₅H₁₂O

- b. Sostanze non contenenti carbonio:
Ogni elemento è indicato in ordine alfabetico:

Acido idroclorico: ClH

3. Per ogni elemento, quando il numero di atomi è > 1, indicare il numero di atomi come pedice dei simboli chimici;
4. Aggiungere informazioni che non sono correlate alla struttura principale alla fine della formula molecolare, separate da un punto o da una virgola:

il benzoato di sodio è C₇H₆O₂, sale di sodio

il solfato di rame diidrato è CuO₄S.2H₂O

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

6.2 Formula strutturale

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

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

- *Formula strutturale in forma di formula molecolare*

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

n-pentano: CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

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

2-metilbutano: CH₃CH(CH₂)CH₂CH₃

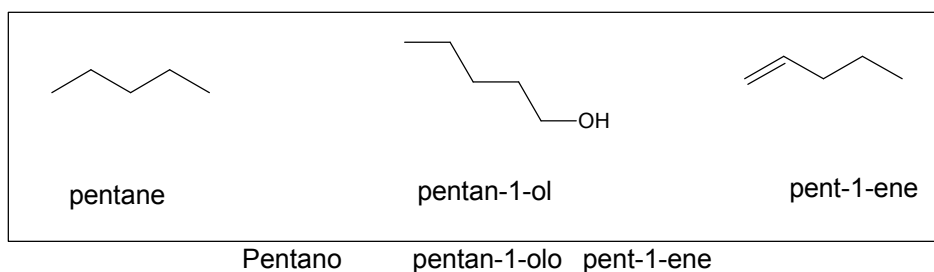
3. In caso di doppi o tripli legami, indicarli tra i gruppi di elementi interessati:

pent-1-ene: CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

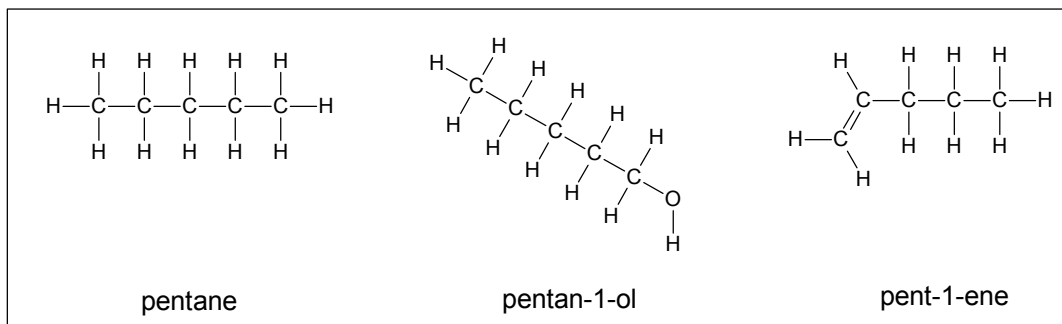
- *Formula strutturale in forma di diagramma strutturale*

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

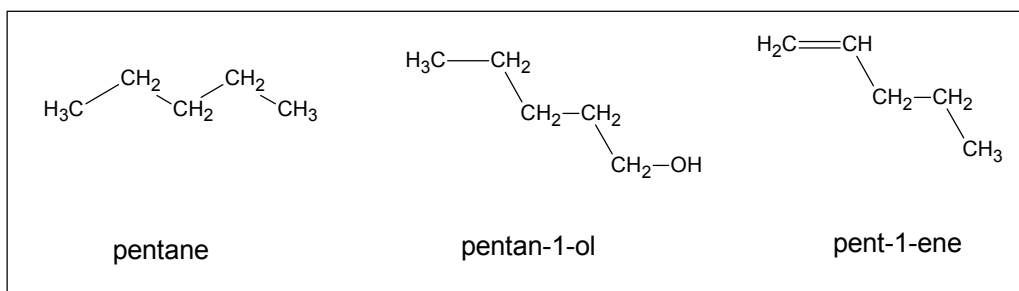
1. Mostrare tutti gli elementi diversi dal carbonio e l'idrogeno attaccato agli elementi diversi dal carbonio.



2. Mostrare tutti gli elementi per nome



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



6.3 Notazione SMILES

SMILES è l'acronimo di Simplified Molecular Input Line Entry Specification³¹. Si tratta di un sistema di notazione chimica usato per rappresentare una struttura molecolare mediante una stringa lineare di simboli. Con SMILES standard, il nome di una molecola è sinonimo della sua struttura: mostra indirettamente un'immagine bidimensionale della struttura molecolare. Dato che una struttura chimica bidimensionale può essere disegnata in vari modi, esistono numerose notazioni SMILES corrette per un'unica molecola. La base delle SMILES è la rappresentazione di un modello di valenza di una molecola; pertanto non è opportuno descrivere molecole che non possono essere rappresentate da un modello di valenza.

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

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

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

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

³¹ 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.

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

catione di ammonio è NH₄⁺

- c. Gli elementi diversi da quelli nel “sottogruppo organico” sono scritti fra parentesi mostrando l'eventuale idrogeno legato.

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

il benzene è c1ccccc1 e il cicloesano è C1CCCCC1

4. L'idrogeno è incluso solo nelle seguenti situazioni:

- idrogeno con carica, cioè un protone, [H⁺];
- idrogeni collegati ad altri idrogeni, cioè idrogeno molecolare, [H][H];
- idrogeni collegati ad altro rispetto a un altro atomo, per es. ponti di idrogeno;
- specifiche dell'idrogeno isotopico, per es. deuterio ([²H]);
- se l'idrogeno è collegato ad un atomo chirale.

5. I quattro legami base sono illustrati come segue:

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

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

2-metilbutano è CC(C)CC

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

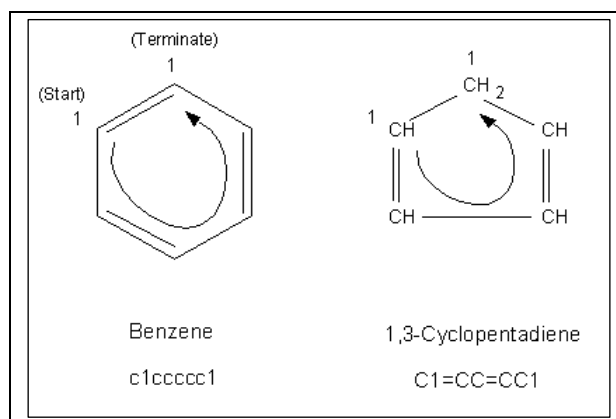
l'acido pentanoico è CCCCC(=O)O

- b. Sono ammessi sostituenti all'interno di sostituenti:

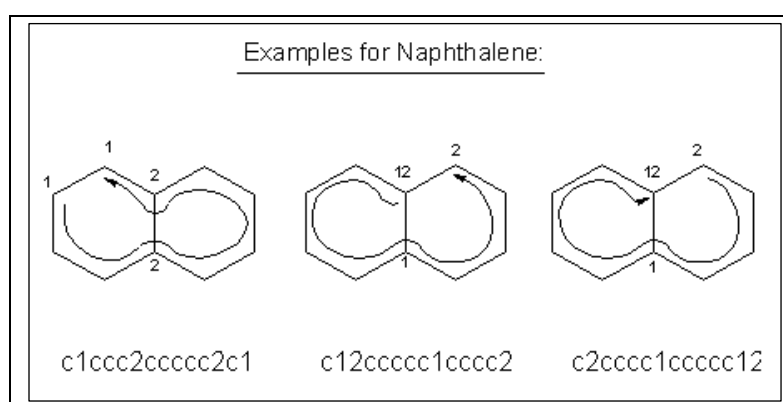
2-(1-metiletil)butano è CC(C(C)C)CC

7. Per le strutture cicliche, i numeri da 1 a 9 sono usati per indicare l'atomo iniziale e finale del ciclo.

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



Finale Inizio Benzene 1,3-ciclopentadiene



Esempi per naftalene:

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

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

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

il cis-1,2-dibromoetene è $Br/C=C\Br$

il trans-1,2-dibromoetene è $Br/C=C/Br$

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

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

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

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

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

7 Informazioni sull'attività ottica

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

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

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

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

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

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

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

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

8 Peso molecolare o intervallo di peso molecolare

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

Per determinare il peso molecolare delle sostanze si possono usare molti metodi: Per determinare i pesi molecolari di sostanze gassose, si può usare la legge di Avogadro la quale dichiara che, in date condizioni di temperatura e pressione, un dato volume di gas contiene un numero specifico di molecole del gas.

$$PV = nRT = NkT$$

n = numero di moli

R = costante universale del gas = 8.3145 J/mol K

N = numero di molecole

k = costante di Boltzmann = 1.38066 x 10⁻²³ J/K = 8.617385 x 10⁻⁵ eV/K

k = R/NA

NA = numero d'Avogadro = 6.0221 x 10²³ /mol

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

9 Composizione della sostanza

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

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

- nome (denominazione IUPAC o altro nome accettato a livello internazionale);
- numero CAS (se disponibile);
- numero CE (se disponibile).

Per ogni costituente, additivo o impurezza, si dovrebbe indicare la percentuale (preferibilmente in peso o in volume), indicando, ove possibile, l'intervallo nella sostanza commerciale. Per il/i costituente/i, si dovrebbe indicare la purezza percentuale tipica con limiti superiori e inferiori dei lotti commerciali tipici; per gli additivi e le impurezze si dovrebbero indicare la purezza percentuale tipica o i limiti superiori e inferiori. Normalmente, i valori indicati dovrebbero sommarsi dando il 100%.**10**

Dati spettrali i dati spettrali sono necessari per confermare la struttura indicata per una sostanza mono-componente o per confermare che una miscela di reazione non è un preparato. Per gli spettri si possono usare numerosi metodi (ultravioletti, infrarossi, risonanza magnetica nucleare o spettro di massa). Non tutti i metodi sono adatti per tutti i tipi di sostanze. Quando possibile, il documento fornirà indicazioni sugli spettri appropriati da includere per i diversi tipi di sostanze (ECB, 2004; ECB, 2005). Per molti dei metodi noti si devono indicare le informazioni seguenti sullo spettro stesso o in allegati:

Spettro ultravioletto-visibile (UV-VIS)

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

Spettro della spettroscopia a infrarossi (IR) l'identità della sostanza;

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

Spettro della spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR)

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

Spettro della spettroscopia di massa (MS)

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

Si possono usare anche altri metodi riconosciuti a livello internazionale se i dati spettrali confermeranno l'identificazione della sostanza, per es. la struttura interna. Esempi includono la XRD per identificare i costituenti di ossidi minerali complessi o l'XRF per analizzarne la composizione chimica.

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

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

11 Cromatografia liquida ad alta prestazione, gascromatografia

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

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

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

- gas di trasporto e pressione del gas di trasporto;
- intervallo di concentrazione della sostanza;
- metodo di visualizzazione, per es. MS;
- identificazione dei picchi;
- risultati (indicare i picchi principali importanti per l'identificazione della sostanza).

12 Descrizione dei metodi analitici

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

11 APPENDICE III - AGGIORNAMENTO DEL DOCUMENTO

Tutte le modifiche apportate al documento sono riportate nella seguente tabella, fatta eccezione per le modifiche minori come le correzioni di errori di stampa, piccole modifiche delle diciture in alcune frasi volte al miglioramento linguistico del documento o l'aggiunta di collegamenti ad altri documenti di orientamento.

Il capitolo 9 Riferimenti non è più presente in questo documento e i relativi riferimenti sono stati spostati all'interno dei capitoli pertinenti sotto forma di note a piè di pagina.

I. Modifiche dalla versione 1 alla versione 1.1 (rettifiche, novembre 2011)

Sezione	Modifica apportata
Titolo	Nel titolo del documento e nei titoli dei capitoli è stato aggiunto un riferimento al regolamento CLP [regolamento (CE) n. 1272/2008 del 16 dicembre 2008]
Generale	Nel corpo del testo è stato fatto riferimento, quando appropriato, al regolamento CLP.
Generale	È stato aggiunto del testo allo scopo di chiarire l'ambito di applicazione del documento di orientamento. Le parti di testo considerate ridondanti sono state rimosse.
1.1	All'interno del documento il termine "TGD" è stato sostituito con "documento di orientamento".
1.2	All'interno del testo il termine "preparato" è stato modificato in "miscela" in virtù delle modifiche apportate al REACH dal regolamento CLP [regolamento (CE) n. 1272/2008 del 16 dicembre 2008]
1.2	All'interno del documento il termine "punto" è stato sostituito con "sezione".
1.3	Le parti di testo considerate ridondanti sono state rimosse.
1.3	All'interno del documento il termine "preregistrazione" è stato sostituito con "preregistrazione (tardiva)".
2.1	Le abbreviazioni AAS e CLP sono state inserite, mentre RIP e TGD sono state rimosse.
2.2	Sono state modificate le descrizioni relative al concetto di lega, inventario CE e IUCLID. Sono state introdotte le definizioni di numero CE, numero in elenco, miscela e sostanza notificata. Cancellazione della definizione di "preparato".
3.2	La sezione è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti.
3.3	La sezione è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti in relazione agli obblighi derivanti dal CLP.
4.2.2.1	La modalità di presentazione dei costituenti è stata cambiata, anziché essere in base alla percentuale di concentrazione è in ordine alfabetico, in modo che la composizione correlata non possa essere dedotta dall'ordine d'elenco.
4.2.3.1	Il termine reticolo è stato modificato in cristallo.
4.3.1.2.3	La sezione è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti.

5	Le parti di testo considerate ridondanti sono state rimosse.
5	Sono stati inclusi riferimenti al Manuale per la presentazione dei dati, Parte 18: Come segnalare l'identità di una sostanza in IUCLID 5 per la registrazione in ambito REACH.
5	La sezione è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti.
6.1	La descrizione della preregistrazione è stata modificata in descrizione della preregistrazione (tardiva).
6.1	Le parti di testo considerate ridondanti sono state rimosse.
7.2	Le parti di testo considerate ridondanti sono state rimosse allo scopo di rendere più chiari i contenuti.
Appendice 1	Aggiornamento dei collegamenti ipertestuali o loro modifica in caso di errato funzionamento.
Appendice 2	La sezione 4.3 è stata rimossa in quanto i suoi contenuti possono essere reperiti sul sito web pertinente.

II. Modifiche dalla versione 1.1 alla versione 1.2 (rettifiche, marzo 2012)

2.2	La definizione di sostanza soggetta a un regime transitorio è stata adeguata con la definizione del regolamento (CE) n. 1907/2006 così come introdotta dal regolamento (CE) n. 1354/2007 del Consiglio e dalla rettifica, GU L 36, 5.2.2009, p.84 (1907/2006).
-----	--

European Chemicals Agency
P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki
<http://echa.europa.eu>