

Guide pour l'identification et la désignation des substances dans le cadre de REACH et du CLP

Décembre 2016
Version 2.0



AVIS JURIDIQUE

Le présent document vise à aider les utilisateurs à remplir les obligations qui leur incombent en vertu du règlement REACH et du CLP. Il est toutefois rappelé aux utilisateurs que les textes des règlements REACH et CLP sont les seules références légales authentiques et que les informations contenues dans le présent document ne constituent en aucun cas des conseils juridiques. L'usage de l'information demeure sous la seule responsabilité de l'utilisateur. L'Agence européenne des produits chimiques (ECHA) décline toute responsabilité quant à l'usage qui pourrait être fait des informations contenues dans ce document.

Guide pour l'identification et la désignation des substances dans le cadre de REACH et du CLP

Référence: ECHA-16-B-37-FR
Numéro de cat.: ED-07-16-146-FR-N
ISBN: 978-92-9495-726-9
DOI: 10.2823/34252
Date de publ.: Décembre 2016
Langue: FR

© Agence européenne des produits chimiques, 2016

Pour toute observation en rapport avec le présent document, veuillez communiquer au moyen du formulaire de demande d'informations (en précisant la référence du document, la date de publication, le chapitre et/ou la page du document faisant l'objet de votre observation). Vous pouvez accéder au formulaire de retour d'information sur le site web des guides de l'ECHA, ou directement à l'adresse suivante:

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

Clause de non-responsabilité: Ceci est une traduction de travail d'un document initialement publié en langue anglaise. La version originale de ce document est disponible sur le site web de l'ECHA.

Agence européenne des produits chimiques

Adresse postale: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finlande

Adresse d'accueil: Annankatu 18, Helsinki, Finlande

PRÉFACE

Le présent document explique comment désigner et identifier une substance dans le cadre de REACH et du CLP. Il fait partie d'une série de documents d'orientation visant à aider toutes les parties intéressées dans leur préparation en vue de satisfaire aux obligations découlant du règlement REACH. Ces documents apportent des informations détaillées relatives à toute une série de processus essentiels de REACH et du CLP, ainsi qu'à certaines méthodes scientifiques et/ou techniques spécifiques que l'industrie ou les autorités doivent utiliser au titre des règlements REACH et CLP.

Les guides techniques ont été rédigés et examinés dans le cadre des projets de mise en œuvre de REACH (RIP) dirigés par les services de la Commission européenne et auxquels ont participé toutes les parties intéressées: les États membres, l'industrie et les organisations non gouvernementales. Ces documents d'orientation peuvent être téléchargés sur le site internet de l'Agence européenne des produits chimiques (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). D'autres documents d'orientation seront publiés sur ce site internet au fur et à mesure de leur finalisation ou de leur mise à jour.

Historique du document

Version	Commentaire	Date
Version 1	Première édition	Juin 2007
Version 1.1	<p>Rectificatif à:</p> <ul style="list-style-type: none"> - La référence au règlement CLP (règlement (CE) n° 1272/2008 du 16 décembre 2008) a été ajoutée dans le titre et dans les titres des chapitres. - Un passage a été ajouté pour clarifier le champ d'application du document d'orientation. Le texte redondant a été supprimé dans l'ensemble du document. - Les références au règlement CLP ont été incluses dans l'ensemble du texte, le cas échéant. - Le terme «TGD» a été remplacé par «document d'orientation» dans l'ensemble du document. - Le terme «préparation» a été remplacé par «mélange» dans l'ensemble du document. - Le terme «point» a été remplacé par «section» dans l'ensemble du document. - Le terme «enregistrement préalable» a été remplacé par «enregistrement préalable (tardif)» dans l'ensemble du document. - Les abréviations AAS et CLP ont été insérées et RIP et TGD ont été supprimées. - Les descriptions d'un «alliage», de l'«inventaire CE» et d'«IUCLID» ont été modifiées. Les définitions de «numéro CE», «numéro de liste», «mélange» et «substance notifiée» ont été ajoutées. La définition d'une «préparation» a été supprimée. - La section 3.2 a été révisée pour en clarifier le contenu. - La section 3.3 a été révisée pour en clarifier le contenu en ce qui concerne les obligations découlant du CLP. 	Novembre 2011 (disponible en Anglais uniquement)

	<ul style="list-style-type: none"> - La façon de présenter les constituants dans la section 4.2.2.1 a été modifiée pour les faire apparaître par ordre alphabétique et non plus par ordre de concentration, de sorte que la composition relative ne puisse pas être déduite de l'ordre dans la liste. - Le terme «réseau cristallin» a été remplacé par «cristal» dans la section 4.2.3.1 - La section 4.3.1.2.3 a été révisée pour en clarifier le contenu. - Inclure dans la section 5 une référence au Manuel de soumission de données n°18 – «Comment déclarer l'identité de la substance dans IUCLID 5 pour un enregistrement au titre de REACH». - La section 5 a été révisée pour en clarifier le contenu. - Dans la section 6, la description de l'enregistrement préalable a été modifiée et remplacée par «enregistrement préalable (tardif)». - Mise à jour des liens hypertextes défectueux dans l'annexe 1. - La section 4.3 de l'annexe 2 a été supprimée car son contenu figure sur le site internet concerné. 	
Version 1.2	<p>Rectificatif</p> <p>La définition «substance bénéficiant d'un régime transitoire» a été alignée avec la définition du règlement (CE) n° 1907/2006 telle qu'introduite par le règlement (CE) n° 1354/2007 du Conseil et par le rectificatif du JO L 36 du 5.2.2009, p. 84 (1907/2006).</p> <p>Il est à noter que les modifications des versions 1.1 et 1.2 sont consolidées dans une seule et unique version traduite 1.2 pour les langues autres que l'anglais.</p>	Mars 2012
Version 1.3	<p>Rectificatif</p> <p>Deux formules structurelles manquantes au chapitre 7.6 ont été insérées.</p>	Février 2014

Version 1.4	<p>Rectificatif à:</p> <ul style="list-style-type: none">- Adapter le format du document à l'identité actuelle de l'Agence.- Supprimer le chapitre 8 qui donne des instructions techniques basées sur une ancienne version d'IUCLID.- Supprimer les références au chapitre 8 et aux Manuels de soumission de données et ajouter la référence aux nouveaux manuels de l'ECHA.- Supprimer l'annexe III et déplacer les informations dans le tableau d'historique du document.- Rectifier les liens vers le site internet défectueux et corriger les erreurs éditoriales.	Juin 2016
Version 2.0	<p>Mise à jour partielle limitée à:</p> <ul style="list-style-type: none">- A la section 7.5, corriger la description de la cristobalite et du quartz et supprimer la référence à la directive 2000/30/CE.- Ajout de la nouvelle annexe III avec la description du concept de profil d'identité de la substance.- Ajout de nouveau texte au chapitre 1 pour présenter la nouvelle annexe III.- Corriger les erreurs typographiques et éditoriales.	Décembre 2016

Table des matières

1. Généralités	10
1.1. Objectifs.....	10
1.2. Champ d'application.....	11
1.3. Structure du document d'orientation.....	12
2. Définitions et abréviations	13
2.1. Abréviations.....	13
2.2. Définitions	15
3. Cadre pour l'identification des substances selon REACH et le CLP	18
3.1. Définition d'une substance	19
3.2. Inventaire CE.....	19
3.2.1. Rôle de l'inventaire CE lors de l'entrée en vigueur de REACH	20
3.2.2. Numéros de liste après l'entrée en vigueur de REACH.....	21
3.3. Exigences concernant l'identification des substances selon REACH et le CLP	22
4. Orientations pour l'identification et la désignation des substances dans le cadre de REACH et du CLP	24
4.1. Introduction.....	24
4.2. Substances de composition bien définie	30
4.2.1. Substances monoconstituant	31
4.2.2. Substances multiconstituants.....	33
4.2.3. Substances identifiées par une composition chimique définie et d'autres identifiants principaux ...	37
4.3. Substances UVCB	38
4.3.1. Orientations générales sur les substances UVCB	39
4.3.2. Types particuliers de substances UVCB.....	48
5. Critères permettant de déterminer si des substances sont identiques	57
6. Identité de la substance dans le cadre d'un enregistrement préalable (tardif) et d'une demande	64
6.1. Enregistrement préalable (tardif)	64
6.2. Demande.....	64
7. Exemples	66
7.1. Peroxydicarbonate de diéthyle	66
7.2. ZOLIMIDINE	67
7.3. Mélange d'isomères.....	67
7.4. Fragrance AH.....	71
7.5. Minéraux	77

7.6. Huile essentielle de Lavandin grosso	80
7.7. Huile de chrysanthème et isomères isolés de celle-ci	86
7.8. Phosphate de phénol isopropylo	90
7.9. Composés d'ammonium quaternaire	91
7.10. Substances pétrolières;	96
7.10.1. Mélange d'essences (C4-C12)	96
7.10.2. Gazoles (pétrole)	97
7.11. Enzymes	98
7.11.1. Subtilisine	98
7.11.2. α -Amylase	100
Annexe I - Outils d'orientation	102
Annexe II - Orientations techniques relatives aux paramètres d'identification des substances	107
Annexe III – Identification des substances et soumission conjointe des données .	123

Liste des tableaux

Tableau 1: Abréviations	13
Tableau 2: Définitions	15
Tableau 3: Paramètres d'identification des substances selon l'annexe VI, section 2 de REACH	23
Tableau 4: Regroupement des principaux identifiants pour des exemples représentant différents types de substances bien définies similaires	25
Tableau 5: Regroupement des principaux identifiants pour des exemples représentant différents types de substances UVCB	26

Liste des figures

Figure 1: Diagramme renvoyant aux chapitres et annexes appropriés du document d'orientation applicables aux différents types de substances	29
Figure 2 (page suivante): vue d'ensemble des étapes à suivre par les déclarants potentiels, depuis la détermination de leurs obligations d'enregistrement (1) jusqu'à la soumission finale de leurs enregistrements afin qu'ils s'acquittent formellement de leurs obligations d'enregistrement de leurs substances (8), en passant par la définition de leur PIS pour leur identité de substance unique (4)	129
Figure 3: schéma d'illustration de la définition d'un PIS (étape 4 de la figure 1) pour une substance de type UVCB identifiée à partir des descripteurs de source et de processus issus des descriptions de source et de processus émanant de chaque entité légale	132

1. Généralités

Le règlement REACH (règlement (CE) n° 1907/2006) met en place un système pour l'enregistrement, l'évaluation, l'autorisation et la restriction des substances chimiques et a instauré l'Agence européenne des produits chimiques (ECHA) pour mettre en œuvre le règlement.¹

Le règlement CLP (règlement (CE) n° 1272/2008) est le nouveau règlement européen relatif à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances chimiques et des mélanges.² La législation introduit, dans toute l'UE, un nouveau système de classification et d'étiquetage des produits chimiques, basé sur le système général harmonisé (SGH) des Nations unies.

Le règlement REACH concerne exclusivement les substances. Pour garantir le bon fonctionnement des processus de REACH, une identification correcte et non ambiguë des substances est essentielle. Le présent document d'orientation sur l'identification et la désignation des substances est destiné à aider l'industrie, les États membres et l'Agence européenne des produits chimiques.

Le présent document d'orientation se fonde sur l'expérience acquise en matière d'identification des substances dans le cadre de la législation précédente sur les produits chimiques (directive 67/548/CEE et directive 98/8/CEE). Cependant, le présent guide a été affiné sur la base des pratiques actuelles en ce qui concerne l'identité des substances dans le cadre du règlement REACH et du règlement relatif à la classification, l'étiquetage et l'emballage des substances et des mélanges (CLP). De plus, et le cas échéant, des approches relevant de systèmes extérieurs à l'Union européenne en matière de produits chimiques ont également été prises en considération.

Des orientations adaptées aux différents types de substances ont été incluses.

Le présent document d'orientation doit être appliqué pour identifier et désigner les substances réglementées en vertu des règlements REACH et CLP.

1.1. Objectifs

Le document d'orientation a pour objet de fournir des orientations aux fabricants et importateurs en matière d'enregistrement et de signalement de l'identité d'une substance dans le contexte de REACH et du CLP. En tant qu'élément clé dans l'identification des substances, le document d'orientation donne des indications sur la façon de désigner les substances. Il donne également des orientations sur les cas où plusieurs substances peuvent être considérées comme identiques dans le cadre de REACH et du CLP et sur la manière dont le principe «une substance, un enregistrement» (OSOR) peut être appliqué en définissant le «profil d'identité de la substance» (PIS). L'identification des substances identiques qui peuvent être couvertes par le même PIS est importante pour le processus d'enregistrement préalable

¹ Règlement (CE) no 1907/2006 du Parlement européen et du Conseil du 18 décembre 2006 concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), instituant une agence européenne des produits chimiques, modifiant la directive 1999/45/CE et abrogeant le règlement (CEE) no 793/93 du Conseil et le règlement (CE) no 1488/94 de la Commission ainsi que la directive 76/769/CEE du Conseil et les directives 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE et 2000/21/CE de la Commission («REACH»).

² Règlement (CE) n° 1272/2008 du Parlement européen et du Conseil du 16 décembre 2008 relatif à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances et des mélanges, modifiant et abrogeant les directives 67/548/CEE et 1999/45/CE et modifiant le règlement (CE) n° 1907/2006 (Texte présentant de l'intérêt pour l'EEE) («CLP»).

(tardif) des substances bénéficiant d'un régime transitoire, pour les demandes, pour le partage de données, pour la soumission conjointe de données, pour la notification à l'inventaire des classifications et étiquetages et pour l'harmonisation de la classification et de l'étiquetage.

L'identification des substances doit de préférence être réalisée par des experts de l'industrie. Pour les industriels ayant peu d'expérience en matière d'identification des substances, des orientations supplémentaires sur les paramètres d'identification sont incluses en annexe du présent document d'orientation.

De plus, le présent document d'orientation dresse la liste de liens vers des outils pertinents d'aide à la caractérisation et à la vérification de l'identité chimique d'une substance.

Des instructions plus détaillées sur la façon de renseigner les informations d'identification de la substance dans IUCLID dans le cadre de différents processus sous REACH et CLP, sont fournies dans les manuels de l'ECHA disponibles à l'adresse suivante <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Champ d'application

Conformément à l'article 1 de REACH, le règlement concerne la fabrication, l'importation, la mise sur le marché et l'utilisation des substances telles qu'elles ou contenues dans des mélanges ou des articles. Les mélanges et les articles tels quels ne sont pas réglementés par REACH.

Selon l'article 10 de REACH, l'enregistrement d'une substance requiert que son identité soit enregistrée à l'aide des paramètres spécifiés à la section 2 de l'annexe VI de REACH (voir le **tableau 3**). Des paramètres similaires (tels que spécifiés aux sections 2.1 à 2.3.4 de l'annexe VI de REACH) sont requis pour enregistrer l'identité de la substance aux fins de sa notification conformément à l'article 40, paragraphe 1, du CLP. Le présent document d'orientation porte sur l'identification appropriée des substances qui répondent à la définition juridique d'une substance selon REACH et le CLP et fournit des orientations sur les paramètres d'identification des substances énoncés à l'annexe VI, section 2, de REACH. Les informations fournies sur l'identité de la substance doivent être suffisantes pour permettre d'identifier chaque substance. Un ou plusieurs des paramètres d'identification des substances peuvent être omis s'il n'est pas techniquement possible ou s'il ne semble pas nécessaire, du point de vue scientifique, de fournir les informations demandées. Les raisons de telles omissions doivent être indiquées clairement et fondées sur une justification scientifique.

L'approche requise pour identifier une substance dépend du type de la substance considérée. C'est pourquoi l'utilisateur du présent document d'orientation est invité à se référer aux chapitres spécifiques aux différents types de substances.

Les inventaires CE utilisés dans le cadre de la directive 67/548/CEE (listes EINECS, ELINCS et NLP) constituent des outils importants pour l'identification des substances. Des orientations sur le rôle de ces inventaires dans le cadre de REACH sont données au chapitre 3.2.

Les substances relevant du champ d'application des règlements REACH et CLP (et par conséquent du présent document d'orientation) sont en général le résultat de réactions chimiques qui se produisent au cours de la fabrication de la substance et peuvent contenir plusieurs constituants distincts. Les substances, telles que définies dans REACH et le CLP, englobent également des substances dérivées chimiquement ou isolées à partir de matériaux naturels, qui peuvent comprendre un élément ou une molécule unique (par exemple, les métaux purs ou certains minéraux) ou plusieurs constituants (par exemple, les huiles essentielles, les mattes métalliques formés lors de la fonte de minerais métalliques sulfurés).

Cependant, les substances qui sont réglementées par une autre législation communautaire sont, dans un certain nombre de cas, exemptées d'enregistrement au titre de REACH (voir l'article 2 de REACH). Les substances énumérées à l'annexe IV de REACH et les substances répondant à certains critères spécifiés à l'annexe V de REACH sont également exemptées d'enregistrement. Il convient de noter que, bien qu'une substance puisse être exemptée d'enregistrement, cela ne signifie pas nécessairement qu'elle soit exemptée des autres titres du règlement REACH ou des exigences du règlement CLP.

Le règlement REACH requiert que les déclarants d'une même substance se regroupent pour convenir de la soumission conjointe de certaines informations sur la substance (principe OSOR)³. L'application d'un tel principe nécessite d'établir clairement la manière dont les déclarants ont défini le champ d'application de leur PIS.

1.3. Structure du document d'orientation

Des informations générales telles que les objectifs et le champ d'application du présent document d'orientation sont fournies au chapitre 1, et les abréviations et les définitions utilisées figurent au chapitre 2. Des informations pertinentes sur le cadre de l'identification des substances selon REACH, par exemple, la définition des substances et les exigences d'information données dans le texte juridique, sont fournies au chapitre 3.

Des orientations pratiques pour l'identification et la désignation des substances sont fournies au chapitre 4.

- Le chapitre 4.1 décrit la différenciation entre les substances «bien définies» et les substances «mal définies»; et au sein de ces deux groupes principaux, différents types de substances peuvent être distingués avec leurs propres orientations spécifiques pour l'identification des substances. Un diagramme clé est présenté pour guider l'utilisateur vers le chapitre approprié avec des orientations pour l'identification de chaque type spécifique de substances.
- Les chapitres suivants fournissent des orientations spécifiques relatives à chaque type de substances sous la forme d'un ensemble de règles complétées par des explications et des exemples.

Le chapitre 5 fournit des orientations pour vérifier si des substances peuvent ou non être considérées comme identiques. Le chapitre 6 apporte des précisions sur l'identité des substances dans le cadre d'un enregistrement préalable (tardif) et de processus de demande.

Par ailleurs, le chapitre 7 présente quelques exemples détaillés qui ont été préparés à l'aide des orientations pratiques du chapitre 4.

L'annexe I dresse la liste de liens vers des outils pertinents d'aide à la caractérisation et à la vérification de l'identité chimique d'une substance.

L'annexe II apporte des informations générales complémentaires sur chacun des paramètres intervenant dans le processus d'identification des substances, tels que les règles de nomenclature, les numéros CE, les numéros CAS, les notations de la formule moléculaire et de la formule structurale et les méthodes d'analyse.

L'annexe III apporte des informations sur le concept du PIS, sa pertinence pour les obligations de soumission conjointe et la manière dont il doit être défini et déclaré.

³ Pour des informations détaillées sur le partage des données relatives à une même substance dans le cadre de la soumission conjointe, veuillez consulter le *Guide technique: partage des données*.

2. Définitions et abréviations

2.1. Abréviations

Les principales abréviations utilisées dans le présent document d'orientation sont énumérées et expliquées dans le **tableau 2.1**.

Tableau 1: Abréviations

Abréviation	Signification
AAS	Atomic Absorption Spectroscopy / Spectroscopie d'absorption atomique
AISE	International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products / Association internationale de la savonnerie, de la détergence et des produits d'entretien
CAS	Chemical Abstract Service/Service des résumés analytiques de chimie
CE	Commission européenne
CG	Chromatographie en phase gazeuse
CLHP	Chromatographie en phase liquide à haute pression
CLP	Règlement (CE) no 1272/2008 relatif à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances et des mélanges
EINECS	European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances/Inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes
ELINCS	European List of Notified Chemical Substances/Liste européenne des substances chimiques notifiées
EM	Spectrométrie de masse
ENCS	Existing and New Chemical Substances (Japan) / Inventaire des substances chimiques existantes et nouvelles du Japon
ESIS	European Substances Information System / Système européen d'information sur les substances chimiques
FEIS	Forum d'échange d'informations sur les substances
InChI	IUPAC International Chemical Identifier / Identifiant chimique international IUPAC
INCI	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients / Nomenclature internationale des ingrédients cosmétiques
IR	Infrarouge
ISO	International Organization for Standardization / Organisation internationale de normalisation
IUBMB	International Union of Biochemistry and Molecular Biology / Union

	internationale de biochimie et de biologie moléculaire
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database (Base de données internationale sur les informations chimiques unifiées)
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry/Union internationale de chimie pure et appliquée
m/m	masse/masse
NLP	No Longer polymère / Ne figure plus sur la liste des polymères
ppm	Partie par million
PIS	Profil d'identité de la substance
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals / Enregistrement, évaluation, autorisation et restriction des substances chimiques
RMN	Résonance magnétique nucléaire
SGH	Système général harmonisé
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification / Spécification simplifiée de structure moléculaire par ligne
TSCA	Toxic Substances Control Act (USA) / Loi sur le contrôle des substances toxiques (USA)
UE	Union européenne
UV/VIS	Ultra violet/visible
UVCB	Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials / Substances de composition inconnue ou variable, produits de réaction complexes ou matériels biologiques
XRD	X-Ray Diffraction / Diffraction des rayons-X
XRF	X-Ray Fluorescence / Fluorescence X

2.2. Définitions

Les définitions principales utilisées dans le présent document d'orientation sont énumérées et décrites dans le **tableau 2.2**.

Ces définitions tiennent compte des définitions utilisées dans les règlements REACH et CLP. C'est pourquoi certains termes ont une définition différente de celle qui était utilisée dans le cadre de la directive 67/548/CEE.

Tableau 2: Définitions

Définition	Description
Additif	Substance qui a été intentionnellement ajoutée afin de stabiliser la substance ⁴ .
Alliage*	Matière métallique, homogène à un niveau macroscopique, constituée de deux éléments ou plus combinés de telle manière qu'ils ne peuvent pas être facilement séparés par des moyens mécaniques. Les alliages sont considérés comme des mélanges spéciaux.
Article*	Objet auquel sont donnés, au cours du processus de fabrication, une forme, une surface ou un dessin particuliers qui sont plus déterminants pour sa fonction que sa composition chimique.
Composant	Substance ajoutée intentionnellement pour former un mélange.
Constituant	Toute espèce présente dans une substance et pouvant être caractérisée par son identité chimique unique
Constituant principal	Constituant d'une substance, autre qu'un additif ou une impureté, qui représente une part importante de la substance et qui est donc utilisé dans la dénomination de la substance et dans l'identification détaillée de la substance.
Empreinte chromatographique	Représentation de la composition d'une substance à partir de la distribution caractéristique des ses constituants sur un chromatogramme.
Fabrication*	Production ou extraction de substances à l'état naturel.
Impureté	Constituant non prévu présent dans une substance lors de sa fabrication. Cette impureté peut provenir des matières de départ ou résulter de réactions secondaires ou incomplètes apparaissant pendant le processus de fabrication. Malgré sa présence, elle n'a pas été ajoutée intentionnellement.

⁴ Dans d'autres domaines, l'additif peut avoir également d'autres fonctions, par exemple, comme régulateur de pH ou colorant. Toutefois, dans le règlement REACH et dans le présent guide technique, un additif est un agent stabilisateur.

Définition	Description
Intermédiaire*	<p>Substance fabriquée en vue d'une transformation chimique et consommée ou utilisée dans le cadre de cette transformation en vue de faire l'objet d'une opération de transformation en une autre substance (ci-après désignée <i>synthèse</i>):</p> <p>(a) un <u>intermédiaire non isolé</u> est un intermédiaire qui, pendant la synthèse, n'est pas retiré intentionnellement (sauf à des fins d'échantillonnage) des dispositifs dans lesquels a lieu la synthèse. Ces dispositifs comprennent la cuve de réaction, le matériel annexe et tout matériel par lequel la ou les substances passent au cours d'un processus à flux continu ou d'un processus discontinu, ainsi que les tuyauteries permettant le transfert d'une cuve à l'autre en vue de la prochaine étape de la réaction. Ils ne comprennent pas les réservoirs et autres récipients dans lesquels la ou les substances sont conservées après la fabrication.</p> <p>(b) un <u>intermédiaire isolé restant sur le site</u> est un intermédiaire ne répondant pas aux critères définissant un intermédiaire non isolé, dans les cas où la fabrication de l'intermédiaire et la synthèse d'une ou de plusieurs autres substances à partir de cet intermédiaire ont lieu sur le même site, exploité par une ou plusieurs personnes morales;</p> <p>(c) un <u>intermédiaire isolé transporté</u> est un intermédiaire ne répondant pas aux critères définissant un intermédiaire non isolé, transporté entre différents sites ou fourni à d'autres sites.</p>
Inventaire CE	<p>Bien qu'il ne soit pas légalement défini dans le règlement REACH, l'inventaire CE est la combinaison des trois listes européennes de substances, indépendantes et légalement approuvées, issues du précédent cadre réglementaire de l'UE sur les produits chimiques: listes EINECS, ELINCS et NLP (substances qui ne figurent plus sur la liste des polymères). Les entrées de l'inventaire CE consistent en un nom chimique et un numéro (nom CE et numéro CE), un numéro CAS, une formule moléculaire (le cas échéant) et une description (pour certains types de substances).</p>
IUCLID	<p>International Uniform Chemical Information Database / Base de données internationale sur les informations chimiques unifiées IUCLID est une base de données et un système de gestion destiné à l'administration des données sur les substances chimiques.</p>
Mélange*	<p>Mélange ou solution composés de deux substances ou plus.</p>
Monomère*	<p>Substance qui est capable de former des liens covalents avec une séquence d'autres molécules semblables ou non dans les conditions de la réaction de formation du polymère pertinente pour le processus particulier.</p>

Définition	Description
Numéro CE	Le numéro CE est l'identifiant numérique des substances dans l'inventaire CE.
Numéro de liste	Numéro attribué automatiquement par REACH-IT. Il s'applique à toutes les nouvelles soumissions valables (par exemple, les enregistrements préalables, les RDAPP, les demandes, les enregistrements, les notifications de classification et d'étiquetage). Un numéro de liste est dénué de signification juridiquement pertinente et n'est utilisé qu'en tant qu'identifiant technique pour gérer les soumissions au sein de l'ECHA.
Polymère*	<p>Une substance constituée de molécules se caractérisant par la séquence d'un ou de plusieurs types d'unités monomères. Ces molécules doivent être réparties sur un éventail de poids moléculaires, les écarts de poids moléculaire étant dus essentiellement aux différences de nombres d'unités monomères. Un polymère comprend:</p> <ul style="list-style-type: none"> (a) une simple majorité pondérale de molécules contenant au moins trois unités monomères liées par covalence à au moins une autre unité monomère ou à une autre substance réactive; (b) une quantité inférieure à une simple majorité pondérale de molécules présentant le même poids moléculaire. <p>Au sens de la présente définition, on entend par «unité monomère», la forme réagie d'une substance monomère dans un polymère.</p>
Substance bénéficiant d'un régime transitoire*	<p>Une substance qui satisfait au moins à l'un des critères suivants:</p> <ul style="list-style-type: none"> (a) être mentionnée dans l'Inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes (EINECS); (b) avoir été fabriquée dans la Communauté ou l'un des pays ayant adhéré à l'Union européenne le 1er janvier 1995, le 1er mai 2004, le 1er janvier 2007 ou le 1er juillet 2013, mais ne pas avoir été mise sur le marché par le fabricant ou l'importateur au moins une fois au cours des quinze années précédant l'entrée en vigueur du présent règlement, à condition que le fabricant ou l'importateur dispose d'une preuve écrite; (c) avoir été mise sur le marché dans la Communauté ou l'un des pays ayant adhéré à l'Union européenne le 1er janvier 1995, le 1er mai 2004, le 1er janvier 2007 ou le 1er juillet 2013 par le fabricant ou l'importateur avant l'entrée en vigueur du présent règlement, et avoir été considérée comme notifiée conformément à l'article 8, paragraphe 1, premier tiret, de la directive 67/548/CEE dans la version de l'article 8, paragraphe 1, résultant de la modification apportée par la directive 79/831/CEE, sans cependant répondre à la définition d'un polymère, telle qu'elle est énoncée dans le présent règlement, à condition que le fabricant ou l'importateur dispose d'une preuve écrite, y compris d'une preuve attestant que la substance a été mise sur le marché par tout fabricant ou importateur entre le 18 septembre 1981 et le 31 octobre 1993 inclus;

Définition	Description
Substance mono-constituant	En règle générale, une substance définie par sa composition dans laquelle un constituant principal est présent à hauteur de 80 % minimum (m/m).
Substance multi-constituant	En règle générale, une substance, définie par sa composition, dans laquelle plus d'un constituant principal est présent à une concentration ≥ 10 % (m/m) et < 80 % (m/m).
Substance ne bénéficiant pas d'un régime transitoire	Substance soumise à l'obligation d'enregistrement et qui ne bénéficie pas du régime transitoire appliqué aux substances bénéficiant d'un régime transitoire au titre de REACH.
Substance non modifiée chimiquement*	Substance dont la structure chimique demeure inchangée, même si elle a été soumise à un processus ou à un traitement chimique ou à un processus physique de transformation minéralogique, par exemple pour éliminer les impuretés.
Substance notifiée	Une substance pour laquelle une notification a été présentée et qui pourrait être mise sur le marché conformément à la directive 67/548/CEE.
Substance présente dans la nature*	Substance naturelle, telle quelle, non traitée ou traitée uniquement par des moyens manuels mécaniques ou gravitationnels; par dissolution dans l'eau, par flottation, par extraction par l'eau, par distillation à la vapeur ou par chauffage uniquement pour éliminer l'eau ou qui est extraite de l'air par un quelconque moyen.
Substance*	Élément chimique et ses composés à l'état naturel ou obtenus par un processus de fabrication, y compris tout additif nécessaire pour en préserver la stabilité et toute impureté résultant du processus mis en œuvre, mais à l'exclusion de tout solvant qui peut être séparé sans affecter la stabilité de la substance ou modifier sa composition.

* Définitions conformément à l'article 3 de REACH.

3. Cadre pour l'identification des substances selon REACH et le CLP

Les règlements REACH et CLP comprennent une définition d'une substance et REACH répertorie les paramètres d'identification des substances (annexe VI, section 2) qui doivent être inclus pour identifier une substance aux fins de son enregistrement.

Ce chapitre explicite la définition d'une substance selon REACH et le CLP (chapitre 3.1), fournit des indications générales sur la façon d'utiliser l'inventaire CE issu du précédent cadre réglementaire sur les produits chimiques (chapitre 3.2) et apporte des précisions sur les exigences en matière d'identification des substances spécifiées dans REACH (chapitre 3.3).

3.1. Définition d'une substance

Selon l'article 3, paragraphe 1, de REACH et l'article 2, paragraphe 7, du CLP, une substance est:

un élément chimique et ses composés à l'état naturel ou obtenus par un processus de fabrication, y compris tout additif nécessaire pour en préserver la stabilité et toute impureté résultant du processus mis en œuvre, mais à l'exclusion de tout solvant qui peut être séparé sans affecter la stabilité de la substance ou modifier sa composition.

La définition d'une substance dans le cadre de REACH et du CLP est identique à celle qui était utilisée dans la septième modification de la relative aux substances dangereuses (directive 92/32/CEE modifiant la directive 67/548/CEE). Dans les deux cas, la définition ne se limite pas à un composé chimique défini par une structure moléculaire unique. Elle inclut différents constituants comme les impuretés.

3.2. Inventaire CE

Trois inventaires différents ont été établis par le précédent cadre réglementaire applicable aux substances chimiques, à savoir: l'Inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes (EINECS), la liste européenne des substances chimiques notifiées (ELINCS) et les substances qui ne figurent plus sur la liste des polymères.

L'Inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes (EINECS) répertorie les substances présentes sur le marché européen entre le 1er janvier 1971 et le 18 septembre 1981^{5, 6, 7}.

Cet inventaire comprend environ 100 000 substances identifiées par un nom chimique (et une description pour certains types de substances), un numéro CAS et un numéro à sept chiffres appelé le numéro EINECS. Les numéros EINECS commencent toujours par 2 ou 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Les substances répertoriées dans l'EINECS ont été soumises à une étape de vérification qui justifie l'introduction de la substance dans l'inventaire.

Les substances notifiées et mises sur le marché après le 18 septembre 1981 sont listées dans la Liste européenne des substances chimiques notifiées (ELINCS).⁵ Cet inventaire (liste) comporte toutes les substances notifiées jusqu'au 31 mai 2008, conformément à la directive 67/548/CEE et ses modifications. Ces substances sont appelées «nouvelles substances», car elles n'étaient pas mises sur le marché communautaire à la date du 18 septembre 1981. Un numéro ELINCS a été attribué à une substance par la Commission européenne après examen des autorités compétentes des États membres (ACEM). À la différence de l'EINECS, l'ELINCS ne comprend pas de numéro CAS, mais le numéro de notification attribué par les ACEM, le nom commercial (le cas échéant), la classification et le nom

⁵ L'EINECS est basé sur l'inventaire européen de base, dénommé ECOIN (**E**uropean **C**ore **I**nventory) auquel des substances peuvent éventuellement être ajoutées par l'industrie (conformément aux critères de déclaration des substances de l'EINECS). L'ecoin combine plusieurs listes de substances chimiques présumées se trouver sur le marché européen (par exemple, la liste TSCA). L'EINECS a été publié le 15 juin 1990 et comprend plus de 100 000 substances. Au cours de l'utilisation de l'inventaire, un certain nombre d'erreurs ont été identifiées (erreurs d'impression, par exemple, nom chimique, formule ou numéro de registre CAS incorrect). Par conséquent, un rectificatif a été publié le 1er mars 2002.

⁶ BCE (2005), Manuel de décisions relatives à la mise en œuvre des sixième et septième modifications de la directive 67/548/CEE (directives 79/831/CEE et 92/32/CEE), version non confidentielle. EUR 20519 EN. Version mise à jour en juin 2005.

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

IUPAC pour les substances classées. Les numéros ELINCS sont aussi des numéros à sept chiffres qui commencent toujours par 4 (4xx-xxx-x).

Les polymères étaient exclus d'inscription à l'EINECS et faisaient l'objet de règles spécifiques dans le cadre de la directive 67/548/CEE⁸ ⁹. Le terme de «polymère» a été défini plus précisément dans la 7e modification de la directive 67/548/CEE (directive 92/32/CEE). En vertu de cette nouvelle définition, certaines substances qui étaient considérées comme des polymères au titre des règles d'inscription dans l'EINECS ne l'étaient *plus* dans la 7e modification. Toutes les substances qui ne figurent pas dans l'EINECS étant notifiables, tous les «No-Longer Polymers»(NLP) devraient théoriquement avoir été notifiés. Le Conseil des ministres a toutefois fait savoir que ces NLP ne devraient pas, rétrospectivement, faire l'objet d'une notification. Il a été demandé à la Commission d'établir une liste des substances qui ne figurent plus sur la liste des polymères (liste NLP). Les substances devant être incluses dans cette liste sont celles qui ont été mises sur le marché de l'UE entre le 18 septembre 1981 (la date d'entrée en vigueur de la directive 79/831/CEE, la 6e modification de la directive 67/548/CEE), et le 31 octobre 1993 (la date d'entrée en vigueur de la directive 92/32/CEE, la 7e modification de la directive 67/548/CEE) et qui remplissent les conditions nécessaires pour être considérées comme des polymères selon les règles d'inscription dans l'EINECS, mais qui ne sont plus considérées comme des polymères au titre de la 7e modification. La liste NLP est une liste non exhaustive. Les substances inscrites sur la liste NLP sont identifiées par un nom chimique, un numéro CAS et un numéro à sept chiffres appelé numéro NLP. Un numéro NLP commence toujours par 5 (5xx-xxx-x).

La combinaison des trois listes de substances, EINECS, ELINCS et NLP, constitue l'inventaire CE. Chaque substance de cet inventaire a un numéro CE attribué par la Commission européenne (pour plus d'informations sur le numéro CE, voir l'annexe II).

Vous pouvez obtenir des informations sur ces substances sur le site internet de l'Agence européenne des produits chimiques (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>) qui tient et publie aussi un inventaire des substances enregistrées (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

3.2.1. Rôle de l'inventaire CE lors de l'entrée en vigueur de REACH

L'inventaire CE peut être utilisé comme outil par les fabricants et les importateurs pour déterminer si une substance bénéficie ou non d'un régime transitoire. L'inventaire CE permettra donc aux fabricants et aux importateurs de savoir quand l'enregistrement d'une substance sera exigé, et si un enregistrement préalable (tardif) ou une demande d'information est nécessaire.

Le règlement REACH définit différentes procédures d'enregistrement et de partage de données des substances «existantes» (bénéficiant d'un régime transitoire) (tel que défini dans l'article 3, paragraphe 20) et des «nouvelles» substances (ne bénéficiant pas d'un régime transitoire)¹⁰.

Si une substance a été précédemment notifiée conformément à la directive 67/548/CEE et figure donc sur la liste ELINCS, la notification soumise doit être considérée comme un enregistrement aux fins de REACH (article 24). Ces substances sont considérées comme étant

⁸ BCE (2003) Notification de nouvelles substances chimiques conformément à la directive 67/548/CEE relative à la classification, l'emballage et l'étiquetage des substances dangereuses. Liste des substances qui ne figurent plus sur la liste des polymères EUR 20853 EN.

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

¹⁰ Les définitions de «substances bénéficiant d'un régime transitoire» et de «substances ne bénéficiant pas d'un régime transitoire» sont données dans le *Guide technique: enregistrement*.

déjà enregistrées par le fabricant ou l'importateur concerné qui a procédé à la notification et ne requièrent donc pas d'enregistrement initial de la part de ce fabricant/importateur. Le fabricant/importateur a néanmoins l'obligation de tenir à jour l'enregistrement. Les nouveaux fabricants/importateurs d'une substance figurant sur la liste ELINCS (non couverte pas la ou les précédentes notifications) sont tenus de procéder à l'enregistrement (comme pour une substance ne bénéficiant pas d'un régime transitoire) et un partage des données avec le déclarant antérieur doit être établi. Des informations supplémentaires sur ce point figurent dans le *Guide technique: enregistrement*, disponible sur le site internet «Guides techniques» de l'ECHA à l'adresse: <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

3.2.2. Numéros de liste après l'entrée en vigueur de REACH

Lors de l'élaboration du système REACH-IT, l'ECHA a jugé bon d'attribuer automatiquement un numéro aux substances de toutes les nouvelles soumissions complètes sur le plan technique (enregistrements préalables, PPORD, demandes, enregistrements, notifications de classification et d'étiquetage, etc.) pour lesquelles un numéro CE n'était pas spécifié (voir les critères d'attribution des numéros de liste ci-dessous). Ceci a facilité techniquement la gestion, le traitement ultérieur et l'identification des substances dans ces soumissions. Ces «numéros de liste» se présentent sous le même format numérique que celui utilisé pour les numéros EINECS, ELINCS et NLP mais ils commencent par des chiffres différents.

À la différence des entrées des listes EINECS, ELINCS et NLP, les numéros de liste ne sont pas basés sur une exigence légale et n'ont pas été publiés dans le Journal officiel de l'Union européenne. Les numéros de liste n'ont donc pas la même signification que les numéros CE et n'ont en commun que leur format numérique. Ils ne sont pertinents que d'un point de vue administratif et non réglementaire. Mais le plus important est que la vaste majorité des numéros de liste et l'identification des substances correspondantes n'ont jamais fait l'objet d'une vérification de leur exactitude, de leur validité et de la question de savoir si les conventions exposées dans le présent document d'orientation ont été respectées.

Pour cette raison, il n'a pas été initialement prévu de rendre accessible au public les numéros de liste avant qu'ils n'aient été vérifiés par l'ECHA. Toutefois, étant donné qu'au cours de la phase d'enregistrement préalable, approximativement 40 000 substances ont été préenregistrées sans numéro CE, l'ECHA a décidé de publier les numéros de liste avec la liste des substances préenregistrées afin de faciliter la formation de FEIS.

Il faut souligner qu'il est possible que différents numéros de liste soient attribués à la même substance lorsque différents identifiants (par exemple, différents noms) sont utilisés pour cette substance. Par conséquent, il est également possible qu'un numéro de liste soit attribué à une substance figurant sur une des listes EINECS, ELINCS ou NLP, si lors d'une soumission à l'ECHA via REACH-IT, le nom d'une substance utilisé est différent de celui mentionné dans l'inventaire CE.

Les numéros de liste commencent toujours par 6, 7 8 ou 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-xx; 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

Une substance identifiée dans le dossier/la soumission par un numéro CAS, qui n'est pas lié à un numéro CE ou à un autre numéro de liste déjà attribué par l'ECHA, se voit attribuer un numéro de liste commençant par 6 ou 8.

Une substance pour laquelle seul un nom est indiqué dans le dossier, qui ne peut pas être lié à un nom dans l'inventaire CE ou avec un nom de liste, se voit attribuer un numéro de liste commençant par 9.

Les numéros de liste commençant par 7 sont attribués au cours du processus de demande (article 26 de REACH) après vérification de l'identification de la substance. Ceux-ci correspondent à des substances dont l'identité est fiable et a été vérifiée.

Il est important de noter que pour certaines entrées de la liste EINECS, la description d'une substance est relativement large et peut éventuellement être considérée comme couvrant plusieurs identités de substance conformément à l'article 3, paragraphe 1, de REACH. Dès lors, le déclarant potentiel est invité à décrire plus précisément la substance en question (par exemple, à l'aide du nom IUPAC ou d'autres identifiants). Afin de démontrer le statut de régime transitoire de la substance, le déclarant doit néanmoins indiquer à quelle entrée de la liste EINECS la substance appartient. Dans de tels cas, l'Agence européenne des produits chimiques décidera s'il est approprié ou non d'attribuer un numéro de liste à la substance en question.

3.3. Exigences concernant l'identification des substances selon REACH et le CLP

Au titre du règlement REACH, lorsqu'un enregistrement est exigé, il doit inclure les informations relatives à l'identification de la substance spécifiées à la section 2 de l'annexe VI. Ces informations doivent être adéquates et suffisantes pour permettre l'identification de chaque substance. S'il n'est pas techniquement possible ou s'il ne semble pas nécessaire, du point de vue scientifique, de fournir des informations sur l'un ou plusieurs des paramètres d'identification de la substance, il y a lieu d'en indiquer clairement les raisons, comme indiqué dans la note 1 de l'annexe VI.

De même, au titre du règlement CLP, lorsqu'une notification doit être effectuée (article 40 du CLP), elle doit inclure les informations sur l'identification de la substance spécifiées aux sections 2.1 à 2.3.4 de l'annexe VI de REACH. Ces informations doivent être adéquates pour permettre l'identification de chaque substance. S'il n'est pas techniquement possible ou s'il ne semble pas nécessaire, du point de vue scientifique, de fournir des informations sur l'un ou plusieurs des paramètres d'identification de la substance, il y a lieu d'en indiquer clairement les raisons, comme indiqué dans la note 1 de l'annexe VI.

Une vue d'ensemble des paramètres d'identification des substances selon l'annexe VI de REACH est donnée dans le **tableau 3.1**.

Tableau 3: Paramètres d'identification des substances selon l'annexe VI, section 2 de REACH

	Paramètres d'identification des substances selon l'annexe VI, section 2 de REACH
2.	IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE <i>Pour chaque substance, les informations données doivent être suffisantes pour en permettre l'identification. S'il n'est pas techniquement possible ou s'il ne semble pas nécessaire, du point de vue scientifique, de fournir des informations sur l'un ou plusieurs des points énumérés ci-après, il y a lieu d'en indiquer clairement les raisons.</i>
2.1	Nom ou autre identificateur de chaque substance
2.1.1	<i>Nom(s) dans la nomenclature IUPAC ou autres noms chimiques internationaux</i>
2.1.2	<i>Autres noms (nom usuel, marque commerciale, abréviation)</i>
2.1.3	<i>Numéro EINECS ou ELINCS (s'il est disponible et pertinent)</i>
2.1.4	<i>Nom CAS et numéro CAS (s'ils sont disponibles)</i>
2.1.5	<i>Autre code d'identité (s'il est disponible)</i>
2.2	Informations relatives à la formule moléculaire et structurelle de chaque substance
2.2.1	<i>Formule moléculaire et structurelle (y compris la notation SMILES, si elle est disponible)</i>
2.2.2	<i>Informations sur l'activité optique et ratio habituel des (stéréo-)isomères (si elles sont disponibles et pertinentes)</i>
2.2.3	<i>Poids moléculaire ou intervalle de poids moléculaire</i>
2.3.	Composition de chaque substance
2.3.1	<i>Pureté en pourcentage (%)</i>
2.3.2	<i>Nature des impuretés, y compris les isomères et les sous-produits</i>
2.3.3	<i>Pourcentage des principales impuretés (significatives)</i>
2.3.4	<i>Nature et ordre de grandeur (... ppm, ... %) des additifs éventuels (agents stabilisateurs ou inhibiteurs, par exemple)</i>
2.3.5	<i>Données spectrales (ultraviolet, infrarouge, résonance magnétique nucléaire ou spectre de masse)</i>
2.3.6	<i>Chromatographie en phase liquide à haute pression, chromatographie en phase gazeuse</i>
2.3.7	<i>Description des méthodes d'analyse ou références bibliographiques appropriées permettant d'identifier la substance et, le cas échéant, les impuretés et les additifs. Ces informations doivent être suffisantes pour que les méthodes puissent être reproduites.</i>

4. Orientations pour l'identification et la désignation des substances dans le cadre de REACH et du CLP

4.1. Introduction

Les règles d'identification et de désignation diffèrent selon les différents types de substances. Pour des raisons pratiques, le présent document d'orientation est structuré de telle sorte que, pour chaque type de substances, l'utilisateur soit renvoyé directement au chapitre où figurent les orientations appropriées. À cet effet, des explications sur les différents types de substances sont fournies ci-dessous, suivies d'un schéma pour identifier le chapitre approprié.

L'identification d'une substance doit reposer au minimum sur les paramètres d'identification des substances énumérés à l'annexe VI, section 2 de REACH (voir le **tableau 3**). Toute substance doit donc être identifiée à l'aide d'une combinaison des paramètres d'identification appropriés:

- le nom IUPAC et/ou d'autres noms ou identifiants, par exemple, le numéro CAS, le numéro CE (annexe VI, section 2.1);
- des informations relatives à la formule moléculaire et structurale (annexe VI, section 2.2);
- la composition chimique (annexe VI, section 2.3).

Une substance est totalement identifiée par sa composition chimique, l'identité chimique et la teneur en chacun des constituants de la substance. Si une identification élémentaire de ce type est réalisable pour la plupart des substances, elle est inapplicable et inadéquate pour certaines d'entre elles relevant du champ d'application de REACH et du CLP. En pareil cas, des informations différentes ou complémentaires sur l'identification des substances sont exigées.

Les substances peuvent donc être divisées en deux groupes principaux:

1. «Substances bien définies»: substances de composition qualitative et quantitative définie pouvant être identifiées de façon suffisante sur la base des paramètres d'identification contenus à l'annexe VI, section 2, de REACH.
2. «Substances UVCB»: substances de composition inconnue ou variable, produits de réaction complexes ou matériels biologiques. Ces substances ne peuvent pas être identifiées de façon suffisante au moyen des paramètres mentionnés ci-dessus.

La variabilité de la composition, pour les substances bien définies, est spécifiée par les limites supérieure et inférieure de l'intervalle de concentration du ou des constituants principaux. Pour les substances UVCB, la variabilité est relativement importante et/ou difficilement prévisible.

Il est admis qu'il y aura des cas limites entre les substances bien définies (produits de réaction avec de nombreux constituants, chacun dans une large gamme) et les substances UVCB (produits de réaction de composition variable et difficilement prévisible). Il incombe au déclarant d'identifier une substance de la façon la plus appropriée.

Les règles d'identification et de désignation varient selon qu'il s'agit de «substances bien définies» contenant un constituant principal ou de «substances bien définies» contenant plusieurs constituants principaux. En ce qui concerne les différents types de substances que l'on qualifie d'UVCB, différentes règles d'identification et de désignation sont décrites.

Les **tableaux 4** et **5**, répertorient les principaux identifiants applicables pour plusieurs exemples des différents types de substances. Ces exemples sont regroupés de sorte que les similitudes et les différences en termes d'identification des substances soient faciles à reconnaître.

Les **tableaux 4** et **5** ne constituent pas une liste complète de tous les types de substances possibles. Ce regroupement de substances selon les règles d'identification et de désignation ne doit pas être considéré comme un système officiel de classification des substances, mais comme une aide pratique permettant d'appliquer de façon appropriée les règles spécifiques et de déterminer à quelle partie du présent document d'orientation se reporter.

Tableau 4: Regroupement des principaux identifiants pour des exemples représentant différents types de substances bien définies similaires

Caractéristiques communes	Exemples ou produits représentatifs	Principaux identifiants
Substances bien définies par leur composition chimique <i>[chapitre 4.2.]</i>	Substances monoconstituant, par exemple, - benzène (95 %) - nickel (99 %) <i>[chapitre 4.2.1]</i>	Composition chimique: un constituant principal ≥ 80 %: - identité chimique du constituant principal (nom chimique, numéro CAS, numéro CE, etc.) - concentration habituelle et limites supérieure et inférieure
	Substances multiconstituant, par exemple, produits de réaction définis tels que masse de réaction des 2-, 3-, et 4-chlorotoluène (30 % de chaque) <i>[chapitre 4.2.2]</i>	Composition chimique: un mélange (masse de réaction) de constituants principaux présents chacun entre ≥10 % et <80 %: - identité chimique de chaque constituant principal - concentrations habituelles et limites supérieure et inférieure pour chaque constituant et pour la masse
	Substances définies par leur composition chimique et d'autres caractéristiques, par exemple, graphite et diamant <i>[chapitre 4.2.3]</i>	Composition chimique: comme substance monoconstituant ou multiconstituant ET Autres paramètres physiques ou autres caractéristiques: par exemple, la morphologie cristalline, la composition minérale (géologique), etc.

Tableau 5: Regroupement des principaux identifiants pour des exemples représentant différents types de substances UVCB

Caractéristiques communes	Exemples ou produits représentatifs	Principaux identifiants			
		Source	Processus	Autres identifiants	
Substances UVCB (substances de composition inconnue ou variable, produits de réaction complexes ou matériels biologiques) [chapitre 4.3]	Matériels biologiques (B)	Extraits de matériels biologiques, par exemple, fragrances naturelles, huiles naturelles, colorants et pigments naturels	- Espèce ou famille végétale ou animale - Partie de plante/d'animal	- Extraction - Fractionnement, concentration, isolation, purification, etc. <u>- Dérivation*</u>	- Composition connue ou générique - Empreintes chromatographiques ou autres - Référence à des normes Colour index (indice de couleur)
		Macromolécules biologiques complexes, par exemple, enzymes, protéines, fragments d'ADN ou d'ARN, hormones, antibiotiques			- Indice normalisé (enzymes) - Code génétique - Stéréochimie - Propriétés physiques - Fonction/activité - Structure - Séquence d'acide aminé
	Produits de fermentation Antibiotiques, biopolymères, mélanges d'enzymes, vinasses (produits de fermentation du sucre), etc.	- Milieu de culture - Microorganismes appliqués	- Fermentation - Isolation des produits - Étapes de purification	- Type de produits: par exemple, antibiotiques, biopolymères, protéines etc. - Composition connue	
Substances chimiques ou minérales	Mélanges réactionnels de composition difficilement prévisible et/ou variable	Matières premières	<u>Type de réaction chimique</u> , par exemple, estérification, alkylation, hydrogénation	- Composition connue - Empreintes chromatographiques ou autres - Référence à des normes	

	de composition mal définie, complexe ou variable (UVC)	- Fractions ou distillats, par exemple, produits pétroliers - Argile, par exemple, bentonite - Goudrons	- Pétrole brut - Charbon/tourbe - Gaz d'origine minérale - Minéraux	- Fractionnement, distillation - <u>Conversion de fractions</u> - Traitement physique - Résidus	- Intervalles de coupe - Gamme de longueur de chaîne - Ratio aromatiques/aliphatiques - Composition connue - Indice normalisé
		Concentrés ou produits de fusion, par exemple, minerais métalliques, ou résidus de divers procédés de fonderie ou de métallurgie, par exemple, laitiers	Minerais	- Fonderie - Traitement thermique - Divers procédés métallurgiques	- Composition connue ou générique - Concentration des métaux

* Les processus soulignés signalent la synthèse de nouvelles molécules.

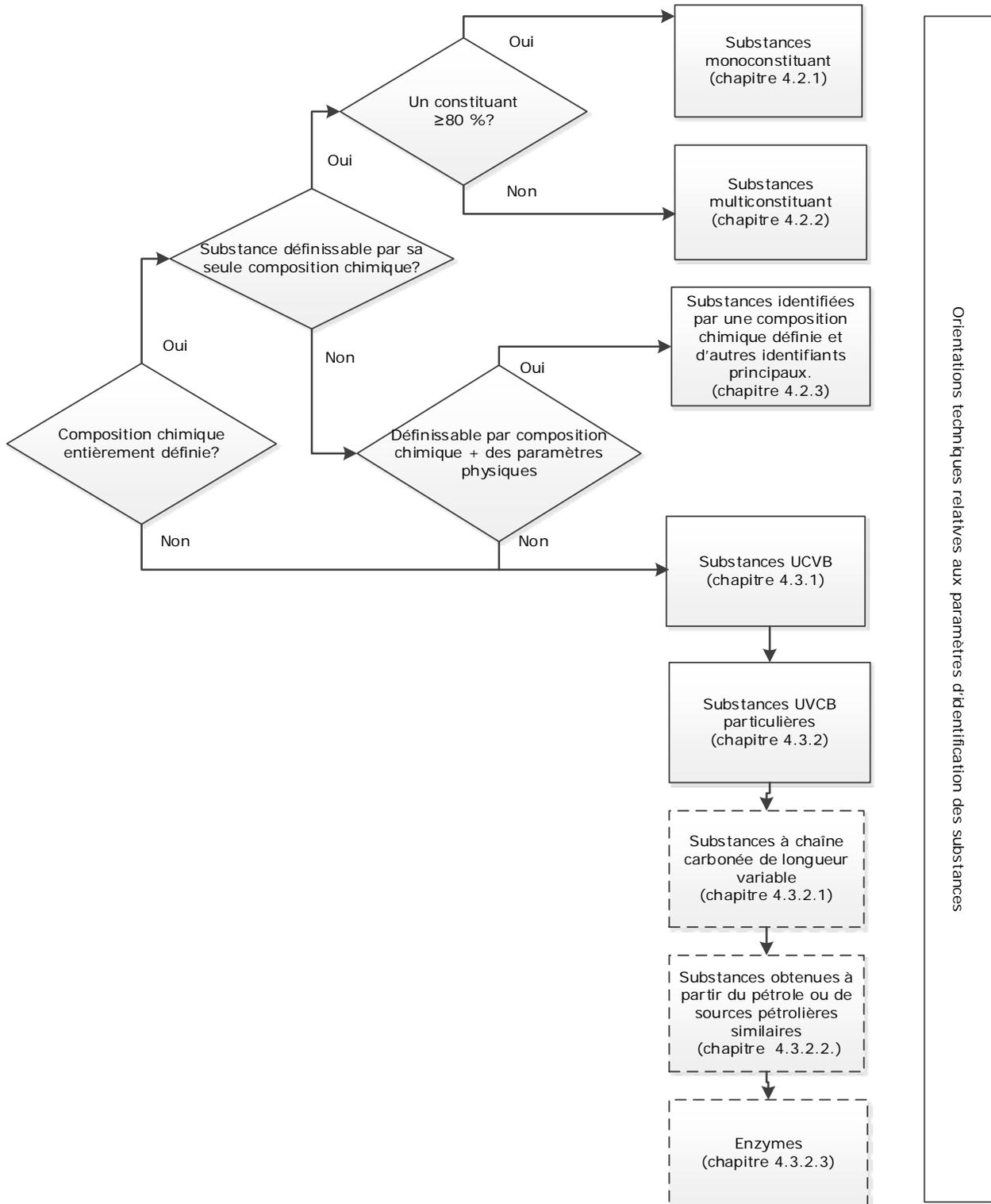
Le présent chapitre est divisé en sous-chapitres contenant des orientations spécifiques sur l'identification des substances des différents types de substances. Le diagramme de la **figure 1** permet de se reporter aux chapitres appropriés.

Le diagramme de la **figure 1** est fondé sur des critères qui sont des «règles empiriques». Il appartient au déclarant de choisir le chapitre le plus approprié et d'enregistrer l'identité de la substance conformément aux règles et critères applicables à ce type de substances.

La règle de base est que les substances sont définies dans la mesure du possible par leur composition chimique et l'identification de leurs constituants. Ce n'est que dans les cas où cela n'est pas réalisable techniquement que d'autres identifiants doivent être utilisés, comme indiqué pour les différents types de substances UVCB.

Si le déclarant s'écarte des règles et critères d'identification des substances énoncés dans le présent document d'orientation, une justification doit être fournie. L'identification des substances doit être assurée de façon transparente et responsable, et offrir des garanties de cohérence.

Figure 1: Diagramme renvoyant aux chapitres et annexes appropriés du document d'orientation applicables aux différents types de substances



Une description des méthodes d'analyse et/ou références bibliographiques appropriées permettant d'identifier la substance et, le cas échéant, les impuretés et les additifs, doit être fournie (annexe VI, sections 2.3.5, 2.3.6 et 2.3.7 de REACH). Ces informations doivent être suffisantes pour que les méthodes puissent être reproduites. Il convient également de fournir les résultats caractéristiques obtenus par application des techniques d'analyse.

4.2. Substances de composition bien définie

Les substances de composition chimique bien définie sont désignées d'après leur ou leurs constituants principaux. Pour certains types de substances, la composition chimique seule ne suffit pas à les caractériser. En pareil cas, des paramètres physiques supplémentaires relatifs aux structures chimiques doivent être ajoutés à l'identification des substances.

En règle générale, l'objectif est de couvrir jusqu'à 100 % de la composition, et chaque constituant exige une spécification chimique complète, incluant les informations relatives à la structure. Pour les substances qui sont définies par leur composition chimique, une distinction est faite entre:

- **constituant principal:** constituant d'une substance, autre qu'un additif ou une impureté, qui représente une part importante de la substance et qui est donc utilisé dans la dénomination de la substance et dans l'identification détaillée de la substance.
- **impureté:** constituant non prévu présent dans une substance lors de sa production. Cette impureté peut provenir des matières de départ ou résulter de réactions secondaires ou incomplètes apparaissant pendant le processus de fabrication. Malgré sa présence, elle n'a pas été ajoutée intentionnellement.
- **additif:** substance qui a été intentionnellement ajoutée afin de stabiliser la substance.

Tous les constituants (excepté les additifs) qui ne sont pas le ou les constituants principaux d'une substance monoconstituant ou multiconstituant sont considérés comme des impuretés. Bien que dans certains secteurs il soit d'usage d'utiliser le terme «traces», seul le terme «impuretés» est utilisé dans le présent document d'orientation.

Les exigences en matière d'identification varient selon les constituants:

- Les constituants principaux interviennent dans la désignation de la substance et chaque constituant principal doit être complètement spécifié en utilisant tous les identifiants pertinents.
- Les impuretés n'interviennent pas dans la désignation de la substance et doivent être spécifiées uniquement par leur nom, leur numéro CAS et leur numéro CE et/ou leur formule moléculaire.
- Les additifs interviennent dans la composition de la substance (mais non dans sa désignation) et doivent toujours être complètement identifiés.

Certaines conventions sont utilisées pour distinguer les substances monoconstituant des substances multiconstituant:

- Une substance monoconstituant est une substance dans laquelle un constituant est présent dans une concentration d'au moins 80 % (m/m) et qui contient jusqu'à 20 % (m/m) d'impuretés.

Une substance monoconstituant est désignée d'après son constituant principal.

- Une substance multiconstituant est une substance composée de plusieurs constituants principaux présents dans des concentrations généralement $\geq 10\%$ et $< 80\%$ (m/m).

Une substance multiconstituant est désignée comme une masse de réaction de deux ou plusieurs constituants principaux.

Les règles mentionnées ci-dessus ont valeur d'orientation. Il est admis de s'en écarter à condition de pouvoir fournir une justification plausible.

En principe, les impuretés présentes dans une concentration ≥ 1 % doivent être spécifiées. Cependant, les impuretés qui sont pertinentes pour la classification et/ou l'évaluation des propriétés PBT¹¹ doivent toujours être spécifiées, quelle que soit leur concentration. En règle générale, les informations doivent être complètes pour 100 % de la composition.

Les additifs au sens des règlements REACH et CLP et du présent document d'orientation sont des agents nécessaires pour préserver la stabilité de la substance. Les additifs sont donc un constituant essentiel de la substance et sont pris en compte dans le bilan massique. Cependant, en dehors de la définition de REACH et du présent document d'orientation, le terme «additif» est également utilisé pour désigner les substances ajoutées intentionnellement ayant d'autres fonctions, par exemple, les régulateurs de pH ou les agents colorants. Ces substances ajoutées intentionnellement ne font pas partie de la substance en tant que telle, et ne sont donc pas prises en compte dans le bilan massique.

Les mélanges, tels que définis dans REACH et le CLP, sont des mélanges intentionnels de substances et ne doivent donc pas être considérés comme des substances multiconstituant.

Des orientations spécifiques sont fournies au chapitre 4.2.1 sur les substances monoconstituant et au chapitre 4.2.2 sur les substances multiconstituant. Pour les substances qui nécessitent des informations supplémentaires (par exemple, certains minéraux), des orientations sont fournies au chapitre 4.2.3.

4.2.1. Substances monoconstituant

Une substance monoconstituant est une substance, définie par sa composition quantitative, dans laquelle un constituant principal est présent dans une concentration d'au moins 80 % (m/m).

4.2.2. Convention de désignation

Une substance monoconstituant est désignée d'après son constituant principal. En principe, le nom doit être donné en anglais conformément aux règles de la nomenclature IUPAC (voir l'annexe I). En principe, les noms doivent être donnés en anglais conformément aux règles de la nomenclature IUPAC.

4.2.3. Identifiants

Une substance monoconstituant est identifiée par un nom chimique et d'autres identifiants (notamment la formule moléculaire et structurelle) du constituant principal et l'identité chimique des impuretés et/ou additifs, ainsi que leur(s) concentration(s) habituelle(s) et leur(s) intervalle(s) de concentration, ces informations étant attestées par des données spectroscopiques et analytiques.

Exemple				
Constituant principal	Teneur (%)	Impureté	Teneur (%)	Identité de la substance
m-xylène	91	o-xylène	5	m-xylène
o-xylène	87	m-xylène	10	o-xylène

Le constituant principal est normalement présent dans une concentration > 80 % et doit être complètement spécifié par tous les paramètres mentionnés ci-dessus. Les impuretés présentes dans une concentration > 1 % doivent être spécifiées par au moins l'un des identifiants suivants: nom chimique (nom IUPAC et/ou nom CAS), numéro CAS et numéro CE

¹¹ Des informations supplémentaires sur l'évaluation des propriétés PBT et les critères pertinents figurent dans le Guide sur les exigences d'information et l'évaluation de la sécurité chimique, chapitre R11: Évaluation des propriétés PBT.

et/ou formule moléculaire. Les impuretés qui sont pertinentes pour la classification et/ou l'évaluation des propriétés PBT¹² doivent toujours être spécifiées par ces mêmes identifiants, indépendamment de leur concentration.

Pour une application correcte de la règle des 80 %, les substances ajoutées intentionnellement, comme les régulateurs de pH ou les agents colorants, ne doivent pas être incluses dans le bilan massique.

La «règle des 80 %» a été appliquée à la notification des nouvelles substances (directive 67/548/CEE). Elle peut être considérée comme une «règle empirique». Cependant, tout écart par rapport à cette règle des 80 % doit être justifié. Des exemples d'écarts justifiés sont:

- le constituant principal est < 80 %, mais il peut être démontré que la substance a des propriétés physicochimiques similaires et le même profil de risque que d'autres substances monoconstituant ayant la même identité et satisfaisant à la règle des 80 %.
- l'intervalle de concentration du constituant principal et des impuretés ne respecte pas la règle des 80 % et le constituant principal n'est qu'occasionnellement ≤ 80 %.

Exemples									
Substance	Constituant principal	Teneur supérieure (%)	Teneur type (%)	Teneur inférieure (%)	Impureté	Teneur supérieure (%)	Teneur type (%)	Teneur inférieure (%)	Identité de la substance
1	o-xylène	90	85	65	m-xylène	35	15	10	o-xylène
2	o-xylène m-xylène	90 35	85 15	65 10	p-xylène	5	4	1	o-xylène

Compte tenu des intervalles de concentration du constituant principal et de l'impureté, les substances 1 et 2 peuvent être considérées comme des substances multiconstituant comprenant deux constituants principaux, l'o-xylène et le m-xylène, ou comme des substances monoconstituant. La décision en pareil cas est de considérer l'une et l'autre comme substance monoconstituant, ceci venant du fait que l'o-xylène est généralement présent dans une concentration > 80 %.

4.2.4. Données analytiques

Des données spectrales suffisantes sont nécessaires pour confirmer la structure d'une substance monoconstituant. Plusieurs méthodes spectroscopiques peuvent être appropriées, en particulier la spectroscopie d'absorption UV-visible (UV/Vis), la spectroscopie infrarouge (IR), la spectroscopie par résonance magnétique nucléaire (RMN) et la spectrométrie de masse (MS). Pour les substances inorganiques, l'utilisation de la diffraction des rayons X (XRD), de la fluorescence X (XRF) ou de la spectroscopie d'absorption atomique (AAS) peut s'avérer plus adaptée.

¹² Des informations supplémentaires sur l'évaluation des propriétés PBT et les critères pertinents figurent dans le Guide sur les exigences d'information et l'évaluation de la sécurité chimique, chapitre R11: Évaluation des propriétés PBT.

Des méthodes chromatographiques, telles que la chromatographie en phase gazeuse (CG) ou la chromatographie en phase liquide à haute pression (CLHP) sont nécessaires pour confirmer la composition de la substance. S'il y a lieu, d'autres techniques valides de séparation des constituants peuvent également être utilisées.

Les méthodes spectroscopiques et analytiques sont en constante évolution. Il incombe donc au déclarant de présenter des données spectrales et analytiques appropriées.

4.2.5. Substances multiconstituants

Une substance multiconstituant est une substance, définie par sa composition quantitative, dans laquelle plus d'un constituant principal est présent dans une concentration $\geq 10\%$ (m/m) et $< 80\%$ (m/m). Une substance multiconstituant est le résultat d'un processus de fabrication¹³.

Le règlement REACH exige l'enregistrement d'une substance telle qu'elle est produite. Si une substance multiconstituant est fabriquée, c'est cette substance multiconstituant qui doit être enregistrée¹⁴ ¹⁵. Il convient d'établir au cas par cas dans quelle mesure les différentes étapes de production de la substance sont couvertes par la définition du terme «fabrication». Toutes les substances couvertes précédemment par l'EINECS (par exemple, les substances multiconstituant étaient couvertes si tous leurs constituants individuels figuraient dans l'EINECS) peuvent éventuellement bénéficier d'un régime transitoire. Il n'est pas nécessaire de soumettre la substance telle quelle à des essais, si le profil de risque de la substance peut être suffisamment décrit par les informations sur les constituants individuels.

4.2.6. Convention de désignation

Une substance multiconstituant est désignée comme une masse de réaction des constituants principaux de la substance telle quelle, il ne s'agit donc pas des matières de départ nécessaires pour produire la substance. Le format générique est: «masse de réaction de [noms des constituants principaux]». Il est recommandé d'indiquer les noms des constituants par ordre alphabétique séparés par la conjonction «et». Seuls les constituants principaux généralement $\geq 10\%$ interviennent dans le nom. Dans le présent document d'orientation, le format générique du nom des produits de réaction est «Reaction product of (produit de réaction de) [noms des matières de départ]». En principe, les noms doivent être donnés en anglais conformément aux règles de la nomenclature IUPAC.

4.2.7. Identifiants

Une substance multiconstituant est identifiée par le nom chimique et les identifiants de la substance telle quelle, ainsi que par la composition chimique quantitative et qualitative (identité chimique, notamment la formule moléculaire et structurale) de ses constituants, ces informations étant attestées par des données analytiques.

¹³ La différence entre un mélange et une substance multiconstituant est qu'un mélange est obtenu par mélange de deux substances ou plus sans qu'il se produise de réaction chimique. Une substance multiconstituant est le résultat d'une réaction chimique.

¹⁴ Un certain nombre de substances sont exemptées d'enregistrement selon REACH (par exemple, les substances énumérées à l'annexe IV).

¹⁵ Ce principe ne s'applique pas à un certain nombre de substances spécifiques comme les minéraux (voir le chapitre 7.5 pour plus de détails).

Exemple				
Constituants principaux	Teneur (%)	Impureté	Teneur (%)	Identité de la substance
m-xylène	50	p-xylène	5	Masse de réaction du m-xylène et de l'o-xylène
o-xylène	45			

Pour les substances multiconstituant, la composition chimique est connue et plusieurs constituants principaux sont pertinents pour l'identification de la substance. De plus, la composition chimique de la substance est prévisible, avec ses valeurs et intervalles habituels. Les constituants principaux doivent être complètement spécifiés par tous les paramètres pertinents. La somme des concentrations habituelles des constituants principaux ($\geq 10\%$) et des impuretés ($< 10\%$) doit être égale à 100% .

Pour une application correcte de la règle des 10% et des 80% , les substances ajoutées intentionnellement, comme les régulateurs de pH ou les agents colorants, ne doivent pas être incluses dans le bilan massique.

Les impuretés présentes dans une concentration $\geq 1\%$ doivent être spécifiées par au moins l'un des identifiants suivants: nom chimique, numéro CAS et numéro CE et/ou formule moléculaire. Les impuretés qui sont pertinentes pour la classification et/ou l'évaluation des propriétés PBT doivent toujours être spécifiées par ces mêmes identifiants, indépendamment de leur concentration.

Exemple								
Constituant principal	Teneur supérieure (%)	Teneur type (%)	Teneur inférieure (%)	Impureté	Teneur supérieure (%)	Teneur type (%)	Teneur inférieure (%)	Identité de la substance
aniline	90	75	65	phénanthrène	5	4	1	Masse de réaction de l'aniline et du naphthalène
naphthalène	35	20	10					

Conformément aux règles énoncées dans le présent document d'orientation, cette substance est une substance multiconstituant. Bien que l'intervalle de concentration d'un constituant soit $> 80\%$, cela ne se produit qu'occasionnellement et la concentration habituelle est $< 80\%$.

Il peut être occasionnellement opportun de considérer une substance comme substance multiconstituant même si un constituant est présent dans une concentration $\geq 80\%$. Par exemple, une substance contient deux constituants, l'un dans une concentration de 85% et l'autre dans une concentration de 10% , le reste étant constitué d'impuretés. Les deux constituants contribuent et sont essentiels pour obtenir l'effet technique de la substance. Dans ce cas, malgré le fait qu'un constituant soit présent dans une concentration $> 80\%$, la substance peut être décrite comme une substance à deux constituants.

4.2.8. Données analytiques

Lorsque les données spectrales apportent des informations sur la composition d'une substance multiconstituant, ces informations doivent être fournies. Plusieurs méthodes spectroscopiques peuvent être appropriées, en particulier la spectroscopie d'absorption UV-visible (UV/Vis), la spectroscopie infrarouge (IR), la spectroscopie par résonance magnétique nucléaire (RMN) et la spectrométrie de masse (MS). Pour les substances inorganiques, l'utilisation de la diffraction des rayons X (XRD), de la fluorescence X (XRF) ou de la spectroscopie d'absorption atomique (AAS) peut s'avérer plus adaptée.

L'utilisation de méthodes chromatographiques, telles que la chromatographie en phase gazeuse (CG) et/ou la chromatographie en phase liquide à haute pression (CLHP) est nécessaire pour confirmer la composition de la substance. S'il y a lieu, d'autres techniques valides de séparation des constituants peuvent également être utilisées.

Les méthodes spectroscopiques et analytiques sont en constante évolution. Il incombe donc au déclarant de présenter des données spectrales et analytiques appropriées.

4.2.9. Enregistrement des constituants individuels d'une substance multiconstituant

En général, l'enregistrement de l'identité de la substance aux fins de l'enregistrement (préalable) doit suivre l'approche prévue pour les substances multiconstituant (c'est-à-dire l'enregistrement de la substance multiconstituant). Par dérogation à cette approche, les constituants individuels peuvent être enregistrés, si cela peut être justifié. Cette possibilité de déroger au cas standard et d'identifier (et potentiellement d'enregistrer) les substances par leurs constituants individuels existe lorsque:

- il n'en résulte pas une baisse des exigences d'information;
- il y a suffisamment de données existantes pour justifier la démarche d'enregistrement des constituants individuels, c'est-à-dire que cette démarche ne doit normalement pas induire des essais supplémentaires (sur des animaux vertébrés) par comparaison avec l'approche standard;
- l'enregistrement des constituants individuels conduit à une situation plus efficace (c'est-à-dire que cela évite de nombreux enregistrements de substances composées des mêmes constituants);
- les informations sur la composition des masses de réaction individuelles sont fournies.

Il convient de ne pas abuser de la flexibilité offerte pour se soustraire aux exigences en matière de données. Dans le cas, par exemple, d'une substance multiconstituant «C + D» fabriquée en quantités de 1200 tonnes par an (tpa) et composée de 50 % de C et de 50 % de D, cette démarche donnerait lieu à deux enregistrements avec les informations suivantes:

Substance C

- quantités 600
- exigences relatives aux données à respecter pour des quantités > 1000 tonnes (annexe X)

Substance D

- quantités 600
- exigences relatives aux données à respecter pour des quantités > 1000 tonnes (annexe X)

Cette démarche doit être combinée à l'exigence de REACH selon laquelle les volumes d'une même substance doivent être additionnés pour chaque entité légale. Il est proposé d'établir les exigences relatives aux données comme suit:

- additionner tous les volumes des constituants individuels (selon les quantités contenues dans la substance),
- se référer au volume le plus élevé d'une substance qui contient ce constituant.

Les exigences d'information doivent être établies sur la base du plus élevé des deux résultats. Pour la consignation des quantités, il convient de prendre la somme des quantités de chacun des constituants individuels. Des exemples simplifiés sont donnés ci-après pour illustrer la mise en œuvre pratique de cette démarche.

Exemple 1

La substance multiconstituant «C + D + E» est le résultat d'un processus au sein d'une seule entité légale, qui conduit à différentes substances:

- Substance 1: 50 % de C, 25 % de D et 25 % de E, 1100 tpa
- Substance 2: 50 % de C et 50 % de D, 500 tpa

De plus, dans ce cas, le produit de réaction est le point de départ: les deux substances doivent être enregistrées comme substances multiconstituant. Si la démarche d'enregistrement des constituants individuels est suivie¹⁶, les considérations suivantes s'appliquent:

Dans ce cas, la déclaration de la substance D serait:

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

La détermination des exigences d'information est fondée sur l'exigence la plus sévère. Dans ce cas: > 1000 tpa, car les quantités totales de la substance multiconstituant «C + D + E» sont supérieures à 1000 tpa.

Note: dans cet exemple, les substances C et E doivent être enregistrées selon le même principe.

Exemple 2

La substance multiconstituant «G + H + I» est le résultat d'un processus au sein d'une seule entité légale, qui conduit à différentes substances:

- Substance 3: 65 % de G, 15 % de H et 20 % de I, 90 tpa
- Substance 4: 60 % de G et 40 % de H, 90 tpa

Déclaration de la substance G:

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

La détermination des exigences d'information est fondée sur l'exigence la plus sévère. Dans ce cas: > 100 tpa, car les quantités totales du constituant G sont supérieures à 100 tpa.

Note: dans cet exemple, les substances H et I doivent être enregistrées selon le même principe.

Outre la détermination des exigences d'information mentionnées, il faut également tenir compte du nombre des études nouvelles (sur des animaux vertébrés) à réaliser. Avant d'opter pour une stratégie, les déclarants potentiels doivent déterminer s'il y a suffisamment d'études existantes (sur des animaux vertébrés) et si la flexibilité proposée conduira à une augmentation ou à une diminution du nombre de nouveaux essais (sur des animaux vertébrés). La stratégie qui évite de nouveaux essais (sur des animaux vertébrés) doit être retenue.

En cas de doute, la voie classique de déclaration de l'identité d'une substance aux fins de son enregistrement doit toujours être l'identification de la substance telle qu'elle est fabriquée.

¹⁶ Cet exemple est destiné uniquement à illustrer comment déterminer les exigences d'information et comment déclarer les volumes. Il ne s'agit pas d'examiner si la démarche est justifiable dans ce cas.

4.2.10. Substances identifiées par une composition chimique définie et d'autres identifiants principaux

Certaines substances (par exemple, les minéraux inorganiques) qui peuvent être identifiées par leur composition chimique doivent en outre être spécifiées par des identifiants supplémentaires pour obtenir leur propre identification. Ces substances peuvent être soit des substances monoconstituant soit des substances multiconstituant, mais elles nécessitent, en plus des paramètres d'identification des substances décrits dans les chapitres précédents, d'autres identifiants principaux pour être identifiées sans ambiguïté.

Exemples

Certains minéraux non métalliques (obtenus à partir de sources naturelles ou synthétiques) présentant une structure unique ne peuvent être identifiés sans ambiguïté que si l'on dispose de leur morphologie et de leur composition minérale. Un exemple est le kaolin (CAS 1332-58-7) composé de kaolinite, d'aluminosilicate de potassium, de feldspath et de quartz.

Avec le développement des nanotechnologies et l'évolution des connaissances sur les dangers liés à ces technologies, il pourra être nécessaire à l'avenir de fournir des informations supplémentaires sur la taille des substances. L'état actuel du développement ne permet pas d'inclure dans le présent document d'orientation des indications sur l'identification des substances nanostructurées.

4.2.11. Convention de désignation

En principe, il y a lieu de suivre la même convention de désignation pour les substances monoconstituant (voir le chapitre 4.2.1) que pour les substances multiconstituant (voir le chapitre 4.2.2).

Dans le cas des minéraux inorganiques, les noms minéralogiques peuvent être utilisés pour les constituants. Par exemple, l'apatite est une substance multiconstituant composée d'un groupe de minéraux phosphate, généralement désignés par les termes d'hydroxylapatite, de fluorapatite, et de chlorapatite, ainsi nommés en raison de leurs concentrations élevées en ions OH⁻, F⁻, ou Cl⁻, respectivement, dans le cristal. La formule du mélange des trois espèces les plus courantes est Ca₅(PO₄)₃(OH, F, Cl). Un autre exemple est l'aragonite, l'une des structures cristallines particulières du carbonate de calcium.

4.2.12. Identifiants

Ces substances sont identifiées et désignées conformément aux règles applicables aux substances monoconstituant (voir le chapitre 4.2.1) ou aux substances multiconstituant (voir le chapitre 4.2.2). Les autres paramètres d'identification principaux à ajouter dépendent de la substance. Il peut s'agir de la composition élémentaire combinée à des données spectrales, de la structure cristalline déterminée par diffraction des rayons X (XRD), des pics d'absorption infrarouge, de l'indice de gonflement, de la capacité d'échange cationique ou d'autres propriétés physiques et chimiques.

Pour les minéraux, il est important de combiner les résultats de la composition élémentaire avec les données spectrales pour identifier la composition minéralogique et la structure cristalline. Ceci est ensuite confirmé par des propriétés physicochimiques caractéristiques comme la structure cristalline (déterminée par diffraction des rayons X), la forme, la dureté, le pouvoir gonflant, la densité et/ou la surface spécifique.

Des exemples d'identifiants principaux supplémentaires spécifiques peuvent être donnés pour des minéraux spécifiques, car les minéraux ont des caractéristiques qui permettent de

compléter leur identification, par exemple, une dureté très faible pour le talc, le pouvoir gonflant de la bentonite, les formes de la diatomite, la densité très élevée de la baryte et la surface spécifique (adsorption d'azote).

4.2.13. Données analytiques

Il convient de fournir les mêmes données analytiques que pour les substances monoconstituant (voir le chapitre 4.2.1) ou les substances multiconstituant (voir le chapitre 4.2.2). Dans le cas des substances pour lesquelles les données spectrales, les chromatogrammes CG ou CLHP ne sont pas suffisants pour l'identification, des informations obtenues par d'autres techniques d'analyse doivent être fournies, par exemple, la diffraction des rayons X pour les minéraux, l'analyse élémentaire etc. Le critère est que des informations suffisantes doivent être fournies pour confirmer la structure de la substance.

4.3. Substances UVCB

Les substances de composition inconnue ou variable, produits de réaction complexes ou matériels biologiques^{17, 18, 19}, appelées encore substances UVCB, ne peuvent pas être identifiées de façon suffisante par leur composition chimique, parce que:

- le nombre de constituants est relativement élevé et/ou
- la composition est, pour une part importante, inconnue et/ou
- la variabilité de la composition est relativement élevée ou difficilement prévisible.

Par conséquent, l'identification des substances UVCB nécessite d'autres types d'informations en plus de ce que l'on sait de leur composition chimique.

Comme on le voit au **tableau 5**, les identifiants principaux pour les différents types de substances UVCB sont liés à la source de la substance et au processus utilisé; ou ils appartiennent à un groupe d'«autres identifiants principaux» (par exemple, «empreintes chromatographiques ou autres empreintes»). Le nombre et la nature des identifiants donnés au **tableau 5** représentent une illustration de la variabilité des types; l'objet n'est pas d'en donner un bilan complet. Lorsque la composition chimique d'un produit de réaction complexe par exemple, ou d'une substance d'origine biologique est connue, la substance doit être identifiée, selon les cas, soit comme substance mono- soit comme substance multiconstituant. Le fait de qualifier une substance d'UVCB a pour conséquence que toute modification significative de la source ou du processus conduirait probablement à l'obtention d'une substance différente qui devrait être à nouveau enregistrée. Si un mélange réactionnel est identifié comme «substance multiconstituant», la substance peut être dérivée d'une source différente et/ou obtenue par différents processus tant que la composition de la substance finale reste dans l'intervalle spécifié. Ainsi, un nouvel enregistrement ne serait pas exigé.

Le chapitre 4.3.1 fournit des orientations générales sur les substances UVCB et le chapitre 4.3.2 fournit des orientations spécifiques sur des types spécifiques de substances UVCB comme les substances à chaîne carbonée de longueur variable, les substances obtenues à partir du pétrole ou de sources pétrolières similaires et les enzymes.

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

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

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

4.3.1. Orientations générales sur les substances UVCB

Le présent chapitre du document d'orientation fournit des indications générales sur la façon d'utiliser certains identifiants principaux, outre les paramètres d'identification des substances de l'annexe VI, section 2, de REACH, pour identifier les substances UVCB.

4.3.2. Informations sur la composition chimique

Si les substances UVCB ne peuvent pas être uniquement spécifiées par le nom IUPAC des constituants, du fait que tous les constituants ne peuvent pas être identifiés; elles peuvent être spécifiées de façon générique, mais avec un manque de spécificité dû à la variabilité de la composition exacte. Comme il n'y a pas de différence entre les constituants et les impuretés, les termes «constituants principaux» et «impuretés» ne sont pas importants pour les substances UVCB.

Cependant, la composition chimique et l'identité des constituants doivent malgré tout être précisées dans la mesure où elles sont connues. La description de la composition peut souvent être donnée d'une façon plus générique, par exemple «acides gras linéaires en C8-16» ou «éthoxylates d'alcool avec alcools en C10-14 et unités éthoxylate ayant 4 à 10 atomes de carbone». De plus, des informations sur la composition chimique peuvent être fournies sur la base d'échantillons de référence bien connus ou de normes; et, dans de nombreux cas, des index et des codes existants peuvent être utilisés en complément. Les «empreintes», telles que, par exemple, les images chromatographiques ou spectrales montrant une distribution caractéristique des pics peuvent constituer également des informations générales sur la composition.

Pour une substance UVCB, tous les constituants connus et tous les constituants présents dans des concentrations $\geq 10\%$ doivent être spécifiés par au moins un nom IUPAC en anglais et de préférence un numéro CAS; les concentrations habituelles et les intervalles de concentration des constituants doivent être également être fournis. Les constituants qui sont pertinents pour la classification et/ou l'évaluation des propriétés PBT²⁰ de la substance doivent toujours être identifiés par ces mêmes identifiants, indépendamment de leur concentration.

Les constituants inconnus doivent être identifiés dans la mesure du possible par une description générale de leur nature chimique. Les additifs doivent être complètement spécifiés, d'une façon similaire à celle décrite pour les substances bien définies.

4.3.3. Paramètres d'identification principaux – nom, source et processus

Comme la composition chimique ne suffit pas à elle seule à l'identification d'une substance, celle-ci doit en général être identifiée par son nom, son origine ou sa source et les étapes les plus pertinentes de son traitement. D'autres propriétés de la substance peuvent également être des identifiants importants, soit comme identifiants génériques pertinents (par exemple, le point d'ébullition), soit comme identifiants cruciaux pour des groupes spécifiques de substances (par exemple, l'activité catalytique pour les enzymes).

1. *Convention de désignation*

En général, le nom d'une substance UVCB est une combinaison d'une source et d'un processus dont le format général est le suivant: d'abord la source puis le ou les processus.

- Une substance dérivée de sources biologiques est identifiée par le nom de l'espèce.

²⁰ Des informations supplémentaires sur l'évaluation des propriétés PBT et les critères pertinents figurent dans le Guide sur les exigences d'information et l'évaluation de la sécurité chimique, chapitre R11: Évaluation des propriétés PBT.

- Une substance dérivée de sources non biologiques est identifiée par les matières de départ.
- Les processus sont identifiés par le type de réaction chimique si la synthèse de nouvelles molécules est impliquée, ou par le type d'étape de raffinement, par exemple, extraction, fractionnement, concentration, ou bien en tant que résidu.

Exemples	
Nom CE	Nom CE
296-358-2	«Lavender, Lavandula hybrida, ext., acetylated» (Lavande, Lavandula hybrida, extraits acétylés)
307-507-9	«Lavender, Lavandula latifolia, ext., sulfurized, palladium salt» (Lavande, Lavandula latifolia, extraits sulfurisés, sel de palladium)

Dans le cas de produits de réaction, différents formats ont été utilisés dans l'inventaire CE, par exemple,

- EINECS: Matière de départ principale, produit(s) de réaction obtenu(s) à partir d'un autre ou d'autres matières de départ
- ELINCS: Produit(s) de réaction obtenu(s) à partir d'une ou des matières de départ

Exemples	
Nom CE	Nom CE
232-341-8	«Nitrous acid, reaction products with 4-methyl-1,3-benzenediamine hydrochloride» (acide nitreux, produits de réaction avec l'hydrochlorure de méthyl-4 benzènediamine-1,3)
263-151-3	«Fatty acids, coco, reaction products with diethylenetriamine» (acides gras de coco, produits de réaction avec la diéthylène-triamine)
400-160-5	«Reaction products of tall-oil fatty acids, diethanolamine and boric acid» (Produits de réaction d'acides gras d'huile de tall, de diéthanolamine et d'acide borique)
428-190-4	«Reaction product of: 2,4-diamino-6-[2-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)ethyl]-1,3,5-triazine and cyanuric acid» (Produits de réaction de 2,4-diamino-6-[2-(2-méthyl-1H-imidazol-1-yl)éthyl]-1,3,5-triazine et d'acide cyanurique)

Dans le présent document d'orientation, le format générique du nom des produits de réaction est «Reaction product of (produit de réaction de) [noms des matières de départ]». En principe, les noms doivent être donnés en anglais conformément aux règles de la nomenclature IUPAC. D'autres désignations reconnues au niveau international peuvent être données en complément. Il est recommandé de remplacer le mot «reaction» dans le nom par le type

spécifique de réaction décrit de façon générique par exemple, estérification ou formation de sel, etc. (voir les précisions ci-après dans les quatre sous-classes spécifiques de substances UVCB).

2. Source

Les sources peuvent être divisées en deux groupes:

2.1. Sources de nature biologique

Les substances d'origine biologique doivent être définies par le genre, l'espèce et la famille, par exemple, *Pinus cembra*, *Pinaceae* signifie *Pinus* (genre), *cembra* (espèce), *Pinaceae* (famille), et le cas échéant par la souche ou le type génétique. S'il y a lieu, le tissu ou la partie de l'organisme utilisée pour l'extraction de la substance, par exemple, moelle osseuse, pancréas; ou tige, graines ou racines, doit également être précisée.

Exemples	
Nom CE	Nom CE
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ext. (Saccharomyces cerevisiae, extraits) Description CE Extraits de Saccharomyces cerevisiae, Saccharomycètes, et leurs dérivés physiquement modifiés tels que teintures, concrètes, absolus, huiles essentielles, oléorésines, terpènes, fractions déterpénées, distillats, résidus, etc.
296-350-9	Arnica mexicana, ext. (Arnica mexicana, extraits) Description CE Extraits de Arnica mexicana, Composacées, et leurs dérivés physiquement modifiés tels que teintures, concrètes, absolus, huiles essentielles, oléorésines, terpènes, fractions déterpénées, distillats, résidus, etc.

2.2. Sources chimiques ou minérales

Dans le cas de produits de réaction obtenus à partir de réactions chimiques, les matières de départ doivent être décrites par leur nom IUPAC en anglais. Les sources minérales doivent être décrites en termes génériques, par exemple, minerais de phosphate, bauxite, kaolin, gaz minéral, charbon, tourbe.

3. Processus

Les processus sont identifiés par le type de réaction chimique en cas de synthèse de nouvelles molécules; ou comme un type d'étape de raffinement, par exemple, extraction, fractionnement, concentration; ou bien en tant que résidu de raffinement.

Pour certaines substances comme les dérivés chimiques, le processus doit être décrit comme une combinaison d'un raffinement et d'une synthèse.

3.1 Synthèse

Une réaction chimique ou biochimique donnée se produit entre les matières de départ pour conduire à la substance. Par exemple, réaction de Grignard, sulfonation, clivage enzymatique par protéase ou lipase, etc. De nombreuses réactions de dérivation appartiennent également à ce type.

Pour les substances nouvellement synthétisées dont la composition chimique ne peut pas être fournie, les matières de départ constituent l'identifiant principal, avec une spécification de la réaction, c'est-à-dire du type de réaction chimique. Le type de réaction chimique fournit une indication sur les molécules censées être présentes dans la substance. Il existe plusieurs types de réaction chimique finale: l'hydrolyse, l'estérification, l'alkylation, la chloration, etc. Étant donné que cela ne fournit que des informations génériques sur les substances susceptibles d'être produites, une empreinte chromatographique sera également nécessaire dans de nombreux cas pour une caractérisation et une identification complètes de la substance.

Exemples

Numéros CE	Nom CE
294-801-4	«Linseed oil, epoxidised, reaction products with tetraethylenepentamine» (huile de lin époxydée, produits de réaction avec la tétraéthylènepentamine)
401-530-9	«Reaction product of (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzophenone and triethoxysilane) with (hydrolysis product of silica and methyltrimethoxysilane)» (Produit de réaction de (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzophénone et triéthoxysilane) et du (produit d'hydrolyse de silice et méthyltriméthoxysilane)

3.2 Raffinement

Le raffinement peut être appliqué de différentes façons à des substances d'origine naturelle ou minérale, sans modifier l'identité chimique des constituants mais en modifiant leur concentration, par exemple, un traitement à froid d'un tissu végétal suivi d'une extraction par un alcool.

Le raffinement peut être défini plus précisément dans des processus comme l'extraction. L'identification des substances dépend du type de processus:

- Pour les substances dérivées par des méthodes physiques, par exemple, le raffinement ou le fractionnement, l'intervalle des valeurs seuils et les paramètres de la fraction doivent être spécifiés (par exemple: la taille moléculaire, la longueur de chaîne, le point d'ébullition, l'intervalle de volatilité, etc.).
- Pour les substances dérivées par concentration, par exemple, les produits issus de procédés métallurgiques, les précipités obtenus par centrifugation, les résidus de filtration, etc., l'étape de concentration doit être spécifiée ainsi que la composition générique de la substance résultante, par comparaison avec la matière de départ.

Exemples

Nom CE	Nom CE
408-250-6	«Organotungsten compound concentrate (reaction products of tungsten hexachloride with 2-methylpropan-2-ol, nonylphenol and pentane-2,4-dione)» (Concentré d'organo-tungstène (produits de réaction d'hexachlo-

	rure de tungstène et de 2-méthylpropan-2-ol, de nonylphénol et de pentane-2,4-dione))
--	---

- o Pour les résidus d'une réaction spécifique, par exemple, scories, goudrons et fractions lourdes, le processus doit être décrit ainsi que la composition générique de la substance résultante.

Exemples	
Numéro CE	Nom CE
283-659-9	«Tin, melting residues» (étain, résidus de fusion) Description CE Substance résultant de l'utilisation et de la production d'étain et d'alliages stannifères obtenus à partir de matériaux primaires et secondaires, et notamment de produits intermédiaires recyclés. Est principalement constituée de composés d'étain. Peut également contenir d'autres métaux non ferreux résiduels, ainsi que leurs composés
293-693-6	«Soybean meal, protein extn. Residue» (farine de soja, résidu d'extraction des protéines) Description CE Sous-produit obtenu par extraction à l'éthanol de la farine de soja dégraissée. Se compose essentiellement d'hydrates de carbone.

- o Pour les extraits, il convient d'indiquer la méthode d'extraction, le solvant utilisé pour l'extraction et d'autres conditions pertinentes, par exemple, la température/gamme de température).
- o Lors d'un traitement combiné, chaque étape doit être spécifiée (de façon générique) en complément de la source d'information. Ce traitement combiné a une importance particulière en cas de dérivations chimiques.

Exemples:

- o Une plante est soumise dans un premier temps à une extraction, l'extrait est distillé et la fraction distillée de l'extrait de plante est utilisée pour une dérivation chimique. La substance résultante peut être soumise à une purification ultérieure. Le produit purifié peut éventuellement être bien défini par sa composition chimique et il n'est alors pas nécessaire d'identifier la substance comme substance UVCB. Si le produit doit toujours être considéré comme une substance UVCB, le traitement combiné peut être décrit comme un «dérivé chimique purifié d'une fraction distillée d'un extrait de plante».
- o Si le traitement ultérieur d'un extrait ne comprend qu'une dérivation physique, la composition sera modifiée mais sans synthèse intentionnelle de nouvelles molécules. Néanmoins, la modification de la composition conduit à une substance différente, par exemple, un distillat ou un précipité d'extrait de plante.
- o Pour la production de produits pétroliers, une dérivation chimique et un fractionnement sont souvent utilisés en combinaison. Par exemple, la distillation du pétrole suivie du craquage produisent une fraction de la matière première et également de nouvelles molécules. Ainsi, dans ce cas, les deux types de processus

doivent être identifiés ou le distillat doit être spécifié comme matière première du craquage. Cela s'applique en particulier aux dérivés du pétrole qui résultent souvent d'une combinaison de processus. Cependant, un système spécifique distinct peut être utilisé pour l'identification de substances pétrolières (voir le chapitre 4.3.2.2).

Étant donné qu'un dérivé chimique d'un extrait ne contiendra pas les mêmes constituants que l'extrait d'origine, il doit être considéré comme une substance différente. Il s'ensuit que l'identification par le nom et une description peut être différente de celle figurant précédemment dans l'EINECS. Au moment de l'élaboration de l'inventaire EINECS, les extraits obtenus en utilisant des processus différents, des solvants différents et même les dérivés physiques ou chimiques étaient souvent couverts par une seule entrée. Cependant, dans le cadre de REACH, ces substances doivent être enregistrées comme des substances distinctes.

4. *Autres paramètres d'identification des substances*

Outre le nom chimique, la source et la spécification du processus, il convient de fournir pour une substance UVCB toutes les autres informations pertinentes, exigées par l'annexe VI, section 2, de REACH.

En particulier, pour certains types de substances UVCB, d'autres paramètres d'identification peuvent être pertinents. Les autres identifiants complémentaires comprennent:

- une description générique de la composition chimique;
- une empreinte chromatographique ou tout autre type d'empreinte;
- un document de référence (par exemple, ISO);
- des paramètres physicochimiques (par exemple, le point d'ébullition);
- le numéro du Colour index;
- le numéro AISE.

Des orientations spécifiques sur les règles et les critères, la façon d'utiliser les informations relatives au nom, à la source et au processus pour l'identification des substances UVCB, sont incluses ci-dessous pour les différents types de sources et de processus. Dans les paragraphes suivants, quatre sous-types de substances UVCB sont décrits comme une combinaison de sources (biologique ou chimique/minérale) et de processus (synthèse ou raffinement).

Substances UVCB de sous-type 1, lorsque la source est biologique et le processus est une synthèse

Les substances de nature biologique peuvent être modifiées par un traitement (bio)chimique pour produire des constituants qui n'étaient pas présents dans les matières de départ, par exemple, des dérivés chimiques d'extraits de plante ou des produits obtenus après traitement enzymatique des extraits. Par exemple, les protéines peuvent être hydrolysées par des protéases pour produire des oligopeptides, ou la cellulose provenant du bois peut être carboxylée pour conduire à de la carboxyméthylcellulose (CMC).

Les produits de fermentation peuvent également appartenir à ce sous-type de substances UVCB. Par exemple, la vinasse est un produit de fermentation du sucre qui, comparé au sucre, contient de nombreux constituants différents. Lorsque des produits de fermentation sont purifiés, les substances peuvent éventuellement devenir complètement identifiables par leur composition chimique et ne doivent plus être identifiées comme des substances UVCB.

Les enzymes constituent un groupe particulier de substances qui peuvent être dérivées par extraction puis raffinement à partir d'une source d'origine biologique. Bien que la source et

le processus puissent être spécifiés en détail, cela ne fournit pas d'informations spécifiques sur l'enzyme. Pour ces substances, un système particulier de classification, de désignation et d'identification doit être utilisé (voir le chapitre 4.3.2.3).

Pour l'identification des substances, l'étape finale du processus doit être indiquée et/ou toute autre étape du processus pertinente pour l'identité de la substance.

Une description du processus chimique doit être une description générique du type de processus (estérification, hydrolyse alcaline, alkylation, chloration, substitution, etc.), ainsi que les circonstances pertinentes du processus.

Une description du processus biochimique peut être une description générique de la réaction catalysée, accompagnée du nom de l'enzyme qui catalyse la réaction.

Pour les substances produites par fermentation ou les cultures (tissulaires) d'espèces, il convient d'indiquer l'espèce fermentaire, le type et les conditions générales de fermentation (par lot ou en continu, aérobique, anaérobique, anoxique, température, pH, etc.), ainsi que toutes les étapes ultérieures du processus appliquées pour isoler les produits de fermentation, par exemple, la centrifugation, la précipitation, l'extraction, etc. Si ces substances sont ensuite raffinées, cela peut conduire à une fraction, un concentré ou un résidu. Ces substances soumises à un traitement ultérieur sont identifiées par une spécification supplémentaire des étapes dudit traitement ultérieur.

Substances UVCB de sous-type 2, lorsque la source est chimique ou minérale et le processus est une synthèse

Les substances UVCB obtenues à partir de sources chimiques ou minérales, dérivées via un processus dans lequel de nouvelles molécules sont synthétisées, sont des «produits de réaction». Des exemples de produits obtenus par réaction chimique sont les produits d'estérification, d'alkylation ou de chloration. Les réactions biochimiques par application d'enzymes isolées constituent un type particulier de réactions chimiques. Cependant, si une voie de synthèse biochimique complexe est appliquée en utilisant des microorganismes complets, il est préférable de considérer la substance résultante comme un produit de fermentation et de l'identifier par le processus de fermentation et l'espèce fermentaire plutôt que par les matières de départ (voir le sous-type 4 de substances UVCB).

Tous les produits de réaction ne doivent pas automatiquement être spécifiés comme une substance UVCB. Si un produit de réaction peut être défini de façon suffisante par la composition chimique (avec une certaine variabilité), il est préférable de l'identifier comme une substance multiconstituant (voir le chapitre 4.2.2). La substance doit être identifiée comme une substance UVCB («produit de réaction») uniquement lorsque la composition du produit de réaction est insuffisamment connue ou difficilement prévisible. L'identification d'un produit de réaction est basée sur les matières de départ mises en œuvre pour la réaction et sur le processus de réaction (bio)chimique au cours duquel la substance est produite.

Exemples		
Numéro CE	Nom EINECS	Numéro CAS
294-006-2	«Nonanedioic acid, reaction products with 2-amino-2-methyl-1-propanol» (acide nonanedioïque, produits de réaction avec l'acide 2-amino-2 méthyl-2 propanol-1)	91672-02-5
294-148-5	«Formaldehyde, reaction products with diethylene glycol and phenol» (formaldéhyde, produits de réaction avec le diéthylèneglycol et le phénol)	91673-32-4

Un identifiant principal pour les produits de réaction est la description du processus de fabrication. Pour l'identification des substances, l'étape finale ou l'étape la plus pertinente du processus doit être fournie. La description du processus chimique doit être une description générique du type de processus (par exemple, estérification, hydrolyse alcaline, alkylation, chloration, substitution etc.), ainsi que les circonstances pertinentes du processus. Un processus biochimique doit être décrit par le type de réaction, ainsi que par le nom de l'enzyme qui catalyse la réaction.

Substances UVCB de sous-type 3, lorsque la source est biologique et le processus est un raffinement

Les substances UVCB d'origine biologique, résultant d'un processus de raffinement dans lequel aucune nouvelle molécule n'est produite intentionnellement peuvent être, par exemple, des extraits, des fractions d'extrait, des concentrés d'extrait, des extraits purifiés ou des résidus de substances d'origine biologique.

Dès lors qu'un extrait est soumis à un traitement ultérieur, la substance n'est plus identique à l'extrait mais devient une autre substance qui appartient à un autre sous-type de substances UVCB, par exemple, une fraction ou un résidu d'extrait. Ces substances doivent être spécifiées par d'autres paramètres de traitement (ultérieur). Si l'extrait est modifié au cours de réactions chimiques ou biochimiques, produisant de nouvelles molécules (dérivés), l'identification de la substance est couverte par les orientations applicables au sous-type 2 de substances UVCB ou les indications du chapitre 4.2 pour une substance bien définie.

Cette différenciation des extraits soumis à un traitement ultérieur peut avoir pour conséquence que le nouveau nom et la description diffèrent de ceux figurant dans l'inventaire EINECS. Au moment de l'élaboration de l'inventaire, une telle différenciation n'a pas été faite et tous les types d'extraits obtenus en utilisant des solvants et des étapes de traitement ultérieur différents peuvent avoir été couverts par une seule et même entrée.

Le premier identifiant principal pour ce sous-type de substances UVCB est la famille, le genre et l'espèce de l'organisme à partir duquel la substance est obtenue. S'il y a lieu, le tissu ou la partie de l'organisme utilisée pour l'extraction de la substance doit être précisée, par exemple, moelle osseuse, pancréas; ou tige, graines ou racines. Pour les substances d'origine microbiologique, la souche et le type génétique de l'espèce doivent être définis.

Si la substance UVCB est dérivée d'une espèce différente, elle sera considérée comme une substance différente, même si la composition chimique peut éventuellement être similaire.

Exemples

Nom CE	Nom EINECS
290-977-1	«Oxidised logwood (Haematoxylon campechianum) extract» (Campêche (Haematoxylon campechianum) oxydée, extraits) Description CE Cette substance est répertoriée dans le Colour Index sous le Colour Index Constitution Number CI 75290, oxydé.
282-014-9	«Pancreatic extracts, deproteinated» (pancréas, extraits déprotéinés)

Le second identifiant principal est le traitement de la substance, par exemple, le processus d'extraction, de fractionnement, de purification ou de concentration ou le processus influant sur la composition du résidu. Le raffinement des extraits effectué par différents processus,

par exemple, en utilisant des solvants différents ou des étapes de purification différentes, conduira donc à des substances différentes.

Plus le nombre d'étapes appliquées pour le raffinage est élevé, plus il devient possible de définir la substance par sa composition chimique. Dans ce cas, des espèces d'origines différentes ou des modifications du processus ne conduisent pas automatiquement à une substance différente.

Un paramètre d'identification principal pour les substances d'origine biologique est la description des processus pertinents. Pour les extraits, le processus d'extraction doit être décrit avec le niveau de détail pertinent pour l'identité de la substance. Il convient de spécifier au moins le solvant utilisé.

Lorsque des étapes de traitement ultérieur sont utilisées pour fabriquer la substance, telles que le fractionnement ou la concentration, la combinaison des étapes pertinentes du processus doit être décrite, par exemple, la combinaison d'une extraction et d'un fractionnement, y compris les intervalles des valeurs seuils.

Substances UVCB de sous-type 4, lorsque la source est chimique ou minérale et le processus est un raffinage

Les substances d'origine non biologique, c'est-à-dire qui sont ou qui proviennent de minéraux, de minerais, de charbon, de gaz naturel et de pétrole brut, ou d'autres matières premières utilisées dans l'industrie chimique, et résultant de processus ne comportant pas de réaction chimique intentionnelle, peuvent être des fractions (purifiées), des concentrés ou des résidus de ces processus.

Le charbon et le pétrole brut sont utilisés dans des procédés de distillation ou de gazéification pour produire des substances très diverses, par exemple, des substances pétrolières et des gaz combustibles, etc., mais aussi des résidus comme les goudrons et les scories. Très souvent, un produit distillé ou fractionné d'une autre manière est immédiatement soumis à un traitement ultérieur, y compris des réactions chimiques. Dans de tels cas, l'identification des substances doit suivre les orientations données pour le sous-type 2 de substances UVCB, étant donné que le processus est plus pertinent que la source.

Pour les substances pétrolières, un système d'identification particulier est utilisé (voir le chapitre 4.3.2.2). Les substances couvertes par ce système comprennent les fractions et les produits obtenus par réaction chimique.

D'autres substances appartenant au sous-type 4 de substances UVCB peuvent être des minerais, des concentrés de minerais et des scories contenant des quantités variables de métaux qui peuvent être extraites par traitement métallurgique.

Les minéraux, tels que la bentonite ou le carbonate de calcium peuvent être traités, par exemple, par dissolution acide et/ou précipitation chimique ou à l'aide de colonnes échangeuses d'ions. Lorsque la composition chimique est complètement définie, il convient d'identifier les minéraux conformément aux orientations données dans la partie appropriée du chapitre 4.2. Si des minéraux sont traités uniquement par des méthodes mécaniques, par exemple par broyage, tamisage, centrifugation, flottation, etc., ils sont toujours considérés comme étant les mêmes minéraux que ceux extraits. Les minéraux qui sont produits par le biais d'un processus de fabrication peuvent – aux fins de l'identification²¹ – être considérés comme identiques à leur équivalent naturel, à condition que leurs compositions soient similaires et que leurs profils de toxicité soient identiques.

Un paramètre d'identification principal pour les substances d'origine non biologique est la description de la ou des étapes pertinentes du processus.

²¹ Le fait que la démarche d'identification soit identique pour les minéraux naturels et ceux produits par voie chimique ne signifie pas nécessairement que les exigences légales (par exemple, exemptions d'enregistrement) soient identiques.

Pour les fractions, le processus de fractionnement doit être décrit par les paramètres et l'intervalle des valeurs seuils de la fraction isolée, ainsi que par une description des étapes précédentes du processus, s'il y a lieu.

Pour l'étape de concentration, le type de processus, par exemple évaporation, précipitation etc., doit être indiqué ainsi que le rapport entre la concentration de départ et la concentration finale des constituants principaux, en complément des informations sur la ou les étapes précédentes du processus.

Un paramètre d'identification principal pour les résidus d'origine non biologique est la description du processus à partir duquel le résidu est obtenu. Le processus peut être toute réaction physique qui produit des résidus, par exemple, la purification, le fractionnement ou la concentration.

«Analytical information» (données analytiques)

Dans les cas où les données spectrales apportent des informations sur la composition d'une substance UVCB, ces informations doivent être fournies. Plusieurs méthodes spectroscopiques sont utilisées pour générer des spectres (UV/Vis, infrarouge, résonance magnétique nucléaire ou spectre de masse). Les méthodes et les avis sur la façon d'utiliser ces méthodes sont en constante évolution. Il incombe donc au déclarant de présenter des données spectrales appropriées.

Un chromatogramme qui peut être utilisé comme une empreinte doit être fourni pour caractériser la composition de la substance. S'il y a lieu, d'autres techniques valides de séparation des constituants peuvent également être utilisées.

4.3.4. Types particuliers de substances UVCB

Cette section donne des orientations sur des groupes spécifiques de substances UVCB: les substances à chaîne carbonnée de longueur variable (4.3.2.1); les substances obtenues à partir du pétrole ou de sources pétrolières similaires (4.3.2.2); et les enzymes (4.3.2.3).

4.3.5. Substances à chaîne carbonnée de longueur variable

Ce groupe de substances UVCB concerne les substances comportant un groupe alkyle à longue chaîne dont la chaîne carbonnée est de longueur variable, par exemple, les paraffines et les oléfines. Ces substances sont soit dérivées de graisses ou d'huiles naturelles, soit produites par synthèse. Les graisses naturelles sont d'origine végétale ou animale. Les substances à longue chaîne carbonnée dérivées à partir de plantes ne comportent normalement que des chaînes à nombre pair d'atomes de carbone, alors que les substances à longue chaîne carbonnée obtenues à partir de sources animales comprennent également des chaînes à nombre impair d'atomes de carbone. Les substances à longue chaîne carbonnée produites par synthèse peuvent comporter tous les types de chaînes carbonnées, à nombre pair ou impair.

Identifiants et convention de désignation

Le groupe comprend des substances dont les constituants individuels ont une caractéristique structurale commune: un ou plusieurs groupes alkyle à longue chaîne, auquel est souvent lié un groupe fonctionnel. Les constituants diffèrent les uns des autres par l'une ou plusieurs des caractéristiques suivantes de la chaîne alkyle:

- o longueur de la chaîne carbonnée (nombre d'atomes de carbone)
- o Saturation
- o structure (linéaire ou ramifiée)
- o position du groupe fonctionnel

L'identité chimique des constituants peut être décrite de façon suffisante et désignée de façon systématique en utilisant les trois descripteurs suivants:

- le **descripteur d'alkyle**, qui décrit le nombre d'atomes de carbone de la ou des chaînes carbonées du ou des groupes alkyle;
- le **descripteur de fonctionnalité**, qui identifie le groupe fonctionnel de la substance, par exemple, amine, ammonium, acide carboxylique.
- le **descripteur salin**, le cation/anion caractérisant un quelconque sel, par exemple, sodium (Na⁺), carbonate (CO₃²⁻), chlorure (Cl⁻).

Descripteur d'alkyle

- Le descripteur d'alkyle C_{x-y} fait généralement référence aux chaînes d'alkyle saturées et linéaires de longueur comprise entre x et y, par exemple, C₈₋₁₂ correspond à C₈, C₉, C₁₀, C₁₁ et C₁₂.
- Il convient d'indiquer si le descripteur d'alkyle fait référence uniquement aux chaînes à un nombre pair ou impair d'atomes de carbone, par exemple, C₈₋₁₂ (nombre pair).
- Il convient d'indiquer si le descripteur d'alkyle fait référence (également) à des chaînes alkyle ramifiées, par exemple, C₈₋₁₂ (ramifiée) ou C₈₋₁₂ (linéaire et ramifiée).
- Il convient d'indiquer si le descripteur d'alkyle fait référence (également) à des chaînes alkyle insaturées, par exemple, C₁₂₋₂₂ (C₁₈ insaturé).
- Une distribution étroite des longueurs de chaîne alkyle ne couvre pas une distribution plus large, et inversement, par exemple, C₁₀₋₁₄ ne correspond pas à C₈₋₁₈.
- Le descripteur d'alkyle peut également faire référence à la source des chaînes alkyle, par exemple, coco ou suif. Cependant, la distribution de la longueur de chaîne carbonée doit correspondre à celle de la source.

Le système décrit ci-dessus doit être utilisé pour décrire les substances à chaîne carbonée de longueur variable. Il ne convient pas pour les substances bien définies, qui peuvent être identifiées par une structure chimique précise.

Les informations sur le descripteur d'alkyle, le descripteur de fonctionnalité et le descripteur salin constituent la base pour désigner ce type de substances UVCB. De plus, les informations sur la source et le processus peuvent être utiles pour identifier la substance plus précisément.

Exemples		
Descripteurs	Nom	
Descripteur d'alkyle Descripteur de fonctionnalité Descripteur salin	longueurs de chaîne alkyle C ₁₀₋₁₈ acides gras (acide carboxylique) sels de cadmium	acides gras (C ₁₀₋₁₈) sels de cadmium
Descripteur d'alkyle Descripteur de fonctionnalité Descripteur salin	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl-diméthyl ammonium chlorure	chlorure de dialkyl(C ₁₀₋₁₈)-diméthylammonium
Descripteur d'alkyle	triméthyl tallow-alkyle	chlorure de triméthyl-alkyle

Descripteur de fonctionnalité	ammonium chlorure	de suif-ammonium
Descripteur salin		

4.3.6. Substances obtenues à partir du pétrole ou de sources pétrolières similaires

Les substances obtenues à partir du pétrole (substances pétrolières) ou de sources pétrolières similaires (par exemple, le charbon) sont des substances ayant une composition très complexe et variable ou partiellement indéfinie. Dans ce chapitre, les substances pétrolières sont utilisées pour montrer comment identifier ce type particulier de substances UVCB. Cependant, la même démarche pourrait être appliquée à d'autres substances obtenues à partir de sources pétrolières similaires, comme le charbon.

Les matières de départ utilisées dans l'industrie du raffinage du pétrole peuvent être du pétrole brut, ou toute fraction de raffinage spécifique obtenue par un ou plusieurs processus. La composition des produits finaux dépend du pétrole brut utilisé pour la fabrication (la composition du pétrole brut variant en fonction de son origine géographique) et des processus de raffinage ultérieurs. Il y a donc une variation naturelle de la composition des substances pétrolières, indépendante des processus¹⁷.

1. *Convention de désignation*

Pour l'identification des substances pétrolières, il est recommandé de fournir le nom conformément à un système de nomenclature établi²². Ce nom est généralement constitué du processus de raffinage, de la source de la fraction et de sa composition ou de ses caractéristiques générales. Si la substance contient > 5 % m/m- % d'hydrocarbures aromatiques à noyaux condensés comportant de 4 à 6 cycles, cette information doit être incluse dans la description. Pour les substances pétrolières possédant un numéro EINECS, le nom donné dans l'inventaire CE doit être utilisé.

2. *Identifiants*

Les termes et définitions pour l'identification des substances pétrolières comprennent généralement la source de la fraction, le processus de raffinage, la composition générale, le nombre d'atome de carbone, l'intervalle d'ébullition ou d'autres caractéristiques physiques appropriées, ainsi que le type d'hydrocarbure prédominant²².

Les paramètres d'identification selon l'annexe VI, section 2, de REACH doivent être fournis. Il est admis que les substances pétrolières sont fabriquées selon des spécifications de performance plutôt que des spécifications relatives à leur composition. De ce fait, des caractéristiques comme le nom, l'intervalle de variation de la longueur de chaîne carbonée, le point d'ébullition, la viscosité, les valeurs seuils et d'autres propriétés physiques sont généralement plus utiles que des informations sur la composition, afin d'identifier la substance pétrolière aussi clairement que possible.

Bien que la composition chimique ne soit pas l'identifiant principal pour les substances UVCB, les constituants principaux connus ($\geq 10\%$) doivent être indiqués et la composition doit être décrite en termes génériques, par exemple, intervalle de poids moléculaire, hydrocarbures aliphatiques ou aromatiques, degré d'hydrogénation et autres informations essentielles. De plus, tout autre constituant dans une concentration plus basse ayant une inci-

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

dence sur la classification des dangers doit être identifié par son nom et sa concentration habituelle.

4.3.7. Enzymes

Les enzymes sont le plus souvent produites par fermentation de microorganismes, mais elles sont aussi parfois d'origine végétale ou animale. Le concentré enzymatique liquide, résultant de la fermentation ou de l'extraction et des étapes de purification ultérieures contient, outre de l'eau, la protéine enzymatique active et d'autres constituants tels que des résidus de fermentation, c'est-à-dire des protéines, des peptides, des acides aminés, des glucides, des lipides et des sels inorganiques.

La protéine enzymatique et les autres constituants dérivés du processus de fermentation ou d'extraction, à l'exclusion de l'eau, qui peuvent être séparés sans que cela n'affecte la stabilité de la protéine enzymatique ou ne modifie sa composition, doivent être considérés comme la substance aux fins de l'identification.

La substance enzymatique contient en général 10 à 80 % (m/m) de protéine enzymatique. Les autres constituants varient en pourcentage et dépendent de l'organisme producteur utilisé, du milieu de fermentation, et des paramètres opérationnels du processus de fermentation ainsi que de la purification appliquée en aval, mais la composition sera comprise généralement dans les intervalles indiqués dans le tableau suivant.

Protéine enzymatique active	10–80 %
Autres protéines + peptides et acides aminés	5-55 %
Glucides	3-40 %
Lipides	0-5 %
Sels inorganiques	1-45 %
Total	100 %

La substance enzymatique doit être considérée comme une substance UVCB en raison de sa variabilité et de sa composition partiellement inconnue. La protéine enzymatique doit être considérée comme un constituant de la substance UVCB. Les enzymes hautement purifiées peuvent être identifiées comme des substances de composition bien définie (monoconstituant ou multiconstituant) et doivent être identifiées comme telles.

Dans l'EINECS, l'identifiant principal des enzymes est leur activité catalytique. Les enzymes sont inscrites comme des entrées génériques sans autre spécification ou comme des entrées spécifiques indiquant l'organisme source ou le substrat.

Exemples		
Nom CE	Nom EINECS	Numéro CAS
278-547-1	«Proteinase, Bacillus neutral» (protéinase de Bacillus neutre)	76774-43-1
278-588-5	«Proteinase, Aspergillus neutral» (protéinase de Aspergillus neutre)	77000-13-6

254-453-6	«Elastase (pig pancreas)» (élastase (pancréas de porc))	39445-21-1
262-402-4	«Mannanase» (mannanase)	60748-69-8

Une étude sur les enzymes, commanditée par la Commission européenne a suggéré d'identifier les enzymes selon le système international de nomenclature des enzymes de l'IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology).²³ Cette approche est reprise dans le présent document d'orientation et permettra une identification plus systématique, détaillée et complète des enzymes par comparaison avec l'EINECS.

1. *Convention de désignation*

Les enzymes sont désignées conformément aux conventions de la nomenclature de l'IUBMB.

Le système de classification de l'IUBMB fournit un numéro unique à quatre chiffres pour chaque type d'enzyme et chaque fonction catalytique (par exemple, 3.2.1.1 pour l' α -amylase).²⁴ Chaque numéro peut comprendre des enzymes ayant une séquence d'acides aminés variable et une origine variable, mais la fonctionnalité de l'enzyme est identique. Le nom et le numéro issu de la nomenclature de l'IUBMB doivent être utilisés pour l'identification des substances. La nomenclature de l'IUBMB classe les enzymes en six groupes principaux:

1. Oxydoréductases
2. Transférases
3. Hydrolases
4. Lyases
5. Isoméras
6. Ligases

L'exemple suivant illustre une entrée conformément à la nomenclature de l'IUBMB:

CE 3.4.22.33

Nom d'usage: broméline de fruit

Réaction: hydrolyse de protéines à large spécificité pour les liaisons peptidiques. Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec est un bon substrat synthétique, mais il n'y a pas d'action sur Z-Arg-Arg-NHMec (cf. broméline de tige)

Autre(s) nom(s): broméline de jus; ananase; broméline; broméline; extranase; broméline de jus; pinase; enzyme d'ananas; traumanase; broméline de fruit FA2

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

²⁴ Les termes «numéro CE» (\equiv Enzyme Commission number) et «numéro IUBMB» sont souvent utilisés comme synonymes. Pour éviter toute confusion, il est recommandé d'utiliser le terme «numéro IUBMB» pour le code à quatre chiffres de l'IUBMB.

Commentaires: Proviens de l'ananas, *Ananas comosus*. Très peu inhibée par la cystatine de poulet. Une autre cystéine endopeptidase présentant une action similaire sur les substrats à petites molécules, la pinguinaïne (anciennement CE 3.4.99.18), est obtenue à partir de la plante, *Bromelia pinguin*, mais diffère de la broméline de fruit car elle est inhibée par la cystatine de poulet [4].²⁵ De la famille des peptidases C1²⁶ (famille de la papaine). Anciennement CE 3.4.22.5 et incluse dans CE 3.4.22.4, numéro de registre CAS: 9001-00-7

Liens vers d'autres bases de données:

[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)

Références générales:

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

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

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

Exemples de classification des enzymes conformément au système de l'IUBMB
(<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>)

Les protéases sont numérotées selon les critères suivants:

3.	Hydrolases
3.4	agissant sur les liaisons peptidiques (peptidases), avec les sous-classes:
3.4.1	α -aminoacylpeptide hydrolases (désormais inclus dans CE 3.4.11)
3.4.2	peptidyl-aminoacide hydrolases (désormais inclus dans CE 3.4.17)
3.4.3	dipeptide hydrolases (désormais inclus dans CE 3.4.13)
3.4.4	peptidyl-peptide hydrolases (désormais reclassé dans CE 3.4)
3.4.11	Aminopeptidases
3.4.12	peptidyl-aminoacid hydrolases ou acyl-aminoacid hydrolases (désormais reclassé dans CE 3.4)
3.4.13	Dipeptidases

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

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

3.4.14	dipeptidyl peptidases et tripeptidyl peptidases
3.4.15	peptidyl dipeptidases
3.4.16	carboxypeptidases de type sérine
3.4.17	métallocarboxypeptidases
3.4.18	carboxypeptidases de type cystéine
3.4.19	oméga peptidases
3.4.21	endopeptidases de sérine
	et d'autres enzymes spécifiques sont identifiées:
3.4.21.1	chymotrypsine
3.4.21.2	chymotrypsine C
3.4.21.3	métridine
3.4.21.4	trypsine
3.4.21.5	thrombine
3.4.21.6	facteur de coagulation Xa
3.4.21.7	plasmine
3.4.21.8	désormais couverte par CE 3.4.21.34 et CE 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidase
3.4.21.10	acrosine
3.4.21.11	désormais couverte par CE 3.4.21.36 et CE 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-lytique endopeptidase
...	
3.4.21.105	
3.4.99	endopeptidases de mécanisme catalytique inconnu

Nom CE	Nom EINECS	Numéro CAS	Numéro IUBMB
278-547-1	«Proteinase, Bacillus neutral» (protéinase de Bacillus neutre)	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	«Subtilisine» (subtilisine)	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	«Cellulase» (cel- lulase)	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identifiants

Les substances enzymatiques sont identifiées par la protéine enzymatique qui les contient (nomenclature de l'IUBMB) et par les autres constituants issus de la fermentation. Hormis la protéine enzymatique, chaque constituant spécifique est généralement présent dans une concentration ne dépassant pas 1 %. Si l'identité de ces constituants spécifiques n'est pas connue, ils peuvent être indiqués en utilisant une approche de regroupement (c'est-à-dire protéines, peptides, acides aminés, glucides, lipides et sels inorganiques). Cependant, les constituants doivent être indiqués si leur identité est connue et ils doivent être identifiés si leur concentration dépasse 10 % ou s'ils sont pertinents pour la classification et l'étiquetage et/ou pour l'évaluation des propriétés PBT²⁷.

Protéines enzymatiques

Les protéines enzymatiques présentes dans le concentré doivent être identifiées par:

- o Numéro IUBMB
- o leurs noms selon la nomenclature de l'IUBMB (nom systématique, noms de l'enzyme, synonymes)
- o Noms donnés par l'IUBMB
- o la réaction et le type de réaction
- o le numéro et le nom CE, s'il y a lieu
- o le numéro et le nom CAS, si disponibles.

La réaction induite par l'enzyme doit être spécifiée. Cette réaction est définie par l'IUBMB.

Exemple

.alpha.-amylase: polysaccharide contenant des unités glucose liées par liaisons alpha.-(1-4) + H₂O = maltooligosaccharides; endohydrolyse des liaisons 1,4-alpha.-d-glucosidiques dans des polysaccharides contenant au moins trois unités d-glucose liées par liaisons 1,4-alpha..

Selon la classe d'enzyme, un type de réaction doit être attribué: oxydation, réduction, élimination, addition ou nom de la réaction.

²⁷ Des informations supplémentaires sur l'évaluation des propriétés PBT et les critères pertinents figurent dans le *Guide sur les exigences d'information et l'évaluation de la sécurité chimique, Chapitre R11: Évaluation des propriétés PBT.*

Exemple

.alpha.-amylase: hydrolyse de la liaison O-glycosyl (endohydrolyse).

Constituants autres que les protéines enzymatiques

Tous les constituants présents dans des concentrations ≥ 10 % (m/m) ou pertinents pour la classification et l'étiquetage et/ou pour l'évaluation²⁸ des propriétés PBT doivent être identifiés. L'identité des constituants présents dans des concentrations inférieures à 10 % peut être indiquée sous forme de groupe chimique. Leur(s) concentration(s) habituelle(s) ou les intervalles de concentration doivent être précisés. Il s'agit des:

- o (Glyco)protéines
- o Peptides et acides aminés
- o Glucides
- o Lipides
- o Matières inorganiques (par exemple, chlorure de sodium ou autres sels inorganiques)

S'il n'est pas possible d'identifier les autres constituants d'un concentré enzymatique de façon suffisante, le nom de l'organisme producteur (genre et souche ou type génétique s'il y a lieu) doit être indiqué, comme pour les autres substances UVCB d'origine biologique.

S'ils sont disponibles, des paramètres supplémentaires peuvent être fournis, par exemple, les paramètres fonctionnels (c'est-à-dire les valeurs optimales et les intervalles de pH ou de température), les paramètres cinétiques (c'est-à-dire l'activité spécifique ou le nombre de cycles), les ligands, les substrats, les produits et les cofacteurs.

²⁸ Des informations supplémentaires sur l'évaluation des propriétés PBT et les limites de concentration pertinentes figurent dans le projet de mise en œuvre de REACH, Guide technique 3.2: Évaluation de la sécurité chimique, section sur l'évaluation des propriétés PBT.

5. Critères permettant de déterminer si des substances sont identiques

Pour vérifier si les substances provenant de différents fabricants/importateurs peuvent ou non être considérées comme identiques, il convient de respecter certaines règles. Ces règles qui ont été appliquées dans la mise en place d'EINECS doivent être considérées comme la base d'identification et de désignation d'une substance et donc dans la recherche d'un codéclarant potentiel de cette substance en particulier^{5, 6, 16, 29, 30}. Les substances qui ne sont pas considérées comme étant identiques peuvent toutefois être considérées comme ayant une parenté structurelle, après jugement expert. Un partage de données peut, néanmoins, être possible pour ces substances si cela est justifié scientifiquement. Cependant, ce n'est pas l'objet du présent document d'orientation et il convient de se reporter au *Guide technique: partage des données*.

- La règle des « $\geq 80\%$ » pour les substances monoconstituant et la règle des « $< 80\%/\geq 10\%$ » pour les substances multiconstituant doivent être appliquées.

Aucune distinction n'a été établie entre les qualités technique, pure ou analytique des substances. Cela signifie que les substances «identiques» peuvent avoir un profil de pureté/impureté différent selon sa qualité. Cependant, les substances bien définies doivent contenir le ou les mêmes constituants principaux et les seules impuretés permises sont celles dérivées du processus de production (pour plus de détails, voir le chapitre 4.2) et les additifs nécessaires pour stabiliser la substance.

- Les formes hydratées et anhydres des composés doivent être considérées comme une même substance aux fins de l'enregistrement.

Exemples			
Nom et formule	Numéro CAS	Nom CE	Règle
«Copper sulphate» (sulfate de cuivre) (Cu. H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
«Sulphuric acid copper(2+) salt (1:1), pentahydrate» (sel (1:1) sulfate de cuivre (II) pentahydraté) (Cu.H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Cette substance est couverte par un enregistrement de sa forme anhydre (numéro CE: 231-847-6)

Les formes hydratées et anhydres possèdent des noms chimiques différents et des numéros CAS différents.

- Les acides ou les bases et leurs sels doivent être considérés comme des substances différentes.

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

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

Exemples		
Nom CE	Nom	Règle
201-186-8	«Peracetic acid» (acide peracétique) C ₂ H ₄ O ₃	Cette substance ne doit pas être considérée comme identique à son sel de sodium (EINECS 220-624-9), par exemple.
220-624-9	«Sodium glycollate» (glycolate de sodium) C ₂ H ₄ O ₃ . Na Na	Cette substance ne doit pas être considérée comme identique à son acide correspondant (EINECS 201-186-8).
202-426-4	«2-Chloroaniline» (2-chloroaniline) C ₆ H ₆ ClN	Cette substance ne doit pas être considérée comme identique au bromhydrate de 2-chloroaniline (1:1) (C ₆ H ₆ ClN . HBr) par exemple.

- Les sels individuels (par exemple, de sodium ou de potassium) doivent être considérés comme des substances différentes.

Exemples		
Nom CE	Nom	Règle
208-534-8	«Sodium benzoate» (benzoate de sodium) C ₇ H ₅ O ₂ . Na	Cette substance ne doit pas être considérée comme identique à son sel de potassium (EINECS 209-481-3), par exemple.
209-481-3	«Potassium benzoate» (Benzoate de potassium) C ₇ H ₅ O ₂ . K	Cette substance ne doit pas être considérée comme identique à son sel de sodium (EINECS 208-534-8), par exemple.

- Les chaînes alkyle ramifiées ou linéaires doivent être considérées comme des substances différentes.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
295-083-5	«Phosphoric acid, dipentyl ester, branched and linear» (acide phosphorique, ester de dipentyle, ramifié et linéaire)	Cette substance ne doit pas être considérée comme identique aux substances individuelles ester dipentylique (ramifié) de l'acide phosphorique, ou ester dipentylique (linéaire) de l'acide phosphorique.

- Les groupes ramifiés doivent être mentionnés comme tels dans le nom. Les substances contenant des groupes alkyle sans autres informations couvrent uniquement les chaînes linéaires non ramifiées, sauf indication contraire.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
306-791-1	«Fatty acids, C12-16» (acides gras en C12-16)	Seules les substances ayant des groupes alkyle linéaires et non ramifiés sont considérées comme une même substance.
279-420-3	«Alcohols, C12-14» (alcools en C12-14)	
288-454-8	«Amines, C12-18-alkylmethyl» (amines, alkyl en C12-18 méthyles)	

- Les substances ayant des groupes alkyle complétés d'un terme comme iso, néo, ramifié etc., ne doivent pas être considérées comme identiques aux substances exemptes de cette spécification.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
266-944-2	Glycérides, C ₁₂₋₁₈ Cette substance est répertoriée sous le SDA Substance Name: «C12-C18 trialkyl glyceride» et le SDA Reporting Number: 16-001-00	Cette substance ne sera pas considérée comme identique à C _{12-18-iso} Substance avec des chaînes alkyle saturées qui sont ramifiées à n'importe quelle position

- Sans indication explicite, les chaînes alkyle contenues dans les acides ou les alcools, etc. doivent être considérées comme représentant uniquement les chaînes saturées. Les chaînes insaturées doivent être spécifiées comme telles et sont considérées comme des substances différentes.

Exemples

Numéro CE	Nom	Règle
200-313-4	«Stearic acid, pure» (acide stéarique) C ₁₈ H ₃₆ O ₂	Cette substance ne doit pas être considérée comme identique à l'acide oléique pur, C ₁₈ H ₃₄ O ₂ (EINECS 204-007-1).

- Substances à centre chiral

Une substance possédant un centre chiral peut exister sous formes lévogyre et dextrogyre (énantiomères). En l'absence d'indication contraire, il est admis qu'une substance est un mélange racémique (à parts égales) des deux formes.

Exemples

Numéro CE	Nom	Règle
201-154-3	«2-chloropropan-1-ol» (2-chloropropane-1-ol)	Les énantiomères (R)-2-chloropropan-1-ol et (S)-2-chloropropan-1-ol ne sont pas considérés comme équivalents à cette entrée.

Lorsqu'une substance a été enrichie en une seule forme énantiomérique, les règles des substances multiconstituant s'appliquent. De même, les mélanges racémiques sont considérés comme des substances multiconstituant.

Les substances ayant plusieurs centres chiraux peuvent exister en 2ⁿ formes (n étant le nombre de centres chiraux). Ces différentes formes peuvent avoir des propriétés physico-chimiques, toxicologiques et/ou écotoxicologiques différentes. Elles doivent être considérées comme des substances distinctes.

- Catalyseurs inorganiques

Les catalyseurs inorganiques sont considérés comme des mélanges. Aux fins de l'identification, les métaux ou les composés métalliques doivent être considérés comme des substances individuelles (sans indication de leur usage).

Exemples		
	Nom	Règle
	Catalyseur à base d'oxyde de cobalt et d'oxyde d'aluminium	Doit faire l'objet d'identifications distinctes: - oxyde de cobalt II - oxyde de cobalt III - oxyde d'aluminium - oxyde d'aluminium et de cobalt

- Les concentrés enzymatiques ayant le même numéro IUBMB peuvent être considérés comme une même substance, en dépit du fait que des organismes producteurs différents sont utilisés, à condition que les propriétés dangereuses ne diffèrent pas de façon significative et correspondent à la même classification.

Substances multiconstituants

La directive 67/548/CEE réglementait la mise sur le marché de la substance. La façon dont la substance était produite n'était pas concernée. Une substance multiconstituant mise sur le marché était donc couverte par l'EINECS, si *tous* ses constituants figuraient dans l'inventaire EINECS; par exemple, le mélange isomérique de difluorobenzènes était couvert par les entrées EINECS 1,2-difluorobenzène (206-680-7), 1,3-difluorobenzène (206-746-5) et 1,4-difluorobenzène (208-742-9), bien que le mélange isomérique lui-même ne figurât pas dans l'inventaire EINECS.

Le règlement REACH requiert quant à lui l'enregistrement de la substance fabriquée. Il convient d'établir au cas par cas dans quelle mesure les différentes étapes de production de la substance sont couvertes par la définition du terme «fabrication» (par exemple, des étapes de purification ou de distillation différentes). Si une substance multiconstituant est produite, elle doit être enregistrée (à moins qu'elle ne soit couverte par un enregistrement des constituants individuels, voir le chapitre 4.2.2.4); par exemple, le mélange isomérique de difluorobenzènes est produit, donc le «difluorobenzène», en tant que mélange isomérique, doit être enregistré. Cependant, pour les substances multiconstituant, il n'est pas nécessaire de soumettre la substance telle quelle à des essais, si le profil de risque de la substance peut être suffisamment décrit par les informations sur les constituants individuels. Si les isomères individuels 1,2-difluorobenzène, 1,3-difluorobenzène et 1,4-difluorobenzène sont produits et ensuite mélangés, les isomères individuels doivent être enregistrés et le mélange isomérique est alors considéré comme un mélange.

Une substance multiconstituant ayant comme constituants principaux A, B et C ne doit pas être considérée comme identique à une substance multiconstituant ayant comme constituants principaux A et B ou à une masse de réaction de A, B, C et D.

- Une substance multiconstituant n'est pas considérée comme équivalente à une substance qui ne contient qu'une partie des constituants de la première.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
207-205-6	«2,5-Difluorotoluène» (2,4-difluorotoluène)	Ces deux substances ne sont pas considérées comme

207-211-9	«2,4-Difluorotoluene» (2,4-difluorotoluène)	identiques au mélange isomérique de difluorotoluènes parce que ces deux substances ne correspondent qu'à une partie de tous les isomères possibles.
-----------	---	---

- L'enregistrement d'une substance multiconstituant ne couvre pas ses constituants individuels.

Exemples

Numéro CE	Nom	Règle
208-747-6	«1,2-Dibromoethylene» (1,2-dibromoéthylène)	Cette substance décrit un mélange d'isomères cis et trans. Les substances individuelles (1Z)-1,2-dibromoéthène et (1E)-1,2-dibromoéthène ne sont pas couvertes par l'enregistrement du mélange isomérique.

Substances UVCB

- Une substance UVCB présentant une distribution étroite de ses constituants n'est pas considérée comme équivalente à une substance UVCB ayant une composition plus large, et inversement.

Exemples

Numéro CE	Nom	Règle
288-450-6	«Amines, C12-18-alkyl, acetates» (amines alkyle en C12-18, acétates)	Les substances «amines, C12-14-alkyl, acetates» ou «amines, C12-20-alkyl, acetates» ou «amines, dodécyl (C12-alkyl), acetates» ou les substances n'ayant que des chaînes alkyle à nombre pair d'atomes de carbone ne sont pas considérées comme équivalentes à cette substance.

- Une substance qui est caractérisée par une espèce/un genre n'est pas considérée comme identique à une substance isolée d'une autre espèce/d'un autre genre.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
296-286-1	«Glycerides, sunflower-oil di-» (glycérides d'huile de tournesol, di-)	Cette substance n'est pas considérée comme identique à Glycérides, soya di- (EINECS: 271-386-8), ni comme identique à Glycérides, tallow di- (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	«Linseed oil, epoxidized» (huile de lin époxydée)	Cette substance n'est pas considérée comme identique à l'huile de lin époxydée (EINECS: 272-038-8), ni comme identique à l'huile de lin maléatée (EINECS: 268-897-3), ni comme identique à l'huile de ricin époxydée (non listée dans EINECS).

- Un extrait purifié ou un concentré est considéré comme une substance différente de l'extrait.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
232-299-0	«Rape oil» (huile de colza) Extraits et leurs dérivés physiquement modifiés. Consiste principalement des glycérides des acides gras érucique, linoléique et oléique. (Brassica napus, Cruciferae)	La substance «acide (Z)-docos-13-énoïque (acide érucique)» est un constituant de la substance «huile de colza». L'acide érucique n'est pas considéré comme identique à l'huile de colza car il est isolé comme substance pure à partir de l'huile de colza. L'acide érucique possède sa propre entrée EINECS (204-011-3). Un mélange isolé constitué d'acide palmitique, d'acide oléique, d'acide linoléique, d'acide linoléique, d'acide linoléique, d'acide érucique et d'acide eicosénoïque n'est pas considéré comme identique à l'huile de colza, car ces constituants ne représentent pas la totalité de l'huile.

6. Identité de la substance dans le cadre d'un enregistrement préalable (tardif) et d'une demande

Des indications sur la façon d'identifier et de désigner les substances sont fournies au chapitre 4 du présent document d'orientation. Il convient de suivre ces indications pour déterminer si les substances peuvent être considérées comme étant identiques aux fins de REACH et du CLP. Le présent chapitre apporte ci-dessous des précisions supplémentaires en ce qui concerne l'enregistrement préalable (tardif) des substances bénéficiant d'un régime transitoire et la demande d'information sur les substances ne bénéficiant pas d'un régime transitoire.

Conformément à l'article 4, tout fabricant ou importateur peut, tout en restant pleinement responsable du respect des obligations qui lui incombent au titre du règlement REACH, désigner un représentant tiers pour accomplir toutes les procédures visées au titre III pour lesquelles des consultations avec d'autres fabricants ou importateurs sont nécessaires.

6.1. Enregistrement préalable (tardif)

Le processus d'enregistrement préalable (tardif) a pour objet de mettre en relation les déclarants potentiels d'une même substance, afin d'éviter la duplication des études, en particulier des essais sur des animaux vertébrés. L'enregistrement préalable (tardif) ne s'applique qu'aux substances bénéficiant d'un régime transitoire.

Des informations supplémentaires sur l'enregistrement préalable (tardif) et les personnes qui peuvent encore en bénéficier figurent dans le *Guide technique: partage des données* à l'adresse <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach> et sur la page suivante consacrée à cet effet sur le site internet de l'ECHA: <http://echa.europa.eu/regulations/reach/registration/data-sharing/pre-registration>.

6.2. Demande

Pour les substances ne bénéficiant pas d'un régime transitoire, ou les substances bénéficiant d'un régime transitoire qui n'ont pas été préenregistrées, le déclarant potentiel est tenu de s'adresser à l'Agence, avant l'enregistrement, pour savoir si un enregistrement a déjà été soumis pour la substance en question (article 26 de REACH). Cette demande doit contenir:

- l'identité du déclarant potentiel, conformément à l'annexe VI, section 1, du règlement REACH, à l'exception des sites d'utilisation;
- l'identité de la substance, conformément à l'annexe VI, section 2, du règlement REACH;
- des précisions concernant les exigences en matière d'information qui contraindraient le déclarant potentiel à réaliser de nouvelles études requérant des essais sur des animaux vertébrés;
- des précisions concernant les exigences en matière d'information qui contraindraient le déclarant potentiel à réaliser de nouvelles études.

Le déclarant potentiel doit fournir l'identité et le nom de la substance conformément aux règles énoncées au chapitre 4 du présent document d'orientation.

L'Agence doit établir si la même substance a déjà été enregistrée, en appliquant également les règles énoncées au chapitre 4 du présent document d'orientation. Le résultat est communiqué au déclarant potentiel et tout déclarant précédent ou tout autre déclarant potentiel en sont informés.

Des informations supplémentaires sur le processus de demande figurent dans le *Guide technique: partage des données* et sur la page dédiée du site internet de l'ECHA à

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

7. Exemples

Les exemples donnés dans les pages suivantes visent uniquement à illustrer la manière dont l'utilisateur peut éventuellement appliquer les orientations fournies dans le présent document d'orientation. Ils ne constituent en aucun cas des références pour l'interprétation des obligations liées à REACH.

Les exemples suivants sont inclus:

- Le «peroxydicarbonate de diéthyle» est un exemple de substance monoconstituant comprenant un solvant qui agit également comme agent stabilisateur (voir le chapitre 7.1).
- La «zolimidine» est un exemple de substance qui pourrait être identifiée comme substance monoconstituant ou comme substance multiconstituant (voir le chapitre 7.2).
- Un «mélange d'isomères» formé au cours de la réaction de fabrication est proposé comme exemple de substance multiconstituant (voir le chapitre 7.3). Cette substance était précédemment couverte par les entrées EINECS des isomères individuels.
- «Fragrance AH» est un exemple de substance produite avec des qualités différentes, qui peut être décrite par une masse de réaction de cinq constituants ayant différents intervalles de concentration (chapitre 7.4). C'est également un exemple d'écart justifié par rapport à la règle des 80 % et à la règle des 10 %.
- Des «minéraux» non métalliques, notamment la montmorillonite comme exemple de substance bien définie requérant une caractérisation physique supplémentaire, sont inclus au chapitre 7.5.
- Une «huile essentielle de lavandula» est un exemple de substance UVCB obtenue à partir de plantes (chapitre 7.6).
- L'«huile de chrysanthème et les isomères isolés de celle-ci» est un exemple de substance UVCB d'origine biologique, qui est soumis à un traitement ultérieur (chapitre 7.7).
- Le «phosphate de phénol isopropylé» est un exemple de substance UVCB variable, qui ne peut pas être complètement définie (chapitre 7.8).
- Les «composés d'ammonium quaternaire» sont des exemples de substances à chaîne carbonée de longueur variable (chapitre 7.9).
- Deux exemples de «substances pétrolières», un mélange d'essences et des gazoles, sont inclus au chapitre 7.10.
- Deux exemples illustrant l'identification d'enzymes, la laccase et l'amylase, sont donnés au chapitre 7.11.

7.1. Peroxydicarbonate de diéthyle

La substance «diethyl peroxydicarbonate» (peroxydicarbonate de diéthyle) (CE 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) est produite sous forme d'une solution à 18 % dans l'isododécane (CE 250-816-8, CAS 31807-55-3). L'isododécane agit également comme agent stabilisateur vis-à-vis des propriétés explosives. La concentration la plus élevée possible qui garantit une manipulation sans danger de la substance correspond à une solution à 27 %.

Comment la substance décrite ci-dessus doit-elle être identifiée et désignée pour l'enregistrement?

Selon la définition des substances dans REACH, les solvants qui peuvent être séparés sans affecter la stabilité de la substance ou modifier sa composition doivent être exclus. Dans le cas ci-dessus, l'isododécane agit également comme agent stabilisateur et ne peut pas être totalement séparé en raison des propriétés explosives de la substance. L'isododécane doit donc être considéré comme un additif et pas seulement comme un solvant. Cependant la substance doit malgré tout être considérée comme une substance monoconstituant. Par

conséquent, la substance doit être enregistrée comme la solution ayant la concentration en isododécane la plus élevée qui garantit une manipulation sans danger:

peroxydicarbonate de diéthyle (limite de concentration supérieure: 27 %). L'isododécane doit être indiqué dans la rubrique «additifs» et la fonction stabilisatrice doit être spécifiée.

7.2. ZOLIMIDINE

La solution méthanolique fabriquée contient «zolimidine» (CE 214-947-4; CAS 1222-57-7, C₁₄H₁₂N₂O₂S) et «imidazole»(CE 206-019-2; CAS 288-32-4, C₃H₄N₂). Après élimination du solvant «méthanol» et optimisation du processus de fabrication, la substance présente une gamme de pureté allant de 74 à 86 % de zolimidine et de 4 à 12 % d'imidazole.

Comment la substance décrite ci-dessus doit-elle être identifiée et désignée pour l'enregistrement?

Selon la définition des substances dans REACH, les solvants qui peuvent être séparés sans affecter la stabilité de la substance ou modifier sa composition doivent être exclus. Comme dans le cas précédent, le méthanol peut être séparé sans aucune difficulté; c'est la substance sans solvant qui doit être enregistrée.

En règle générale, une substance est considérée comme substance monoconstituant, si un constituant principal est présent dans une concentration ≥ 80 %. Une substance est considérée comme substance multiconstituant, si plusieurs constituants principaux sont présents dans des concentrations ≥ 10 % et < 80 %. L'exemple ci-dessus est un cas limite, car les valeurs seuils sont dépassées. La substance peut donc éventuellement être considérée comme une substance monoconstituant «zolimidine» ou comme une substance multiconstituant, une masse de réaction de «zolimidine» et d'«imidazole».

Dans un tel cas limite, la concentration habituelle des constituants principaux de la substance peut être utilisée pour décider de la meilleure façon de décrire cette substance parmi les suivantes:

(1) si la concentration habituelle de zolimidine est de 77 % et la concentration habituelle d'imidazole est de 11 %, il est recommandé de considérer la substance comme une masse de réaction de zolimidine et d'imidazole;

(2) si la concentration habituelle de zolimidine est de 85 % et la concentration habituelle d'imidazole est de 5 %, il est recommandé de considérer la substance comme une substance monoconstituant «zolimidine».

7.3. Mélange d'isomères

La substance concernée est un mélange (masse de réaction) de deux isomères formés au cours de la réaction de fabrication. Chacun des isomères a été répertorié dans l'EINECS. La directive 67/548/CEE réglementait la mise sur le marché de la substance. La façon dont la substance était produite n'était pas prise en compte, le mélange était couvert par les entrées EINECS des deux isomères individuels. Le règlement REACH requiert l'enregistrement des substances fabriquées. Il convient d'établir au cas par cas dans quelle mesure les différentes étapes de production de la substance sont couvertes par la définition du terme «fabrication». Si le mélange d'isomères est enregistré comme une substance multiconstituant (selon les orientations du chapitre 4.2.2), il n'est pas nécessaire de soumettre la substance telle quelle à des essais, si le profil de risque de la substance peut être suffisamment décrit par les informations sur les constituants individuels. Cependant, il convient de se référer aux entrées EINECS des isomères individuels pour démontrer le statut de régime transitoire de la substance.

1. Nom et autres identifiants

Exemples	
Nom IUPAC ou autre nom chimique international (de la substance)	Masse de réaction de 2,2'-[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol et 2,2'-[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol
Autres noms (de la substance)	2,2'-[[méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol masse de réaction de 2,2'-[[méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol et d'eau composé isomérique de 2,2'-[[méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol (9CI)
Numéro CE (de la substance) Nom CE Description CE	Il n'existe pas de numéro CE pour le mélange, comme le mélange n'était pas répertorié dans l'EINECS. Cependant, la substance était couverte par les entrées EINECS des constituants (279-502-9, 279-501-3). Par conséquent, le mélange doit être considéré comme une substance bénéficiant d'un régime transitoire.
Numéro CAS (de la substance) Intitulé du CAS	Non disponible Non disponible
Numéro CE (constituant A) Nom CE Description CE	279-502-9 2,2'-[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol /
Numéro CE (constituant B) Nom CE Description CE	279-501-3 2,2'-[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol /
Numéro CAS (constituant A) Intitulé du CAS	80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis-
Numéro CAS (constituant B) Intitulé du CAS	80584-88-9 Ethanol, 2,2'-[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis-
Autre code d'identité Référence	Numéro ENCS 5-5917

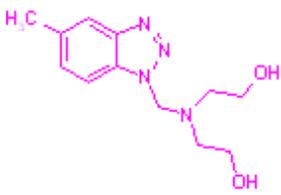
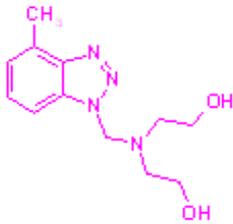
2. Informations sur la composition – constituants principaux

Constituants principaux						
	Intitulé de l'IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Formule moléculaire selon Hill	Concentration habituelle (% m/m)	Intervalle de concentration (% m/m)
A	Ethanol, 2,2'-[[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	Ethanol, 2,2'-[[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Constituants principaux	
Autre noms	
A	2,2'-[[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol
B	2,2'-[[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol

Constituants principaux		
	Nom CE	Description CE
A	2,2'-[[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol	/
B	2,2'-[[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]biséthanol	/

Constituants principaux		
	Intitulé du CAS	Numéro CAS
A	Ethanol, 2,2'-[[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis-	80584-89-0
B	Ethanol, 2,2'-[[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis-	80584-88-9

Constituants principaux			
	Formule moléculaire méthode du CAS	Formule structurale	Code SMILES
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Constituants principaux		
	Poids moléculaire [g.mol ⁻¹]	Gamme de poids moléculaire
A	250	/
B	250	/

7.4. Fragrance AH

Fragrance AH est constituée de gamma (iso-alpha) méthylionone et de ses isomères. Cette substance est produite en trois qualités différentes (qualité A, B et C), pour lesquelles le ratio des isomères est différent.

Le tableau suivant donne un aperçu de la composition des différentes qualités.

Composition des différentes qualités de Fragrance AH				
Intervalle de concentration [%]	Qualité A	Qualité B	Qualité C	Intervalle total
gamma (iso-alpha) méthylionone	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (iso-béta) méthylionone	6 - 10	3 - 7	37	3 - 10
alpha n-méthylionone	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma n-méthylionone	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
béta n-méthylionone	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5-15
pseudo méthylionones	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Plusieurs options sont possibles pour l'identification des substances:

- La qualité A contient au moins 80 % de l'isomère gamma (iso-alpha) méthylionone et pourrait de ce fait être considérée comme une substance monoconstituant basée sur l'isomère gamma (iso-alpha) méthylionone, avec les autres isomères comme impuretés.
- Les qualités B et C contiennent moins de 80 % de l'isomère gamma (iso-alpha) méthylionone et ≥ 10 % des autres isomères. Elles pourraient donc être considérées comme des substances multiconstituant:
 - La qualité B: comme une masse de réaction de gamma(iso-alpha) méthylionone (65-75 %) et d'alpha-n méthylionone (10-20 %) avec les autres isomères comme impuretés.
 - La qualité C: comme une masse de réaction de gamma(iso-alpha) méthylionone (50-60 %) et d'alpha-n méthylionone (20-30 %) avec les autres isomères comme impuretés.

La composition est variable et un isomère est parfois présent dans une concentration ≥ 10 % (il devrait donc normalement être appelé «constituant principal») et parfois dans une concentration < 10 % (il devrait donc normalement être appelé «impureté»).

Il serait possible d'enregistrer les différentes qualités séparément. Ceci impliquerait trois enregistrements. Cependant, des références croisées de données peuvent être justifiées.

Il est également possible de considérer:

- Un enregistrement comme substance monoconstituant avec deux sous-qualités. Dans ce cas, les sous-qualités s'écartent de la règle des 80 % (voir le chapitre 4.2.1).

- Un enregistrement comme masse de réaction définie de cinq isomères (substance multiconstituant). Dans ce cas, certains isomères (constituants principaux) s'écartent de la règle des 10 % qui fait la distinction entre les constituants principaux et les impuretés (voir le chapitre 4.2.2).
- Un enregistrement comme masse de réaction définie, dont la variabilité de la composition est couverte par tous les intervalles de concentration des différents isomères.

Il peut être important de prendre en compte que:

- Les trois qualités ont des propriétés physicochimiques identiques ou très similaires.
- Les trois qualités ont une utilisation et des scénarios d'exposition similaires.
- Toutes les qualités ont les mêmes classification et étiquetage des dangers et les contenus des fiches de données de sécurité et des rapports sur la sécurité chimique sont identiques.
- Les données d'essais disponibles (et les essais futurs) couvrent la variabilité des trois qualités.

Dans cet exemple, l'identification de la substance comme masse de réaction définie de cinq isomères (substance multiconstituant) est décrite. Une justification est nécessaire du fait de l'écart par rapport à la règle des 80 % (voir le chapitre 4.2.1) et à la règle des 10 % (voir le chapitre 4.2.2). Étant donné que chaque qualité est produite telle quelle, la composition de chacune des trois qualités doit être spécifiée dans le dossier d'enregistrement. Cependant, dans les conditions formelles, au moins deux enregistrements pourraient être nécessaires: (1) gamma (iso-alpha) méthylionone et (2) masse de réaction de gamma (iso-alpha) méthylionone et d'alpha-n-méthylionone.

Identification de la substance

Fragrance AH est produite en trois différentes qualités (A, B et C) ayant des compositions identiques qualitativement mais différentes quantitativement. Les trois qualités sont décrites dans un même dossier d'enregistrement d'une substance multiconstituant. Bien que ceci implique que la règle des 80 % et la règle des 10 % ne soient pas appliquées strictement, l'enregistrement comme substance multiconstituant est justifié, car (1) les données d'essais disponibles couvrent la variabilité des trois qualités, (2) les trois qualités ont des propriétés physicochimiques très proches, (3) toutes les qualités ont les mêmes classification et étiquetage des dangers (les fiches de données de sécurité sont donc identiques), et (4) les trois qualités ont une utilisation et des scénarios d'exposition similaires (par conséquent des rapport sur la sécurité chimique similaires).

1. Nom et autres identifiants

Identification de la substance	
Nom IUPAC ou autre nom chimique international	Reaction mass of 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; [R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one 1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-ten-3-one

Autres noms	gamma méthylionone, Qualité A gamma méthylionone, Qualité B gamma méthylionone, Qualité C
Numéro CE	Non disponible
Nom CE	/
Description CE	/
Numéro CAS	Non disponible
Intitulé du CAS	/

2. Informations sur la composition– constituants principaux

En théorie, d'autres énantiomères sont possibles. Cependant, les isomères suivants ont été analysés:

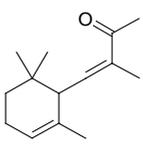
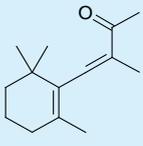
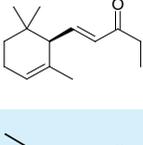
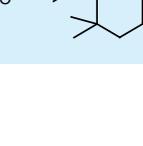
Constituants principaux						
	Intitulé de l'IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Formule moléculaire selon Hill	Concentration minimale (% m/m)	Concentration maximale (% m/m)
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	127-51-5	204-846-3	C14H22O	50	85
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	79-89-0	201-231-1	C14H22O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
D	1-(6,6-methyl-2-méthylencyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one	Non disponible	Non disponible	C14H22O	0,5	4
E	1-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-ène-3-one	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

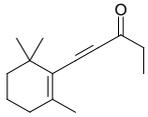
Constituants principaux	
Autres noms	
A	alpha-iso-méthylionone; gamma méthylionone
B	béta-iso-méthylionone; delta méthylionone
C	alpha-n-méthylionone
D	gamma-n-méthylionone
E	béta-n-méthylionone

Constituants principaux		
	Nom CE	Description CE
A	(3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one)	/
B	(3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one)	/
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one	/
D	1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-ène-3-one	/
E	1-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-ène-3-one	/

Constituants principaux		
	Intitulé du CAS	Numéro CAS
A	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	127-51-5
B	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	79-89-0
C	1-Penten-3-one, 1-[(1R)-2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl]-, (1E)-	127-42-4
D	Non disponible	Non disponible
E	1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	127-43-5

Constituants principaux		
	Autre code d'identité	Référence
A	2714. 07.036	FEMA EU Flavour Register
B	07.041	EU Flavour Register
C	2711 07.009	FEMA EU Flavour Register
D	Non disponible	Non disponible
E	2712 07.010	FEMA EU Flavour Register

Constituants principaux			
	Formule moléculaire Méthode CAS	Formule structurale	Code 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
----------	-----------------------------------	---	------------------------------

Constituants principaux

	Poids moléculaire / g.mol ⁻¹	Gamme de poids moléculaire
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Informations sur la composition – impuretés et additifs

Impuretés

	Intitulé de l'IUPAC	Numéro CAS	Nom CE	Formule moléculaire	Concentration habituelle (% m/m)	Intervalle de concentration (% m/m)
F						
Nombre d'impuretés non spécifiées: Concentration totale d'impuretés non spécifiées:				11 (pseudo méthylionones) 0,5 -3 % m/m		

«Additives» (additifs)

	Intitulé de l'IUPAC	Numéro CAS	Nom CE	Formule moléculaire	Concentration habituelle (% m/m)	Intervalle de concentration (% m/m)

G	Butylated Hydroxytoluene (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0,1	0,05 – 0,15
----------	--------------------------------	----------	-----------	---------	-----	-------------

4. Informations sur les différentes qualités

Le tableau ci-dessous indique les intervalles de concentration des cinq constituants principaux présents dans chacune des trois qualités :

Intervalle de concentration [%]	Qualité A	Qualité B	Qualité C
gamma (iso-alpha) méthylionone	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (iso-béta) méthylionone	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alpha n-méthylionone	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-méthylionone	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4
béta n-méthylionone	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo méthylionones	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Minéraux

Un minéral est défini comme étant une combinaison de constituants inorganiques tels que ceux que l'on trouve dans la croûte terrestre, avec un ensemble caractéristique de compositions chimiques, de formes cristallines (allant de fortement cristallines à amorphes) et de propriétés physicochimiques.

Les minéraux sont exemptés d'enregistrement, s'ils répondent à la définition de «substances présentes dans la nature» (*article 3, paragraphe 39*, de REACH) et s'ils sont non modifiés chimiquement (*article 3, paragraphe 40*, de REACH). Cela s'applique aux minéraux dont la structure chimique demeure inchangée, même s'ils ont été soumis à un processus ou à un traitement chimique ou à un processus physique de transformation minéralogique, par exemple pour éliminer les impuretés.

Si certains minéraux peuvent être décrits uniquement par leur composition chimique (voir les chapitres 4.2.1 et 4.2.2 pour les substances monoconstituant et multiconstituant), d'autres ne peuvent pas être identifiés par leur seule composition chimique (voir le chapitre 4.2.3).

Pour de nombreux minéraux, contrairement à d'autres substances monoconstituant ou multiconstituant, l'identification doit être basée sur leur composition chimique et leur structure interne (déterminée par exemple par diffraction des rayons X), parce que celles-ci représentent l'essence du minéral et déterminent ses propriétés physicochimiques.

Comme pour d'autres substances multiconstituant, le numéro CAS du minéral doit faire partie de l'identification (c'est-à-dire la combinaison des constituants inorganiques). Les numéros CAS des constituants inorganiques (tels que définis par la minéralogie systématique)

sont utilisés pour décrire les différents constituants. Si un constituant inorganique individuel est produit (substance monoconstituant), le numéro CAS de cette substance doit être utilisé pour l'identification de la substance. Par exemple:

- Le kaolin minéral (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) est principalement composé de kaolinites primaires et secondaires (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7) qui est une argile aluminosilicate hydratée.

Dans le cas où un processus de raffinement est appliqué au kaolin pour produire un seul constituant, la kaolinite par exemple, le numéro CAS/EINECS de la substance serait EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Le bentonite minéral (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) qui est décrit dans EINECS comme «une argile colloïdale». Constitué principalement de la «montmorillonite» contient un taux élevé du constituant inorganique, la montmorillonite (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) mais pas uniquement.

En cas de production de montmorillonite pure (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), le numéro CAS devant être utilisé pour identifier la substance est celui de la montmorillonite.

Il est important de souligner le fait que la bentonite (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) et la montmorillonite (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) ne sont pas considérées comme étant la même substance.

En conclusion, un minéral est généralement désigné par son constituant inorganique ou la combinaison de ses constituants inorganiques. Il peut être considéré comme une substance monoconstituant ou comme une substance multiconstituant (pour des orientations générales, voir les chapitres 4.2.1 et 4.2.2). Certains minéraux ne peuvent pas être décrits uniquement par leur composition chimique, et une caractérisation physique des paramètres de traitement supplémentaires est requise afin de les identifier de façon suffisante (voir le chapitre 4.2.3). Quelques exemples sont donnés dans le tableau suivant.

Exemples de minéraux

Nom	CAS	EINECS	Description supplémentaire ³¹
Cristobalite	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (structure cristalline: cubique/tétraгонаle)
Quartz	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (structure cristalline: trigonale/hexagonale)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Également connu sous le nom de diatomite, kieselgur et célite Description: Solide siliceux mou composé de squelettes de petites plantes aquatiques préhistoriques. Contient essentiellement de la silice.
Dolomite	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Minéraux du groupe des feldspaths	68476-25-5	270-666-7	Substance minérale produite par une réaction de calcination à haute température au cours de laquelle l'oxyde d'aluminium, l'oxyde de baryum, l'oxyde de calcium, l'oxyde de magnésium, l'oxyde de silicium et l'oxyde de strontium, en proportions variables, sont l'objet d'une diffusion interne ionique et homogène aboutissant à la formation d'une matrice cristalline.
Talc	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

³¹ Définition selon la directive 2001/30/CE de la Commission (JO L 146, 31.05.2001, p. 1)

Données analytiques requises pour les minéraux

Composition élémentaire	La composition chimique donne un aperçu général de la composition du minéral quel que soit le nombre de constituants et leurs proportions dans le minéral. Par convention, la composition chimique est exprimée en oxydes.
Données spectrales (XRD ou équivalent)	La diffraction des rayons X ou d'autres techniques permettent d'identifier les minéraux sur la base de leur structure cristallographique. Les pics XRD ou IR caractéristiques permettant d'identifier le minéral doivent être indiqués, avec une brève description de la méthode d'analyse ou des références bibliographiques.
Propriétés physicochimiques habituelles	Les minéraux ont des propriétés physicochimiques caractéristiques qui permettent de compléter leur identification, par exemple, <ul style="list-style-type: none"> - très faible dureté - pouvoir gonflant - formes de la diatomite (microscope optique) - densité très élevée - surface (adsorption d'azote)

7.6. Huile essentielle de Lavandin grosso

Les huiles essentielles sont des substances qui sont obtenues à partir de plantes. Elles peuvent donc être caractérisées comme des substances d'origine botanique.

En règle générale, les substances d'origine botanique sont des substances naturelles complexes obtenues en soumettant une plante ou certaines de ses parties à un traitement de type extraction, distillation, pressage, fractionnement, purification, concentration ou fermentation. La composition de ces substances varie selon le genre, l'espèce, les conditions de croissance et la période de récolte de la source, et en fonction des techniques appliquées.

Les huiles essentielles pourraient être définies par leurs constituants principaux comme il est d'usage pour les substances multiconstituant. Cependant, les huiles essentielles peuvent comporter plusieurs centaines de constituants, qui peuvent varier considérablement en fonction de nombreux facteurs (par exemple, le genre, l'espèce, les conditions de croissance, la période de récolte, les processus utilisés). Par conséquent, une description des constituants principaux est souvent insuffisante pour décrire ces substances UVCB. Les huiles essentielles doivent être décrites par la plante d'origine et le processus de traitement comme décrit au chapitre 4.3.1 (sous-type 3 de substances UVCB).

Dans de nombreux cas, il existe des normes industrielles pour les huiles essentielles (ainsi que des normes ISO-pour un grand nombre d'entre elles). Des informations sur les normes peuvent être fournies en complément. Cependant, l'identification des substances doit être basée sur la substance telle qu'elle est fabriquée.

L'exemple ci-dessous décrit l'«huile essentielle de Lavandin grosso», pour laquelle il existe une norme ISO (ISO 8902:1999).

1. Noms et autres identifiants

Source

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

Processus

Description des processus réactionnels (bio)chimiques utilisés pour la fabrication de la substance:

distillation à la vapeur d'eau des sommités florales de *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) puis séparation de l'eau et de l'huile essentielle;
la séparation est un processus physique spontané, qui se déroule normalement dans un séparateur (appelé «vase florentin») qui permet d'isoler facilement l'huile séparée. La température à ce stade du processus de distillation est d'environ 40 °C.

Nom

Nom IUPAC ou autre nom chimique international	Essential oil of <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
Nom CE Nom CE Description CE	297-385-2 «Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext.» (Lavande, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extraits) Extraits de <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiacées, et leurs dérivés physiquement modifiés tels que teintures, concrètes, absolus, huiles essentielles, oléorésines, terpènes, fractions déterpénées, distillats, résidus, etc. ³² .
Numéro CAS Intitulé du CAS	93455-97-1 «Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext.» (Lavande, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extraits)

³² «Labiatae» et «Lamiaceae» sont synonymes

2. Informations sur la composition – constituants connus

Constituants connus					
	Nom chimique CE CAS IUPAC Autre	Numéro CE CAS	Mol. For- mule mo- léculaire selon la méthode de Hill	Concen- tration habituelle (% m/m)	Intervalle de con- centration (% m/m)
A	CE acétate de linalyle CAS 1,6-Octadien-3-ol, 3,7- diméthyl-, acetate IUPAC 3,7-Diméthyl octa-1,6-dien- 3-yl acetate	CE 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
B	CE linalool CAS 1,6-octadien-3-ol, 3,7- diméthyl- IUPAC 3,7-Dimethyl octa-1,6-diene- 3-ol	CE 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24 – 35
C	CE Bornan-2-one CAS Bicyclo[2.2.1] heptan-2-one, 1,7,7-triméthyl- IUPAC 1,7,7- Trimethylbicyclo[2.2.1]-2- heptanone Autre camphor	CE 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
D	CE Cineole CAS 2-oxabicyclo [2.2.2]octane, 1,3,3-triméthyl- IUPAC 1,3,3-Trimethyl-2- oxabicyclo[2.2.2]octane Autre 1,8-cineole	CE 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7

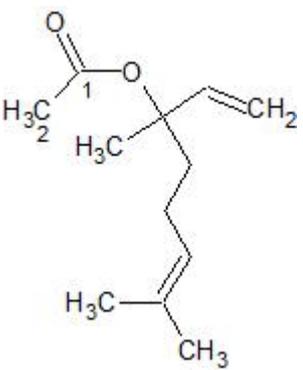
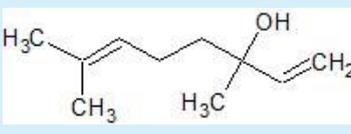
E	<p>CE P-menth-1-en-4-ol</p> <p>CAS 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-</p> <p>IUPAC 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol</p> <p>Autre terpinene-4-ol</p>	<p>CE 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5 – 5
F	<p>CE 2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetate</p> <p>CAS 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate</p> <p>IUPAC 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol</p> <p>Autre (±)-Lavandulol acetate</p>	<p>CE 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5 – 3
G	<p>CE DL-borneol</p> <p>CAS Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol</p> <p>Autre borneol</p>	<p>CE 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5 – 3
H	<p>CE Caryophyllene</p> <p>CAS Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylene bicyclo[7.2.0]undec-4-ene</p> <p>Autre trans-beta-caryophyllene</p>	<p>CE 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1 – 2,5
I	<p>CE (E)-7,11-dimethyl-3-methylenedodeca-1,6,10-triene</p> <p>CAS 1,6,10-Dodecatriene, 7,11-dimethyl-3-methylene-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-Dimethyl-3-methylene-1,6,10-dodecatriene</p> <p>Autre trans-beta-farnesene</p>	<p>CE 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2 – 2

J	CE (R)-p-mentha-1,8-diene CAS cyclohexen, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexene Autre limonene	CE 227-813-5 CAS 5989-27-5	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5 – 1,5
K	CE 3,7-dimethylocta-1,3,6-triene CAS 1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl- IUPAC 3,7-Dimethylocta-1,3,6-triene Autre cis-beta-ocimene	CE 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5 – 1,5

Constituants connus ≥ 10 %

Constituants connus		
	Nom CE	Description CE
A	acétate de linalyle C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	linalol C ₁₀ H ₁₈ O	

Constituants connus		
	Intitulé du CAS	Numéros CAS correspondants
A	acétate de linalyle C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linalol C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Constituants connus			
	Formule moléculaire Méthode CAS	Formule structurelle	Code SMILES
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Constituants connus		
	Poids moléculaire	Gamme de poids moléculaire
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Huile de chrysanthème et isomères isolés de celle-ci

Une entreprise produit une huile de chrysanthème qui est extraite après broyage de fleurs et de feuilles de *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae avec un solvant contenant un mélange eau/éthanol (1:10). Après extraction, le solvant est éliminé et l'extrait «pur» est raffiné dans des étapes ultérieures pour conduire à l'huile de chrysanthème finale.

De plus, deux isomères sont isolés de l'extrait sous forme d'une masse de réaction de:

Jasmolin I

(Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; Numéro CAS 4466-14-2) et

Jasmolin II

(Cyclopropanecarboxylic acid, 3-[(1E)-3-methoxy-2-methyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-dimethyl-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-ylester, (1R,3R)-; No CAS 1172-63-0

Par ailleurs, l'entreprise a décidé de synthétiser également la masse de réaction isomérique de Jasmolin I et de Jasmolin II.

L'entreprise pose les questions suivantes:

1. Comment identifier l'huile de chrysanthème aux fins de son enregistrement?
2. La masse de réaction des isomères isolés Jasmolin I et Jasmolin II est-elle couverte par l'enregistrement de l'huile?
3. Le mélange synthétisé des deux isomères peut-il être considéré comme identique à celui des isomères isolés à partir de l'huile de chrysanthème?

1. Comment identifier l'huile de chrysanthème aux fins de son enregistrement?

L'huile de chrysanthème est considérée comme une substance UVCB qui ne peut pas être identifiée de façon suffisante par sa composition chimique (pour des informations détaillées, voir le chapitre 4.3). D'autres paramètres d'identification, comme la source et le processus, sont essentiels. L'huile de chrysanthème est de nature biologique et doit être identifiée par l'espèce et la partie de l'organisme à partir de laquelle elle est obtenue, ainsi que par le processus de raffinage (extraction par un solvant). Cependant, la composition chimique et l'identité des constituants doivent être précisées dans la mesure où elles sont connues.

Les informations suivantes sont considérées comme nécessaires pour identifier la substance de façon suffisante:

Nom de la substance	<i>Chrysanthemum, cinerariaefolium</i> , Compositae huile obtenue à partir de fleurs et de feuilles broyées par extraction à l'aide d'un mélange eau:éthanol (1:10)
Source	
Genre, espèce, sous-espèce	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae

Partie de la plante utilisée pour extraire l'huile	Fleurs et feuilles			
Processus				
Méthode de fabrication	Broyage suivi d'une extraction			
Solvant utilisé pour l'extraction	Eau:éthanol (1:10)			
Informations sur la composition – constituants connus en % (m/m)				
Nom du constituant	No CE	No CAS	Min %	Max %
Pyrethrin I: 2-méthyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-chrysanthemate	204-455-8	121-21-1	30	38
Pyrethrin II: 2-méthyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-méthoxy-2-méthyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-diméthylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerin I: 3-(but-2-enyl)-2-méthyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-diméthyl-3-(2-méthylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerin II: 3-(but-2-enyl)-2-méthyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-diméthyl-3-(3-méthoxy-2-méthyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropane carboxylate	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolin I: 2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-diméthyl-3-(2-méthylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	néant	4466-14-2	4	10

Jasmolin II: 2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclo pent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]- 2,2-diméthyl-3-(3-méthoxy-2-méthyl- 3-oxoprop-1- enyl)cyclopropanecarboxylate	néant	1172-63-0	4	10
La substance contient en outre jusqu'à 40 constituants dans des concentrations inférieures à 1 %.				

On peut également envisager d'identifier la substance comme une substance multiconstituant bien définie ayant six constituants principaux (masse de réaction de Pyréthrin I, Pyréthrin II, Cinerin I, Cinerin II, Jasmolin I et Jasmolin II).

La substance serait considérée comme une «substance présente dans la nature» si le processus de fabrication consistait uniquement en un «broyage» et serait exemptée de l'obligation d'enregistrement à moins qu'elle ne réponde aux critères de classification comme substance dangereuse conformément à la directive 67/548/CEE.

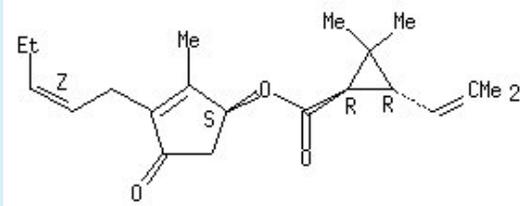
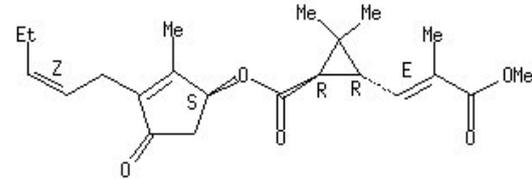
2. La masse de réaction des isomères isolés Jasmolin I et Jasmolin II est-elle couverte par l'enregistrement de l'huile?

La masse de réaction des isomères isolés Jasmolin I et Jasmolin II n'est pas couverte par l'enregistrement de l'huile *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae car le ou les constituants ne sont pas couverts par la substance UVCB dans son ensemble, et inversement. La masse de réaction de Jasmolin I et Jasmolin II est considérée comme une substance différente.

La masse de réaction de Jasmolin I et Jasmolin II peut être considérée comme une substance multiconstituant (pour des informations détaillées, voir le chapitre 4.2.3) ayant deux constituants principaux.

Les informations suivantes sont considérées comme nécessaires pour identifier la substance de façon suffisante:

Nom IUPAC de la substance	Masse de réaction de (2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-diméthyl-3-(2-méthylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) et (2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-diméthyl-3-(3-méthoxy-2-méthyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)
Autre nom	Masse de réaction de Jasmolin I et Jasmolin II
Pureté de la substance	95 – 98 % (m/m)
Informations sur la composition – constituants principaux en % (m/m)	

Nom du constituant	No CE	No CAS	Min %	Max %
Jasmolin I: 2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-diméthyl-3-(2-méthylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	néant	4466-14-2	40	60
Formule moléculaire				
Formule structurale				
Poids moléculaire		C ₂₂ H ₃₀ O ₅ M = 374 g/mol		
Jasmolin II: 2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-diméthyl-3-(3-méthoxy-2-méthyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	néant	1172-63-0	35	65
Formule moléculaire				
Formule structurale				
Poids moléculaire		C ₂₁ H ₃₀ O ₃ M = 330 g/mol		

3. Le mélange synthétisé (masse de réaction) des deux isomères peut-il être considéré comme identique à celui des isomères isolés à partir de l'huile de chrysanthème?

Pour les substances chimiquement bien définies, qui sont décrites de façon suffisante par leur constituants, peu importe que la substance soit isolée d'un extrait ou synthétisée par un processus chimique. Par conséquent, la masse de réaction de Jasmolin I et Jasmolin II obtenue par synthèse peut être considérée comme identique au mélange des isomères isolés de Chrysanthemum, même si leurs processus de fabrication sont différents, pour autant que la pureté du mélange et l'intervalle de concentration des constituants principaux soient identiques.

4. Conclusion

Deux substances sont identifiées:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae huile obtenue à partir de fleurs et de feuilles broyées par extraction à l'aide d'un mélange eau:éthanol (1:10)
2. masse de réaction des isomères Jasmolin I et Jasmolin II, indépendamment du processus de fabrication de la substance.

Si les substances ci-dessus étaient utilisées *uniquement* comme produits phytopharmaceutiques ou comme biocides, elles seraient considérées comme enregistrées au titre de REACH (*article 15*).

7.8. Phosphate de phénol isopropylié

Le phosphate de phénol isopropylié (3:1) est une substance UVCB dans laquelle la variabilité de l'entité isopropyliée ne peut pas être complètement définie.

1. Nom et autres identifiants

Nom IUPAC ou autre nom chimique international	«Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)» (phénol isopropylié, phosphate (3:1))
Autre noms	Phosphate de phénol isopropylié Phosphate de phénol isopropylié (3:1) (basé sur un rapport molaire propylène/phénol de 1:1)
Numéro CE Nom CE Description CE	273-066-3 «Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)» (phénol isopropylié, phosphate (3:1)) /
Numéro CAS Intitulé du CAS	68937-41-7 «Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)» (phénol isopropylié, phosphate (3:1))

2. Informations sur la composition– constituants principaux

Constituants principaux					
Intitulé de l'IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Formule moléculaire selon Hill	Concentration habituelle (% m/m)	Intervalle de concentration (% m/m)
«Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)» (phénol isopropylé, phosphate (3:1))	68937-41-7	273-066-3	Non spécifiée		

Constituants principaux	
Nom CE	Description CE
«Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)» (phénol isopropylé, phosphate (3:1))	/
Intitulé du CAS	Numéro CAS
«Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)» (phénol isopropylé, phosphate (3:1))	68937-41-7

7.9. Composés d'ammonium quaternaire

Une entreprise synthétise les substances suivantes:

Substance A

«Quaternary ammonium compounds, di-C4-22-alkyldimethyl, chlorides» (composés de l'ion ammonium quaternaire, dialkyl en C4-22 diméthyles, chlorures)

Numéro CE 294-392-2

No CAS 91721-91-4

Distribution des longueurs de chaîne carbonée

C₁₀ 10%

C₁₁ 5,5%

C₁₂ 12%

C ₁₃	7,5%
C ₁₄	18%
C ₁₅	8%
C ₁₆	24%
C ₁₇	7%
C ₁₈	8%

Substance B

«Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides» (composés de l'ion ammonium quaternaire, bis(alkyl de coco) diméthyles, chlorures)

Numéro CE 263-087-6

No CAS 61789-77-3

La composition exacte de cette substance n'est pas connue par l'entreprise.

Substance C

«Didodecyldimethylammonium bromide» (bromure de didodécyl diméthylammonium)

Substance D

«Didodecyldimethylammonium chloride» (chlorure de didodécyl diméthylammonium)

Substance E

La substance E est fabriquée comme masse de réaction de bromure de didodécyl diméthylammonium et de chlorure de didodécyl diméthylammonium (masse de réaction des substances C et D)

Substance F

«Quaternary ammonium compounds, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimethylammonium, chlorides» (composés de l'ion ammonium quaternaire, dialkyl en C₁₄₋₁₈ diméthyles, chlorures)

Numéro CE 268-072-8

No CAS 68002-59-5

Distribution des longueurs de chaîne carbonée

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

Substance G

«Quaternary ammonium compounds, di-C₄₋₂₂-alkyldimethyl, chlorides» (composés de l'ion ammonium quaternaire, dialkyl en C₄₋₂₂ diméthyles, chlorures)

Distribution des longueurs de chaîne carbone (un «'» indique une double liaison; «''» indique une triple liaison]:

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

Jusqu'à présent, l'entreprise utilise uniquement la substance B («Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides» (composés de l'ion ammonium quaternaire, bis(alkyl de coco) diméthyles, chlorures), numéro CE 263-087-6, numéro CAS 61789-77-3) pour la désignation, car c'est le nom qui convient le mieux à toutes les substances (substances A à G). L'entreprise souhaiterait savoir s'il est possible de couvrir toutes les substances (A à G) par le seul enregistrement de la substance B.

1. Remarques générales

Les hydrocarbures (paraffines, oléfines) dérivés de graisses et d'huile ou de substitués de synthèse sont identifiés par la distribution des longueurs de chaîne carbonée ou par leur origine (descripteur d'alkyle), par un groupe fonctionnel (descripteur de fonctionnalité), par exemple, ammonium, et par l'anion/le cation (descripteur salin), par exemple, chlorure. La distribution des longueurs de chaîne, par exemple, C₈₋₁₈, fait référence à un hydrocarbure:

saturé

linéaire (non ramifié)

incluant tous les nombres de carbone (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈), sachant qu'une distribution étroite ne couvre pas une distribution plus large, et inversement.

S'il en est autrement, il convient d'indiquer:

insaturé (C₁₆ insaturé)

ramifié (C₁₀ ramifié)

à nombre pair (C₁₂₋₁₈ nombre pair)

Les chaînes carbonées décrites par la source doivent comprendre la distribution telle qu'elle se présente dans la source, par exemple, les alkylamines de suif.

Les alkylamines de suif sont à 99 % des alkylamines primaires à chaîne linéaire présentant la distribution de longueurs de chaîne carbonée suivante (Ullmann, 1985) [«'» indique une double liaison; «''» indique une triple liaison]:

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

2. Comment identifier les substances aux fins de leurs enregistrements?

Chacune des substances est comparée à la substance B (qui était utilisée jusqu'à présent pour la désignation), afin de déterminer si les deux substances peuvent être considérées comme identiques.

Comparaison des substances A et B

La distribution des longueurs de chaîne pour le groupe «coco» de la substance B (Ullmann, 1985) [«'» indique une double liaison; «''» indique une triple liaison]:

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

Ainsi, la distribution des longueurs de chaîne de la substance A est différente de la distribution des longueurs de chaîne carbonée du groupe «coco» de la substance B. Les compositions qualitatives et quantitatives des deux substances étant significativement différentes, elles ne peuvent pas être considérées comme identiques.

Comparaison des substances B et C

La substance B «composés d'ammonium quaternaire, chlorures de dicocoalkyldiméthyle» décrit un mélange de constituants ayant des longueurs de chaîne carbonée différentes (C₆ à C₁₈ à nombre pair, linéaire, saturée et insaturée), alors que la substance C décrit un seul constituant ayant une longueur de chaîne définie et saturée (C₁₂) et un anion différent (bromure). Par conséquent, la substance C ne peut pas être considérée comme identique à la substance B.

Comparaison des substances B et D

La substance B «Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides» (composés de l'ion ammonium quaternaire, bis(alkyl de coco) diméthyles, chlorures) décrit un mélange de constituants ayant des longueurs de chaîne carbonée différentes (C_6 à C_{18} à nombre pair, linéaire, saturée et insaturée), alors que la substance D décrit un constituant ayant une longueur de chaîne définie et saturée (C_{12}) et le même anion (chlorure). Les substances B et D ont des noms différents et ne peuvent pas être considérées comme une même substance, car un constituant unique n'est pas couvert par un mélange contenant ce constituant, et inversement.

Comparaison des substances B et E

La substance E est un mélange des substances C et D. Ces deux substances ont une longueur de chaîne saturée en C_{12} mais des anions différents (bromure et chlorure). La substance B «Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides» (composés de l'ion ammonium quaternaire, bis(alkyl de coco) diméthyles, chlorures) décrit un mélange de constituants ayant des longueurs de chaîne carbonée différentes (C_6 à C_{18} à nombre pair, linéaire, saturée et insaturée) et un anion chlorure. Cependant, la substance E est décrite uniquement par la longueur de chaîne carbonée C_{12} avec un anion bromure supplémentaire. Par conséquent, les substances B et E ne peuvent pas être considérées comme identiques. Un enregistrement distinct est donc nécessaire pour la substance E.

Comparaison des substances B et F

La substance F «Quaternary ammonium compounds, di- C_{14-18} -alkyldimethylammonium, chlorides» (composés de l'ion ammonium quaternaire, dialkyl en C_{14-18} diméthyles, chlorures) est un mélange de constituants ayant des longueurs de chaîne carbonée différentes (C_{14} à C_{18} à nombre pair et impair, linéaire et saturée). La substance F diffère de la substance B par sa composition et par la distribution des longueurs de chaîne carbonée. La substance F a une distribution étroite des longueurs de chaîne carbonée, et comprend en outre des chaînes carbonées en C_{15} et C_{17} . Par conséquent, les substances B et F ne peuvent pas être considérées comme identiques.

Comparaison des substances B et G

Les substances B et G semblent être très proches, car la distribution des longueurs de chaîne carbonée couvre pratiquement la même gamme. Cependant, la substance G comprend en outre des chaînes carbonées en C_4 , C_{20} et C_{22} . La distribution des longueurs de chaîne carbonée de la substance G couvre une gamme plus large que celle de la substance B. Par conséquent, les substances B et G ne peuvent pas être considérées comme identiques.

3. Conclusion

Les hydrocarbures (paraffines, oléfines) ne peuvent être considérés comme une même substance que lorsque les trois descripteurs (alkyle, de fonctionnalité et salin) sont identiques.

Dans l'exemple donné ci-dessus, les descripteurs sont toujours différents les uns des autres. Par conséquent, les substances ne peuvent pas être couvertes par le seul enregistrement de la substance B.

7.10. Substances pétrolières;

Deux exemples, conformes aux orientations applicables aux substances UVCB particulières fournies au chapitre 4.3.3.2, sont inclus ci-après.

7.10.1. Mélange d'essences (C4-C12)

1. *Nom et autres identifiants*

Nom

Nom IUPAC ou autre nom chimique international	«Naphtha (petroleum), catalytic reformed» (naphta de reformage catalytique (pétrole))
--	--

Source

Identification ou description de la fraction	Pétrole brut
---	--------------

Processus

Description du processus de raffinage	Processus de reformage catalytique
Gamme de distribution des longueurs de chaîne carbonée	C4-C12
Intervalle d'ébullition ou cut off	30 °C à 220 °C
Autres propriétés physicochimiques, par exemple, viscosité	inférieure à 7 mm ² /s à 40 °C (viscosité)

Numéro CE Numéro CAS Nom CE/Nom CAS Description CE/Description CAS	273-271-8 68955-35-1 «Naphtha (petroleum), catalytic reformed» (naphta de reformage catalytique (pétrole)) Combinaison complexe d'hydrocarbures obtenue par distillation des produits résultant d'un reformage catalytique. Se compose d'hydrocarbures dont le nombre de carbones se situe principalement dans la gamme C4-C12 et dont le point d'ébullition est compris approximativement entre 30 °C et 220 °C. Renferme une proportion relativement importante d'hydrocarbures aromatiques et d'hydrocarbures à chaînes ramifiées. Peut contenir 10 % ou plus, en volume, de benzène.
---	---

2. Informations sur la composition

Constituants connus			
Intitulé de l'IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Intervalle de concentration (% m/m)
benzène	71-43-2	200-753-7	1-10
toluène	108-88-3	203-625-9	20-25
Xylene	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Gazoles (pétrole)

1. Nom et autres identifiants

Nom IUPAC ou autre nom chimique international	«Gas oils (petroleum), heavy atmospheric» (gazoles atmosphériques lourds (pétrole))
--	--

Source

Identification ou description de la fraction	Pétrole brut
---	--------------

Processus

Description du processus de raffinage	Distillation atmosphérique
Gamme de distribution des longueurs de chaîne carbonée	C7-C35
Intervalle d'ébullition ou cut off	121 °C à 510 °C
Autres propriétés physicochimiques, par exemple, viscosité	20 mm ² /s à 40 °C (viscosité)
Numéro CE Numéro CAS Nom CE/Nom CAS Description CE/Description CAS	272-184-2 68783-08-4 «Gas oils (petroleum), heavy atmospheric» (gazoles atmosphériques lourds (pétrole)) Combinaison complexe d'hydrocarbures obtenue par distillation du pétrole brut. Se compose d'hydrocarbures dont le nombre de carbones se situe principalement dans la gamme C7-C35 et dont le point d'ébullition est compris approximativement entre 121 °C et 510 °C.

2. Composition chimique

Pas d'informations disponibles.

7.11. Enzymes

Deux exemples de concentrés enzymatiques, conformes aux orientations applicables aux substances UVCB particulières fournies au chapitre 4.3.2.3, sont inclus ci-après: la subtilisine (identifiée par la nomenclature de l'IUBMB + d'autres constituants) et l' α -amylase (identifiée par la nomenclature de l'IUBMB + un organisme producteur).

7.11.1. Subtilisine

Protéine enzymatique	Subtilisine
Numéro IUBMB	3.4.21.62

<p>Noms attribués par IUBMB (Nom systémique, nom de l'enzyme, synonymes)</p>	<p>Subtilisine; alcalase; alcalase 0,6L; alcalase 2,5L; ALK-enzyme; bacillopeptidase A; bacillopeptidase B; Bacillus subtilis alkaline proteinase biopraxe; biopraxe AL 15; biopraxe APL 30; colistinase; (voir également les commentaires); subtilisine J; subtilisine S41; subtilisine Sendai; subtilisine GX; subtilisine E; etc.</p>
<p>Noms donnés par l'IUBMB</p>	<p>La subtilisine est une endopeptidase de sérine, exemple-type de la famille des peptidases S8. Elle ne contient pas de résidu cystéine (bien que l'on en trouve dans des enzymes homologues). Des variantes de l'espèce comprennent la subtilisine BPN' (également subtilisine B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse, Nagarse proteinase, subtilisine Novo, protéinase bactérienne Novo) et la subtilisine Carlsberg (subtilisine A, subtilopeptidase A, alcalase Novo). Anciennement CE 3.4.4.16 et incluse dans CE 3.4.21.14. Des enzymes similaires sont produites par diverses souches de <i>Bacillus subtilis</i> et d'autres espèces de <i>Bacillus</i> [1,3].</p>
<p>Réaction</p>	<p>Hydrolyse de protéines avec une large spécificité pour les liaisons peptidiques, et une préférence pour un résidu non chargé en position P1. Hydrolyse les amides peptidiques.</p>
<p>Type de réaction</p>	<p>hydrolases agissant sur les liaisons peptidiques (peptidases) endopeptidases de sérine</p>
<p>Numéro CE</p>	<p>232-752-2</p>
<p>Nom CE</p>	<p>Subtilisin</p>
<p>Numéro CAS</p>	<p>9014-01-1</p>
<p>Intitulé du CAS</p>	<p>Subtilisin</p>
<p>Concentration de protéine enzymatique</p>	<p>26 %</p>
<p>Concentration de protéine enzymatique</p>	

Autre protéines, peptides et acides aminés	39 %
Glucides	11 %
Lipides	1 %
Sels inorganiques	23 %
Substrats et produits	
Paramètres supplémentaires	protéines ou oligopeptides, eau, peptides

7.11.2. α -Amylase

Protéines enzymatiques	α -Amylase
Numéro IUBMB	3.2.1.1
Noms attribués par IUBMB (Nom systémique, nom de l'enzyme, synonymes)	1,4- α -D-glucan gluconohydrolase; glycogenase; α -amylase; alpha-amylase; endoamylase; Taka-amylase A
Commentaires donnés par l'IUBMB	(nom systémique, nom de l'enzyme, synonymes) Agit sur l'amidon, le glycogène et les polysaccharides et oligosaccharides apparentés de façon aléatoire; les groupes réducteurs sont libérés dans la configuration α . Le terme « α » fait référence à la configuration anomérique initiale du sucre libre relargué et non à la configuration de la liaison hydrolysée.
Réaction	Endohydrolyse des liens de 1,4- α -D-glucosidic dans les polysaccharides contenant au moins trois unités D-glucose liées en position 1,4- α

Type de réaction	hydrolases; glycosidases; glycosidases, c'est-à-dire enzymes hydrolysant les liaisons O- et S- des composés glycosyle
Numéro CE	232-565-6
Nom CE	Amylase, α -
Numéro CAS	9000-90-2
Numéros CAS correspondants	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (tous supprimés)
Intitulé du CAS	Amylase, α -
Concentration de la protéine enzymatique	37 %
Concentration de protéine enzymatique	
Autre protéines, peptides et acides aminés	30 %
Glucides	19 %
Sels inorganiques	14 %
Paramètres supplémentaires	
Substrats et produits	amidon; glycogène; eau; polysaccharides; oligosaccharide;

Annexe I - Outils d'orientation

La présente annexe comprend une liste des sites internet, base de données et manuels qui peuvent être utiles pour trouver les noms IUPAC, CAS et CE appropriés, les numéros CAS et CE, les formules moléculaires et les formules structurales, mais aussi la notation SMILES et d'autres paramètres requis pour l'identification des substances. Les bases de données commerciales et les outils d'orientation ne sont pas mentionnés ici.

Généralités		
Paramètre d'identité de la substance	Source	Description de la source
Department of Health and Human Services (ministère américain de la santé et des services sociaux)	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	Famille de bases de données et d'outils pour aider les utilisateurs à rechercher des informations chimiques
Perkin Elmer Informatics	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	Base de données gratuite qui fournit les structures chimiques, les propriétés physiques et des hyperliens vers les informations concernées.
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	http://accelrys.com/products/informatics/	Logiciel chimique; Accord Alphabetical Product Listing

Nom et autres identifiants		
Paramètre d'identité de la substance	Source	Description de la source
Intitulé de l'IUPAC	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	Site internet officiel de l'IUPAC
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	Nomenclature chimique et recommandations IUPAC (sous l'autorité de l'IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Une des principales publications sur la nomenclature IUPAC, mise à jour en 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Une des principales publications sur la nomenclature IUPAC, mise à jour en 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Une des principales publications sur la nomenclature IUPAC, mise à jour en juillet 2005.
Intitulé de l'IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Une des principales publications sur la nomenclature IUPAC
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Volume introductif couvrant tous types de composés
Intitulé de l'IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Programme commercial de désignation informatisée qui peut être très utile dans la désignation des structures de complexité modérée. Logiciel gratuit pour les petites molécules (recommandé par l'IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Nomenclature IUPAC de chimie organique (recommandée par l'IUPAC)

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Liste complète des noms triviaux et semi-systématiques approuvés pour les composés organiques
	http://www.chemexper.com/	L'objectif du ChemExper Chemical Directory est de créer une base de données de produits chimiques commune et accessible gratuitement sur internet. Cette base de données contient des produits chimiques avec leurs caractéristiques physiques. Chacun peut soumettre des données chimiques et rechercher des informations via un navigateur internet.
Nomenclature IUBMB	http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/ or http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb	Base de données de nomenclature biochimique de l'IUBMB (sous l'autorité de l'IUBMB)
Autres noms	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Noms génériques du Colour Index International, quatrième édition en ligne
	http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp	Site internet officiel de l'INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients / Nomenclature internationale des ingrédients de produits cosmétiques), site internet officiel du Personal Care Products Council
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	Inventaire de l'Agence américaine de protection de l'environnement (US EPA) des substances contenant des longueurs de chaîne carbonée variables (désignation des chaînes alkyle à l'aide de la notation CX-Y)
Autres identifiants	http://www.cenorm.be	Normes CE, site internet officiel du Comité européen de normalisation
Numéro CE	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	Inventaire CE: recherche dans les listes EINECS, ELINCS, NLP et l' <i>annexe I</i> de la directive 67/548/CEE
Numéro CAS	http://www.cas.org	Site internet officiel du service d'enregistrement CAS

	http://www.chemistry.org	Site internet officiel de l'American Chemical Society
--	---	---

Formule moléculaire et structurale

Paramètre d'identité de la substance	Source	Description de la source
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilites/SMILES_generator_checker/index.html	Générateur de notation SMILES (gratuit)
Poids moléculaire et SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html	ACDChemsketch, logiciel gratuit (également disponible dans le commerce)
Divers paramètres physico-chimiques	http://www2.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ est une suite pour Windows® de modèles d'estimation des propriétés physiques/chimiques et du devenir dans l'environnement développé par l'Office of Pollution Prevention and Toxics de l'EPA et la Syracuse Research Corporation (SRC).

Annexe II - Orientations techniques relatives aux paramètres d'identification des substances

Les informations fournies dans cette annexe sont destinées aux utilisateurs du présent document d'orientation qui ne sont pas familiarisés avec les règles techniques applicables à la nomenclature, l'utilisation des divers numéros d'enregistrement, les règles de notation des formules moléculaires et structurales, les données spectrales etc.

Elles fournissent une introduction générale, en résumant les grands principes et guident l'utilisateur vers les sources originales où il trouvera des informations complètes.

Cet aperçu est une version simplifiée, non complète ou exhaustive, et n'est pas suffisamment détaillée pour les utilisateurs professionnels. Il ne doit en aucun cas être considéré comme équivalent à la source officielle.

1 Nom(s) selon la nomenclature IUPAC ou une autre nomenclature internationale

Pour l'enregistrement, le nom IUPAC de la substance en anglais, ou un autre nom bien défini reconnu au niveau international, doit être fourni.

Un nom IUPAC est basé sur la nomenclature chimique internationale définie par l'organisation internationale IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry / Union internationale de chimie pure et appliquée, voir les références de l'annexe I). La nomenclature IUPAC fait appel à une démarche systématique de désignation des produits chimiques, qu'ils soient organiques ou inorganiques. Dans la nomenclature IUPAC, des préfixes, suffixes et infixes sont utilisés pour décrire le type et la position des groupes fonctionnels dans la substance.

Dans l'exemple **penta-1,3-dien-1-ol**:

le préfixe est **penta-1,3-**

l'infixe est **-di** et

le suffixe est **-ol**

en- est le radical du nom.

Cet ensemble de règles a été mis au point sur plusieurs années et est constamment modifié afin de prendre en compte de nouveaux composants présentant une diversité moléculaire ainsi que d'éventuels conflits ou confusions identifiés. Les règles fixées par l'IUPAC peuvent uniquement être utilisées pour des substances bien définies.

Des orientations générales sont fournies ci-dessous sur la structure d'un nom IUPAC. Pour des précisions plus détaillées, il convient de se reporter aux orientations fournies au chapitre 4 du présent document d'orientation.

1.1 Substance organique

Étape 1 Identifier le nombre d'atomes de carbone dans la chaîne carbonée continue la plus longue; ce nombre détermine le préfixe, la première partie du radical:

Nombre d'atomes de carbone	Radical
1	meth-
2	eth-
3	prop-

4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	oct-
N

Étape 2 Déterminer la saturation de la chaîne; celle-ci détermine le suffixe, la deuxième partie du radical:

Saturation	Liaison	Suffixe
Chaîne insaturée	Double Triple	-ene -yn
Chaîne saturée	-	-ane

S'il y a plusieurs doubles ou triples liaisons, le nombre de liaisons est indiqué par «mono», «di», «tri», etc. devant le suffixe:

«pentene» avec 2 doubles liaisons: «pentadiene»

Étape 3 Combiner le préfixe, le suffixe et autres ajouts au radical.

Remarque: Pour le radical, les noms triviaux et semi-systématiques approuvés par l'IUPAC peuvent également être utilisés:

benzene, toluene, etc.

Étape 4 Utiliser le tableau ci-dessous:

- Identifier les substituants et/ou les groupes fonctionnels: groupes carbonés ou non carbonés liés à la chaîne d'atomes de carbone identifiée à la première étape;
- Déterminer l'ordre de priorité des substituants et/ou des groupes fonctionnels;
- Ajouter le suffixe correspondant au premier substituant/groupe fonctionnel, puis les autres suffixes en suivant l'ordre de priorité;
- Ajouter le préfixe correspondant aux autres substituants et groupes fonctionnels par ordre alphabétique.

Priorité	Groupe	Formule	Suffixe	Préfixe
1	Acide carboxylique	R-COOH	Acide -oïque	Carboxy

2	Ester	R-CO-O-R	-oate	-
3	Amide	R-CONH ₂	-amide	Carbamoyl
4	Cyanure	R-CN	-nitrile	Cyano
5	Aldéhyde	R-CHO	-al	Oxo
6	Cétone	R-CO-R	-one	Oxo
7	Alcool	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Thiol	R-SH	-thiol	Sulfanyl
9	Amine	R-NH ₂	-amine	Amino

1.2 Substance inorganique

1.2.1 Désignation des substances inorganiques simples

La désignation des substances inorganiques est basée sur un ensemble de règles («red book» de l'IUPAC, voir la référence en 7.1), dont les plus élémentaires sont présentées ci-dessous:

1 Les anions monoatomiques sont désignés par le suffixe «-ide» (en anglais):

O²⁻ est oxyde

2 Les composés ioniques simples sont désignés par le cation suivi de l'anion. Pour les cations dont la charge est supérieure à 1, la charge est notée entre parenthèse en chiffres romains immédiatement après le nom de l'élément:

Cu²⁺ est cuivre(II)

3 Les hydrates sont désignés par le composé ionique suivi d'un préfixe numérique et de «-hydrate». Les préfixes numériques sont mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, déca-:

CuSO₄ · 5H₂O est «sulfate de cuivre (II) pentahydraté»

Remarque: aux fins de l'enregistrement, les hydrates et, le cas échéant, la forme anhydre, d'un sel métallique particulier sont considérés comme «identiques».

4 Les composés moléculaires inorganiques sont désignés par un préfixe (voir hydrates) avant chaque élément. L'élément le plus électronégatif est noté en dernier, avec un suffixe «-ide» (en anglais):

CO₂ = «carbon dioxide» (dioxyde de carbone), et CCl₄ = «carbon tetrachloride» (tétrachlorure de carbone)

5 Les acides sont désignés d'après l'anion formé lorsque l'acide est dissout dans l'eau. Il y a plusieurs possibilités:

a Si, lorsqu'il est dissout dans l'eau, l'acide se dissocie en un anion «x»-ide, l'acide est nommé «hydro-«x»-ic acid»:

«hydrochloric acid» (l'acide chlorhydrique) forme un anion «chloride» (chlorure).

b Si, lorsqu'il est dissout dans l'eau, l'acide se dissocie en un anion «x»-ate, l'acide est nommé ««x»-ic acid»:

«chloric acid» (l'acide chlorique) se dissocie en anions chlorate dans l'eau.

c Si, lorsqu'il est dissout dans l'eau, l'acide se dissocie en un anion «x»-ite, l'acide est nommé ««x»-ous acid»:

«chlorous acid» (l'acide chloreux) se dissocie en anions chlorite.

1.2.2 Désignation des phases minéralogiques

Les phases minéralogiques complexes contiennent généralement au moins trois éléments en combinaison. La plupart des éléments présents sont combinés à de l'oxygène et, afin de simplifier l'identification, les composés complexes sont habituellement considérés par les minéralogistes comme étant composés d'oxydes, les uns ayant un caractère basique et les autres un caractère acide. Par exemple, dans le cas des silicates, il a été de règle de les représenter soit comme la somme d'un certain nombre d'oxydes, soit comme des sels d'acide silicique, soit comme des acides aluminosiliciques. En conséquence, «calcium orthosilicate» (l'orthosilicate de calcium) peut être représenté comme $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$, une combinaison d'oxydes distincts ou comme Ca_2SiO_4 , le sel de calcium de l'acide orthosilicique H_4SiO_4 . Il en va de même pour d'autres oxydes minéraux complexes qui sont désignés par un préfixe avant chaque oxyde (par exemple, $\text{Ca}_3\text{SiO}_5 = \text{«tricalcium silicate»}$ (silicate de tricalcium) = $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$). Dans certains secteurs industriels, une simplification supplémentaire a été introduite afin d'abrégier la formule du composé. Par exemple, dans le cas de clinker de ciment Portland, $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ [«calcium orthosilicate» (orthosilicate de calcium) ou «dicalcium silicate» (silicate de dicalcium)] est raccourci en C_2S , où C = CaO et S = SiO_2 . Il est conseillé de se référer aux normes relatives à la minéralogie ou industrielles pour désigner ou identifier des phases minéralogiques complexes.

1.3 Produits naturels et leurs composants

Pour les produits naturels, l'IUPAC a élaboré plusieurs règles de désignation systématique. En bref, pour les substances extraites d'une source naturelle, le nom est basé, autant que possible, sur le nom de la famille, du genre ou de l'espèce de l'organisme à partir duquel la substance a été extraite:

Pour une protéine hypothétique, *Hypothecalia Exemplare*, les noms sont basés sur *hypothecalia* et/ou *exemplare*, par exemple *Horse Exemplare*

Si possible, le nom doit refléter la distribution, connue ou probable, du produit naturel. S'il y a lieu, la classe ou l'ordre peut également être éventuellement utilisé(e) comme base pour le nom d'une substance qui existe dans un certain nombre de familles proches. Le nom des produits naturels de structure inconnue ne doit contenir aucun des préfixes, suffixes et/ou infixes utilisés dans la nomenclature des substances organiques:

Produit de condensation de *Horse exemplare*, Valarine ajouté au N-terminus

De nombreuses substances naturelles appartiennent à des classes structurales bien définies, dont chacune peut être caractérisée par un ensemble de structures parentes qui sont étroitement liées entre elles, c'est-à-dire que chacune peut être dérivée d'une structure fondamentale. Le nom systématique de ces substances naturelles et de leurs dérivés peut être basé sur le nom d'une structure fondamentale parente appropriée.

Des structures parentes bien connues sont les alcaloïdes, les stéroïdes, les terpénoïdes et les vitamines.

Une structure fondamentale parente doit refléter le squelette de base qui est commun à la plupart des substances de cette classe. Les substances naturelles ou leurs dérivés sont désignés d'après la structure parente, en ajoutant des préfixes, suffixes ou infixes indiquant:

- des modifications de la structure du squelette

- un remplacement d'atomes du squelette
- des changements de l'état d'hydrogénation indiqué par le nom de la structure parente
- des atomes ou des groupes substituant des atomes d'hydrogène de la structure parente
- des configurations non indiquées par le nom de la structure parente, ou modifiées par rapport à celles indiquées

«Thiamin chloride» (le chlorure de thiamine) est également connu sous le nom de vitamine B₁

Pour des informations plus détaillées sur la désignation systématique des produits naturels et des substances connexes, il convient de contacter l'IUPAC (voir l'annexe 1).

1.4 Impossibilité d'établir un nom IUPAC

S'il n'est pas possible d'établir un nom IUPAC pour certaines substances, une autre nomenclature reconnue au niveau international, spécifique de ces substances, peut être utilisée, en l'occurrence:

- minéraux et minerais; noms minéralogiques;
- substances pétrolières;
- noms génériques du Colour Index³;
- additifs pétroliers;
- INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients)⁴;
- noms des tensioactifs de la SDA (Soap and Detergent Association)⁵;
- etc.

2 Autres noms

Aux fins d'un enregistrement dans le cadre de REACH, il est utile de communiquer tous les noms pertinents et/ou identifiants publics dans toutes les langues dans lesquelles une substance est ou sera mise sur le marché de l'UE (par exemple, les noms commerciaux). Cela inclut les noms commerciaux, les synonymes, les abréviations, etc.

- <http://www.colour-index.com>, Colour Index International, 4e édition en ligne
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, site internet officiel du Personal Care Products Council
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, site internet officiel de la American Cleaning Institute (ACI).³

Numéro CE issu de l'EINECS, l'ELINCS ou de la liste NLP (inventaire CE)

Le numéro CE (EINECS, ELINCS ou NLP) est le numéro officiel de la substance au sein de l'Union européenne. Le numéro CE peut être obtenu dans les publications officielles relatives aux produits EINECS, ELINCS et NLP et de l'Agence européenne des produits chimiques.

Le numéro CE est constitué de 7 chiffres du type x₁x₂x₃-x₄x₅x₆-x₇. Le premier chiffre désigne la liste dont relève la substance.

Liste	Premier chiffre du numéro CE
EINECS	2 ou 3

ELINCS	4
NLP	5

4 Nom CAS et numéro CAS

Le Chemical Abstracts Service (CAS), une division de l'American Chemical Society (ACS), attribue un nom et un numéro CAS à tout produit chimique qui entre dans la base de données du registre CAS. Les noms et numéros sont attribués en ordre séquentiel uniquement aux substances identifiées par les scientifiques du CAS. Toute substance enregistrée au Chemical Abstracts Service possède un nom conforme à la nomenclature CAS, adopté par l'ACS sur recommandations du comité de l'ACS sur la nomenclature (voir les références de l'annexe 1).

4.1 Intitulé du CAS

Le nom CAS est le nom fourni par le Chemical Abstract Service et est différent du nom IUPAC. La nomenclature CAS est basée sur un ensemble limité de critères qui ne sont pas toujours suffisants pour établir le nom d'une substance. En règle générale, il est donc recommandé de contacter le Chemical Abstract Service pour obtenir le nom CAS correct.

En résumé, les principales règles de nomenclature sont:

- Une partie «principale» de la substance est choisie comme «en-tête» ou parent.
- Les substituants sont énumérés après l'«en-tête»/le parent, auquel il est fait référence dans un ordre inverse.
- Lorsque plusieurs substituants sont présents, ils sont énumérés par ordre alphabétique, (préfixes inclus):

«o-Xylen-3-ol» est le «benzene, 1,2-dimethyl, 3-hydroxy»

4.2 Numéro CAS

Les numéros CAS peuvent être obtenus auprès du Chemical Abstract Service.

Le numéro CAS est constitué d'un minimum de 5 chiffres, scindés en trois parties séparées par des tirets. La deuxième partie est toujours constituée de 2 chiffres, la troisième partie, un chiffre pour la «somme de contrôle».

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

La «somme de contrôle» permet la vérification du numéro CAS:

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

Le numéro CAS est correct si la somme de contrôle est juste.

5 Autres codes d'identité

D'autres codes d'identité reconnus au niveau international peuvent également être fournis, comme:

- le numéro ONU;
- le numéro du Colour index;
- le numéro de colorant;

6 Formule moléculaire, formule structurale et notation SMILES

6.1 Formule moléculaire

Une formule moléculaire identifie chaque type d'élément par son symbole chimique et identifie le nombre d'atomes de chacun des éléments trouvés dans une seule molécule de la substance.

Les formules moléculaires doivent être fournies conformément au système (traditionnel) de Hill et, en outre, conformément au système CAS, lorsque les deux formules moléculaires diffèrent.

Pour appliquer la méthode de Hill, les étapes suivantes peuvent être suivies:

1. Identifier les éléments et énumérer les symboles chimiques
2. Arranger les éléments dans le bon ordre:

- a. substances contenant du carbone:

Chaque élément est mentionné par son symbole chimique, dans l'ordre suivant:

- (1) carbone;
- (2) hydrogène;
- (3) autres symboles d'élément par ordre alphabétique:

«Pentane» (pentane): C5H12

«Pentene» (pentène): C5H10

«Pentanol» (pentanol): C5H12O

- b. Substances ne contenant pas de carbone:

Chaque élément est mentionné par ordre alphabétique:

«Hydrochloric acid» (acide chlorhydrique): ClH

3. Pour chaque élément, lorsque le nombre d'atomes est > 1, indiquer le nombre d'atomes par un indice après le symbole chimique

4. Ajouter les informations qui ne concernent pas la structure principale à la fin de la formule moléculaire, en les séparant par un point ou une virgule: «Sodium benzoate» (benzoate de sodium):

C7H6O2, sel de sodium «Copper sulphate dihydrate» (sulfate de cuivre dihydrate):

CuO4S.2H2O

Si la méthode de Hill ne peut pas être appliquée pour une substance spécifique, il convient d'indiquer la formule moléculaire d'une façon différente, par exemple en utilisant une formule empirique, avec une description simple des atomes et le rapport entre les atomes présents, ou la formule fournie par le Chemical Abstract Service (voir le chapitre 4 du présent document d'orientation).

6.2 Formule structurale

Une formule structurale est nécessaire pour visualiser la disposition des molécules au sein de la substance et leurs relations les unes avec les autres. La formule structurale doit indiquer l'emplacement des atomes, des ions ou des groupes et la nature des liaisons entre eux. Cela inclut également l'isomérisme (cis/trans, chiralité, énantiomères, etc.).

La formule structurale peut être fournie sous différents formats: sous la forme d'une formule moléculaire et/ou sous la forme d'un schéma structurel.

- *Formule structurale sous la forme d'une formule moléculaire*

1. Noter tous les éléments par groupes et par ordre d'apparition:

«n-pentane» (n-pentane): CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

2. Chaque substituant est noté entre parenthèses, directement après l'atome auquel il est lié:

«2-methylbutane» (2-méthylbutane): CH₃CH(CH₂)CH₂CH₃

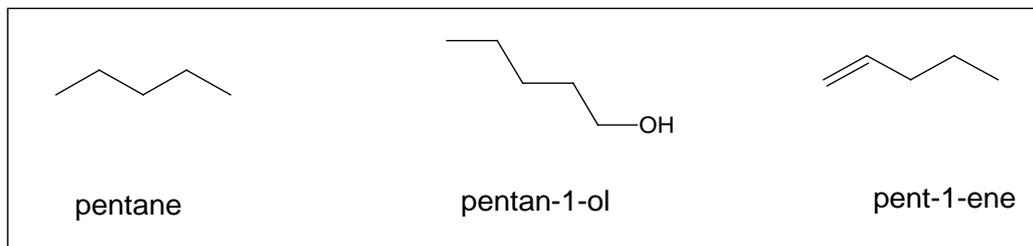
3. En cas de doubles ou triples liaisons, les indiquer entre les groupes d'éléments concernés:

«pent-1-ene» (pent-1-ène): CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

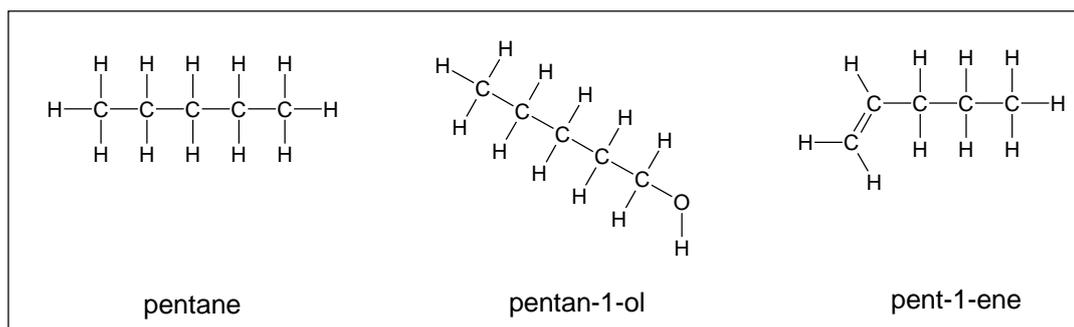
- *Formule structurale sous la forme d'un schéma structurel*

Pour un schéma structurel, les éléments et les liaisons entre les éléments sont visualisés par une représentation en 2D ou en 3D. Il existe plusieurs méthodes:

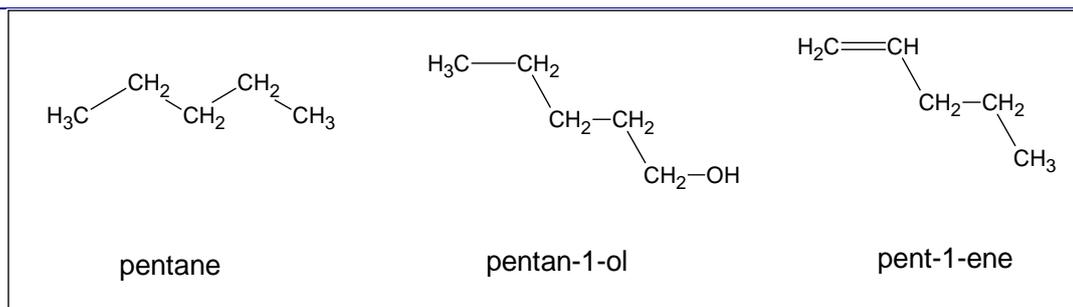
1. Représentation de tous éléments autres que des atomes de carbone et de l'atome d'hydrogène lié aux éléments autres que des atomes de carbone. pentane pentan-1-ol



2. pent-1-ène Représentation de tous les éléments par leur nom



3. Représentation des atomes de carbone et d'hydrogène par groupes (par exemple, CH₃), ainsi que de tous les éléments autres que des atomes de carbone et de tous les atomes d'hydrogènes non liés à des atomes de carbone.



6.3 Notation SMILES

SMILES est l'acronyme de «Simplified Molecular Input Line Entry Specification». ³³ Il s'agit d'un système de notation chimique utilisé pour représenter une structure moléculaire par une suite linéaire de symboles. Avec une notation SMILES standard, le nom d'une molécule est synonyme de sa structure: il illustre indirectement une représentation en deux dimensions de la structure moléculaire. Une structure chimique en deux dimensions pouvant être représentée de différentes façons, il existe plusieurs notations SMILES correctes pour une molécule. La notation SMILES est basée sur la représentation de la valence d'une molécule; elle n'est donc pas adaptée pour décrire des molécules qui ne peuvent pas être représentées par un modèle de la valence.

Les notations SMILES sont constituées d'atomes, désignés par les symboles des éléments, de liaisons, de parenthèses, utilisées pour indiquer les ramifications, et de nombres, utilisés pour les structures cycliques. Une notation SMILES représente une structure moléculaire sous forme graphique avec des indications éventuelles de chiralité. Une notation SMILES décrivant la structure uniquement en termes de liaisons et d'atomes est dite «générique»; une notation SMILES comportant des spécifications relatives à l'isotopie et à la chiralité est dite «isomérique».

En bref, la notation SMILES est basée sur plusieurs règles essentielles:

1. Les atomes sont représentés par leurs symboles atomiques
2. Chaque atome, excepté l'hydrogène, est spécifié indépendamment
 - a. les éléments du «sous-ensemble organique» B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br et I sont notés sans parenthèses et sans H attaché, dans la mesure où le nombre d'atomes d'hydrogène est conforme à la valence ou aux valences normales les plus faibles compatibles avec les liaisons explicites:

Élément du «sous-ensemble organique»	«valence(s) normale(s) la(les) plus faible(s)»
B	3
C	4
N	3 et 5
O	2

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

P	3 et 5
S	2, 4 et 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. les éléments du «sous-ensemble organique» sont notés entre parenthèses lorsque le nombre d'atomes d'hydrogène n'est pas conforme à la valence normale la plus faible:

«Ammonium cation» (cation ammonium):

- c. les éléments autres que ceux du «sous-ensemble organique» sont notés entre parenthèses, chaque atome d'hydrogène lié étant indiqué.

3. Les atomes aliphatiques sont indiqués en majuscules; les atomes aromatiques en minuscules: «Benzene» (benzène):

c1ccccc1; «Cyclohexane» (cyclohexane):

4. C1CCCCC1 Les atomes d'hydrogène ne sont inclus que dans les situations suivantes:
- atome d'hydrogène chargé, c'est-à-dire un proton, [H+];
 - des atomes d'hydrogène liés à d'autres atomes d'hydrogène, c'est-à-dire l'hydrogène moléculaire, [H][H];
 - des atomes d'hydrogène liés à autre chose qu'un autre atome, par exemple, des ponts hydrogènes;
 - spécifications isotopiques de l'atome d'hydrogène, par exemple, le deutérium ([2H]);
 - atome d'hydrogène lié à un atome chiral.

5. Les quatre liaisons de base sont représentées comme suit:

Type de liaison	Notation SMILES
Simple	- (non représentée)
Double	=
Triple	N°
Aromatique	Lettres minuscules

6. Les substituants sont placés entre parenthèses immédiatement après les atomes auxquels ils sont liés:

«2-methylbutane» (2-méthylbutane): CC(C)CC

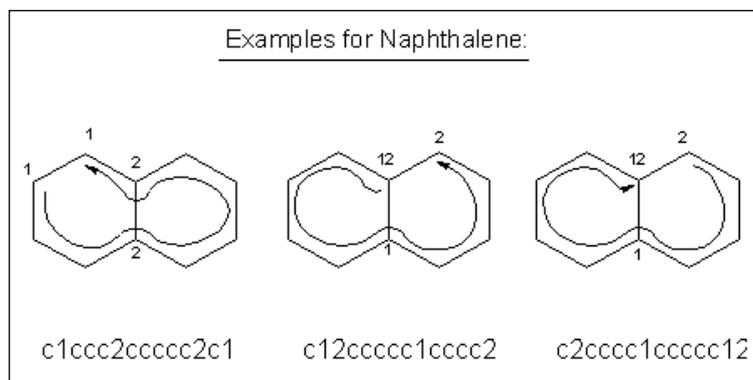
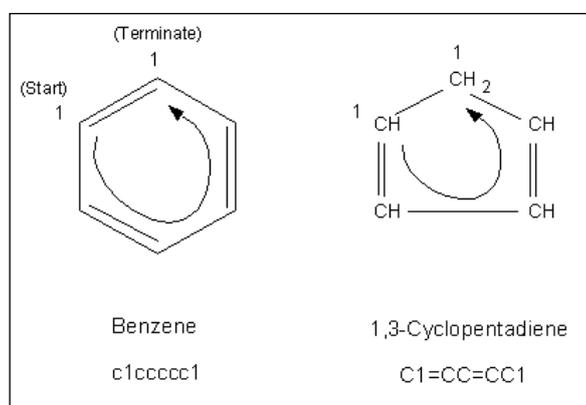
- a les substituants sont toujours représentés directement après les atomes concernés; ils ne peuvent pas suivre un symbole de double liaison ou de triple liaison:

«Pentanoic acid» (acide pentanoïque): CCCC(=O)O

- b. les substituants à l'intérieur d'un substituant sont autorisés:

«2-(1-méthylethyl)butane» (2-(1-méthyléthyl)butane): CC(C(C)C)CC

7. Pour les structures cycliques, les nombres 1 à 9 sont utilisés pour indiquer l'atome initial et l'atome terminal du cycle.
- le même nombre est utilisé pour indiquer l'atome initial et l'atome terminal de chaque cycle. Ces deux atomes doivent être liés entre eux. b. les nombres sont placés immédiatement après les atomes utilisés pour indiquer les positions initiale et terminale.
 - un atome initial ou un atome terminal peut être associé à deux nombres consécutifs. atome terminal
 - 1,3-Cyclopentadiene Exemples pour «Naphthalene» (le naphthalène):



8. Les composés non liés sont désignés comme structures ou ions individuels séparés par un point («.»). Les atomes adjacents séparés par un point («.») ne sont pas directement liés les uns aux autres, par exemple, dans le cas d'une liaison de Van der Waals:

«Aminopropene hydrochloride» (chlorhydrate d'aminopropène):

9. C=CC(N).HCl La configuration isomérique est spécifiée par un slash «/» ou un anti-slash «\». Ces symboles indiquent la direction relative entre les doubles liaisons des isomères: (cis = «/ \», trans = «/ /»). La notation SMILES utilise la chiralité locale, ce qui signifie que la chiralité doit être complètement spécifiée:

«cis-1,2-dibromoethene» (cis-1,2-dibromoéthène): Br/C=C\Br

«trans-1,2-dibromoethen» (trans-1,2-dibromoéthène): Br/C=C/Br

10. Les énantiomères ou la chiralité sont spécifiés par le symbole «@». Le symbole «@» indique que les atomes voisins de l'atome chiral sont énumérés suivant le sens inverse des aiguilles d'une montre. Si le symbole «@@» est utilisé, les atomes sont énumérés suivant le sens des aiguilles d'une montre. L'atome chiral et le symbole «@» sont notés entre crochets:

«2-chloro-2-hydroxypropanoic acid» (acide 2-chloro-2-hydroxypropanoïque) avec spécification de la chiralité: C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)

11. Les spécifications isotopiques sont indiquées en faisant précéder le symbole atomique par un nombre entier égal à la masse atomique correspondante. Une masse atomique ne peut être spécifiée qu'entre crochets:

«Carbon-13» (carbone 13): [13C]; «Oxygen-18» (oxygène 18): [18O]

Pour la détermination de la notation SMILES, plusieurs outils (générateurs SMILES) sont disponibles (voir l'annexe 1).

7 Informations sur l'activité optique

L'activité optique est la capacité des substances asymétriques de faire tourner le plan de polarisation de la lumière. De telles substances, et leurs images dans un miroir, sont appelées énantiomères et possèdent un ou plusieurs centres chiraux. Bien qu'ils aient des arrangements géométriques différents, les énantiomères possèdent des propriétés chimiques et physiques identiques. Étant donné que chaque type d'énantiomère a une incidence différente sur la lumière polarisée, l'activité optique peut être utilisée pour déterminer quel énantiomère est présent dans un échantillon et ainsi, également la pureté de la substance. L'amplitude de la rotation est une propriété intrinsèque de la molécule.

Les énantiomères induisent toujours une rotation de même amplitude, mais en sens opposé. L'activité optique d'un mélange d'énantiomères est donc une indication du ratio entre les deux énantiomères. Un mélange 50/50 d'énantiomères présente une activité optique nulle.

La rotation observée dépend de la concentration, de la longueur du tube contenant l'échantillon, de la température et de la longueur d'onde de la source de lumière.

L'activité optique est, par conséquent, le paramètre de choix pour identifier une substance asymétrique; et il est le seul paramètre qui permette de distinguer la substance de son image dans un miroir. L'activité optique de la substance doit donc être indiquée, s'il y a lieu.

L'activité optique standard est appelée «rotation spécifique». La rotation spécifique est définie comme étant la rotation observée à la longueur d'onde de 5896 angströms, avec une longueur de trajectoire de 1 dm et une concentration de l'échantillon de 1 g/ml. La rotation spécifique est calculée en divisant la rotation observée par la longueur de trajectoire (dm) et en multipliant par la concentration (g/ml).

L'activité optique peut être mesurée à l'aide de plusieurs méthodes différentes. Les plus courantes sont:

- la rotation optique, méthode dans laquelle est mesurée la rotation du plan de polarisation d'un faisceau de lumière traversant l'échantillon;
- le dichroïsme circulaire, méthode dans laquelle est mesurée l'absorption par l'échantillon d'une lumière polarisée à droite et à gauche.

Si la substance fait tourner la lumière vers la droite (dans le sens des aiguilles d'une montre), elle est appelée dextrogyre et est désignée par le signe +. Si elle fait tourner la lumière vers la gauche (dans le sens inverse des aiguilles d'une montre), elle est appelée lévogyre et est désignée par le signe -.

8 Poids moléculaire ou intervalle de poids moléculaire

Le poids moléculaire est le poids d'une molécule de la substance exprimé en unités de masse atomique (uma) ou sous la forme d'une masse molaire (g/mol). Le poids moléculaire peut être calculé à partir de la formule moléculaire de la substance: il est égal à la somme des poids atomiques des atomes qui composent la molécule. Pour les molécules comme certaines protéines ou des mélanges réactionnels indéfinis pour lesquelles un seul poids moléculaire ne peut être déterminé, un intervalle de poids moléculaire peut être indiqué.

Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour déterminer le poids moléculaire des substances:

- Pour déterminer le poids moléculaire des substances gazeuses, la loi d'Avogadro peut être utilisée. Cette loi indique que, dans certaines conditions de température et de pression, un volume donné d'un gaz quelconque contient un nombre spécifique de molécules de ce gaz:

$$PV = nRT = NkT$$

n = nombre de moles

R = constante universelle des gaz parfaits = 8,3145 J/mol/K

N = nombre de molécules

k = constante de Boltzmann = 1,38066.10⁻²³ J/K = 8,617385.10⁻⁵ eV/K

k = R/NA

NA = nombre d'Avogadro = 6,0221.10²³ /mol

- Pour les substances liquides et solides, le poids moléculaire peut être établi par détermination de leurs effets sur le point de fusion, le point d'ébullition, la pression de vapeur, ou la pression osmotique d'un solvant.
- La spectrométrie de masse est une méthode de mesure très précise.
- Pour les molécules de substances complexes ayant un poids moléculaire élevé, comme les protéines ou les virus, le poids moléculaire peut être déterminé par mesure, par exemple de la vitesse de sédimentation dans une ultracentrifugeuse ou par photométrie de diffusion de la lumière.
- Plusieurs outils permettent de calculer le poids moléculaire à partir du schéma structural ou de la formule moléculaire de la substance (voir l'annexe 1).

9 Composition de la substance

Pour chaque substance, la composition doit être indiquée sous la forme d'une combinaison de ses constituants principaux, additifs et impuretés conformément aux règles et critères décrits au chapitre 4 du présent document d'orientation.

Chaque constituant, additif ou impureté doit être correctement identifié par:

- son nom (nom IUPAC ou autre nom reconnu au niveau international);
- son numéro CAS (si disponible);
- son numéro CE (si disponible).

Pour chaque constituant, additif ou impureté, il convient d'indiquer son pourcentage (de préférence en poids, ou en volume), dans la mesure du possible, en tant qu'intervalle de

concentration dans la substance commerciale.

Pour le ou les constituants, le pourcentage de pureté habituel, assorti des limites supérieure et inférieure pour des lots commerciaux habituels, doit être indiqué; pour les additifs et les impuretés le pourcentage de pureté habituel ou les limites supérieure et inférieure doivent être indiquées. Les valeurs fournies doivent en principe correspondre à un total de 100 %.

10 Données spectrales

Les données spectrales sont nécessaires pour confirmer la structure fournie pour une substance monoconstituant ou pour confirmer qu'un mélange réactionnel n'est pas une préparation. Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour générer des spectres (UV, IR, résonance magnétique nucléaire ou spectre de masse). Toutes les méthodes ne sont pas appropriées pour tous les types de substances. Dans la mesure du possible, le présent document d'orientation donnera des indications sur les spectres appropriés à inclure selon les différents types de substances (BCE, 2004; BCE, 2005).

Pour les méthodes bien connues, les informations suivantes doivent être indiquées sur le spectre lui-même ou en annexe:

Spectre ultraviolet-visible (UV-VIS)

- identité de la substance;
- solvant et concentration;
- intervalle de concentration;
- position (et valeurs epsilon) des principaux pics;
- effet des acides;
- effet des bases;

Spectre infrarouge (IR)

- identité de la substance;
- milieu;
- intervalle de concentration;
- résultats (indiquer les principaux pics importants pour l'identification, par exemple, interprétation de la zone de l'«empreinte digitale»).

Spectre de résonance magnétique nucléaire (RMN)

- identité de la substance;
- noyau et fréquence;
- solvant;
- s'il y a lieu, référence interne ou externe;
- résultats (indiquer les signaux importants pour l'identification de la substance et les signaux correspondant au solvant et aux impuretés);
- Pour les spectres RMN 1H, la courbe d'intégration doit être fournie.
- Pour les pics RMN de faible intensité, il convient de dilater l'échelle verticale et, pour les spectres complexes, l'échelle horizontale.
-

Spectre de masse (MS)

- identité de la substance;

- tension d'accélération;
- méthode de chargement (insertion directe, couplage CG/MS, etc.);
- mode d'ionisation (impact d'électrons, ionisation chimique, désorption de champ, etc.);
- ion moléculaire (M);
- fragments significatifs pour l'identification de la substance;
- valeurs m/z ou valeurs affectées aux pics importants pour l'identification de la structure;
- il convient de dilater l'échelle horizontale pour les spectres complexes.

D'autres méthodes reconnues au niveau international peuvent également être utilisées si les données spectrales confirment l'identification de la substance, par exemple, sa structure interne. Des exemples comprennent la diffraction des rayons X pour identifier les constituants d'oxydes minéraux complexes et la fluorescence X pour analyser leur composition chimique.

Il convient de respecter les exigences générales suivantes pour une bonne compréhension et/ou interprétation des spectres:

- Noter les longueurs d'onde significatives ou d'autres données le cas échéant;
- Fournir des informations supplémentaires, par exemple, les spectres des matières de départ;
- Indiquer le solvant utilisé et/ou d'autres détails essentiels, comme indiqué ci-dessus pour certaines méthodes;
- Fournir des copies claires (plutôt que des originaux) en indiquant bien les échelles;
- Fournir des informations sur les concentrations de substance utilisées;
- S'assurer que l'intensité des pics les plus intenses de la substance soit proche de la pleine échelle.

11 Chromatographie en phase liquide à haute pression, chromatographie en phase gazeuse

Le cas échéant, selon le type de substances, un chromatogramme doit être fourni pour confirmer sa composition. Par exemple, un chromatogramme approprié permet de confirmer l'existence des impuretés, des additifs et des constituants d'un mélange réactionnel. Les deux méthodes les plus connues pour la séparation et l'identification des mélanges sont la chromatographie en phase gazeuse (CG) et la chromatographie liquide à haute pression (CLHP). Ces deux méthodes sont basées sur l'interaction entre une phase mobile et une phase stationnaire, pour conduire à la séparation des constituants d'un mélange.

Pour les chromatogrammes CG/CLHP, les informations suivantes doivent être indiquées sur le chromatogramme lui-même ou en annexe (BCE, 2004; BCE, 2005):

CLHP

- identité de la substance;
- propriétés de la colonne, telles que diamètre, compactage, longueur;
- température, et gamme de température le cas échéant;
- composition de la phase mobile et gamme de composition le cas échéant;
- intervalle de concentration de la substance;
- méthode de visualisation, par exemple, UV-VIS;
- résultats (indiquer les pics principaux importants pour l'identification de la substance);

CG

- identité de la substance;
- propriétés de la colonne, telles que diamètre, compactage, longueur;
- température, et gamme de température le cas échéant;
- température d'injection;
- nature et pression du gaz vecteur;
- intervalle de concentration de la substance;
- méthode de visualisation, par exemple, SM;
- identification des pics;
- résultats (indiquer les pics principaux importants pour l'identification de la substance).

12 Description des méthodes d'analyse

L'annexe VI de REACH requiert que le déclarant décrive les méthodes d'analyse et/ou fournisse les références bibliographiques relatives aux méthodes utilisées pour l'identification de la substance et, le cas échéant, des impuretés et additifs. Ces informations doivent être suffisantes pour que les méthodes puissent être reproduites.

Annexe III – Identification des substances et soumission conjointe des données

La partie principale du présent guide décrit les principes généraux que les déclarants potentiels doivent observer lorsqu'ils identifient les substances à enregistrer spécifiques à leur entité légale. La présente annexe fournit des conseils pratiques aux déclarants potentiels sur la manière d'appliquer les principes d'identification des substances lors de leur définition collective de l'identité et du champ d'application de l'identité de la substance aux fins d'un enregistrement commun, selon le principe d'«une substance - un enregistrement» (OSOR) du règlement REACH. Pour plus d'informations sur les obligations de soumission conjointe et le processus de partage des données en général, veuillez consulter le «Guide technique: partage des données», disponible à l'adresse <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

Il est implicite que les mêmes principes d'identification des substances exposés dans le guide principal s'appliquent, en fonction du type de substance, pour l'identité de la substance unique aux fins de l'enregistrement commun.

En effet, les premières parties des articles 11, paragraphe 1, et 19, paragraphe 1, du règlement REACH imposent une exigence de «soumission conjointe de données par plusieurs déclarants». Plus précisément, en vertu de ces dispositions, «lorsqu'il est prévu qu'une substance sera fabriquée dans la Communauté par un fabricant ou plus et/ou importée par un importateur ou plus», les informations relatives aux propriétés de la substance et à sa classification «sont d'abord soumises par un seul déclarant agissant avec l'assentiment du ou des autre(s) déclarant(s) (ci-après dénommé "déclarant principal")».

Le règlement d'exécution (UE) 2016/9 de la Commission relatif à la soumission conjointe de données et au partage des données réaffirme et renforce l'obligation de plusieurs déclarants d'une même identité de substance de soumettre certaines informations conjointement. En pratique, la soumission conjointe d'informations nécessite que les parties concernées conviennent des limites et du champ d'application de l'identité de la substance. Ces caractéristiques sont appelées le profil d'identité de la substance, ou PIS. Le PIS est destiné à préciser les limites de la substance que les déclarants conviennent de couvrir par les données soumises conjointement. Ceci concerne également les déclarants qui peuvent avoir choisi de renoncer à soumettre certaines informations conjointement.

Ainsi, l'accord sur le champ d'application de l'identité de la substance couverte par l'enregistrement constitue une condition préalable à la soumission conjointe. La transparence sur le champ d'application de l'identité de cette substance unique et sur les données auxquelles elle se réfère est essentielle pour la mise en œuvre. Par conséquent, le champ d'application de la substance ou du PIS doit être déclaré dans des termes clairs dans le dossier du déclarant principal au nom de tous les autres déclarants, tandis que ces derniers communiquent individuellement leurs informations sur la composition.

Dans la figure 1 ci-dessous, un exemple simple illustre de manière schématique une façon d'établir le profil d'identité d'une substance pour des produits chimiques fabriqués ou importés dans l'UE par des déclarants individuels. Il décrit l'identification de la substance à enregistrer, le regroupement des différentes compositions, la production des données et enfin, leur soumission au format IUCLID dans un dossier d'enregistrement. Cet exemple concerne une substance monoconstituant bien définie bénéficiant d'un régime transitoire. Pour les substances plus complexes, le processus de définition du PIS peut comprendre des itérations entre les étapes 3 et 5 de la figure.

Lors des discussions entre les déclarants potentiels, la documentation du PIS peut se présenter, par exemple, sous la forme d'un document Word ou d'une feuille Excel où les informations pertinentes convenues sont enregistrées et mises à la disposition de tous les membres et membres potentiels. Certaines associations sectorielles ont mis à disposition

des modèles pour présenter la documentation du PIS, et ceux-ci ont été utilisés par de nombreux déclarants (p. ex. le modèle Cefic³⁴). D'autres ont simplement consigné les informations pertinentes dans un document Word ou sur la page web d'un consortium formé pour travailler sur l'enregistrement de la substance concernée.

2. Définir l'identité et le champ d'application d'une substance correspondant aux données soumises pour enregistrement

Les étapes qui peuvent être suivies par plusieurs déclarants potentiels pour définir l'identité de la substance correspondant aux données qu'ils soumettent conjointement sont illustrées schématiquement dans l'exemple présenté à la figure 1 (étapes 1 à 4) pour les substances simples bien définies.

Chaque déclarant potentiel détermine ses obligations correspondant à ce qu'il fabrique ou importe, en se fondant sur la définition de la substance visée à l'article 3, paragraphe 1, et en appliquant les principes d'identification de la substance décrits dans la partie principale du présent guide (étape 1 et 2 de la figure 1).

Chaque déclarant potentiel peut ensuite vérifier si d'autres déclarants potentiels sont parvenus aux mêmes «noms et autres identifiants» (étape 3). A partir de ce point de départ, les déclarants potentiels peuvent appliquer collectivement les principes de la partie principale du présent guide pour définir les limites de l'identité de la substance correspondant aux données qu'ils soumettent conjointement, c'est-à-dire le profil d'identité de la substance (étape 4).

Ce PIS décrit de manière générique le champ d'application de la substance en termes d'informations sur sa composition (comprenant tous les autres paramètres pertinents tels que la morphologie, c'est-à-dire la forme physique), son nom et les autres identifiants pour lesquels la classification et les données sur les risques soumises conjointement seront pertinentes. La définition du PIS ne doit pas adopter une approche trop conservatrice pour éviter d'exclure des concurrents de la soumission conjointe.

Le PIS établit le lien inhérent entre l'identité de la substance et les données sur les risques à soumettre conjointement. S'il est établi suffisamment tôt, il peut faciliter le stade de la production/ de la collecte d'informations lors du processus visant à s'acquitter des obligations d'enregistrement (décrit dans le Guide sur les exigences d'information et l'évaluation de la sécurité chimique; étape 5 de la figure 1 ci-dessous) afin de garantir que les données créées ou recueillies couvrent toute l'étendue de l'identité de la substance.

Comme il a été décrit dans les sections 4.2.3 et 4.3 du guide principal, pour les substances plus complexes, des paramètres supplémentaires et/ou des descripteurs pour les informations sur la composition (p. ex la description de la source/du processus) sont généralement utilisés par les déclarants potentiels aux étapes 1-3, et ceux qui sont approuvés peuvent ensuite être inclus dans le PIS (étape 4). Dans certains cas, le lien entre la limite de l'identité de la substance et les données sur les risques soumises conjointement peut même se révéler clairement uniquement lorsque tout ou partie des données disponibles sur les risques ont été recueillies. Il peut exister des itérations entre les étapes 3 et 5, si nécessaire en fonction de la complexité de l'identité de la substance et des données recueillies à l'étape 5, p. ex. lorsque certaines compositions comprennent des constituants qui entraînent une classification et un étiquetage et/ou une évaluation des propriétés PBT. Le PIS peut com-

³⁴ Le PIS a été décrit initialement dans le Guide à l'intention des déclarants principaux : « *Guidance for Lead Registrants* », disponible à l'adresse : <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Des exemples de PIS élaborés par des déclarants à l'aide de ce modèle sont consultables sur le site web de ReachCentrum: <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

prendre plusieurs profils de composition afin de décrire de manière adéquate les limites de l'identité de la substance.

Le PIS doit fournir des informations génériques permettant la détermination des limites de l'identité de la substance correspondant aux données soumises conjointement:

- nom de la substance
- autres identifiants (p. ex. numéros CAS, CE, formules moléculaires et structurales, description le cas échéant) couverts par l'ensemble des déclarants de l'identité de la substance concernée
- informations sur la composition:
 - identité des constituants pertinents pour l'identification de la substance et intervalles de concentration respectifs,
 - liste générique des identités des stabilisants pertinents pour l'identification de la substance (et intervalles de concentration respectifs le cas échéant),
 - liste générique des paramètres supplémentaires pertinents pour le type de substance (p. ex., descripteurs de processus source pour certaines UVCB)

Il est important que les paramètres qui définissent les limites de l'identité de la substance qui fait l'objet de la soumission conjointe soient convenus par tous les déclarants conjoints et soient clairement documentés dans le PIS. En conséquence, il peut être nécessaire de modifier ou d'élargir un PIS suite à la demande de tout nouveau déclarant potentiel, si les déclarants conviennent que tout ou partie des données soumises conjointement sont également pertinentes pour la substance fabriquée ou importée par ce déclarant.

Le PIS ne doit pas entraîner le partage d'informations commerciales confidentielles entre les déclarants ni la divulgation de telles informations à des tiers étrangers à la soumission conjointe. Si des informations commerciales potentiellement confidentielles nécessitent d'être partagées par les déclarants conjoints afin de définir clairement le PIS, ils peuvent envisager d'avoir recours à un mandataire, comme indiqué dans le «Guide technique: partage des données».

3. Orientations pratiques concernant la documentation du profil d'identité de la substance

Les principes généraux de l'identification d'une substance pour les substances bien définies et les UVCB sont décrits dans le guide principal. Nous donnons ci-dessous des orientations pratiques sur la manière d'appliquer ces principes collectivement. Le guide principal prévoit la possibilité de dérogations aux principes généraux. De telles dérogations nécessitent que les déclarants soient en mesure de démontrer le lien inhérent entre l'identité de la substance et les données sur les risques soumises conjointement.

3.1 Substances bien définies

Pour une substance bien définie, le principe de $\geq 80\%$ (m/m) pour l'identification des substances monoconstituant et le principe de $< 80\%$, $\geq 10\%$ pour l'identification des substances multiconstituant doivent être observés lors de la définition du ou des principal(aux) constituant(s) et de leurs intervalles de concentration et impuretés. Ceci s'applique à chaque déclarant individuel et à tous les déclarants multiples collectivement, lors de la détermination du PIS. En particulier, les profils d'impuretés convenus dans le PIS devront être déclarés. Si le PIS comprend des impuretés spécifiques qui pourraient influencer sur la classification et l'étiquetage et/ou l'évaluation des propriétés PBT, les déclarants concernés par ces impuretés devront les prendre en compte dans la phase de recueil des données (étape 5). Les informations pertinentes de l'annexe VII-XI peuvent être soumises conjointement ou séparément, conformément à l'article 11, paragraphe 3, du règlement REACH (possibilité de «soumissions séparées»). Les valeurs de concentration à déclarer doivent tenir compte de l'intervalle de concentration couvrant la soumission conjointe.

Pour les substances qui nécessitent des paramètres supplémentaires pour enregistrer leur identification de manière non équivoque, chaque déclarant devra observer les principes dé-

crits au chapitre 4.2.3 de la partie principale du présent guide. Il convient d'examiner si la variabilité de ces paramètres entraînerait un ajustement, si nécessaire, de la classification ou des données sur les risques soumises conjointement. Aux fins de la détermination du PIS dans le cadre de la soumission conjointe, des considérations similaires peuvent être appliquées. Par exemple, il peut être nécessaire d'inclure, dans le profil d'identité de la substance, les paramètres (p. ex. la forme physique et/ou les paramètres morphologiques tels que la porosité, la taille et la forme des particules) qui peuvent influencer sur les propriétés pertinentes pour déterminer le profil de risque (p. ex. la solubilité, la réactivité, la toxicité par inhalation, etc.). Lorsque c'est le cas, les intervalles génériques de ces paramètres couverts par le PIS devront être fournis en toute transparence (p. ex. les intervalles de taille des particules applicables à tous les déclarants et la liste de leur(s) forme(s), ainsi que la liste des chimies des surfaces). Ainsi, l'exhaustivité des données sur le risque soumises conjointement dans le cadre du PIS est garantie.

De même, les différences dans la phase cristalline des produits chimiques inorganiques peuvent susciter différentes considérations sur les profils de risque concernant spécifiquement ces phases (p. ex. quartz, cristobalite, silice amorphe). En tenant compte de la différence éventuelle des propriétés des diverses phases, il incombe aux déclarants potentiels de ces substances d'examiner s'ils souhaitent soumettre un unique enregistrement conjoint couvrant toutes les phases, comprenant les données sur les risques spécifiques aux différentes phases, ou différents enregistrements conjoints pour les différentes phases (c'est à dire différentes identités de substance). Dans les deux cas, les phases couvertes devront être énumérées dans le PIS et les données pertinentes de l'annexe VII-XI devront traiter toutes les phases couvertes par l'enregistrement, garantissant ainsi que les données couvrent toute l'étendue du PIS.

Il convient de noter que les compositions peuvent présenter différents profils d'impureté et/ou de risque et que ces différences ne signifient de ne pas nécessairement que ces compositions ne peuvent pas être consignées dans le même enregistrement.

3.2 Substances UVCB

Pour les UVCB, l'identification peut être plus difficile; par conséquent, une documentation transparente est très utile pour convenir de l'identité de la substance aux fins de l'enregistrement conjoint. Chaque déclarant potentiel devra tenir compte, individuellement, des conseils qui figurent dans la partie principale du présent guide, puis appliquer les mêmes principes collectivement. Notons que le regroupement des intervalles de concentration dans le PIS pourrait aboutir à un profil présentant de très larges intervalles de concentration, éventuellement jusqu'au point où l'on ne peut plus considérer qu'il s'agit d'une substance unique.

Comme nous l'avons décrit dans le guide principal, l'identification de certaines substances UVCB se fonde sur la source et le processus utilisés dans leur fabrication plutôt que directement sur les identités et les intervalles de concentration de leurs constituants. Dans ces cas, d'autres descripteurs font office d'approximations pour les identités des constituants et leurs intervalles de concentration respectifs. Les déclarants potentiels peuvent décrire le processus de fabrication en termes de source et de processus dans la mesure nécessaire pour identifier la substance. La description peut comprendre tous les paramètres/les éléments de caractérisation que les déclarants jugent pertinents pour l'identité de leur substance (voir par exemple le **tableau 5** dans le guide principal). Aux fins de l'enregistrement conjoint, les descriptions sont partagées uniquement si nécessaire pour convenir du champ d'application de l'identité de la substance UVCB pour l'enregistrement. Les déclarant potentiels peuvent observer les principes décrits dans le guide principal, à la fois individuellement, et, ensuite, collectivement. Le PIS aboutit ainsi à une déclaration générique des paramètres de source et de processus, de telle sorte qu'il couvre toute l'étendue des compositions de chaque déclarant. Ceci est illustré schématiquement dans la **figure 2**.

Pour les substances identifiées sur le fondement de la source et du processus, comme il est décrit dans le guide principal, tout changement important de source ou de processus est susceptible d'aboutir à une identité de substance différente qui doit être enregistrée séparément. Les dérogations à ce principe impliqueraient que les déclarants puissent démontrer que chaque combinaison de processus et de source produit des compositions qui peuvent être traitées dans le même enregistrement conjoint. Des variations mineures des matériaux sources et du processus et/ou des conditions du processus peuvent être prises en compte dans le PIS. Les déclarants doivent convenir que chaque combinaison de processus/source produit des compositions qui sont similaires au point qu'il est judicieux de les couvrir en tant qu'identité de substance unique, et doivent s'assurer que les données sur les risques sont appropriées pour l'ensemble de la zone de variation du PIS. Plus précisément, les déclarants doivent être en mesure de justifier que l'ensemble de données sur les risques soumis conjointement est pertinent pour toutes ces compositions ou est adapté, le cas échéant, au moyen des informations soumises séparément pour les compositions spécifiques en vertu de l'article 11, paragraphe 3, du REACH (soumission séparée).

Afin de démontrer la pertinence de l'ensemble de données pour chaque combinaison de processus et de source, ces combinaisons doivent être documentées en toute transparence dans le PIS afin d'étayer les critères d'inclusion et d'exclusion appliqués pour les déclarants conjoints actuels et futurs.

Pour les autres types d'UVCB (voir le chapitre 4.3.2 du guide principal), une combinaison de descripteurs supplémentaires et de composition peut être utilisée par les déclarants potentiels, le cas échéant. Par exemple, pour certains produits oléochimiques, la composition est variable en raison de la variabilité des distributions des longueurs de la chaîne alkyle des constituants, et la distribution des longueurs de la chaîne alkyle peut être un descripteur supplémentaire utilisé dans l'identification. L'approche adoptée par le FEIS devrait être documentée en toute transparence dans leur PIS.

3.3 Profil d'identité de la substance

Il incombe à tous les déclarants qui soumettent des informations conjointement de convenir des paramètres nécessaires pour l'identification de leur substance et de les documenter en toute transparence dans leur PIS correspondant. Les écarts ou les dérogations aux principes normaux d'identité de la substance effectués collectivement nécessitent d'être documentés en toute transparence. Étant donné que le PIS documente les critères d'inclusion et d'exclusion, le FEIS devra veiller à ce que les critères appliqués soient transparents et à ce que les données pertinentes de l'annexe VII-IX collectées ou produites couvrent tous les profils de composition convenus.

Si des déclarants potentiels incluent individuellement, dans leur profil d'identité, des additifs stabilisants visés à l'article 3, paragraphe 1, leurs identités et intervalles de concentration doivent être convenus et déclarés en toute transparence dans le PIS.

Au stade du recueil des données, la pertinence du ou des matériau(x) d'essai utilisés pour produire ou collecter des données afin de remplir les exigences d'information de l'annexe VII-XI doit être examinée. Les justifications des conclusions sur leur représentativité pour les compositions couvertes par le PIS doivent être documentées et incluses dans le dossier technique. Ceci est particulièrement important pour les identités de substances complexes qui couvrent des profils de composition étendus.

Au cours du recueil de données, les déclarants potentiels peuvent déterminer que leur PIS est trop étendu et n'est pas adapté aux fins de la soumission conjointe des informations sur les risques qui sont représentatives de l'identité de la substance concernée. Dans un tel cas, les déclarants potentiels peuvent décider de diviser le FEIS pour traiter séparément plusieurs substances³⁵. Chaque substance aurait alors son propre PIS et sa propre soumission

³⁵ Des considérations sur le rôle de l'EINECS dans l'établissement de l'identité de la substance dans le cadre de REACH peuvent être consultées dans le document CARACAL adopté lors de la 4^e réunion des Autorités compétentes

conjointe des informations sur les risques qui doivent être spécifiquement représentatives de l'identité de la substance. Les raisons pour lesquelles certaines informations sur les risques n'étaient pas représentatives de certains paramètres de l'identité de la substance devront être documentées en toute transparence dans le PIS pour chaque enregistrement distinct. Les déclarants potentiels respectifs peuvent également décider, à ce stade, que les profils de composition doivent être encore affinés en se fondant sur les constituants et/ou les impuretés qui entraînent une classification, un étiquetage, une évaluation des propriétés PBT, etc.

Les déclarants potentiels qui envisagent de rejoindre d'autres déclarants potentiels lorsqu'un PIS a déjà été convenu par ceux-ci, et si l'enregistrement n'a pas encore été soumis, devront examiner si leurs informations relatives à l'identité de la substance se situent dans les limites du PIS. Si ce n'est pas le cas, ils devront discuter et convenir avec les déclarants potentiels s'il est nécessaire soit d'élargir le champ d'application du profil pour inclure le nouveau membre, soit de convenir qu'il n'entre pas dans ledit champ d'application. Une adaptation du PIS sera nécessaire si la substance à enregistrer par le déclarant potentiel présente des paramètres d'identité de substance spécifiques qui pourraient altérer la représentativité des informations sur les risques soumises conjointement, et par conséquent nécessiter une justification spécifique (p. ex. une impureté spécifique, un rapport de composition différent, une phase différente, une taille de particule différente, etc.). À des fins de transparence, ce paramètre devra être précisé dans le PIS.

Dans les cas individuels, les déclarants potentiels et existants peuvent convenir que les données sur les risques soumises conjointement ne sont pas fondamentalement représentatives de la substance du déclarant potentiel, en raison d'un écart des paramètres d'identité de la substance qui ne se situent pas dans les limites du PIS convenues. Dans ce cas, le déclarant potentiel soumettra un enregistrement distinct, soit avec d'autres déclarants avec une identité de substance comprenant ce paramètre, ou individuellement, s'il n'y pas d'autres déclarants pour la même identité de substance.

4. Déclarer le profil d'identité de la substance dans le dossier d'enregistrement

Lorsque les déclarants potentiels ont recueilli ou produit toutes les données de l'annexe VII-XI requises pour leur substance (étape 5 de la **figure 1**), l'ensemble de données est prêt à être déclaré au format IUCLID dans les dossiers qui seront soumis à l'Agence (étape 6 de la **figure 1**). Pour déclarer le PIS au format IUCLID, le nom et les autres identifiants, les informations sur la composition et les autres paramètres pertinents sont déclarés dans les sections 1.1 et 1.2 d'IUCLID.

Profil d'identité de la substance	Déclaré dans IUCLID
nom et autres identifiants	Section 1.1 de tous les dossiers
informations sur la composition et autres paramètres le cas échéant	Section 1.2 du dossier du déclarant principal

Les nom et autres identifiants du PIS sont déclarés dans la section 1.1 de tous les dossiers. Le déclarant principal déclare les informations sur la composition et les autres paramètres du PIS, le cas échéant, dans la section 1.2 de son dossier, sous la forme d'une «composition limite de la substance»³⁶. Le déclarant principal doit également soumettre toutes les don-

pour REACH et CLP (CARACAL) : CA/74/2009 rev.2 «Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)».

³⁶ Les instructions sur la manière de saisir la «composition limite de la substance» sont consultables dans le manuel

nées pertinentes de l'annexe VII-XI dans les sections 4-14 (en l'absence de soumission séparée justifiée pour une ou plusieurs des exigences d'information) au nom de tous les déclarants.

Chaque déclarant (y compris le déclarant principal) déclare dans la section 1.2 de son propre dossier, pour sa propre entité légale, les informations sur la composition de la substance spécifique qu'il fabrique ou importe. Ceci signifie que le déclarant principal déclare à la fois les informations sur la composition du PIS et ses informations sur la composition pour sa propre entité légale dans la section 1.2 de son dossier, tandis que les autres déclarants déclarent leurs propres informations spécifiques relatives à la composition. Chaque enregistrement type doit également comprendre les informations analytiques pertinentes dans la section 1.4 d'IUCLID.

Chaque déclarant doit démontrer que les informations sur la composition des substances spécifiques qu'il fabrique ou importe sont couvertes par le PIS comme il est déclaré dans la «composition limite», et également par les données de l'annexe VII-XI soumises dans le dossier du déclarant principal (en l'absence de soumission séparée justifiée).

Des instructions techniques sur la manière de déclarer les informations sur la composition au format IUCLID sont disponibles dans les manuels IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

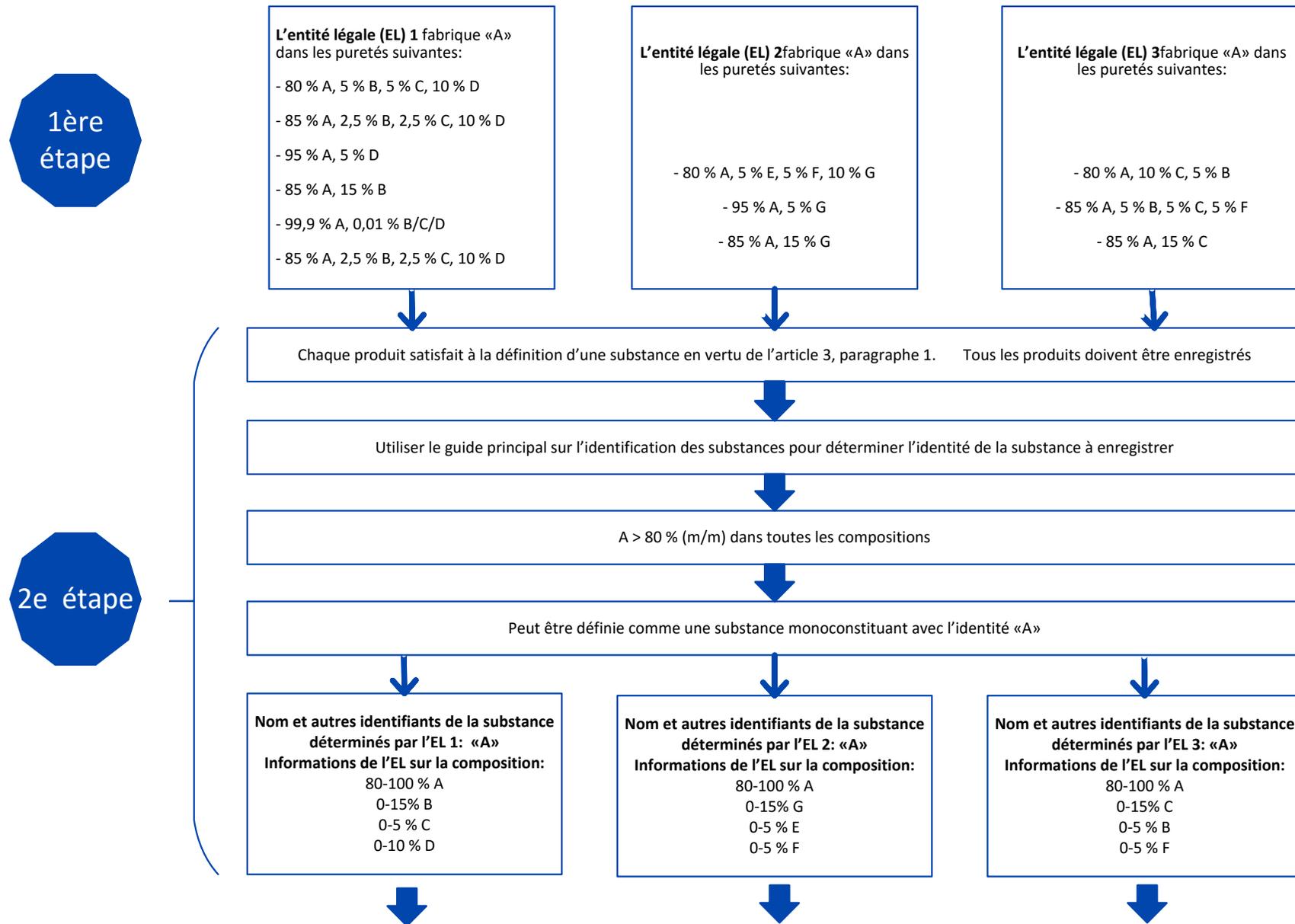
5. Mesures de transition entre IUCLID 5 et 6

Dans IUCLID 5, il n'existait pas de champ pour déclarer en toute transparence les informations du PIS sur la composition dans la section 1.2 du dossier du déclarant principal. Certains déclarants principaux fournissaient ces informations à l'aide d'étiquettes pour indiquer que les informations se référaient au PIS.

IUCLID 6 gère cette déclaration de manière transparente et systématique. Les détails techniques sont disponibles dans le manuel IUCLID correspondant.

Le document «Transition to the new IT tools – how to prepare» (Transition vers les nouveaux outils informatiques – Comment se préparer» (disponible à l'adresse <http://echa.europa.eu/manuals>) apporte des informations détaillées sur les mesures de transition pour les dossiers d'enregistrement principaux saisis dans IUCLID 5 qui soumettent des mises à jour dans IUCLID 6 et doivent inclure dans la section 1.2 les informations sur la composition dans le cadre de l'identité de la substance; ce document est disponible sur le site web de l'ECHA.

Figure 2 (page suivante): **vue d'ensemble des étapes à suivre par les déclarants potentiels, depuis la détermination de leurs obligations d'enregistrement (1) jusqu'à la soumission finale de leurs enregistrements afin qu'ils s'acquittent formellement de leurs obligations d'enregistrement de leurs substances (8), en passant par la définition de leur PIS pour leur identité de substance unique (4).**



Note concernant la figure: l'identité de la substance est un monoconstituant simple pour la rendre plus facile à visualiser. Pour les substances plus complexes, les étapes sont identiques, mais il est possible d'utiliser des éléments supplémentaires et/ou des approximations pour les informations sur la composition afin de définir l'identité de la substance. Le processus de définition du PIS peut également impliquer des itérations entre les étapes 3 et 5.

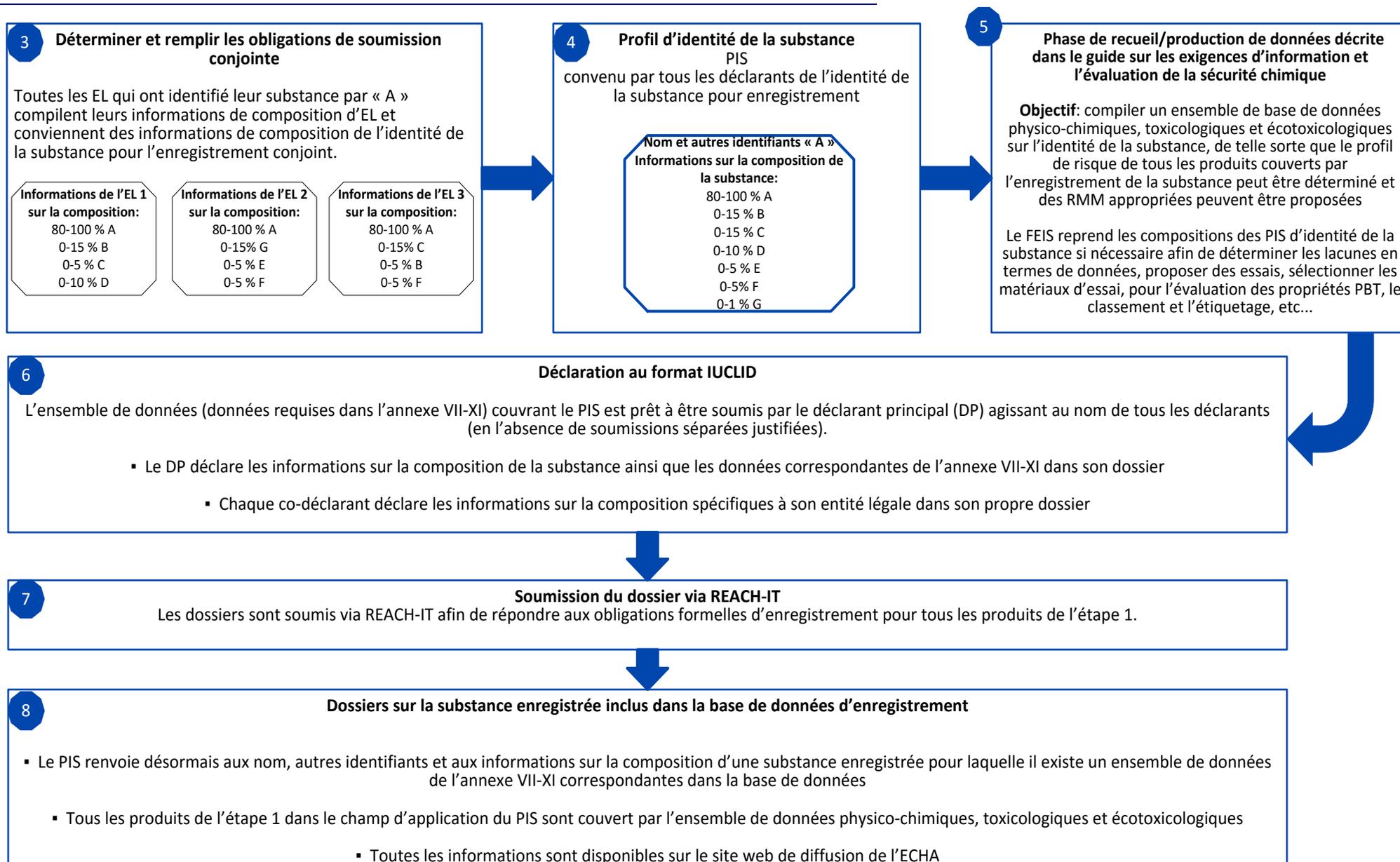
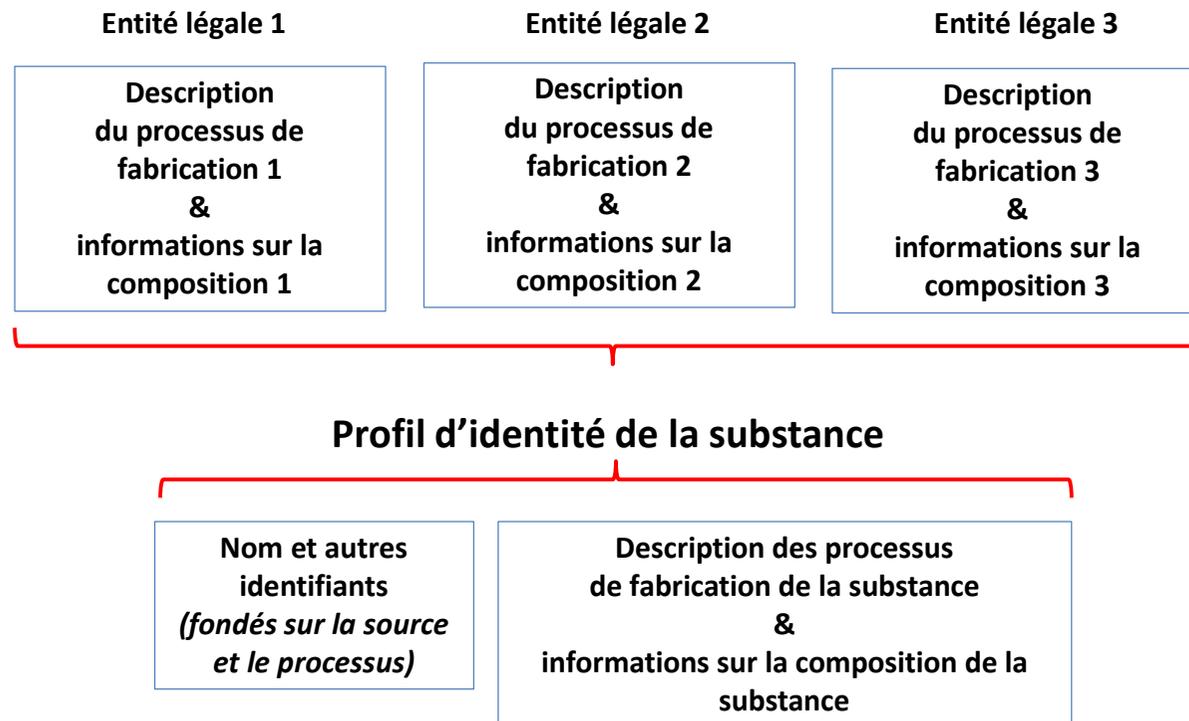


Figure 3: schéma d'illustration de la définition d'un PIS (étape 4 de la figure 1) pour une substance de type UVCB identifiée à partir des descripteurs de source et de processus issus des descriptions de source et de processus émanant de chaque entité légale.



Agence européenne des produits chimiques
P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finlande
<http://echa.europa.eu>