

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

Maggio 2017
Versione 2.1



AVVERTENZA LEGALE

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

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

Riferimento: ECHA-16-B-37.1-IT
Numero di catalogo: ED-07-18-147-IT-N
ISBN: 978-92-9495-7117-7
DOI: 10.2823/914857
Data di pubblicazione: Maggio 2017
Lingua: IT

© Agenzia europea per le sostanze chimiche, 2017

Per inviare eventuali osservazioni relative al presente documento, utilizzare il modulo di feedback sugli orientamenti (riportando il riferimento del documento, la data di pubblicazione, il capitolo e/o la pagina del documento a cui si riferisce il commento). È possibile accedere al modulo di feedback attraverso il sito web dell'ECHA dedicato agli orientamenti o direttamente tramite il seguente link:

https://comments.echa.europa.eu/comments_cms/FeedbackGuidance.aspx

Clausola di esclusione dalla responsabilità: Questa è una traduzione di lavoro di un documento originariamente pubblicato in inglese. Il documento originale è disponibile sul sito web dell'ECHA.

Agenzia europea per le sostanze chimiche

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

Sede: Annankatu 18, Helsinki, Finlandia

PREFAZIONE

Il presente documento descrive come denominare e identificare una sostanza in ambito REACH e CLP. Esso è parte integrante di una serie di documenti d'orientamento redatti con lo scopo di assistere tutte le parti interessate nella fase preparatoria, in vista dell'adempimento degli obblighi 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 industrie o le autorità devono utilizzare conformemente alle disposizioni di tali regolamenti.

I documenti d'orientamento sono stati redatti e discussi nell'ambito dei progetti di attuazione 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 d'orientamento possono essere reperiti attraverso il sito web dell'Agenzia europea per le sostanze chimiche (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Altri documenti d'orientamento verranno pubblicati su questo sito web una volta ultimati o aggiornati.

Cronologia del documento

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

| | | |
|--------------|--|---------------|
| | <ul style="list-style-type: none">- nella sezione 4.2.2.1 è stata cambiata la modalità di presentazione dei costituenti. 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;- nella sezione 4.2.3.1 il termine reticolo è stato sostituito con cristallo;- la sezione 4.3.1.2.3 è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti;- nella sezione 5 è stato incluso un riferimento ai Manuali per la presentazione dei dati - Parte 18: "Come segnalare l'identità di una sostanza in IUCLID 5 per la registrazione ai sensi di REACH";- la sezione 5 è stata rivista allo scopo di chiarirne i contenuti;- nella sezione 6, la descrizione del termine preregistrazione è stata sostituita con quella di preregistrazione (tardiva);- sono stati aggiornati collegamenti ipertestuali interrotti nell'Appendice 1;- la sezione 4.3 dell'Appendice 2 è stata rimossa in quanto i suoi contenuti possono essere reperiti sul sito web pertinente. | |
| Versione 1.2 | <p>Rettifica 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). 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 |
| Versione 1.3 | <p>Rettifica Sono state inserite nel capitolo 7.6 due formule di struttura mancanti.</p> | Febbraio 2014 |

| | | |
|--------------|---|---------------|
| Versione 1.4 | <p>Rettifica:</p> <ul style="list-style-type: none">- è stato conferito un nuovo formato al documento che è in linea con l'attuale identità dell'agenzia;- è stato eliminato il capitolo 8 che forniva istruzioni tecniche basate su una versione non aggiornata di IUCLID;- sono stati rimossi i riferimenti al capitolo 8 e ai manuali per la presentazione dei dati e aggiunti i riferimenti ai nuovi manuali ECHA;- è stata rimossa l'Appendice III e le informazioni sono state spostate nella tabella della cronologia del documento;- sono stati corretti i collegamenti interrotti ai siti web e gli errori editoriali. | Giugno 2016 |
| Versione 2.0 | <p>Aggiornamento parziale limitato a:</p> <ul style="list-style-type: none">- correzione nella sezione 7.5 della descrizione della cristobalite e del quarzo ed eliminazione del riferimento alla direttiva 2000/30/CE;- aggiunta della nuova appendice III con descrizione del concetto di profilo di identità della sostanza;- aggiunta di nuovo testo nel capitolo 1 per introdurre la nuova appendice III;- correzione di refusi ed errori editoriali. | Dicembre 2016 |
| Versione 2.1 | <p>Rettifica per correggere le inesattezze tipografiche nel testo e gli errori nelle informazioni sulla composizione negli esempi nella figura 2 dell'appendice III.</p> | Maggio 2017 |

Indice

| | |
|--|-----------|
| 1. Generale | 9 |
| 1.1. Obiettivi | 9 |
| 1.2. Ambito d'applicazione..... | 10 |
| 1.3. Struttura del documento d'orientamento..... | 11 |
| 2. Definizioni e abbreviazioni | 12 |
| 2.1. Abbreviazioni | 12 |
| 2.2. Definizioni..... | 14 |
| 3. Requisiti per l'identificazione delle sostanze in REACH e CLP | 18 |
| 3.1. Definizione di sostanza | 18 |
| 3.2. Inventario CE | 18 |
| 3.2.1. Il ruolo dell'inventario CE all'entrata in vigore del regolamento REACH..... | 19 |
| 3.2.2. I numeri in elenco dopo l'entrata in vigore del REACH..... | 20 |
| 3.3. Requisiti per l'identificazione delle sostanze in REACH e CLP | 21 |
| 4. Orientamenti all'identificazione e alla denominazione delle sostanze in ambito REACH e CLP | 23 |
| 4.1. Introduzione | 23 |
| 4.2. Sostanze dalla composizione ben definita..... | 29 |
| 4.2.1. Sostanze mono-componente | 30 |
| 4.2.2. Sostanze multi-componente | 32 |
| 4.2.3. Sostanze con composizione chimica definita e altri identificatori principali | 35 |
| 4.3. Sostanze UVCB..... | 36 |
| 4.3.1. Indicazioni generali sulle sostanze UVCB | 37 |
| 4.3.2. Tipi specifici di sostanze UVCB | 46 |
| 5. Criteri per verificare se le sostanze sono identiche | 55 |
| 6. Identità delle sostanze nell'ambito della preregistrazione (TARDIVA) e della richiesta | 62 |
| 6.1. Preregistrazione (TARDIVA) | 62 |
| 6.2. Richiesta..... | 62 |
| 7. Esempi | 63 |
| 7.1. Perossidicarbonato di dietile | 63 |
| 7.2. ZOLIMIDINA | 64 |
| 7.3. Miscela di isomeri | 64 |
| 7.4. Aroma AH | 68 |
| 7.5. Minerali | 74 |

| | |
|---|------------|
| 7.6. Olio essenziale di Lavandin Grosso | 77 |
| 7.7. Olio di crisantemo e relativi isomeri isolati | 83 |
| 7.8. Fenolo, isopropilato, fosfato | 86 |
| 7.9. Composti di ammonio quaternario..... | 88 |
| 7.10. Sostanze derivate dal petrolio..... | 92 |
| 7.10.1. Corrente per la miscelazione della benzina (C4-C12) | 92 |
| 7.10.2. Gasoli (petrolio) | 94 |
| 7.11. Enzimi | 94 |
| 7.11.1. Subtilisina | 95 |
| 7.11.2. α -Amilasi..... | 96 |
| Appendice I – Strumenti orientativi..... | 98 |
| Appendice II – Orientamenti tecnici in base al parametro di identificazione delle sostanze | 102 |
| Appendice III - Identificazione della sostanza e trasmissione congiunta dei dati .. | 118 |

Indice delle tabelle

| | |
|---|----|
| Tabella 1: Abbreviazioni | 12 |
| Tabella 2: Definizioni | 14 |
| Tabella 3: parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito di REACH a norma dell'allegato VI punto 2 | 21 |
| Tabella 4: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze simili ben definite..... | 24 |
| Tabella 5: raggruppamento di identificatori principali per esempi che rappresentano vari tipi di sostanze UVCB | 25 |

Indice delle figure

| | |
|--|-----|
| Figura 1: legenda ai capitoli e alle appendici del documento d'orientamento per ottenere indicazioni adeguate relative ai diversi tipi di sostanze | 28 |
| Figura 2 (pagina seguente): panoramica schematica delle fasi che i potenziali dichiaranti adottano per determinare i propri obblighi di registrazione (1) al fine di definire il SIP relativo all'identità della loro sostanza (4) e di presentare le registrazioni in adempimento degli obblighi di registrazione delle loro sostanze (8). | 124 |
| Figura 3: schema illustrativo della definizione di un SIP (fase 4 in Figura 2) per una sostanza UVCB identificata in base ai descrittori della fonte e del processo forniti nelle descrizioni della fonte e del processo delle singole entità giuridiche. | 127 |

1. Generale

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

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

Il regolamento REACH 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 d'orientamento sull'identificazione e la denominazione delle sostanze è finalizzato a supportare l'industria, gli Stati membri e l'Agenzia europea per le sostanze chimiche.

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

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

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

1.1. Obiettivi

L'obiettivo del presente documento è quello di fornire orientamenti ai fabbricanti e agli importatori in merito alla registrazione e alla dichiarazione dell'identità di una sostanza nell'ambito dei regolamenti REACH e CLP. Il documento offre orientamenti sulla modalità di denominazione di una sostanza, elemento chiave nell'identificazione della sostanza. Esso offre, inoltre, orientamenti in merito a quando le sostanze possono essere considerate identiche ai fini di REACH o CLP e a come il principio "Una sostanza - una registrazione" (OSOR) possa essere attuato definendo il "profilo di identità della sostanza" (SIP). L'identificazione di sostanze identiche, riconducibili allo stesso SIP, è importante ai fini del processo di preregistrazione (tardiva) delle sostanze soggette a un regime transitorio, delle richieste, della condivisione dei dati, della trasmissione congiunta dei dati, della notifica

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").

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 d'orientamento sono offerte ulteriori indicazioni sui parametri di identificazione.

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

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

1.2. Ambito d'applicazione

Ai sensi dell'articolo 1 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**). 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 d'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 d'orientamento viene indirizzato a capitoli specifici in base ai differenti tipi di sostanze.

Gli inventari CE utilizzati nel quadro della direttiva 67/548/CEE (EINECS, ELINCS e l'elenco NLP) costituiscono strumenti importanti ai fini dell'identificazione delle sostanze. Nel capitolo 3.2 sono fornite indicazioni sul ruolo di questi inventari nell'ambito 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 minerali) oppure diversi costituenti (per esempio oli essenziali, metalline che si formano quando vengono separati i minerali metallici dei metalli solforosi). Tuttavia, le sostanze regolamentate da altre normative comunitarie sono, in certi casi, esentate dalla registrazione a norma 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.

Il regolamento REACH impone che i dichiaranti della stessa sostanza collaborino al fine di accordarsi sulla trasmissione comune di determinate informazioni sulla sostanza (principio OSOR)³. L'implementazione di tale principio richiede la massima chiarezza sul modo in cui il dichiarante ha definito l'ambito del SIP.

1.3. Struttura del documento d'orientamento

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

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

- Il capitolo 4.1 descrive la differenziazione fra sostanze "ben definite" e sostanze "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'utente 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, il capitolo 7 presenta alcuni esempi dettagliati, preparati sulla base degli orientamenti pratici indicati nel capitolo 4.

Nell'appendice I sono elencati alcuni link a strumenti 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 d'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 fornisce informazioni sul concetto di SIP, sulla rilevanza degli obblighi di trasmissione comune e su come deve essere definito e dichiarato.

³ Per maggiori informazioni sulla condivisione dei dati per la trasmissione comune consultare gli Orientamenti alla condivisione dei dati.

2. Definizioni e abbreviazioni

2.1. Abbreviazioni

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

Tabella 1: Abbreviazioni

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

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

2.2. Definizioni

Nella **tabella 2** sono elencate e chiarite le principali definizioni utilizzate nei presenti orientamenti.

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

Tabella 2: Definizioni

| Definizione | Descrizione |
|-------------------------|---|
| Additivo | Una sostanza che è stata intenzionalmente aggiunta per stabilizzare la sostanza ⁴ . |
| Articolo* | Un oggetto al quale, durante la produzione, viene data una forma, una superficie o un disegno speciali che determinano la sua funzione in misura più elevata di quanto non lo faccia la sua composizione chimica. |
| Componente | Sostanza aggiunta intenzionalmente per formare una miscela. |
| Costituente | Ogni singola specie presente in una sostanza che può essere caratterizzata dalla sua identità chimica unica. |
| Costituente principale | Un costituente, che non è un additivo o un'impurezza, in una sostanza che costituisce una parte significativa di tale sostanza ed è pertanto usato nella denominazione e nell'identificazione dettagliata della sostanza. |
| Fabbricazione* | La produzione o l'estrazione di sostanze allo stato naturale. |
| Impronta cromatografica | Rappresentazione della composizione di una sostanza a partire dalla distribuzione caratteristica dei costituenti in un cromatogramma analitico. |
| Impurezze | Un costituente indesiderato 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, esso non è stato aggiunto intenzionalmente. |
| 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 (ex polimeri). Le voci presenti nell'inventario CE sono costituite da una denominazione chimica e un numero (nome CE e numero CE), un numero CAS, una formula molecolare (se disponibile) e una descrizione (per alcuni tipi di sostanze). |

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

| Definizione | Descrizione |
|--------------------|--|
| IUCLID | Banca dati internazionale di informazione chimica uniforme. IUCLID è una banca dati e un sistema di gestione per l'amministrazione dei dati sulle sostanze chimiche. |
| Lega* | Un materiale metallico, omogeneo su scala macroscopica, composto da due o più elementi combinati in modo tale da non poter essere facilmente separati con processi meccanici. Le leghe sono considerate miscele speciali. |
| Miscela* | Miscela o soluzione costituita da due o più sostanze. |
| Monomero* | Una sostanza in grado di formare legami covalenti con una sequenza di molecole aggiuntive, uguali o diverse, nelle condizioni della pertinente reazione di formazione del polimero utilizzata per quel particolare processo. |
| Numero CE | Il numero CE è l'identificatore numerico delle sostanze nell'inventario CE. |
| Numero in elenco | Numero 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. |
| 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. |

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

| Definizione | Descrizione |
|--|--|
| Sostanza soggetta a un regime transitorio* | Una sostanza che soddisfa almeno uno dei seguenti criteri: <ul style="list-style-type: none">(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, il 1° gennaio 2007 o il 1° luglio 2013, 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 il fabbricante o l'importatore ne fornisca 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, il 1° gennaio 2007 o il 1° luglio 2013, dal fabbricante o dall'importatore prima dell'entrata in vigore del presente regolamento ed è stata considerata notificata a norma dell'articolo 8, paragrafo 1, 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. |
| 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. |

*Definizioni secondo l'articolo 3 del regolamento REACH.

3. Requisiti per l'identificazione delle sostanze in 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 orientamenti generali all'uso dell'inventario CE derivante dai precedenti quadri normativi sulle sostanze chimiche (capitolo 3.2) e offre ulteriori informazioni di base sui requisiti in materia di identificazione delle sostanze derivanti da REACH (capitolo 3.3).

3.1. Definizione di sostanza

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

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

La definizione di sostanza fornita nei regolamenti REACH e CLP è identica alla definizione di sostanza 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" (ex polimeri - NLP).

Le sostanze presenti sul mercato europeo tra il 1° gennaio 1971 e il 18 settembre 1981 sono elencate nell'inventario europeo delle sostanze chimiche esistenti a carattere commerciale (EINECS)^{5, 6, 7}.

Questo inventario comprende circa 100.000 sostanze identificate da una denominazione chimica (e da una descrizione nel caso di determinati tipi di sostanze), da un numero CAS e

⁵ EINECS si basa sull'inventario ECOIN (**E**uropean **C**ORE **I**nventory) a cui l'industria può presentare una dichiarazione supplementare sulle sostanze (secondo i criteri per la dichiarazione delle sostanze per EINECS). ECOIN è stato creato fondendo diversi elenchi di sostanze chimiche che si presumeva fossero presenti sul mercato europeo (per esempio TSCA). L'EINECS è stato pubblicato il 15 giugno 1990 e comprende più di 100.000 sostanze. Nel corso d'uso dell'inventario, sono stati identificati diversi errori (errori di stampa, per esempio denominazioni chimiche, formule o numeri di registrazione CAS errati), per tale ragione il 1° marzo 2002 è stata pubblicata una correzione.

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

⁷ Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) Inventario EINECS delle sostanze chimiche presenti sul mercato comunitario. Tox Env Chem Vol. 37, pagg. 21-33.

da un numero a sette cifre chiamato numero EINECS. I numeri EINECS cominciano sempre per 2 o 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Le sostanze dichiarate all'EINECS sono sottoposte a una fase di verifica in virtù della quale viene giustificata l'ammissione della sostanza nell'inventario.

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

I polimeri sono stati esonerati dall'obbligo di notifica all'EINECS e sono stati sottoposti a una speciale normativa nell'ambito della direttiva 67/548/CEE⁸ ⁹. Il termine "polimero" è stato ulteriormente definito nel settimo 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 - ex polimeri, teoricamente, dovrebbero essere state notificate. Tuttavia il Consiglio dei ministri ha chiarito che per questo tipo di sostanze, gli ex polimeri, non è richiesta una notifica retroattiva. Alla Commissione è stato richiesto di redigere un elenco di No-Longer Polymers (elenco NLP - ex polimeri). 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).

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

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

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

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

decidere se una sostanza è soggetta a un 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 un regime transitorio") nonché per la condivisione dei relativi dati¹⁰.

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. Negli *Orientamenti alla registrazione*, disponibili sul sito web dell'ECHA nella sezione dedicata alle guide all'indirizzo <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>, 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, PPORD, richieste, registrazioni, notifiche di classificazione ed etichettatura, ecc.) per le quali non era specificato un numero CE (cfr. criteri di attribuzione dei numeri in elenco di cui in seguito). Questo, da un punto di vista tecnico, ha facilitato la gestione, la successiva elaborazione e l'identificazione delle sostanze presenti in dette trasmissioni. I cosiddetti "numeri in elenco" hanno lo stesso formato numerico utilizzato per i numeri EINECS, ELINCS e NLP, ma a differenza di questi iniziano con cifre differenti.

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 d'orientamento 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.

È necessario sottolineare che alla stessa sostanza possono essere attribuiti numeri in elenco differenti qualora per essa siano utilizzati identificatori diversi (per esempio il nome). Di conseguenza, è anche possibile che 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

¹⁰ La definizione di sostanze "soggette a regime transitorio" e sostanze "non soggette a un regime transitorio" è fornita negli *Orientamenti alla registrazione*.

nell'inventario CE.

I numeri in elenco iniziano sempre per 6, 7, 8 o 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-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 od 8.

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 contempli 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 al 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**.

Tabella 3: parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito di REACH a norma dell'allegato VI punto 2

| parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito di REACH a norma dell'allegato VI punto 2 | |
|---|--|
| 2. | IDENTIFICAZIONE DELLA SOSTANZA <i>Per ogni sostanza le informazioni fornite dovranno essere sufficienti a identificare ciascuna sostanza. Se non è tecnicamente possibile o non sembra necessario, dal punto di vista scientifico, fornire informazioni su uno o più dei punti elencati di seguito, occorre indicarne chiaramente la</i> |

| parametri per l'identificazione delle sostanze nell'ambito di REACH a norma dell'allegato VI punto 2 | |
|---|---|
| | <i>ragione.</i> |
| 2.1 | <i>Denominazione o altro identificatore di ogni sostanza</i> |
| 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 | <i>Informazioni relative alla formula molecolare e strutturale di ogni sostanza</i> |
| 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. | <i>Composizione di ogni sostanza</i> |
| 2.3.1 | <i>Grado di purezza (%)</i> |
| 2.3.2 | <i>Natura delle impurezze, inclusi isomeri e sottoprodotti</i> |
| 2.3.3 | <i>Percentuale di impurezze 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, gascromatogramma</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 impurezze e additivi. Queste informazioni devono essere sufficienti a consentire la riproduzione dei metodi.</i> |

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

4.1. Introduzione

Le norme per l'identificazione e la denominazione sono diverse per i vari tipi di sostanze. Per motivi pratici, il presente documento d'orientamento è strutturato in modo che, per ogni tipo di sostanza, l'utente sia direttamente guidato al capitolo in cui sono fornite le indicazioni appropriate. A tale scopo, 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**). Pertanto qualunque sostanza deve essere identificata mediante una combinazione dei parametri identificativi appropriati:

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

Una sostanza viene identificata completamente dalla sua composizione chimica, vale a dire dall'identità chimica e dal contenuto di ciascun suo costituente. Sebbene tale identificazione diretta possa essere possibile per la maggior parte 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 con molti componenti, ciascuno rientrante in un'ampia gamma di costituenti) e sostanze UVCB (prodotti di reazione con composizione variabile e difficilmente prevedibile). È responsabilità del dichiarante identificare una sostanza nel modo più appropriato.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

* I processi sottolineati indicano la sintesi di nuove molecole

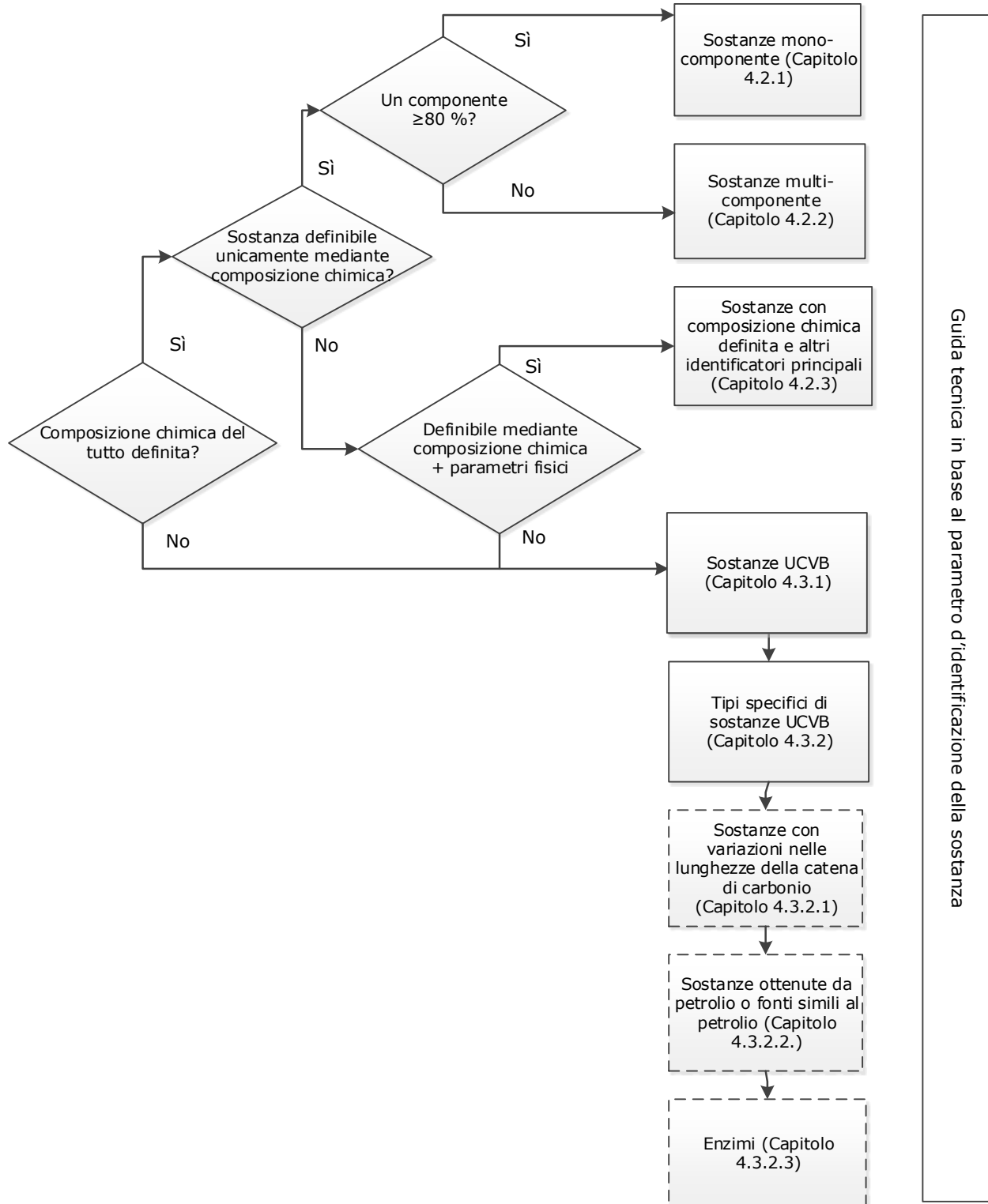
Il presente capitolo è diviso in sottocapitoli che contengono indicazioni specifiche per l'identificazione dei vari tipi di sostanze. Una legenda ai capitoli appropriati è fornita nella **figura 1**.

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

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

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

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



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

4.2. Sostanze dalla composizione ben definita

Le sostanze dalla composizione chimica ben definita sono denominate secondo il/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:

- **costituente principale:** un costituente, che non è un additivo o un'impurezza, in una sostanza che costituisce una parte significativa di tale sostanza ed è pertanto usato nella denominazione e nell'identificazione dettagliata della sostanza.
- **impurezza:** un costituente indesiderato presente in una sostanza prodotta. Esso può avere origine dai materiali di partenza oppure essere il risultato di reazioni secondarie o incomplete durante il processo di produzione. Benché 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 d'orientamento si usa solo il termine "impurezza".

I differenti costituenti hanno differenti requisiti di identificazione:

- i costituenti principali contribuiscono alla denominazione della sostanza e ciascun costituente principale deve essere 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 valutazione¹¹ PBT devono sempre essere specificate, indipendentemente dalla concentrazione. Come regola generale, le informazioni sulla composizione dovrebbero essere completate al 100%.

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

Le miscele, secondo la definizione 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 disponibili rispettivamente nei capitoli 4.2.1 e 4.2.2. Per le sostanze che richiedono informazioni aggiuntive (per esempio determinati minerali), sono disponibili orientamenti nel capitolo 4.2.3.

4.2.1. Sostanze mono-componente

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

Convenzione per la denominazione

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

Identificatori

Una sostanza mono-componente è identificata 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.

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

Normalmente, il costituente principale è presente in concentrazione $> 80\%$ e dovrebbe essere specificato completamente mediante tutti i suddetti parametri. Le impurezze presenti in concentrazione $> 1\%$ dovrebbero essere specificate almeno mediante uno dei seguenti

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

identificatori: nome chimico (nome IUPAC e/o CAS), numero CAS e numero CE e/o formula molecolare. Le impurezze che sono pertinenti ai fini della classificazione e/o della valutazione PBT¹² 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 ≤ 80%

| Esempi | | | | | | | | | |
|---------------|-------------------------------|--------------------------------|-----------------------------|--------------------------------|------------------|--------------------------------|-----------------------------|--------------------------------|-----------------------|
| Sost. | Costituente principale | Contenuto superiore (%) | Contenuto tipico (%) | Contenuto inferiore (%) | Impurezze | Contenuto superiore (%) | Contenuto tipico (%) | Contenuto inferiore (%) | Identità sost. |
| 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%.

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 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 alta prestazione (HPLC), sono necessari per confermare la composizione della sostanza. Se appropriato, si possono usare anche altre tecniche valide di separazione dei costituenti.

¹² Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i relativi criteri possono essere reperite negli Orientamenti alle prescrizioni in materia di informazione e valutazione della sicurezza chimica nel capitolo R.11: Valutazione PBT.

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

4.2.2. Sostanze multi-componente

Una sostanza multicomponente è una sostanza, definita dalla sua composizione quantitativa, in cui più di un costituente principale è presente in un intervallo di concentrazione compreso tra $\geq 10\%$ (p/p) e $< 80\%$ (p/p). Una sostanza multi-componente è il risultato di un processo di fabbricazione¹³.

Il regolamento REACH richiede la registrazione di una sostanza così come prodotta. Se una sostanza multi-componente è fabbricata, tale sostanza multi-componente deve essere registrata^{14 15}. 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 erano elencati in EINECS) sono qualificate come sostanze soggette a un 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.

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.

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.

| Esempio | | | | |
|------------------------|---------------|-----------|---------------|---|
| Costituenti principali | Contenuto (%) | Impurezze | Contenuto (%) | Identità della sostanza |
| o-xilene | 50 | p-xilene | 5 | Massa di reazione dello m-xilene e dello o-xilene |
| m-xilene | 45 | | | |

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

¹³ La differenza risiede nel fatto che una miscela viene ricavata mischiando due o più sostanze, senza che avvenga una reazione chimica, mentre una sostanza multicomponente è il risultato di una reazione chimica.

¹⁴ Il regolamento REACH prevede che alcune sostanze siano esentate dall'obbligo di registrazione (per esempio, le sostanze riportate in elenco nell'allegato IV).

¹⁵ Questo approccio non può essere applicato ad alcune specifiche sostanze come i minerali (cfr. capitolo 7.5 per maggiori dettagli).

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

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

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.

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 alta prestazione (HPLC), sono necessari per confermare la composizione della sostanza. Se appropriato, 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.

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 giuridica. La proposta è di stabilire le prescrizioni relative ai dati come segue:

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

Le prescrizioni in materia di informazione dovrebbero essere stabilite in base al risultato più alto. Per la dichiarazione dei tonnelli, 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 giuridica, da cui risultano differenti sostanze:

- Sostanza 1: 50% C e 25 % D e 25 % E, 1.100 tpa
- Sostanza 2: 50% C e 50 % D, 500 tpa

Anche in questo caso il prodotto di reazione è il punto iniziale: le due sostanze dovrebbero essere registrate come sostanze multi-componente. Se si segue l'approccio della registrazione dei singoli costituenti¹⁶, 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: >1.000 tpa, poiché il tonnello totale della sostanza multi-

¹⁶ 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.

componente "C+D+E" è superiore a 1.000 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 giuridica, 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:

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

La determinazione delle prescrizioni in materia di informazione si basa sulla prescrizione più severa. In questo caso: >100 tpa, poiché il tonnellaggio 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).

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 con 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.

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 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$. Un altro esempio è l'aragonite, una delle strutture cristalline speciali del carbonato di calcio.

Identificatori

Queste sostanze sono identificate e denominate in base alle regole relative alle sostanze mono-componente (cfr. capitolo 4.2.1) o 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 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).

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^{17, 18, 19}, chiamati anche sostanze UVCB, non possono essere sufficientemente identificati dalla loro composizione chimica poiché:

¹⁷ 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.

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

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

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

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

4.3.1. Indicazioni generali sulle sostanze UVCB

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

Informazioni sulla composizione chimica

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

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

Per una sostanza UVCB, tutti i costituenti 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 PBT²⁰ 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.

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).

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 | Nome CE |
|------------------|--|
| 296-358-2 | Lavanda, Lavandula hybrida, est., acetilata |
| 307-507-9 | Lavanda, Lavandula latifolia, est., solforizzata, sale di palladio |

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

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

Esempi

| Numero CE | Nome CE |
|------------------|---|
| 232-341-8 | Acido nitroso, prodotti di reazione con 4-metil-1,3-benzenediammina idrocloruro |

²⁰ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i relativi criteri possono essere reperite negli Orientamenti alle prescrizioni in materia di informazione e valutazione della sicurezza chimica nel capitolo R.11: Valutazione PBT.

| | |
|-----------|---|
| 263-151-3 | Acidi grassi, cocco, prodotti di reazione con dietilentriammina |
| 400-160-5 | Prodotti di reazione di acidi grassi di tallolio, dietanolammina e acido borico |
| 428-190-4 | Prodotto di reazione di: 2,4-diammino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-il)etil]-1,3,5-triazina e acido cianurico |

Nel presente documento d'orientamento, il formato generico del nome 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 appropriato, si dovrebbe indicare anche il tessuto o la parte dell'organismo usati per l'estrazione della sostanza, per esempio midollo osseo, pancreas oppure tronco, semi o radici.

| Esempi | |
|------------------|---|
| Numero CE | Nome CE |
| 283-294-5 | Saccharomyces cerevisiae, est. Descrizione CE Estratti e loro derivati fisicamente modificati come tinture, 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.

3.1 Sintesi

Tra i materiali di partenza si verifica una determinata reazione chimica o biochimica da cui deriva la sostanza. Alcuni esempi sono: reazione 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

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

3.2 Raffinazione

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

La raffinazione può essere ulteriormente definita in processi quali l'estrazione.

L'identificazione della sostanza dipende dal tipo di processo:

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

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

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

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

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

Esempi:

- una pianta è prima 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.

- 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 sostanze

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

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

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

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

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

Gli enzimi sono un gruppo speciale di sostanze che può essere ricavato mediante estrazione e ulteriore raffinazione da una fonte di origine biologica. Sebbene la fonte e il processo 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 (includendo una certa variabilità), si dovrebbe preferire l'identificazione come sostanza multi-componente (cfr. capitolo 4.2.2). Solo quando la composizione del prodotto di reazione non è sufficientemente nota o è scarsamente prevedibile, la sostanza dovrebbe essere identificata come una sostanza UVCB ("prodotto di reazione"). L'identificazione di un prodotto di reazione si basa sui materiali di partenza della reazione e sul processo di reazione (bio)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 sostanza UVCB è rappresentato dalla famiglia, il genere e la specie dell'organismo da cui la sostanza ha origine. Se appropriato, si dovrebbe indicare il tessuto o la parte dell'organismo usati per l'estrazione della sostanza, per esempio midollo osseo, pancreas oppure tronco, semi o radici. Per le sostanze di origine microbiologica, si devono definire il ceppo e il tipo genetico della specie.

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

Esempi

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

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

Quante più fasi sono applicate per la raffinazione, tanto più facile risulterà definire la sostanza mediante la sua composizione chimica. In tal caso, diversi tipi di fonti o diverse modifiche dei processi non portano automaticamente 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 i minerali sono lavorati unicamente mediante metodi meccanici, per esempio mediante triturazione, setacciatura, centrifugazione, flottazione e così via, essi continuano a essere considerati gli stessi minerali estratti dalla miniera. I minerali che sono prodotti attraverso un processo di fabbricazione possono, ai fini dell'identificazione²¹, 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.

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

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

informazioni analitiche

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.

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 del/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 Descrittore della funzionalità Descrittore del sale | lunghezze delle catene alchiliche C_{10-18} acidi grassi (acido carbossilico) sali di cadmio | acidi grassi (C_{10-18}) sali di cadmio |
| Descrittore alchilico Descrittore della funzionalità Descrittore del sale | cloruro di di- C_{10-18} -alchil-dimetil ammonio | cloruro di di- C_{10-18} -alchil-dimetilammonio |
| Descrittore alchilico Descrittore della funzionalità Descrittore del sale | Cloruro di trimetil dimetil ammonio | cloruro di trimetil-segoalchil-ammonio |

4.3.2.2 Sostanze ottenute da petrolio o fonti simili a petrolio

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

I materiali di partenza usati nell'industria della raffinazione del petrolio possono essere petrolio greggio o qualsiasi corrente di raffineria 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 petrolio¹⁷.

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 stabilito²². 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 predominante²².

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

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

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)²³. Questo approccio è stato adottato nel presente documento d'orientamento e consentirà un'identificazione più sistematica, dettagliata e completa degli enzimi rispetto a EINECS.

1. **Convenzione per la denominazione**

Gli enzimi sono denominati secondo le convenzioni di nomenclatura IUBMB.

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

1. ossidoreduttasi
2. trasferasi
3. Idrolasi
4. liasi
5. Iiomerasi
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

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]²⁵. Nella famiglia di peptidasi C1²⁶ (famiglia della papaina). Precedentemente CE 3.4.22.5 e inclusa in CE 3.4.22.4, numero di registrazione CAS: 9001-00-7

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

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

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

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

Link ad altre banche dati:

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

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

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

Riferimenti generali:

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

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

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

Esempi per la classificazione degli enzimi secondo il sistema IUBMB
(<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>)

Le proteasi sono numerate secondo i 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 e CE 3.4.21.35 |
| 3.4.21.9 | enteropeptidasi |
| 3.4.21.10 | acrosina |
| 3.4.21.11 | ora coperta da CE 3.4.21.36 e CE 3.4.21.37 |
| 3.4.21.12 | 12 a-litica endopeptidasi |
| ... | |
| 3.4.21.105 | |
| 3.4.99 | Endopeptidasi dal meccanismo catalitico sconosciuto |

Esempi da EINECS con numero IUBMB aggiunto

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

2. Identificatori

Le sostanze enzimatiche sono identificate mediante la proteina enzimatica 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 PBT²⁷.

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 contenuti 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 $\geq 10\%$ (p/p) o pertinenti ai fini della classificazione ed etichettatura e/o della valutazione PBT²⁸ 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:

²⁷ Ulteriori informazioni sulla valutazione PBT e i relativi criteri possono essere reperite negli *Orientamenti alle prescrizioni in materia di informazione e valutazione della sicurezza chimica, nel capitolo R.11: Valutazione PBT*.

²⁸ 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 (vale 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, 29, 30}. Le sostanze che non sono considerate uguali possono, comunque, essere ritenute strutturalmente correlate facendo ricorso al giudizio di un esperto. La condivisione dei dati può, in ogni caso, essere possibile per tali sostanze se scientificamente giustificata. Tuttavia, questo argomento non è l'oggetto del presente documento ed è trattato negli *Orientamenti alla condivisione dei dati*.

- Si dovrebbe applicare la regola "≥ 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/impurezza 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.

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

²⁹ Vollmer et al. (1998) Compilazione dell'EINECS: descrizioni e definizioni utilizzate per sostanze, impurezze e miscele. *Tox Env Chem Vol. 65*, pagg. 113-122.

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

| 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 (1:1) (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 C18H36O2 | Questa sostanza non deve essere considerata uguale all'acido oleico, puro, C18H34O2 (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 2^n (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.

Sostanze 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, C12-18-alchil, acetati | Le sostanze "ammine, C12-14-alchil, acetati" o "ammine, C12-20-alchil, acetati" o "ammine, dodecil (C12-alchil), acetati" o le sostanze con solo catene alchiliche pari non sono considerate uguali a questa sostanza |

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

| Esempi | | |
|-----------|----------------------------------|--|
| Numero CE | Nome | 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: 272-038-8), né all'olio di semi di lino, maleato (EINECS: 268-897-3), né all'olio di ricino, epossidato (non elencato in EINECS). |

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

| Esempi | | |
|------------------|--|--|
| Numero CE | Nome | 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 d'orientamento sono fornite indicazioni sull'identificazione e la denominazione delle sostanze. Queste indicazioni dovrebbero essere seguite per determinare se le sostanze possono essere considerate uguali ai fini dei regolamenti REACH e CLP. Esse sono ulteriormente approfondite in seguito per la preregistrazione (tardiva) delle sostanze soggette a regime transitorio e la richiesta di sostanze non soggette a un 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) e su chi può ancora beneficiarne possono essere reperite nella *Guida alla condivisione dei dati* all'indirizzo

<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach> e sulla pagina web dell'ECHA dedicata all'indirizzo <http://echa.europa.eu/regulations/reach/registration/data-sharing/pre-registration>.

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

Maggiori informazioni sul processo di richiesta possono essere reperite negli *Orientamenti alla condivisione dei dati* e sulla pagina web dell'ECHA dedicata all'indirizzo <https://www.echa.europa.eu/web/quest/regulations/reach/registration/data-sharing/inquiry>.

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 d'orientamento. 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%). 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*

| Esempi | |
|--|---|
| Denominazione IUPAC o altra denominazione chimica internazionale (della sostanza) | Massa di reazione di 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo e 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo |
| Altre denominazioni (della sostanza) | 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolo Massa di reazione di Etanolo 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-e acqua Composto isomerico di Etanolo 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- (9CI) |
| Numero CE (della sostanza) Nome CE Descrizione CE | Non esiste alcun numero CE per la 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 |

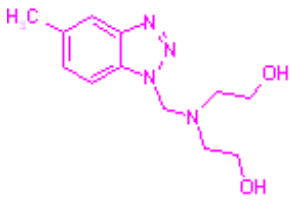
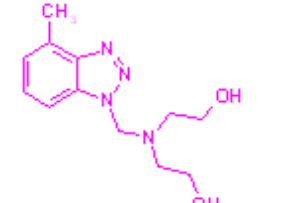
2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

| Costituenti principali | | | | | | |
|-------------------------------|--|-------------------|------------------|---|----------------------------|-----------------------------------|
| | Denominazione IUPAC | Numero CAS | Numero CE | Formola 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 | C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂ | 60 | 50-70 |
| B | Etanolo 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- | 80584-88-9 | 279-501-3 | C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂ | 40 | 30-50 |

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

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

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

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

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

7.4. Aroma AH

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

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

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

Esistono diverse opzioni per l'identificazione della sostanza:

- la qualità A contiene almeno l'80% dell'isomero gamma (iso-alfa) 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) metilionone (65-75%) e alfa-n-metilionone (10-20%) con gli altri isomeri come impurezze.
 - qualità C: una massa di reazione di gamma(iso-alfa) metilionone (50-60%) e alfa-n-metilionone (20-30%) con gli altri isomeri come impurezze.

La composizione è variabile e a volte un isomero è presente in concentrazioni $\geq 10\%$ (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 | non disponibile |
| Nome CE | / |
| Descrizione CE | / |

| | |
|------------|-----------------|
| Numero CAS | non disponibile |
| Nome CAS | / |

2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

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

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

Costituenti principali

Altre denominazioni

| | |
|----------|-------------------------------------|
| A | alfa-iso-metilione; gamma metilione |
|----------|-------------------------------------|

| | |
|----------|---|
| 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 | / |

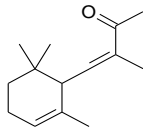
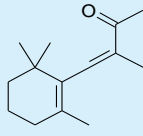
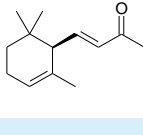
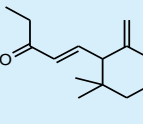
Costituenti principali

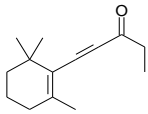
| | Nome CAS | Numero CAS |
|----------|--|-----------------|
| A | 3-buten-2-one, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il)- | 127-51-5 |
| B | 3-buten-2-one, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cicloesen-1-il)- | 79-89-0 |
| C | 1-penten-3-one, 1-[(1R)-2,6,6-trimetil-2-cicloesen-1-il]-, (1E)- | 127-42-4 |
| 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 |  | <chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem> |
| B | C ₁₄ H ₂₂ O |  | <chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem> |
| C | C ₁₄ H ₂₂ O |  | <chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem> |
| D | C ₁₄ H ₂₂ O |  | <chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem> |

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

Costituenti principali

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

3. Informazioni sulla composizione – impurezze e additivi

Impurezze

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

Additivi

| | Denominazione IUPAC | Numero CAS | Numero CE | Formula mol. | Conc. tipica (%p/p) | Intervallo di conc. (%p/p) |
|----------|--------------------------------|------------|-----------|-----------------------------------|---------------------|----------------------------|
| G | Idrossitoluen e 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 amorphe) 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 |
|-----------------------------------|------------|-----------|---|
| Cristobalite | 14464-46-1 | 238-455-4 | O ₂ Si (struttura cristallina: cubica/tetragonale) |
| Quarzo | 14808-60-7 | 238-878-4 | O ₂ Si (struttura cristallina: trigonale/esagonale) |
| 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 interdificati per formare una matrice cristallina. |
| Talco | 14807-96-6 | 238-877-9 | Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄ |
| Vermiculite | 1318-00-9 | - | (Mg _{0.33} [Mg ₂₋₃ (Al ₀₋₁ Fe ₀₋₁) ₀₋₁](Si _{2.33-3.33} Al _{0.67-1.67})(OH) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O) |

Informazioni analitiche prescritte per i minerali

| | |
|---|--|
| Composizione elementare | La composizione chimica fornisce una panoramica generale della composizione del minerale indipendentemente dal numero di costituenti e dalle loro proporzioni nel minerale. Per convenzione la composizione chimica è espressa per ossidi. |
| Dati spettrali (XRD o equivalente) | La XRD o altre tecniche possono identificare i minerali in base alla loro struttura cristallografica. Dovrebbero essere indicati i picchi XRD 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. - 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 *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) e successiva separazione dell'acqua dall'olio essenziale.

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

Nome

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

³¹ "Labiatae" e "Lamiaceae" sono sinonimi.

2. Informazioni sulla composizione – costituenti noti

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

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

| | | | | | |
|----------|--|--|---------------------------------|---|-----------|
| J | EC (R)-p-menta-1,8-diene CAS cicloesen, 1-metil-4-(1-metiletenil)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-metil-4-(1-metiletenil)cicloesene Altro limonene | EC 227-813-5 CAS 5989-27-5 | C ₁₀ H ₁₆ | 1 | 0,5 – 1,5 |
| K | EC 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 | EC 237-641-2 CAS 13877-91-3 | C ₁₀ H ₁₆ | 1 | 0,5 – 1,5 |

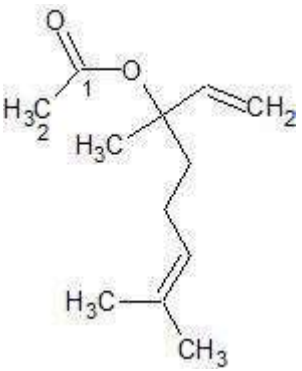
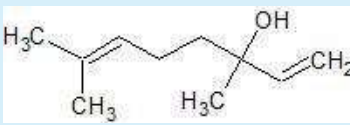
Costituenti noti ≥ 10%

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

Costituenti noti

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

Costituenti noti

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

Costituenti noti

| | Peso molecolare | Intervallo di peso molecolare |
|----------|-----------------|-------------------------------|
| A | 196,2888 | / |
| B | 154,2516 | / |

7.7. Olio di crisantemo e relativi isomeri isolati

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

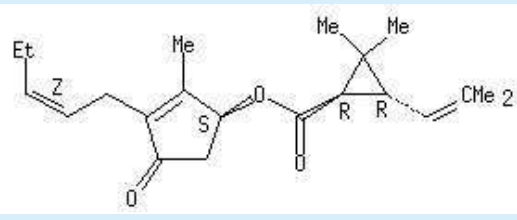
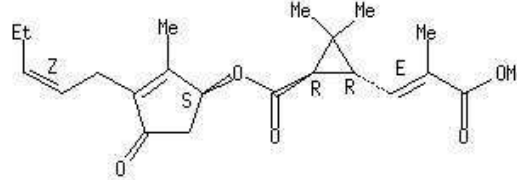
2. La massa di reazione degli isomeri isolati di Jasmolina I e II è coperta dalla registrazione dell'olio?

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 | Numero 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 |

| | | | | |
|--|---------|---|----|----|
| Formola molecolare | |  | | |
| Formola 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-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(3-metossi-2-metil-3-ossoprop-1-enil)ciclopropancarbossilato | nessuno | 1172-63-0 | 35 | 65 |
| Formola molecolare | |  | | |
| Formola strutturale Peso molecolare | | C ₂₁ H ₃₀ O ₃ M = 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 Nome CE Descrizione CE | 273-066-3 Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1) / |
| Numero CAS Nome CAS | 68937-41-7 Fenolo, isopropilato, fosfato (3:1) |

2. Informazioni sulla composizione – costituenti principali

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

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

7.9. Composti di ammonio quaternario

Un'azienda sintetizza le seguenti sostanze:

Sostanza A

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

Numero CE 294-392-2

Numero CAS 91721-91-4

Distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio:

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

Sostanza B

Composti di ammonio quaternario, dicocco alchildimetil, cloruri

Numero CE 263-087-6

Numero CAS 61789-77-3

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

Sostanza C

Bromuro di didodecildimetilammonio

Sostanza D

Cloruro di didodecildimetilammonio

Sostanza E

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

Sostanza F

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

Numero CE 268-072-8

Numero CAS 68002-59-5

Distribuzione delle lunghezze delle catene di carbonio:

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

Sostanza G

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

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

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

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

1. Osservazioni generali

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

saturi

lineari (non ramificati)

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

Altrimenti dovrebbe essere indicato nel modo seguente:

insaturi (C₁₆ insaturi)

ramificati (C₁₀ ramificati)

numeri pari (C₁₂₋₁₈ numeri pari)

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

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

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

2. Come identificare le sostanze ai fini della registrazione?

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

Confronto tra le sostanze A e B

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

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

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

Confronto tra le sostanze B e C

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

Confronto tra le sostanze B e D

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

Confronto tra le sostanze B ed E

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

Confronto tra le sostanze B e F

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

Confronto tra le sostanze B ed G

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

3. 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 Descrizione CE/Descrizione CAS | 272-184-2 68783-08-4 Gasoli (petrolio), pesanti, distillazione atmosferica Una combinazione complessa di idrocarburi ottenuta per distillazione del petrolio grezzo. È costituita da idrocarburi con numero di atomi di carbonio prevalentemente nell'intervallo C7-C35, e punto di ebollizione 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, proteinasi alcalina da <i>Bacillus subtilis</i> ; bioprasi AL 15; bioprasi APL 30; colistinasi; (cfr. anche commenti); subtilisina J; subtilisina S41; subtilisina Sendai; subtilisina GX; subtilisina E; ecc. |
| 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 <i>Bacillus subtilis</i> e altre specie di <i>Bacillus</i> [1,3] |
| Reazione | Idrolisi delle proteine con un'ampia specificità per i legami peptidici, e una preferenza per un grande residuo senza carica in P1. Idrolizza peptidi ammidici |
| Tipo di reazione | Idrolasi; agente sui legami peptidici (peptidasi); Serina endopeptidasi |
| Numero CE | 232-752-2 |
| Nome CE | Subtilisina |
| Numero CAS | 9014-01-1 |

| | |
|---|---|
| Nome CAS | Subtilisina |
| Concentrazione della proteina enzimatica | 26% |
| Altri costituenti | |
| Altre proteine, peptidi e aminoacidi | 39% |
| Carboidrati | 11% |
| Lipidi | 1% |
| Sali inorganici | 23% |
| Substrati e prodotti | |
| Ulteriori parametri | proteine od oligopeptidi, acqua peptidi |

7.11.2. α -Amilasi

| Proteina enzimatica | α-Amilasi |
|---|---|
| Numero IUBMB | 3.2.1.1 |
| Denominazioni fornite dall'IUBMB (Nome sistemico, nome dell'enzima, sinonimi) | 1,4- α -D-glucano glucanoidrolasi; glicogenasi; α -amilasi; alfa-amilasi; endoamilasi; Taka-amilasi A |
| 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 | Endoidrolisi dei legami 1,4- α -D-glucosidici in polisaccaridi contenenti tre o più unità di D-glucosio con legami 1,4- α - |
| Tipo di reazione | idrolasi; glicosidasi; glicosidasi, cioè enzimi che idrolizzano composti O-glicosilati ed S-glicosilati |
| Numero CE | 232-565-6 |
| Nome CE | Amilasi, α - |
| Numero CAS | 9000-90-2 |
| Numeri CAS correlati | 9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (tutti cancellati) |
| Nome CAS | Amilasi, α - |
| Concentrazione della proteina enzimatica | 37% |
| Altri costituenti | |
| Altre proteine, peptidi e aminoacidi | 30% |
| Carboidrati | 19% |
| Sali inorganici | 14% |
| Ulteriori parametri | |
| Substrati e prodotti | amido; glicogeno; acqua; polisaccaride; oligosaccaride; |

Appendice I – 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 |
| Perkin Elmer Informatics | http://chemfinder.cambridgesoft.com/ | Banca dati gratuita che fornisce strutture chimiche, proprietà fisiche e collegamenti ipertestuali a informazioni pertinenti |
| BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB) | http://accelrys.com/products/informatics/ | Software chimico; elenco alfabetico dei prodotti Accord |

| Nome e altri identificatori | | |
|--|---|---|
| Parametro di identificazione della sostanza | Fonte | Descrizione della fonte |
| Denominazione IUPAC | https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/ | Sito web IUPAC ufficiale |
| | 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. |
| | Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941] | Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC, aggiornamento previsto a luglio 2005. |
| Denominazione IUPAC | Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4] | Principali pubblicazioni sulla nomenclatura IUPAC |
| | Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856] | Volume introduttivo in cui sono contemplati tutti i tipi di composti |
| Denominazione IUPAC | http://www.acdlabs.com/products/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/ o http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb | Banca dati IUBMB sulla nomenclatura biochimica (sotto l'autorità dell'IUBMB) |
| Altre denominazioni | http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name | Nomi generici Colour Index, Colour Index Internazionale, Quarta Edizione Online |
| | http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp | INCI (Nomenclatura internazionale degli ingredienti cosmetici), sito web ufficiale del Personal Care Products Council |
| | https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges | EPA statunitense Sostanze contenenti lunghezze delle catene di carbonio variabili (intervalli alchilici utilizzando la notazione CX-Y) |
| Altri identificatori | http://www.cenorm.be | Norme CE, sito CE europeo ufficiale |
| Numero-CE | https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory | Inventario CE: ricerca su EINECS, ELINCS, NLP e <i>allegato I</i> di 67/548/CEE |
| Numero CAS | http://www.cas.org | Sito web ufficiale del servizio di registrazione CAS |

| | | |
|--|---|--|
| | http://www.chemistry.org | Sito web ufficiale della American Chemical Society |
|--|---|--|

Formula molecolare e strutturale

| Parametro di identificazione della sostanza | Fonte | Descrizione della fonte |
|---|---|--|
| SMILES | http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html | Generatore gratuito di SMILES |
| Peso molecolare e SMILES | http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html | ACDChemsketch, in forma gratuita (disponibile anche commercialmente) |
| Numerosi parametri fisico-chimici | http://www2.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface | La EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ è una suite basata su Windows® sulle proprietà fisico/chimiche e i modelli di stima del destino ambientale sviluppata dall'Office of Pollution Prevention Toxics e Syracuse Research Corporation (SRC) dell'EPA. |

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

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

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 d'orientamento.

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 Triplo | -ene -in |
| Saturo | - | -ano |

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

pentene con 2 legami doppi: pentadiene

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 sostituito/gruppo funzionale e di quelli eventualmente successivi secondo l'ordine di precedenza;
- aggiungere il prefisso degli altri sostituenti e gruppi funzionali in ordine alfabetico.

| Precedenza | Gruppo | Formula | Suffisso | Prefisso |
|-------------------|--------------------|----------------|-----------------|-----------------|
| 1 | Acido carbossilico | R-COOH | acido -oico | Carbossi |

| | | | | |
|---|---------|---------------------|----------|-----------|
| 2 | 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 originale
- atomi o gruppi che sostituiscono gli atomi di idrogeno della struttura originale

- configurazioni non già comportate dal nome della struttura originale, o variate rispetto a quelle comportate

Il cloruro di tiamina è anche noto come vitamina B₁

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

1.4 Denominazione IUPAC impossibile da derivare

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

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

2 Altre denominazioni

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

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

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

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

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

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

4 Nome CAS e numero CAS

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

4.1 Nome CAS

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

In breve, le regole di nomenclatura di base sono:

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

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

4.2 Numero CAS

I numeri CAS possono essere ottenuti dal Chemical Abstracts Service.

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

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

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

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

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

5 Altri codici identificativi

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

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

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

pentanolo: C₅H₁₂O

b. Sostanze non contenenti carbonio:

ogni elemento è indicato in ordine alfabetico:

acido idroclorico: CLH

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

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

il benzoato di sodio è C₇H₆O₂, sale di sodio

il solfato di rame diidrato è CuO₄S.2H₂O

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

6.2 Formula strutturale

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

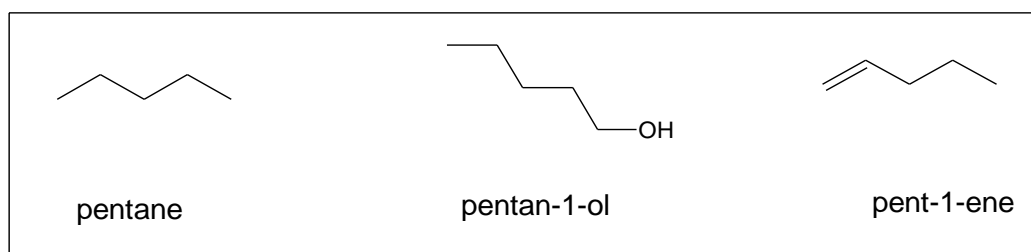
3. In caso di doppi o tripli legami, indicarli tra i gruppi di elementi interessati:

pent-1-ene: CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

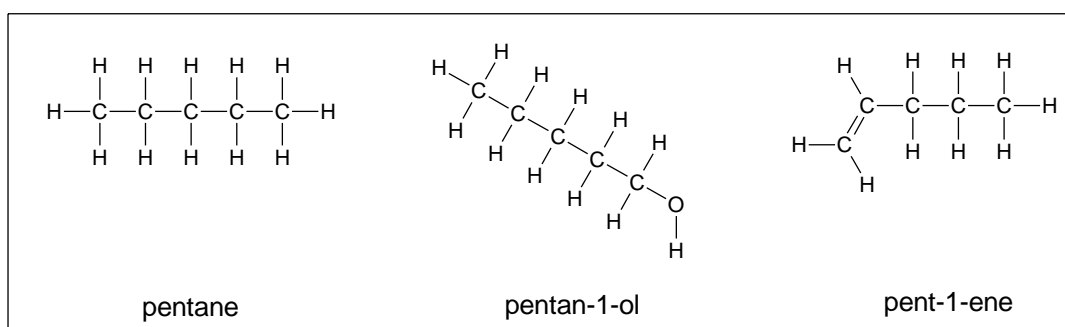
- Formula strutturale in forma di diagramma strutturale

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

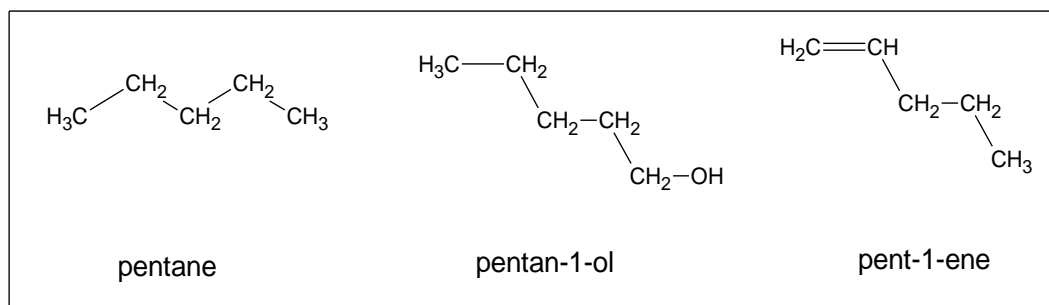
1. mostrare tutti gli elementi diversi dal carbonio e l'idrogeno attaccato agli elementi diversi dal carbonio;



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 Specification.³² 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 |

³² Weininger (1988) SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules; J. Chem. Inf. Comput. Sci.; 1988; 28(1); 31-36.

| | |
|----|---|
| Br | 1 |
| I | 1 |

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

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

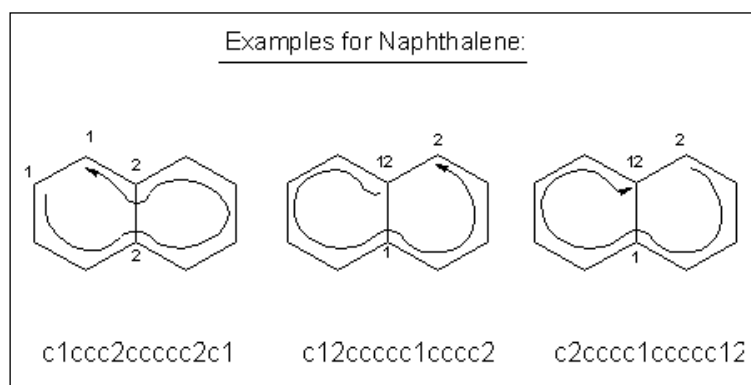
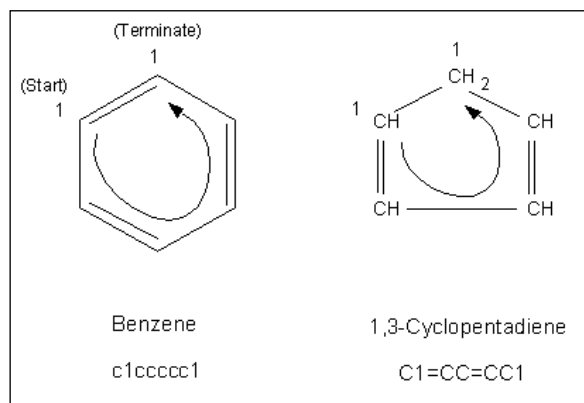
- b. Sono ammessi sostituenti all'interno di sostituenti:

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.

- a. 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.

- b. I numeri sono immessi immediatamente dopo gli atomi usati per indicare le posizioni iniziali e finali.
- c. Un atomo iniziale o finale può essere associato a due numeri consecutivi.



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

l'idrocloruro di 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 = $1,38066 \times 10^{-23}$ J/K = $8,617385 \times 10^{-5}$ eV/K

k = R/NA

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

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

9 Composizione della sostanza

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

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

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

Per ogni costituente, additivo o impurezza, si dovrebbe specificare la percentuale (preferibilmente in peso o in volume), ove possibile, come 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 alta prestazione (HPLC). I due metodi si basano sull'interazione di una fase mobile con una fase stazionaria, portando alla separazione dei costituenti di una miscela.

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

HPLC

- 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.

Appendice III - Identificazione della sostanza e trasmissione congiunta dei dati

Il nucleo centrale dei presenti orientamenti illustra i principi generali a cui i potenziali dichiaranti devono attenersi nell'identificazione delle sostanze specifiche della loro entità giuridica da registrare. Questa appendice fornisce un orientamento pratico ai potenziali dichiaranti circa il modo in cui applicare i principi di identificazione della sostanza se l'identità della sostanza e l'ambito di applicazione vengono definiti collettivamente ai fini della registrazione congiunta sulla base del principio REACH "Una sostanza - una registrazione" (OSOR). Maggiori informazioni sugli obblighi di trasmissione congiunta e sul processo di condivisione dei dati in generale sono reperibili negli Orientamenti sulla condivisione dei dati alla pagina web <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>. È implicito che gli stessi principi di identificazione delle sostanze indicati negli orientamenti di base sono applicabili, a seconda del tipo di sostanza, all'identità di una sostanza ai fini della registrazione congiunta.

In effetti, le prime parti dell'articolo 11, paragrafo 1, e dell'articolo 19, paragrafo 1, del regolamento REACH stabiliscono un requisito per la "trasmissione congiunta dei dati da parte di più dichiaranti". In particolare, tali disposizioni richiedono che "qualora uno o più fabbricanti e/o importatori intendano fabbricare e/o importare nella Comunità una sostanza", la trasmissione delle informazioni relative alle proprietà della sostanza e alla sua classificazione "viene effettuata in primo luogo da un solo dichiarante che agisce con il consenso di un altro o di altri dichiaranti (in seguito denominato "il dichiarante capofila")".

Il regolamento di esecuzione (UE) n. 2016/9 della Commissione relativo alla trasmissione comune di dati e alla condivisione di dati ribadisce e consolida l'obbligo di più dichiaranti dell'identità della stessa sostanza di presentare alcune informazioni congiuntamente. In pratica, la presentazione congiunta delle informazioni impone alle parti interessate di concordare i limiti e l'ambito di applicazione dell'identità della sostanza. Questa definizione è nota come profilo di identità della sostanza o SIP. Si prevede che il SIP specifichi i limiti della sostanza che i dichiaranti hanno deciso di includere nei dati presentati congiuntamente. Questo riguarda anche i dichiaranti per i quali sono previste opzioni opt-out per alcune delle informazioni presentate congiuntamente.

Pertanto, l'accordo sull'ambito di applicazione dell'identità della sostanza oggetto della registrazione è un pre-requisito per la presentazione congiunta. La trasparenza relativa all'ambito di applicazione dell'identità della sostanza e ai dati cui si riferisce è centrale per l'attuazione. Di conseguenza, l'ambito di applicazione della sostanza o il SIP devono essere chiaramente segnalati nel fascicolo del dichiarante capofila per conto di tutti gli altri dichiaranti, mentre tutti i dichiaranti riportano le proprie informazioni sulla composizione singolarmente.

Un semplice esempio illustrativo di un modo per stabilire il profilo di identità di una sostanza chimica prodotta/importata nell'UE da parte dei singoli dichiaranti è schematicamente riportato nella sottostante Figura 2. Illustra l'identificazione della sostanza da registrare, considerando le diverse composizioni, generando i dati e, infine, presentando le informazioni in formato IUCLID all'interno di un fascicolo di registrazione. L'esempio riguarda una sostanza semplice, soggetta a un regime transitorio, monocomponente e ben determinata. Per le sostanze più complesse, il processo di definizione del SIP può comportare iterazioni tra le fasi 3 e 5 della figura.

Nel corso delle discussioni tra i potenziali dichiaranti, la documentazione relativa al SIP può avere la forma, ad esempio, di un documento Word o di un foglio di lavoro Excel in cui tutte le informazioni convenute sono registrate e messe a disposizione di tutti i membri esistenti e potenziali. Alcune associazioni di settore hanno reso disponibili modelli per documentare il

SIP, i quali sono stati utilizzati da molti dichiaranti (ad esempio, il modello Cefic³³). Altre hanno semplicemente documentato le informazioni pertinenti in un documento Word o sulla pagina web di un consorzio istituito per lavorare sulla registrazione della sostanza in questione.

2. Definizione dell'identità e dell'ambito di applicazione di una sostanza corrispondente ai dati presentati per una registrazione

La Figura 2 (fasi da 1 a 4) illustra schematicamente le fasi che possono essere eseguite da più dichiaranti potenziali nel definire l'identità della sostanza corrispondente ai dati presentati congiuntamente per sostanze semplici ben determinate.

Ogni singolo dichiarante potenziale determina i propri obblighi per le sostanze che produce/importa in base alla definizione di sostanza di cui all'articolo 3, paragrafo 1, e applicando i principi di identificazione della sostanza di cui alla parte centrale dei presenti orientamenti (fasi 1 e 2 della Figura 2).

Ogni potenziale dichiarante può quindi verificare se altri potenziali dichiaranti hanno lo stesso "nome e altri identificatori" (fase 3). Da qui, i potenziali dichiaranti possono applicare collettivamente i principi della parte centrale dei presenti orientamenti al fine di definire i limiti dell'identità della sostanza corrispondente ai dati presentati congiuntamente, ossia il profilo di identità della sostanza (fase 4).

Il SIP descrive in modo generico l'ambito di applicazione della sostanza in termini di informazioni sulla composizione (compresi eventuali altri parametri rilevanti quali, ad esempio, la morfologia, l'aspetto fisico, la forma), il nome e altri identificatori per i quali possano risultare rilevanti i dati relativi alla classificazione e al rischio presentati congiuntamente. La definizione del SIP non deve seguire una linea troppo conservativa, onde evitare di escludere i concorrenti dalla trasmissione congiunta.

Il SIP definisce il legame intrinseco tra l'identità della sostanza e i dati relativi al rischio da presentare congiuntamente. Se definito con sufficiente anticipo, può facilitare la fase di generazione/raccolta delle informazioni durante il processo di adempimento degli obblighi di registrazione (descritti nella Guida alle prescrizioni in materia di informazione e alla valutazione sulla sicurezza chimica; fase 5 della Figura 2 riportata di seguito), al fine di garantire che i dati generati o raccolti si riferiscano appieno all'identità della sostanza.

Come evidenziato nei paragrafi 4.2.3 e 4.3 degli orientamenti di base, per le informazioni sulla composizione delle sostanze più complesse, i potenziali dichiaranti utilizzano in genere parametri e/o descrittori aggiuntivi (ad esempio la descrizione della fonte/processo) nelle fasi 1-3; quelli concordati possono poi essere inclusi nel SIP (fase 4). In alcuni casi, il legame tra il limite di identità della sostanza e i dati relativi al rischio presentati congiuntamente possono diventare del tutto chiari solo in seguito alla raccolta parziale o totale dei dati relativi al rischio. Se necessario, a seconda della complessità dell'identità della sostanza, è possibile stabilire iterazioni tra le fasi 3 - 5 e i dati raccolti nella fase 5, ad esempio quando certe composizioni comprendono componenti che determinano la classificazione, l'etichettatura e/o la valutazione PBT. Al fine di descrivere adeguatamente i limiti dell'identità della sostanza, il SIP può comprendere più di un profilo di composizione.

Il SIP deve fornire informazioni generiche che consentano la determinazione dei limiti di identità della sostanza corrispondenti ai dati presentati congiuntamente:

³³ Il SIP è stato originariamente descritto negli "Orientamenti per dichiaranti capofila" di Cefic, disponibile sul sito <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Alcuni esempi di SIP sviluppati dai dichiaranti che utilizzano questo modello sono reperibili sul sito di REACH centrum <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

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

È importante che i parametri che definiscono i limiti di identità della sostanza inclusi nella presentazione congiunta siano concordati da tutti i dichiaranti e siano chiaramente documentati nel SIP. Di conseguenza, in seguito alla richiesta di un nuovo dichiarante potenziale, è possibile che il SIP debba essere modificato o esteso qualora si convenga che una parte o tutti i dati presentati congiuntamente siano rilevanti anche per la sostanza fabbricata o importata dal dichiarante interessato.

Il SIP non deve comportare la condivisione di informazioni commerciali riservate tra i dichiaranti o la divulgazione di tali informazioni a terzi attraverso la trasmissione congiunta. Laddove informazioni commerciali potenzialmente riservate debbano essere condivise dai dichiaranti comuni al fine di definire chiaramente il SIP, i dichiaranti possono considerare di servirsi di un fiduciario, come descritto negli Orientamenti sulla condivisione dei dati.

3. Guida pratica per documentare il profilo di identità della sostanza

I principi generali per l'identificazione delle sostanze UVCB ben determinate sono descritti negli orientamenti di base. Di seguito sono riportate alcune indicazioni pratiche su come applicare questi principi collettivamente. Gli orientamenti di base prevedono la possibilità di applicare deroghe ai principi generali. Tali deroghe richiedono ai dichiaranti di essere in grado di dimostrare il legame intrinseco tra l'identità della sostanza e i dati relativi al rischio presentati congiuntamente.

3.1 Sostanze ben determinate

Quando si definiscono i componenti principali e i relativi intervalli di concentrazione e impurità di una sostanza ben determinata, è necessario attenersi al principio del $\geq 80\%$ (w/w) per l'identificazione di una sostanza monocomponente e al principio del $< 80\%$, $\geq 10\%$ per l'identificazione di una sostanza multicomponente. Questo vale per ogni singolo dichiarante e per tutti i dichiaranti collettivamente nel momento in cui determinano il SIP. In particolare, devono essere segnalati i profili delle impurità concordati nel SIP. Qualora il SIP includa impurità specifiche che possono avere un impatto sulla classificazione ed etichettatura e/o sulla valutazione PBT, i dichiaranti interessati da queste impurità devono tenerne conto in fase di raccolta dei dati (fase 5). Le informazioni pertinenti di cui agli allegati VII-XI possono essere presentate congiuntamente o separatamente ai sensi dell'articolo 11, paragrafo 3, del regolamento REACH (cosiddette opzioni opt-out). I valori della concentrazione da segnalare devono tener conto dell'intervallo di concentrazione attraverso la presentazione congiunta.

Per le sostanze che richiedono parametri aggiuntivi onde poter registrare l'identificazione in modo inequivocabile, ogni dichiarante ha bisogno di attenersi ai principi delineati nel paragrafo 4.2.3 della parte centrale dei presenti orientamenti. Occorre valutare se la variabilità di questi parametri renda necessario adeguare la classificazione o i dati relativi al rischio presentati congiuntamente. Ai fini della determinazione del SIP in relazione alla trasmissione congiunta, è possibile applicare analoghe considerazioni. Ad esempio, può essere necessario includere nel profilo di identità della sostanza quei parametri (ad esempio

aspetto fisico e/o parametri morfologici come porosità, granulometria, forma delle particelle) che possono incidere sulle proprietà rilevanti per la determinazione del profilo di rischio (ad esempio, solubilità, reattività, tossicità in caso di inalazione, ecc.). Se questo è il caso, gli intervalli generici di questi parametri contemplati dal SIP devono essere forniti in modo trasparente (ad esempio, intervalli di dimensione delle particelle applicabili a tutti i dichiaranti, elenco della/e forma/e ed elenco delle chimiche superficiali). In questo modo, la completezza dei dati sul rischio presentati congiuntamente nel SIP è assicurata.

Allo stesso modo, le differenze della fase cristallina dei prodotti chimici inorganici possono dare origine a diverse considerazioni sul profilo di rischio, specifiche per queste fasi (ad esempio quarzo, cristobolite, silice amorfa). Tenendo conto delle eventuali differenze nelle proprietà delle varie fasi, spetta ai potenziali dichiaranti di queste sostanze valutare l'opportunità di presentare una registrazione congiunta che includa tutte le fasi, compresi i dati relativi al rischio specifici per le diverse fasi, o se presentare registrazioni congiunte diverse per le varie fasi (ad esempio, varie identità della sostanza). In entrambi i casi, le fasi incluse devono essere elencate nel SIP e i relativi dati di cui agli allegati VII-XI devono considerare tutte le fasi oggetto di registrazione, in modo da garantire che i dati si riferiscano appieno al SIP.

Va notato che le composizioni possono avere diversi profili di impurità e/o di rischio, ma tali differenze non implicano necessariamente che dette composizioni non possano essere inserite nella stessa registrazione.

3.2 Sostanze UVCB

Per le sostanze UVCB, l'identificazione può essere più difficile e per questo motivo una documentazione trasparente è molto utile per concordare l'identità della sostanza ai fini della registrazione congiunta. Ogni potenziale dichiarante dovrebbe prendere in considerazione singolarmente le raccomandazioni di cui alla parte centrale dei presenti orientamenti e quindi applicare gli stessi principi collettivamente. Si noti che l'aggiunta di intervalli di concentrazione all'interno del SIP può determinare un profilo con intervalli di concentrazione molto ampi, fino al punto che la sostanza può non essere considerata più tale.

Come indicato negli orientamenti di base, i punti di partenza per l'identificazione di alcune sostanze UVCB sono la fonte e il processo utilizzato per la fabbricazione, piuttosto che direttamente le identità e gli intervalli di concentrazione dei componenti. In questi casi, altri descrittori fungono da indicatori per determinare le identità dei componenti e i rispettivi intervalli di concentrazione. I potenziali dichiaranti possono descrivere il processo di fabbricazione in termini di fonte e di processo nella misura necessaria per identificare la sostanza. La descrizione può includere eventuali parametri/caratterizzatori aggiuntivi, che i dichiaranti ritengano rilevanti per l'identità della sostanza (vedere ad esempio la **Tabella 5** inclusa negli orientamenti di base). Ai fini della registrazione congiunta, le descrizioni sono condivise esclusivamente se necessario per concordare l'ambito di applicazione dell'identità della sostanza UVCB ai fini della registrazione. I potenziali dichiaranti possono attenersi ai principi delineati negli orientamenti di base sia a livello individuale sia in forma collettiva. Il SIP si traduce quindi in una segnalazione generica dei parametri di fonte e di processo, in modo da coprire tutta la portata delle composizioni dei singoli dichiaranti. Questo è schematicamente illustrato in **Figura 3**.

Come indicato negli orientamenti di base, per le sostanze identificate sulla base della fonte e del processo, eventuali cambiamenti significativi della fonte e del processo determinerebbero una diversa identità della sostanza, che dovrebbe essere registrata separatamente. Una deroga a tale principio implicherebbe che i dichiaranti siano in grado di dimostrare che ogni combinazione di processo/fonte produce composizioni che possono essere trattate nella stessa registrazione congiunta. Variazioni minime dei materiali di base,

del processo e/o delle condizioni di processo possono essere prese in considerazione nel SIP. I dichiaranti devono concordare sul fatto che ogni combinazione di processo/fonte produce composizioni simili al punto che è opportuno includerle nell'identità di una stessa sostanza, e devono accertarsi che i dati relativi al rischio siano appropriati per l'intera area di variazione del SIP. Più in particolare, i dichiaranti devono essere in grado di giustificare che i dati sul rischio presentati congiuntamente si riferiscano a tutte le composizioni o siano adattati, se del caso, alle informazioni presentate separatamente per specifiche composizioni, ai sensi dell'articolo 11, paragrafo 3, del regolamento REACH (opt-out).

Al fine di dimostrare la pertinenza del set di dati rispetto a ciascuna combinazione di processo/fonte, le combinazioni devono essere documentate in modo trasparente nel SIP e indicare i criteri di inclusione/esclusione applicati per i dichiaranti comuni correnti e futuri.

Per altri tipi di UVCB (vedere paragrafo 4.3.2 degli orientamenti di base), a seconda dei casi i potenziali dichiaranti possono utilizzare una combinazione di descrittori sulla composizione e di descrittori aggiuntivi. Ad esempio, per alcune sostanze oleochimiche, la composizione varia in funzione delle distribuzioni della lunghezza della catena alchilica dei componenti, e la distribuzione della lunghezza della catena alchilica può essere un descrittore aggiuntivo utilizzato per l'identificazione. L'approccio adottato dal SIEF deve essere documentato in modo trasparente nel proprio SIP.

3.3 Profilo di identità della sostanza

È responsabilità di tutti i dichiaranti che presentano congiuntamente le informazioni concordare i parametri necessari per l'identificazione della sostanza e documentarle in modo trasparente nel proprio SIP. Deviazioni o deroghe rispetto ai normali principi di identità della sostanza decisi collettivamente devono essere documentate in modo trasparente. Siccome il SIP documenta i criteri di inclusione/esclusione, il SIEF deve poter garantire che i criteri applicati siano trasparenti e che i dati rilevanti di cui agli allegati VII-XI raccolti/generati si riferiscano in modo dimostrabile all'intero profilo di composizione concordato.

Laddove i potenziali dichiaranti includano singolarmente additivi stabilizzanti nel loro profilo di identità, ai sensi dell'articolo 3, paragrafo 1, l'identità e gli intervalli di concentrazione di tali additivi devono essere concordati e segnalati in modo trasparente nel SIP.

In fase di raccolta dei dati, occorre considerare la pertinenza del/i materiale/i di prova utilizzato/i per generare/raccogliere dati utili in adempimento degli obblighi di informativa di cui agli allegati VII-XI. La logica alla base delle conclusioni sulla loro rappresentatività rispetto alle composizioni oggetto del SIP deve essere documentata e inclusa nel fascicolo tecnico. In particolare, questo vale per le identità delle sostanze complesse caratterizzate da ampi profili di composizione.

Durante la raccolta dei dati, i potenziali dichiaranti possono determinare che il proprio SIP è eccessivamente ampio e non adatto a presentare congiuntamente le informazioni sul rischio rappresentativo dell'identità della sostanza in questione. In tal caso, i potenziali dichiaranti possono decidere di suddividere il SIEF e trattare separatamente due o più sostanze³⁴. Ogni sostanza avrebbe allora il proprio SIP e la propria trasmissione congiunta delle informazioni relative al rischio specificamente rappresentative dell'identità della sostanza. Le ragioni per cui certe informazioni relative al rischio non sono rappresentative di alcuni parametri relativi all'identità della sostanza devono essere documentate in modo trasparente nel SIP per ogni singola registrazione. In questa fase, i rispettivi potenziali dichiaranti possono anche

³⁴ Considerazioni sul ruolo di EINECS nello stabilire l'identità delle sostanze in ambito REACH possono essere reperite nel documento CARACAL concordato al 4° Incontro delle autorità competenti per il REACH e il CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev. 2 "Identità della sostanza e formazione del SIEF (il ruolo di EINECS)".

determinare che i profili di composizione debbano essere ulteriormente raffinati in funzione dei componenti e/o delle impurezze che determinano la classificazione e l'etichettatura, la valutazione PBT, ecc.

I potenziali dichiaranti che intendano unirsi ad altri dichiaranti potenziali che hanno già concordato un SIP per cui non è ancora stata presentata la registrazione, devono considerare se le informazioni sull'identità della sostanza rientrano nei limiti del SIP. In caso contrario, i potenziali dichiaranti devono discutere e concordare se sia necessario ampliare l'ambito di applicazione del profilo per includere il nuovo membro o decidere che non rientra nell'ambito di applicazione.

Se la sostanza da registrare a cura del potenziale dichiarante prevede parametri specifici di identità della sostanza che possono alterare la rappresentatività delle informazioni relative al rischio presentate congiuntamente e che, pertanto, richiedono una giustificazione specifica (ad esempio, un'impurità specifica, un diverso rapporto di composizione, una fase diversa, una granulometria differente, ecc.), è necessario un adeguamento del SIP. Per motivi di trasparenza, questo parametro deve essere specificato nel SIP.

In alcuni casi, i dichiaranti potenziali ed esistenti possono convenire che i dati relativi al rischio presentati congiuntamente non sono fondamentalmente rappresentativi della sostanza del dichiarante potenziale a causa di parametri devianti relativi all'identità della sostanza che non rientrano nei limiti del SIP concordati. In tal caso, il potenziale dichiarante presenta una registrazione separata contenente un'identità della sostanza composta dal parametro in questione; la registrazione può essere presentata insieme ad altri dichiaranti o individualmente, se non esistono altri dichiaranti per la stessa identità della sostanza.

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

Quando i potenziali dichiaranti hanno raccolto/generato tutti i dati richiesti agli allegati VII-XI per la loro sostanza (fase 5 della **Figura 2**), il pacchetto di dati è pronto per essere inserito in formato IUCLID nel fascicolo da presentare all'Agenzia (fase 6 della **Figura 2**). Per segnalare il SIP in formato IUCLID, il nome e altri identificatori, le informazioni sulla composizione e gli altri parametri pertinenti sono riportati nelle sezioni IUCLID 1.1 e 1.2.

| Profilo di identità della sostanza | Segnalato in formato IUCLID |
|--|--|
| Nome e altri identificatori | Sezione 1.1 di tutti i fascicoli |
| Informazioni sulla composizione e altri parametri pertinenti | Sezione 1.2 del fascicolo del dichiarante capofila |

Il nome e altri identificatori del SIP sono segnalati nella sezione 1.1 di tutti i fascicoli. Il dichiarante capofila segnala le informazioni sulla composizione e gli altri parametri pertinenti del SIP nella sezione 1.2 del proprio fascicolo, sotto forma di "composizione limite della sostanza"³⁵. Il dichiarante capofila deve anche presentare tutti i dati pertinenti di cui agli allegati VII-XI nelle sezioni 4-14 (in assenza di giustificati opt-out per uno o più obblighi di informativa) per conto di tutti i dichiaranti.

Tutti i dichiaranti (compreso il dichiarante capofila) segnalano le informazioni sulla composizione della sostanza che le proprie entità giuridiche specificamente fabbricano o

³⁵ Le istruzioni su come inserire la "composizione limite della sostanza" possono essere reperite nel manuale "Come preparare i fascicoli PPORD e di registrazione" disponibile sul sito <http://echa.europa.eu/manuals>.

importano nella sezione 1.2 dei propri fascicoli. Ciò significa che, nella sezione 1.2 del proprio fascicolo, il dichiarante capofila segnala sia le informazioni sulla composizione del SIP sia le informazioni sulla composizione della propria entità giuridica, mentre tutti gli altri dichiaranti segnalano le proprie informazioni specifiche sulla composizione. Ogni registrazione standard deve anche includere le informazioni analitiche rilevanti nella sezione 1.4 del documento IUCLID.

Ogni dichiarante deve dimostrare che le informazioni sulla composizione delle sostanze che produce o importa rientrano nel SIP come segnalato nella "composizione limite" e, a sua volta, nei dati di cui agli allegati VII-XI presentati nel fascicolo del dichiarante capofila (in assenza di giustificati opt-out).

Le istruzioni tecniche relative alla modalità di segnalazione delle informazioni sulla composizione in formato IUCLID sono disponibili nei manuali IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

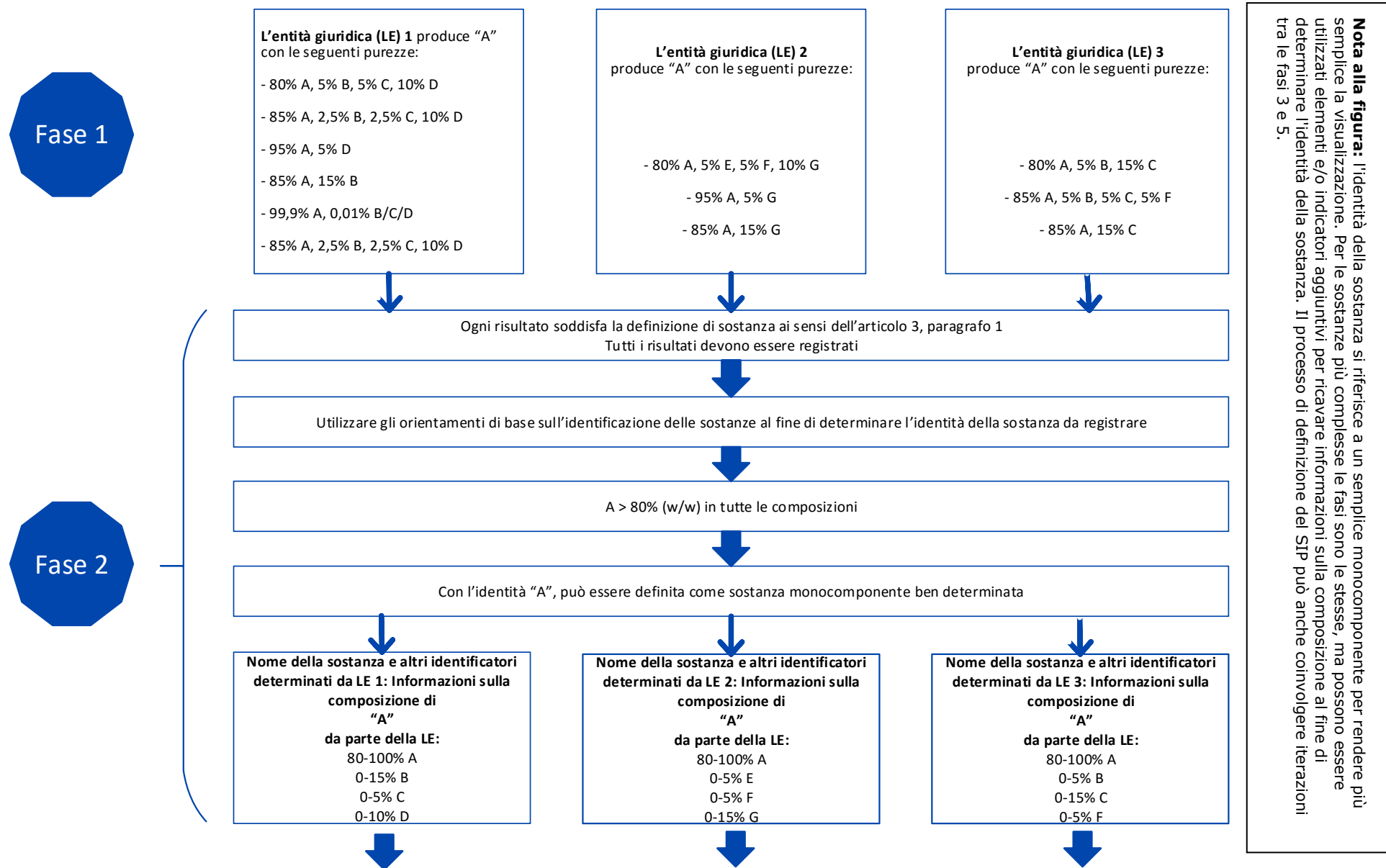
5. Misure di transizione tra IUCLID 5 e 6

Nel documento IUCLID 5 non erano disponibili i campi per segnalare in modo trasparente le informazioni sulla composizione del SIP nella sezione 1.2 del fascicolo del dichiarante capofila. Alcuni dichiaranti capofila avevano fornito queste informazioni utilizzando etichette per indicare i dati relativi al SIP.

Il documento IUCLID 6 prevede la possibilità di indicare queste informazioni in modo trasparente e sistematico. I dettagli tecnici sono disponibili nel relativo manuale IUCLID.

Il documento "Transition to the new IT tools – how to prepare" (Transizione ai nuovi strumenti informatici - come prepararsi) (disponibile sul sito <http://echa.europa.eu/manuals>) fornisce dettagli sulle misure di transizione valide per i fascicoli di registrazione dei capofila presentati in formato IUCLID 5, per i quali sono previsti aggiornamenti al formato IUCLID 6, necessari per includere le informazioni sull'identità della sostanza nella sezione 1.2.

Figura 2 (pagina seguente): **panoramica schematica delle fasi che i potenziali dichiaranti adottano per determinare i propri obblighi di registrazione (1) al fine di definire il SIP relativo all'identità della loro sostanza (4) e di presentare le registrazioni in adempimento degli obblighi di registrazione delle loro sostanze (8).**



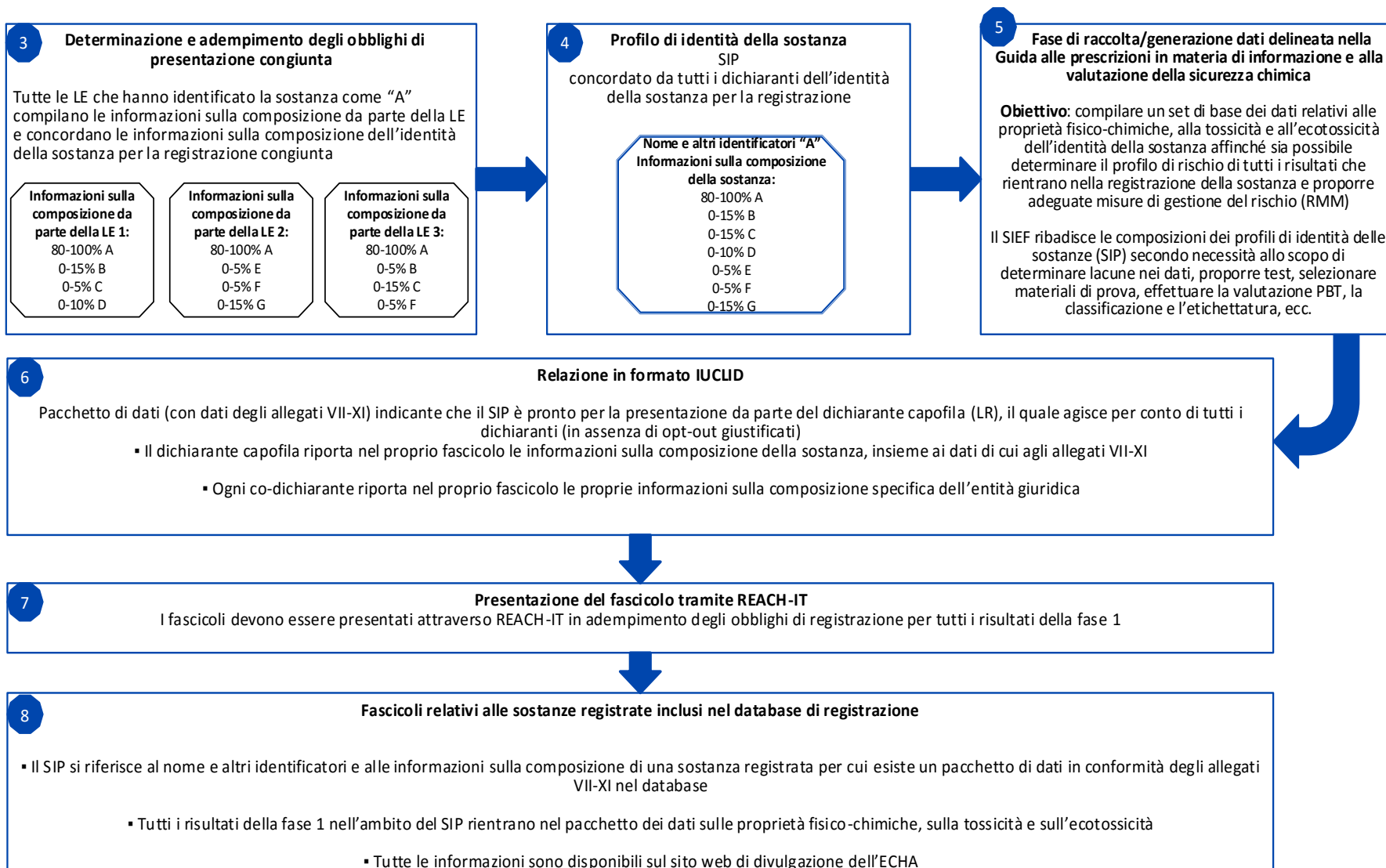
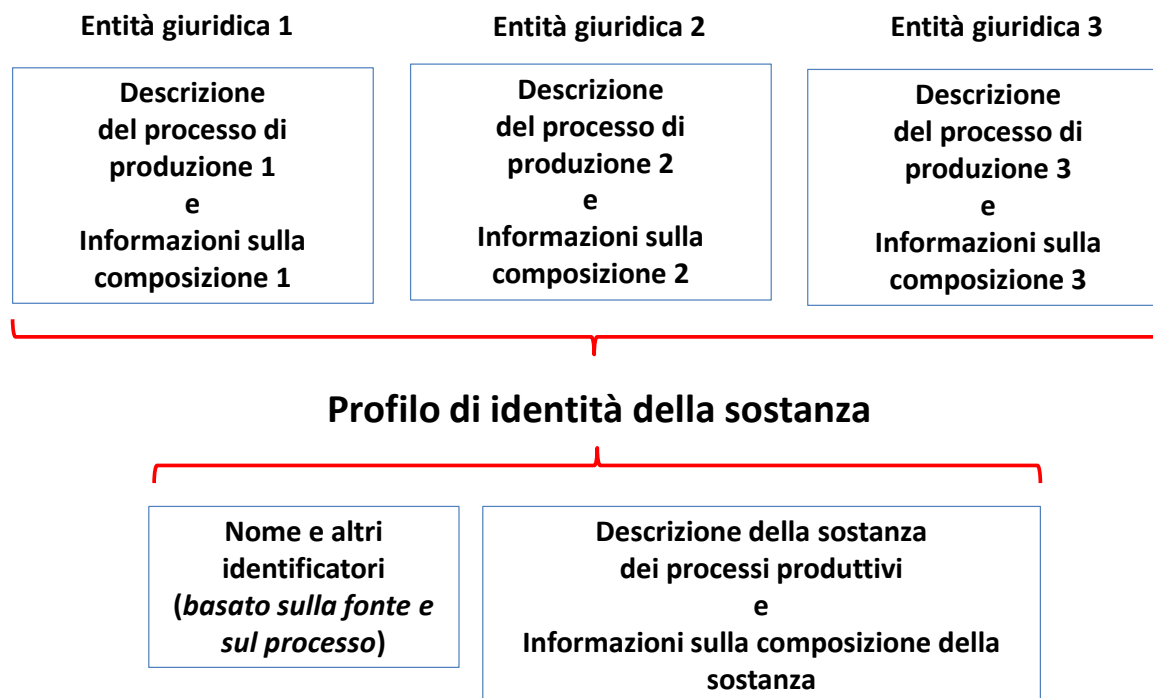


Figura 3: schema illustrativo della definizione di un SIP (fase 4 in Figura 2) per una sostanza UVCB identificata in base ai descrittori della fonte e del processo forniti nelle descrizioni della fonte e del processo delle singole entità giuridiche.



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