ECHA
EUROPEAN CHEMICALS AGENCY

LEITLINIEN

Leitlinien zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen gemäß REACH und CLP

Dezember 2016
Version 2.0

Rechtlicher Hinweis

Dieses Dokument soll den Nutzer bei der Erfüllung seiner Verpflichtungen nach der REACH- und der CLP-Verordnung unterstützen. Rechtlich verbindlich ist ausschließlich der Wortlaut der REACH-Verordnung und der CLP-Verordnung. Bei den hier vorliegenden Informationen handelt es sich nicht um Rechtsauskünfte. Die Verwendung dieser Informationen liegt in der alleinigen Verantwortung des Nutzers. Die Europäische Chemikalienagentur übernimmt keinerlei Haftung für die etwaige Verwendung der Informationen dieses Dokuments.

Leitlinien zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen gemäß REACH und CLP

ECHA-Referenznummer: ECHA-16-B-37-DE
Katalognummer: ED-07-16-146-DE-N
ISBN: 978-92-9495-706-1
DOI: 10.2823/923052
Publ.-Datum: Dezember 2016
Sprache: DE

© Europäische Chemikalienagentur, 2016

Wenn Sie Anmerkungen zu diesem Dokument haben, senden Sie uns diese bitte über das Feedback-Formular für Leitlinien mit Angabe der Referenznummer des Dokuments, des Ausgabedatums, des Kapitels und/oder der Seite des Dokuments zu, auf das bzw. die sich Ihre Anmerkung bezieht. Das Feedback-Formular finden Sie auf der ECHA-Leitlinien-Website oder direkt unter folgendem Link:

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

Haftungsausschluss: Hierbei handelt es sich um die Arbeitsübersetzung eines ursprünglich in Englisch veröffentlichten Dokuments. Das Originaldokument ist auf der ECHA-Website verfügbar.

Europäische Chemikalienagentur

Postanschrift: Postfach Box 400, FI-00121 Helsinki, Finnland

Besucheradresse: Annankatu 18, Helsinki, Finnland

VORWORT

In diesen Leitlinien wird beschrieben, wie Stoffe gemäß der REACH-Verordnung („REACH“) und der CLP-Verordnung („CLP“) zu identifizieren und zu bezeichnen sind. Damit gehört das vorliegende Dokument zu einer Reihe von Leitlinien, die allen Beteiligten helfen sollen, ihre Pflichten gemäß der REACH-Verordnung und der CLP-Verordnung zu erfüllen. Die Leitlinien enthalten ausführliche Anleitungen zu grundlegenden REACH- und CLP-Verfahren sowie zu einigen spezifischen wissenschaftlichen und/oder technischen Methoden, die von Industrie und Behörden im Rahmen der REACH-Verordnung und der CLP-Verordnung anzuwenden sind.

Die Leitlinien wurden im Rahmen der Projekte zur REACH-Implementierung erarbeitet und diskutiert, die von den Dienststellen der Europäischen Kommission geleitet werden und alle Beteiligten einbeziehen: Mitgliedstaaten, Industrie und Nichtregierungsorganisationen. Sie finden diese Leitlinien auf der Website der Europäischen Chemikalienagentur (http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach). Neue Leitlinien und aktualisierte Fassungen bestehender Leitlinien werden ebenfalls auf dieser Website veröffentlicht werden.

DOKUMENTHISTORIE

Version	Kommentar	Datum
Version 1	Erste Ausgabe	Juni 2007
Version 1.1	Berichtigungen: - In den Titel und in die Kapitelnamen wurde der Verweis auf die CLP-Verordnung (Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 vom 16. Dezember 2008) aufgenommen. - Zur Verdeutlichung des Anwendungsbereichs der Leitlinien wurde zusätzlicher Text hinzugefügt. Überflüssiger Text wurde im gesamten Dokument gelöscht. - Der gesamte Text wurde an den entsprechenden Stellen um Verweise auf die CLP-Verordnung ergänzt. - Der Begriff „TGD“ (Technical Guidance Document) wurde im gesamten Dokument durch „Leitlinien“ ersetzt. - Der Begriff „Zubereitung“ wurde im gesamten Dokument durch „Gemisch“ ersetzt. - Der Begriff „Punkt“ wurde im gesamten Dokument durch „Abschnitt“ ersetzt. - Der Begriff „Vorregistrierung“ wurde im gesamten Dokument durch den Begriff „(späte) Vorregistrierung“ ersetzt. - Es wurden die Abkürzungen AAS und CLP hinzugefügt und die Abkürzungen RIP und TGD entfernt. - Die Beschreibungen für Legierung, EG-Verzeichnis und IUCLID wurden geändert. Es wurden Definitionen für die Begriffe EG-Nummer, Listennummer, Gemisch und Angemeldeter Stoff eingeführt. Die Definition für „Zubereitung“ wurde gelöscht. - Der Abschnitt 3.2 wurde überarbeitet, um den Inhalt verständlicher darzustellen.	November 2011

	- Der Abschnitt 3.3 wurde überarbeitet, um den Inhalt hinsichtlich der Pflichten aus der CLP-Verordnung verständlicher darzustellen. - Änderung in Abschnitt 4.2.2.1: Die Darstellung der Bestandteile wurde von der Angabe der Konzentration in Prozent in die Angabe in der alphabetischen Reihenfolge geändert, sodass die relative Zusammensetzung nicht aus der Listenreihenfolge hergeleitet werden kann. - Änderung in Abschnitt 4.2.3.1: Der Begriff „Kristallgitter“ wurde in „Kristall“ geändert. - Der Abschnitt 4.3.1.2.3 wurde überarbeitet, um den Inhalt verständlicher darzustellen. - In Abschnitt 5 wurde ein Verweis auf die Nutzerhandbücher für die Einreichung von Daten, Teil 18 – „Anleitung zum Melden der Stoffidentität in IUCLID 5 zur Registrierung gemäß REACH“, aufgenommen. - Der Abschnitt 5 wurde überarbeitet, um den Inhalt verständlicher darzustellen. - In Abschnitt 6 wurde die Bezeichnung „Vorregistrierung“ in „(späte) Vorregistrierung“ geändert. - Ungültige Hyperlinks in Anhang 1 wurden aktualisiert. - Abschnitt 4.3 von Anhang 2 wurde entfernt, da dessen Inhalt auf der entsprechenden Website zu finden ist.	
Version 1.2	Berichtigung Die Definition von „Phase-in-Stoff“ wurde an die Definition in der Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 angeglichen, die mit der Verordnung des Rates (EG) Nr. 1354/2007 und der Berichtigung im ABl. L 36 vom 5.2.2009, S. 84 (1907/2006) eingeführt wurde. Bitte beachten Sie, dass die Änderungen in Version 1.1 und 1.2 in anderen Sprachen als dem Englischen in einer einzigen übersetzen Version 1.2 zusammengeführt wurden.	März 2012

Version 1.3	Berichtigung In Kapitel 7.6 wurden zwei fehlende Strukturformeln eingefügt.	Februar 2014
Version 1.4	Berichtigungen: - Das Dokument wurde entsprechend der gegenwärtigen Corporate Identity neu formatiert. - Kapitel 8, das technische Anweisungen basierend auf einer veralteten Version von IUCLID enthält, wurde entfernt. - Verweise auf Kapitel 8 und Handbücher für die Einreichung von Daten wurden entfernt sowie Verweise auf neue ECHA-Handbücher hinzugefügt. - Anhang III wurde gelöscht; die Informationen wurden in die Tabelle mit der Dokumentenhistorie verschoben. - Ungültige Website-Links wurden repariert und redaktionelle Fehler korrigiert.	Juni 2016
Version 2.0	Teilaktualisierung wie folgt: - In Kapitel 7.5 wurde die Beschreibung von Cristobalit und Quartz korrigiert und die Bezugnahme auf Richtlinie 2000/30/EG gestrichen. - Ein neuer Anhang III mit einer Erläuterung des Begriffs „Stoffidentitätsprofil“ wurde hinzugefügt. - In Kapitel 1 wurde neuer Text hinzugefügt, um auf den neuen Anhang III hinzuweisen. - Tippfehler und redaktionelle Fehler wurden berichtigt.	Dezember 2016

Inhaltsverzeichnis

1. Allgemeines 10
1.1. Zielvorgaben 10
1.2. Anwendungsbereich 11
1.3. Aufbau der Leitlinien 12
2. Begriffsbestimmungen und Abkürzungen 13
2.1. Abkürzungen 13
2.2. Begriffsbestimmungen 15
3. Rahmen für die Stoffidentifizierung in REACH und CLP 18
3.1. Der Begriff „Stoff“ 19
3.2. EG-Verzeichnis 19
3.2.1. Die Rolle des EG-Verzeichnisses bei Inkrafttreten der REACH-Verordnung 20
3.2.2. Die Listennummern nach Inkrafttreten der REACH-Verordnung 21
3.3. Anforderungen an die Stoffidentifizierung in REACH und CLP 22
4. Leitlinien für die Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen gemäß REACH und CLP 24
4.1. Einleitung 24
4.2. Stoffe mit genau definierter Zusammensetzung 30
4.2.1. Einkomponentige Stoffe 31
4.2.2. Mehrkomponentige Stoffe 33
4.2.3. Stoffe mit definierter chemischer Zusammensetzung und andere Hauptidentifikatoren 36
4.3. UVCB-Stoffe 38
4.3.1. Allgemeine Leitlinien zu UVCB-Stoffen 38
4.3.2. Spezifische Arten von UVCB-Stoffen 48
5. Kriterien für die Überprüfung, ob Stoffe identisch sind 57
6. Stoffidentität bei (SPÄTER) Vorregistrierung und Anfrage 64
6.1. (SPÄTE) Vorregistrierung 64
6.2. Anfrage 64
7. Beispiele 65
7.1. Diethylperoxydicarbonat 65
7.2. ZOLIMIDIN 66
7.3. Isomerengemisch 66
7.4. Duftstoff AH 71
7.5. Minerale 77
7.6. Ätherisches Öl aus Lavandin grosso 80

7.7. Chrysanthemenöl und daraus isolierte Isomere 86
7.8. Phenol, isopropyliert, Phosphat 90
7.9. Quaternäre Ammoniumverbindungen 91
7.10. Erdölstoffe 95
7.10.1. Benzinverschnittlauf (C4-C12) 96
7.10.2. Gasöle (Erdöl) 97
7.11. Enzyme 98
7.11.1. Subtilisin 98
7.11.2. α-Amylase 100
Anhang I – Hilfsmittel 102
Anhang II – Technische Leitlinien nach Stoffidentifizierungsparameter 107
Anhang III - Stoffidentifizierung und gemeinsame Dateneinreichung 124

Tabellen

Tabelle 1: Abkürzungen 13
Tabelle 2: Begriffsbestimmungen 15
Tabelle 3: Parameter zur Stoffidentifizierung in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung 22
Tabelle 4: Gruppierung der Hauptidentifikatoren bei Beispielen, die für verschiedene Arten von genau definierten ähnlichen Stoffen stehen 25
Tabelle 5: Gruppierung der Hauptidentifikatoren für Beispiele, die für verschiedene Arten von UVCB-Stoffen stehen 26

Abbildungen

Abbildung 1: Entscheidungsdiagramm für das Auffinden der Kapitel und Anhänge der Leitlinien für die verschiedenen Stoffarten 28
Abbildung 2 (nächste Seite): Schematische Darstellung der Schritte, die potenzielle Registranten von der Bestimmung ihrer Registrierungspflichten (1) über die Festlegung ihres Stoffidentitätsprofils für ihre gemeinsame Stoffidentität (4) bis schließlich zur Einreichung ihrer Registrierungen zur formellen Erfüllung der Pflichten zur Registrierung ihrer Stoffe (8) ausführen 131
Abbildung 3: Veranschaulichende schematische Darstellung der Festlegung eines Stoffidentitätsprofils (Schritt 4 in Abbildung 1) für einen UVCB-Stoff, der auf der Grundlage von Quellen- und Prozessdeskriptoren aus Quellen- und Prozessbeschreibungen einzelner Rechtspersonen identifiziert wurde 134

1. Allgemeines

Die REACH-Verordnung (Verordnung (EG) Nr. 1907/2006) gibt ein System für die Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe vor und bildete die Grundlage für die Schaffung der Europäischen Chemikalienagentur (ECHA) mit dem Ziel, diese Verordnung umzusetzen.[1]

Die CLP-Verordnung (Verordnung (EG) Nr. 1272/2008) ist die neue europäische Verordnung für die Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung chemischer Stoffe und Gemische.[2] Mit dieser Verordnung gilt in der gesamten Europäischen Union ein neues System zur Einstufung und Kennzeichnung von Chemikalien, das auf dem Global Harmonisierten System der Vereinten Nationen (UN GHS) beruht.

Die REACH-Verordnung beschäftigt sich schwerpunktmäßig mit Stoffen. Wichtig für das ordnungsgemäße Funktionieren der REACH-Prozesse ist es, die Stoffe eindeutig und verständlich zu identifizieren. Diese Leitlinien zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen sollen der Industrie, den Mitgliedstaaten und der Europäischen Chemikalienagentur dabei helfen.

Bei der Erarbeitung dieser Leitlinien wurde auf die Erfahrungen zurückgegriffen, die im Zusammenhang mit der Identifizierung von Stoffen unter den zuvor geltenden Rechtsvorschriften zu Chemikalien (Richtlinie 67/548/EWG und Richtlinie 98/8/EWG) gesammelt wurden. Zur Präzisierung dieser Leitlinien wurden jedoch die aktuellen Verfahrensweisen zur Identifizierung von Stoffen gemäß REACH- und CLP-Verordnung herangezogen. Außerdem, und sofern angemessen, wurden Herangehensweisen anderer Programme zu Chemikalien von außerhalb der Europäischen Union berücksichtigt.

Diese Leitlinien enthalten konkrete Informationen für die einzelnen Arten von Stoffen.

Das Dokument sollte bei der Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen herangezogen werden, die unter die REACH-Verordnung und die CLP-Verordnung fallen.

1.1. Zielvorgaben

Diese Leitlinien sollen Herstellern und Importeuren Informationen dazu an die Hand geben, wie sie die Identität eines Stoffes im Kontext von REACH und CLP erfassen und melden können. So findet der Leser hier wichtige Hinweise dazu, wie bei der Bezeichnung von Stoffen – einem wichtigen Schlüsselelement der Stoffidentifizierung – vorzugehen ist. Außerdem enthalten diese Leitlinien Informationen dazu, ob ein Stoff im Rahmen der REACH-Verordnung und der CLP-Verordnung als identisch angesehen werden kann und wie das Prinzip „Ein Stoff - eine Registrierung“ (Abkürzung „OSOR-Prinzip“ nach dem englischen Begriff „One substance, one registration“) bei der Festlegung des Stoffidentitätsprofils (SIP) angewandt werden kann. Das Identifizieren identischer Stoffe, die von demselben SIP abgedeckt sein können, ist wichtig für den Prozess der (späten) Vorregistrierung von Phase-in-Stoffen, für Anfragen, für die gemeinsame Nutzung von Daten, für die gemeinsame

---

[1] Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 18. Dezember 2006 zur Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe (REACH), zur Schaffung einer Europäischen Chemikalienagentur, zur Änderung der Richtlinie 1999/45/EG und zur Aufhebung der Verordnung (EWG) Nr. 793/93 des Rates, der Verordnung (EG) Nr. 1488/94 der Kommission, der Richtlinie 76/769/EWG des Rates sowie der Richtlinien 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/EG und 2000/21/EG der Kommission („REACH-Verordnung“ bzw. „REACH“).

[2] Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2008 über die Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Stoffen und Gemischen, zur Änderung und Aufhebung der Richtlinien 67/548/EWG und 1999/45/EG und zur Änderung der Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (Text mit EWR-Relevanz) („CLP-Verordnung“ bzw. „CLP“).

Einreichung von Daten, für die Meldung zur Aufnahme von Stoffen in das Einstufungs- und Kennzeichnungsverzeichnis und für die Harmonisierung der Einstufung und Kennzeichnung.

Die Identifizierung von Stoffen sollte vorzugsweise durch entsprechende Fachleute erfolgen. Marktteilnehmer, die nur wenig Erfahrung auf dem Gebiet der Stoffidentifizierung besitzen, finden im Anhang zu diesen Leitlinien zusätzliche Informationen zu Identifizierungsparametern.

Darüber hinaus enthalten diese Leitlinien eine Liste von Links zu relevanten Hilfsmitteln, die bei der Beschreibung und Überprüfung der chemischen Identität von Stoffen hilfreich sein können.

Detailliertere Anweisungen zur Eingabe der Informationen zur Stoffidentität in IUCLID im Kontext verschiedener Prozesse unter der REACH- und der CLP-Verordnung sind den ECHA-Handbüchern zu entnehmen, die unter http://echa.europa.eu/manuals zur Verfügung stehen.

1.2. Anwendungsbereich

Gemäß Artikel 1 bezieht sich die REACH-Verordnung auf die Herstellung, das Einführen, das Inverkehrbringen und das Verwenden von Stoffen als solchen sowie in Gemischen und Erzeugnissen. Gemische und Erzeugnisse als solche werden durch die REACH-Verordnung nicht geregelt.

Gemäß Artikel 10 der REACH-Verordnung muss für eine Registrierung die Stoffidentität anhand der in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung angegebenen Parameter erfasst werden (siehe **Tabelle 3**). Ähnliche Parameter (siehe Anhang VI Abschnitte 2.1 bis 2.3.4 der REACH-Verordnung) sind für das Erfassen der Stoffidentität zum Zweck einer Meldung gemäß Artikel 40 Absatz 1 der CLP-Verordnung zu verwenden. Die vorliegenden Leitlinien beschäftigen sich hauptsächlich mit der ordnungsgemäßen Identifizierung von Stoffen, die nach der gesetzlichen Definition in REACH und CLP als Stoff gelten, und sie enthalten Informationen zu den in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung aufgeführten Parametern zur Stoffidentifizierung. Die zur Identität eines Stoffes gemachten Angaben müssen ausreichen, um den Stoff identifizieren zu können. Ist es technisch nicht möglich oder erscheint es aus wissenschaftlicher Sicht unnötig, die angeforderten Angaben zu machen, können Parameter für die Identifikation weggelassen werden. Derartige Weglassungen sind ausreichend wissenschaftlich zu begründen.

Wie an die Identifikation eines Stoffes heranzugehen ist, hängt von der Art des Stoffes ab. Daher wird der Leser dieser Leitlinien zu konkreten Kapiteln für die jeweiligen Arten von Stoffen geleitet.

Wichtige Hilfsmittel für die Stoffidentifizierung sind die EU-Verzeichnisse und -Listen (EINECS, ELINCS sowie die NLP-Liste), die im Rahmen der Richtlinie 67/548/EWG verwendet werden. Informationen zur Rolle dieser Verzeichnisse unter REACH finden Sie in Kapitel 3.2.

Stoffe, die in den Anwendungsbereich von REACH und CLP fallen (und damit Gegenstand dieser Leitlinien sind), sind in der Regel das Ergebnis chemischer Reaktionen im Rahmen der Herstellung des Stoffes und können aus mehreren unterschiedlichen Bestandteilen bestehen. Als Stoffe gelten gemäß den Definitionen in REACH und CLP auch Stoffe, die chemisch gewonnen oder aus natürlich vorkommendem Material isoliert wurden. Diese können aus einem einzelnen Element oder Molekül (z. B. reine Metalle oder bestimmte Minerale) oder mehreren Bestandteilen (z. B. ätherische Öle, Rohsteine, die sich beim Schmelzen von Sulfidmetallerzen bilden) bestehen. Stoffe, die in den Anwendungsbereich anderer gesetzlicher Regelungen der Gemeinschaft fallen, sind aber in etlichen Fällen von

der Registrierung gemäß REACH ausgenommen (siehe Artikel 2 der REACH-Verordnung). Für Stoffe, die in Anhang IV der REACH-Verordnung aufgeführt werden, und für Stoffe, die die in Anhang V der REACH-Verordnung genannten Kriterien erfüllen, gilt die Registrierungspflicht ebenfalls nicht. Zu beachten ist, dass Stoffe, die von der Registrierungspflicht ausgenommen sind, nicht zwingenderweise auch von anderen Titeln der REACH-Verordnung oder von den Anforderungen der CLP-Verordnung ausgenommen sind.

Nach der REACH-Verordnung müssen sich Registranten desselben Stoffes zusammenschließen, um die gemeinsame Einreichung bestimmter Angaben zu dem Stoff abzustimmen (OSOR-Prinzip)[3]. Zur Anwendung dieses Prinzips muss Klarheit darüber bestehen, wie die Registranten den Umfang ihres SIP festgelegt haben.

1.3. Aufbau der Leitlinien

Kapitel 1 enthält Hintergrundinformationen, beispielsweise die Ziele und den Anwendungsbereich dieser Leitlinien. Kapitel 2 beschäftigt sich mit den Abkürzungen und Begriffsbestimmungen. Kapitel 3 beinhaltet relevante Informationen zum Thema Stoffidentifizierung in REACH, z. B. eine Klärung des Begriffs „Stoff“ und Informationsanforderungen im Rechtstext.

Kapitel 4 können praktische Anleitungen zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen entnommen werden.

– Kapitel 4.1 beschreibt den Unterschied zwischen „genau definierten“ und „ungenau definierten“ Stoffen. Innerhalb dieser beiden Hauptgruppen lassen sich unterschiedliche Stoffarten ausmachen, für die jeweils separate Leitlinien für die Stoffidentifizierung gegeben werden. Der Leser wird dabei anhand eines Entscheidungsdiagramms zum jeweiligen Kapitel mit den Identifizierungsleitlinien für die konkrete Stoffart geleitet.

– Die übrigen Kapitel enthalten konkrete Leitlinien für die einzelnen Stoffarten in Form von Regeln mit Erläuterungen und Beispielen.

Kapitel 5 erläutert, wie geprüft werden kann, ob Stoffe als identisch angesehen werden können. Kapitel 6 geht auf das Thema Stoffidentität im Rahmen der Prozesse zur (späten) Vorregistrierung und Anfrage ein.

Darüber hinaus wurden mithilfe der praktischen Anleitung von Kapitel 4 in Kapitel 7 einige detaillierte Beispiele ausgearbeitet.

Anhang I enthält eine Liste von Links zu relevanten Hilfsmitteln, die bei der Beschreibung und Überprüfung der chemischen Identität von Stoffen hilfreich sein können.

Anhang II bietet weitere Hintergrundinformationen zu den einzelnen Parametern für die Stoffidentifizierung, die im Stoffidentifizierungsprozess Verwendung finden, z. B. zu den Nomenklaturregeln, den EG- und CAS-Nummern, den Notationen der Summen- und Strukturformel und Analysemethoden.

Anhang III enthält Informationen zum Begriff „Stoffidentitätsprofil“ (SIP), zur Bedeutung für die Pflichten zur gemeinsamen Einreichung und zur entsprechenden Festlegung und Meldung.

[3] Ausführliche Informationen über den Austausch von Daten zu demselben Stoff im Hinblick auf eine gemeinsame Einreichung können den Leitlinien über die gemeinsame Nutzung von Daten „*Guidance on data-sharing*“ entnommen werden.

2. Begriffsbestimmungen und Abkürzungen

2.1. Abkürzungen

In **Tabelle 1** werden die wichtigsten Abkürzungen aufgeführt und erläutert, die in diesen Leitlinien verwendet werden.

Tabelle 1: Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
AAS	Atomabsorptionsspektroskopie
A.I.S.E.	Association Internationale de la Savonnerie, de la Détergence et des Produits d'Entretien (Internationaler Verband der Hersteller von Wasch-, Pflege- und Reinigungsmitteln)
CAS	Chemical Abstracts Service
CLP-VERORDNUNG	Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 über die Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Stoffen und Gemischen (CLP-Verordnung)
EK	Europäische Kommission
EINECS	Europäisches Verzeichnis der auf dem Markt vorhandenen chemischen Stoffe
ELINCS	Europäische Liste der angemeldeten chemischen Stoffe
ENCS	Existing and New Chemical Substances (Japan, Liste der vorhandenen und neuen chemischen Stoffe)
ESIS	European Substances Information System (Europäisches Informationssystem für chemische Stoffe)
EU	Europäische Union
GC	Gaschromatografie
GHS	Globally Harmonised System (Global Harmonisiertes System)
HPLC	High performance liquid chromatography (Hochleistungsflüssigkeitschromatografie)
InChI	IUPAC International Chemical Identifier (Internationale chemische Bezeichnung der IUPAC)
INCI	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients (Internationale Nomenklatur für kosmetische Inhaltsstoffe)
IR	Infrarot
ISO	International Organization for Standardization (Internationale Organisation für Normung)
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database (Internationale einheitliche chemische Informationsdatenbank)
IUBMB	International Union of Biochemistry and Molecular Biology

	(Internationale Union für Biochemie und Molekularbiologie)
IUPAC	International Union für reine und angewandte Chemie
MS	Massenspektroskopie
NLP	No Longer Polymer (Nicht länger als Polymer geltend)
NMR	Nuclear Magnetic Resonance (Kernspinresonanz)
ppm	Parts per million (Teile pro Million)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe)
SIEF	Forum zum Austausch von Stoffinformationen
SIP	Stoffidentitätsprofil
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification (vereinfachtes chemisches Notationssystem zur Darstellung von Strukturen in einer linearen Zeichenfolge)
TSCA	Toxic Substances Control Act (USA, Gesetz zum Umgang mit giftigen Stoffen)
UVCB	Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials (Stoffe mit unbekannter oder variabler Zusammensetzung, komplexe Reaktionsprodukte und biologische Materialien)
UV/VIS	Ultra violett/visible (ultraviolett/sichtbar)
Massenprozent (w/w)	Massenprozent (Weight by weight)
XRD	X-Ray Diffraction (Röntgenbeugung)
XRF	X-Ray Fluorescence (Röntgenfluoreszenz)

2.2. Begriffsbestimmungen

In **Tabelle 2** werden die wichtigsten Begriffe aufgeführt und erläutert, die in diesen Leitlinien verwendet werden.

Dabei werden die Begriffsbestimmungen in der REACH-Verordnung und der CLP-Verordnung berücksichtigt. Aus diesem Grund können sich die Begriffsbestimmungen einiger Begriffe von denen nach Richtlinie 67/548/EWG unterscheiden.

Tabelle 2: Begriffsbestimmungen

Definition	Beschreibung
Angemeldeter Stoff*	Stoff, der gemäß der Richtlinie 67/548/EWG angemeldet wurde und in Verkehr gebracht werden durfte
Bestandteil (eines Stoffes)	Einzelner chemischer Inhaltsstoff eines Stoffes, der sich durch eine eindeutige chemische Identität kennzeichnen lässt.
Chromato-grafischer Fingerprint	Darstellung der Zusammensetzung eines Stoffes anhand der typischen Verteilung der Bestandteile in einem analytischen Chromatogramm
EG-Nummer	Die EG-Nummer ist der numerische Identifikator für Stoffe im EG-Verzeichnis.
EG-VERZEICHNIS	Das EG-Verzeichnis, das zwar nicht rechtsverbindlich in der REACH-Verordnung definiert ist, besteht aus den folgenden drei unabhängigen rechtsverbindlichen Stoffverzeichnissen aus dem früheren EU-Rechtsrahmen für Chemikalien: EINECS, ELINCS und NLP-Liste (No-longer Polymers-Liste, Liste der nicht länger als Polymere geltenden Stoffe). Die Einträge im EG-Verzeichnis enthalten folgende Angaben: chemische Bezeichnung und Nummer (EG-Name und EG-Nummer), CAS-Nummer, Summenformel (sofern verfügbar) und Beschreibung (bei bestimmten Arten von Stoffen).
Einkomponen-tiger Stoff	In der Regel ein durch seine Zusammensetzung definierter Stoff, in dem ein Hauptbestandteil mit mindestens 80 Massenprozent (w/w) vertreten ist.
Erzeugnis*	Gegenstand, der bei der Herstellung eine spezifische Form, Oberfläche oder Gestalt erhält, die in größerem Maße als die chemische Zusammensetzung seine Funktion bestimmt
Gemisch*	Gemenge, Gemische oder Lösungen, die aus zwei oder mehr Stoffen bestehen
Hauptbestandteil	Bestandteil eines Stoffes, der weder ein Zusatzstoff noch eine Verunreinigung ist und der einen erheblichen Teil dieses Stoffes ausmacht und deshalb für die Bezeichnung des Stoffes und seine detaillierte Identifizierung verwendet wird
Herstellung*	Produktion oder Extraktion von Stoffen im natürlichen Zustand

Definition	Beschreibung
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database (Internationale einheitliche chemische Informationsdatenbank). IUCLID ist eine Datenbank und ein Managementsystem für die Verwaltung von Daten zu chemischen Stoffen.
Komponente (Gemisch)	Stoff, der absichtlich hinzugefügt wird, um ein Gemisch zu bilden
Legierung*	Metallisches, in makroskopischem Maßstab homogenes Material, das aus zwei oder mehr Elementen besteht, die so verbunden sind, dass sie durch mechanische Mittel nicht ohne weiteres getrennt werden können. Legierungen gelten als spezielle Gemische.
Listennummer	Nummer, die von REACH-IT automatisch zugewiesen wird. Wird für alle eingehenden gültigen Einreichungen (z. B. Vorregistrierungen, PPORD-Anmeldungen, Anfragen, Registrierungen, Meldungen der Einstufung und Kennzeichnung) erteilt. Listennummern haben keine rechtliche Relevanz und dienen nur als technische Identifikatoren zur Verwaltung von Einreichungen innerhalb der ECHA.
Mehrkomponen-tiger Stoff	In der Regel ein Stoff, der durch seine Zusammensetzung definiert ist und in dem mehrere Hauptbestandteile in Konzentrationen zwischen ☐ 10 Massenprozent (w/w) und < 80 Massenprozent (w/w) vertreten sind.
Monomer*	Stoff, der unter den Bedingungen der für den jeweiligen Prozess verwendeten relevanten polymerbildenden Reaktion imstande ist, kovalente Bindungen mit einer Sequenz weiterer ähnlicher oder unähnlicher Moleküle einzugehen
Naturstoff*	Natürlich vorkommender Stoff als solcher, unverarbeitet oder lediglich manuell, mechanisch oder durch Gravitationskraft, durch Auflösung in Wasser, durch Flotation, durch Extraktion mit Wasser, durch Dampfdestillation oder durch Erhitzung zum Wasserentzug verarbeitet oder durch beliebige Mittel aus der Luft entnommen.
Nicht chemisch veränderter Stoff*	Stoff, dessen chemische Struktur unverändert bleibt, auch wenn er einem chemischen Verfahren oder einer chemischen Behandlung oder einer physikalischen mineralogischen Umwandlung, zum Beispiel zur Beseitigung von Verunreinigungen, unterzogen wurde
Nicht-Phase-in-Stoff	Registrierungspflichtiger Stoff, für den die Übergangsregelungen zu Phase-in-Stoffen gemäß REACH nicht gelten

Definition	Beschreibung
Phase-in-Stoff*	Stoff, der mindestens einem der folgenden Kriterien entspricht: (a) er ist im Europäischen Verzeichnis der auf dem Markt vorhandenen chemischen Stoffe (EINECS) aufgeführt; (b) b) der Stoff wurde in der Gemeinschaft oder in den am 1. Januar 1995, am 1. Mai 2004, am 1. Januar 2007 oder am 1. Juli 2013 der Europäischen Union beigetretenen Ländern hergestellt, vom Hersteller oder Importeur jedoch in den 15 Jahren vor Inkrafttreten dieser Verordnung nicht mindestens einmal in Verkehr gebracht, vorausgesetzt, der Hersteller oder Importeur kann dies durch Unterlagen nachweisen; (c) c) der Stoff wurde in der Gemeinschaft oder in den am 1. Januar 1995, am 1. Mai 2004, am 1. Januar 2007 oder am 1. Juli 2013 der Europäischen Union beigetretenen Ländern vom Hersteller oder Importeur vor dem Inkrafttreten dieser Verordnung in Verkehr gebracht und galt als angemeldet im Sinne von Artikel 8 Absatz 1 erster Gedankenstrich der Richtlinie 67/548/EWG in der Fassung von Artikel 8 Absatz 1 aufgrund der Änderung durch die Richtlinie 79/831/EWG, entspricht jedoch nicht der Definition eines Polymers nach der vorliegenden Verordnung, vorausgesetzt, der Hersteller oder Importeur kann dies durch Unterlagen nachweisen, einschließlich des Nachweises, dass der Stoff von einem Hersteller oder Importeur zwischen dem 18. September 1981 und dem 31. Oktober 1993 einschließlich in Verkehr gebracht wurde.
Polymer*	Stoff, der aus Molekülen besteht, die durch eine Kette einer oder mehrerer Arten von Monomereinheiten gekennzeichnet sind. Diese Moleküle müssen innerhalb eines bestimmten Molekulargewichtsbereichs liegen, wobei die Unterschiede beim Molekulargewicht im Wesentlichen auf die Unterschiede in der Zahl der Monomereinheiten zurückzuführen sind. Ein Polymer enthält Folgendes: (a) eine einfache Gewichtsmehrheit von Molekülen mit mindestens drei Monomereinheiten, die zumindest mit einer weiteren Monomereinheit bzw. einem sonstigen Reaktanten eine kovalente Bindung eingegangen sind; (b) weniger als eine einfache Gewichtsmehrheit von Molekülen mit dem gleichen Molekulargewicht. Im Rahmen dieser Definition ist unter einer „Monomereinheit“ die gebundene Form eines Monomerstoffes in einem Polymer zu verstehen.
Stoff*	Chemisches Element und seine Verbindungen in natürlicher Form oder gewonnen durch ein Herstellungsverfahren, einschließlich der zur Wahrung seiner Stabilität notwendigen Zusatzstoffe und der durch das angewandte Verfahren bedingten Verunreinigungen, aber mit Ausnahme von Lösungsmitteln, die von dem Stoff ohne Beeinträchtigung seiner Stabilität und ohne Änderung seiner Zusammensetzung abgetrennt werden können

Definition	Beschreibung
Verunreinigung	Nicht vorgesehener Bestandteil des hergestellten Stoffes. Sie kann beispielsweise aus den Ausgangsmaterialien stammen oder das Ergebnis von Sekundär- oder unvollständigen Reaktionen im Herstellungsprozess sein. Obwohl sie im fertigen Stoff enthalten ist, wurde sie nicht absichtlich zugefügt.
Zusatzstoff	Stoff, der absichtlich zur Wahrung der Stabilität eines Stoffes zugesetzt wird[4].
Zwischenprodukt *	Stoff, der für die chemische Weiterverarbeitung hergestellt und hierbei verbraucht oder verwendet wird, um in einen anderen Stoff umgewandelt zu werden (nachstehend *Synthese* genannt): (a) Ein nicht-isoliertes Zwischenprodukt ist ein Zwischenprodukt, das während der Synthese nicht vorsätzlich aus dem Gerät, in dem die Synthese stattfindet, entfernt wird (außer für Stichprobenzwecke). Solche Geräte sind unter anderem das Reaktionsgefäß, zugehörige Hilfsgeräte und alle Geräte, durch die der/die Stoff(e) im Rahmen eines Prozesses mit kontinuierlichem Fluss oder im Rahmen eines Batch-Prozesses geleitet wird/werden, sowie die Rohre und Leitungen zur Überführung des Stoffes von einem Gefäß in ein anderes, um den nächsten Reaktionsschritt einzuleiten; nicht enthalten sind Tanks oder andere Gefäße, in denen der/die Stoff(e) nach der Herstellung gelagert wird/werden; (b) Ein standortinternes isoliertes Zwischenprodukt ist ein Zwischenprodukt, das die Kriterien eines nicht-isolierten Zwischenprodukts nicht erfüllt, und bei dem seine Herstellung und die Synthese eines anderen Stoffes/anderer Stoffe aus ihm am selben, von einer oder mehreren Rechtspersonen betriebenen Standort durchgeführt wird; (c) Ein transportiertes isoliertes Zwischenprodukt ist ein Zwischenprodukt, das die Kriterien eines nicht-isolierten Zwischenprodukts nicht erfüllt und an andere Standorte geliefert oder zwischen diesen transportiert wird.

* Begriffsbestimmungen gemäß Artikel 3 der REACH-Verordnung

3. Rahmen für die Stoffidentifizierung in REACH und CLP

Die REACH-Verordnung und die CLP-Verordnung definieren, was ein Stoff ist, und die REACH-Verordnung führt die Parameter für die Stoffidentifizierung auf (Anhang VI, Abschnitt 2), die zur Identifizierung des Stoffes im Zuge der Registrierung zu verwenden sind.

Dieses Kapitel enthält die Begriffsbestimmung für den Begriff „Stoff“ gemäß REACH und CLP

[4] In anderen Bereichen kann ein Zusatzstoff auch andere Funktionen haben. So kann er z. B. als pH-Regulator oder als Farbstoff dienen. In der REACH-Verordnung und in diesen Leitlinien handelt es sich bei Zusatzstoffen aber um Stabilisatoren.

(Kapitel 3.1), allgemeine Informationen dazu, wie das EG-Verzeichnis aus dem früheren Rechtsrahmen für chemische Stoffe zu verwenden ist (Kapitel 3.2), sowie weitere Hintergrundinformationen zu Anforderungen an die Stoffidentifizierung gemäß REACH (Kapitel 3.3).

3.1. Der Begriff „Stoff“

Der Begriff „Stoff“ ist in Artikel 3 Absatz 1 der REACH-Verordnung und in Artikel 2 Absatz 7 der CLP-Verordnung wie folgt definiert:

> Stoff: chemisches Element und seine Verbindungen in natürlicher Form oder gewonnen durch ein Herstellungsverfahren, einschließlich der zur Wahrung seiner Stabilität notwendigen Zusatzstoffe und der durch das angewandte Verfahren bedingten Verunreinigungen, aber mit Ausnahme von Lösungsmitteln, die von dem Stoff ohne Beeinträchtigung seiner Stabilität und ohne Änderung seiner Zusammensetzung abgetrennt werden können

Die Definition des Begriffs „Stoff“ in REACH und CLP ist mit der Definition des Begriffs „Stoff“ identisch, die in der siebten Änderung der Gefahrstoffrichtlinie (Richtlinie 92/32/EWG zur Änderung der Richtlinie 67/548/EWG) verwendet wurde. In beiden Fällen geht die Definition über die Definition als reine chemische Verbindung, die durch eine einzelne Molekülstruktur definiert ist, hinaus. Die Definition des Stoffs enthält verschiedene Bestandteile, wie z. B. Verunreinigungen.

3.2. EG-Verzeichnis

Unter dem früheren Rechtsrahmen für chemische Stoffe gab es drei gesonderte Verzeichnisse: das EINECS, die ELINCS und die NLP-Liste.

Stoffe, die sich zwischen dem 1. Januar 1971 und dem 18. September 1981 auf dem europäischen Markt befanden, sind im EINECS aufgeführt[5], [6], [7].

Dieses Verzeichnis beinhaltet ca. 100 000 Stoffe, die durch eine chemische Bezeichnung (sowie, bei bestimmten Arten von Stoffen, eine Beschreibung), eine CAS-Nummer und eine siebenstellige Nummer, die sogenannte EINECS-Nummer, identifiziert sind. EINECS-Nummern beginnen grundsätzlich mit 2 oder 3 (2xx-xxx-x. oder 3xx-xxx-xx) Stoffe, die an das EINECS gemeldet wurden, haben einen Verifizierungsschritt durchlaufen, bevor sie in das Verzeichnis eingetragen wurden.

Stoffe, die nach dem 18. September 1981 angemeldet und in Verkehr gebracht wurden, sind in der Europäischen Liste der angemeldeten chemischen Stoffe (ELINCS) aufgeführt.[6] Dieses Verzeichnis (Liste) enthält alle Stoffe, die bis zum 31. Mai 2008 gemäß der Richtlinie

---

[5] Das EINECS basiert auf dem Grundverzeichnis **E**uropean **CO**re **IN**ventory (ECOIN), an das die Industrie (gemäß den Kriterien für das Melden von Stoffen an das EINECS) ergänzende Stoffmeldungen senden konnte. ECOIN wurde aus verschiedenen Listen chemischer Stoffe (z. B. TSCA) zusammengestellt, von denen angenommen wurde, dass sie sich auf dem europäischen Markt befanden. Das EINECS wurde am 15. Juni 1990 veröffentlicht und enthält über 100 000 Stoffe. Bei der Verwendung des Verzeichnisses wurden eine Reihe von Fehlern festgestellt (Druckfehler, z. B. falsche chemische Bezeichnungen, Formeln oder CAS-Registrierungsnummern). Aus diesem Grund wurde am 1. März 2002 eine Berichtigung veröffentlicht.

[6] ECB (2005) Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/EEC (Directives 79/831/EEC and 92/32/EEC) Non-confidential version. EUR 20519 EN Aktualisierte Version vom Juni 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, S. 21–33.

67/548/EWG und ihren Änderungen angemeldet wurden. Diese Stoffe werden als „neue Stoffe“ bezeichnet, da sie nicht vor dem 18. September 1981 in der Gemeinschaft in Verkehr gebracht wurden. Nach der Überprüfung durch die zuständigen Behörden der Mitgliedstaaten wurde den Stoffen durch die Europäische Kommission eine ELINCS-Nummer zugewiesen. Im Unterschied zum EINECS enthält die ELINCS in ihren Einträgen keine CAS-Nummer, sondern die von den zuständigen Behörden der Mitgliedstaaten zugewiesene Meldungsnummer, den Handelsnamen (sofern verfügbar), die Einstufung und den IUPAC-Namen der eingestuften Stoffe. Die ELINCS-Nummern sind ebenfalls siebenstellig und beginnen mit 4 (4xx-xxx-x).

Polymere waren von der Meldung an das EINECS ausgenommen und unterlagen besonderen Vorschriften im Rahmen der Richtlinie 67/548/EWG[8] [9]. Der Begriff „Polymer“ wurde in der siebten Änderung der Richtlinie 67/548/EWG (Richtlinie 92/32/EWG) näher definiert. Als Folge der Umsetzung dieser Definition gelten einige Stoffe, die nach den Meldevorschriften für das EINECS als Polymere galten, nach der siebten Änderung *nicht länger* als Polymere. Da alle nicht im EINECS aufgeführten Stoffe anmeldungspflichtig waren, sollten theoretisch alle nicht länger als Polymere geltenden Stoffe („*No-Longer Polymers*“, NLP) gemeldet worden sein. Der Ministerrat stellte jedoch klar, dass diese NLP nicht rückwirkend anmeldepflichtig werden sollten. Die Kommission wurde aufgefordert, eine Liste der NLP zu erstellen. In diese Liste sollten die Stoffe aufgenommen werden, die zwischen dem 18. September 1981 (dem Tag des Inkrafttretens der Richtlinie 79/831/EWG, der sechsten Änderung der Richtlinie 67/548/EWG) und dem 31. Oktober 1993 (dem Tag des Inkrafttretens der Richtlinie 92/32/EWG, der siebten Änderung der Richtlinie 67/548/EWG) auf dem EU-Markt in Verkehr waren und auf die zutraf, dass sie gemäß den Meldevorschriften für das EINECS als Polymere galten, gemäß siebter Änderung aber nicht länger als Polymere zu betrachten waren. Die NLP-Liste erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Die Identifizierung der Stoffe in der NLP-Liste erfolgt anhand einer chemischen Bezeichnung, einer CAS-Nummer und einer siebenstelligen Nummer, der sogenannten NLP-Nummer. NLP-Nummern beginnen grundsätzlich mit 5 (5xx-xxx-x).

Diese drei Verzeichnisse bzw. Listen von Stoffen, EINECS, ELINCS und die NLP-Liste, bilden zusammengenommen das sogenannte EG-Verzeichnis. Jeder Stoff in diesem Verzeichnis besitzt eine EG-Nummer, die ihm durch die Europäische Kommission zugewiesen wurde (siehe ausführliche Informationen zu EG-Nummern in Anhang II).

Informationen zu diesen Stoffen sind über die Website der Europäischen Chemikalienagentur erhältlich (http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory), auf der auch ein Verzeichnis der registrierten Stoffe gepflegt und veröffentlicht wird (http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances).

3.2.1. Die Rolle des EG-Verzeichnisses bei Inkrafttreten der REACH-Verordnung

Das EG-Verzeichnis kann von Herstellern und Importeuren als Hilfsmittel bei der Entscheidung darüber verwendet werden, ob es sich bei einem Stoff um einen Phase-in-Stoff oder um einen Nicht-Phase-in-Stoff handelt. Hersteller und Importeure können im EG-Verzeichnis herausfinden, *wann* die Registrierung eines Stoffes zu erfolgen hat und ob eine (späte) Vorregistrierung oder eine Anfrage erforderlich ist.

Die REACH-Verordnung legt für die Registrierung von und die gemeinsame Datennutzung bei „vorhandenen“ („Phase-in“-)Stoffen (nach Artikel 3 Absatz 20) eine andere

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

[9] Rasmussen K., Christ G. and Davis J.B. (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. Tox Env Chem Vol. 67, S. 251–261.

Vorgehensweise als bei „neuen“ („Nicht-Phase-in“-)Stoffen[10] fest.

Wenn ein Stoff zuvor gemäß Richtlinie 67/548/EWG angemeldet wurde und damit in der ELINCS aufgeführt ist, gilt die eingereichte Anmeldung als Registrierung für die Zwecke von REACH (Artikel 24). Diese Stoffe werden als bereits von dem Hersteller oder Importeur registriert angesehen, der die Anmeldung vorgenommen hat. Eine Erstregistrierung durch diesen Hersteller/Importeur ist damit nicht notwendig. Der Hersteller/Importeur ist jedoch verpflichtet, die Registrierung auf dem aktuellen Stand zu halten. Zusätzliche Hersteller/Importeure eines in der ELINCS aufgeführten Stoffes (der nicht durch die vorherige(n) Anmeldung(en) abgedeckt ist) sind (wie bei Nicht-Phase-in-Stoffen) zu einer Registrierung verpflichtet, und sie müssen sich mit dem vorherigen Registranten auf eine gemeinsame Nutzung von Daten verständigen. Weitere Informationen zu diesem Thema finden Sie in den „*Leitlinien zur Registrierung*“ auf der ECHA-Leitlinien-Website unter http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach.

3.2.2. Die Listennummern nach Inkrafttreten der REACH-Verordnung

Bei der Schaffung des REACH-IT-Systems hielt es die ECHA für vorteilhaft, den Stoffen in allen bei ihr eingehenden technisch vollständigen Einreichungen (Vorregistrierungen, PPORD-Anmeldungen, Anfragen, Registrierungen, Meldungen der Einstufung und Kennzeichnung usw.), für die keine EG-Nummer angegeben wurde, automatisch eine Nummer zuzuweisen (siehe Zuweisungskriterien für die Listennummern weiter unten). Dadurch wurde es technisch möglich, die Stoffe in diesen Einreichungen zu verwalten, weiter zu verarbeiten und zu identifizieren. Diese sogenannten „Listennummern“ haben dasselbe numerische Format wie die EINECS-, ELINCS- und NLP-Nummern, beginnen aber mit anderen Ziffern.

Im Unterschied zu EINECS-, ELINCS- und NLP-Einträgen basieren die Listennummern jedoch nicht auf einer Rechtsvorschrift, und sie werden auch nicht im Amtsblatt der Europäischen Union veröffentlicht. Damit haben die Listennummern nicht dieselbe Bedeutung wie EG-Nummern, sie haben lediglich das numerische Format gemein. Die Listennummern dienen einzig und allein Verwaltungszwecken und sind rechtlich nicht relevant. Vor allem jedoch wurden die übergroße Mehrheit der Listennummern und die mit ihnen verknüpfte Stoffidentifizierung zu keinem Zeitpunkt auf Korrektheit, Gültigkeit und Einhaltung der in diesen Leitlinien beschriebenen Konventionen geprüft.

Aus diesem Grund war ursprünglich nicht geplant, die Listennummern vor einer Überprüfung durch die ECHA für die Allgemeinheit zu veröffentlichen. Da aber während der Vorregistrierungsphase ca. 40 000 Stoffe ohne eine EG-Nummer vorregistriert wurden, entschied die ECHA, zusammen mit der Liste der vorregistrierten Stoffe die Listennummern zu veröffentlichen, um so die Bildung von SIEFs zu erleichtern.

Es sei auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einem Stoff unterschiedliche Listennummern zugewiesen wurden, wenn für diesen Stoff unterschiedliche Identifikatoren (z. B. Bezeichnungen) verwendet wurden. Somit kann es passieren, dass einem im EINECS, in der ELINCS oder in der NLP-Liste aufgeführten Stoff, bei dessen Einreichung bei der ECHA über REACH-IT eine Stoffbezeichnung verwendet wurde, die von der Bezeichnung im EG-Verzeichnis abweicht, eine Listennummer zugewiesen wird.

Die Listennummern beginnen grundsätzlich mit 6, 7, 8 oder 9 (6xx-xxx-x, 7xx-xxx-x, 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

Stoffen, die im Dossier/in der Einreichung durch eine CAS-Nummer identifiziert wurden, die nicht mit einer EG-Nummer oder einer anderen, von der ECHA bereits zugewiesenen

[10] Begriffsbestimmungen für die Begriffe „Phase-in-Stoff“ und „Nicht-Phase-in-Stoff“ sind in den „*Leitlinien zur Registrierung*“ zu finden.

Listennummer verknüpft ist, wird eine mit 6 oder 8 beginnende Listennummer zugewiesen.

Stoffe, für die im Dossier nur eine Bezeichnung angegeben ist, die nicht mit einer Bezeichnung im EG-Verzeichnis oder mit einer Listenbezeichnung in Verbindung gebracht werden kann, erhalten eine mit 9 beginnende Listennummer.

Die mit 7 beginnenden Listennummern werden im Rahmen des Anfrageprozesses (Artikel 26 der REACH-Verordnung) nach der Verifizierung der Stoffidentifizierung zugewiesen. Bei diesen Einträgen kann daher von einer verlässlichen und geprüften Stoffidentität ausgegangen werden.

Es sei darauf hingewiesen, dass bei einigen EINECS-Einträgen die Beschreibung des Stoffes relativ allgemein ist und gemäß Artikel 3 Absatz 1 der REACH-Verordnung für mehr als eine Stoffidentität als zutreffend angesehen werden könnte. In diesen Fällen ist der potenzielle Registrant angehalten, den fraglichen Stoff genauer (z. B. anhand des IUPAC-Namens oder anderer Identifikatoren) zu beschreiben. Bei der Angabe des Phase-in-Status des Stoffes sollte der Registrant dennoch angeben, zu welchem EINECS-Eintrag der Stoff gehört. In diesem Fall entscheidet dann die Europäische Chemikalienagentur, ob dem fraglichen Stoff eine Listennummer zugewiesen wird.

3.3. Anforderungen an die Stoffidentifizierung in REACH und CLP

Wird gemäß REACH-Verordnung eine Registrierung erforderlich, muss diese die in Anhang VI Abschnitt 2 genannten Angaben zur Identifizierung des Stoffes enthalten. Die Angaben müssen zur eindeutigen Identifizierung des Stoffes geeignet und ausreichend sein. Ist es technisch nicht möglich oder erscheint es aus wissenschaftlicher Sicht unnötig, Angaben zu einem oder mehreren der Parameter zur Stoffidentifizierung zu machen, so ist dies gemäß Anhang VI Anmerkung 1 ausreichend zu begründen.

Für Meldungen gilt Ähnliches: Ist gemäß CLP-Verordnung eine Meldung erforderlich (Artikel 40 der CLP-Verordnung), muss diese die in Anhang VI Abschnitte 2.1 bis 2.3.4 der REACH-Verordnung genannten Angaben zur Identifizierung des Stoffes enthalten. Die Angaben müssen zur eindeutigen Identifizierung des Stoffes geeignet sein. Ist es technisch nicht möglich oder erscheint es aus wissenschaftlicher Sicht unnötig, Angaben zu einem oder mehreren der Parameter zur Stoffidentifizierung zu machen, so ist dies gemäß Anhang VI Anmerkung 1 ausreichend zu begründen.

Eine Übersicht über die Parameter zur Stoffidentifizierung in Anhang VI der REACH-Verordnung erhalten Sie in **Tabelle 3**.

Tabelle 3: Parameter zur Stoffidentifizierung in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung

	Parameter zur Stoffidentifizierung in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung
2.	**IDENTIFIZIERUNG DES STOFFES** *Die in diesem Abschnitt gemachten Angaben müssen zur eindeutigen Identifizierung des Stoffes ausreichend sein. Falls es technisch nicht möglich oder aus wissenschaftlicher Sicht unnötig ist, bestimmte nachstehend aufgeführte Angaben zu machen, so ist das ausreichend zu begründen.*
2.1	***Name oder andere Bezeichnung des Stoffes***
2.1.1	*Bezeichnung(en) laut IUPAC-Nomenklatur oder andere internationale chemische Bezeichnung(en)*

	Parameter zur Stoffidentifizierung in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung
2.1.2	*Andere Namen (allgemeine Bezeichnung, Handelsname, Abkürzung)*
2.1.3	*EINECS- oder ELINCS-Nummer (sofern vorhanden und sachdienlich)*
2.1.4	*CAS-Bezeichnung und CAS-Nummer (sofern vorhanden)*
2.1.5	*Sonstiger Identifizierungscode (sofern vorhanden)*
2.2	***Angaben zu Summen- und Strukturformel des Stoffes***
2.2.1	*Summen- und Strukturformel (einschließlich SMILES-Notation, sofern vorhanden)*
2.2.2	*Angaben zur optischen Aktivität und zum typischen Anteil von (Stereo-)Isomeren (falls zutreffend und sachdienlich)*
2.2.3	*Molekulargewicht oder Molekulargewichtsbereich*
2.3.	***Zusammensetzung des Stoffes***
2.3.1	*Reinheitsgrad (%)*
2.3.2	*Art der Verunreinigungen einschließlich Isomere und Nebenprodukte*
2.3.3	*Prozentanteil der wesentlichen Verunreinigungen*
2.3.4	*Art und Anteil (… ppm, … %) etwaiger Zusatzstoffe (z. B. Stabilisatoren, Inhibitoren)*
2.3.5	*Spektraldaten (Ultraviolett-, Infrarot-, NMR-, Massenspektrografie)*
2.3.6	*Hochdruck-Flüssigchromatogramm, Gaschromatogramm*
2.3.7	*Beschreibung der Analysemethoden oder Angabe der bibliografischen Daten zur Identifizierung des Stoffes, gegebenenfalls auch zur Identifizierung der Verunreinigungen und Zusatzstoffe. Die Angaben müssen die Reproduktion der Methoden ermöglichen.*

4. Leitlinien für die Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen gemäß REACH und CLP

4.1. Einleitung

Welche Regeln für die Identifizierung und Bezeichnung gelten, hängt von der Art des jeweiligen Stoffes ab. Diese Leitlinien sind aus praktischen Gründen so aufgebaut, dass der Leser für jede Art von Stoff direkt zu dem Kapitel geführt wird, das die entsprechenden Informationen enthält. In diesem Sinne finden Sie hier im Folgenden einige Erläuterungen zu den unterschiedlichen Arten von Stoffen und am Ende eine Entscheidungshilfe, anhand derer Sie herausfinden können, welches Kapitel die Informationen enthält, die Sie gerade benötigen.

Für die Stoffidentifizierung sind mindestens die in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung genannten Parameter heranzuziehen (siehe **Tabelle 3**). Das bedeutet, dass jeder Stoff anhand einer Kombination aus den folgenden Identifizierungsparametern zu identifizieren ist:

- IUPAC-Name und/oder andere Bezeichnung und andere Identifikatoren, z. B. CAS-Nummer, EG-Nummer (Anhang VI, Abschnitt 2.1)
- Angaben zu Summen- und Strukturformel (Anhang VI, Abschnitt 2.2)
- chemische Zusammensetzung (Anhang VI, Abschnitt 2.3)

Zur vollständigen Identifizierung eines Stoffes muss dessen chemische Zusammensetzung, also die chemische Identität und der Gehalt der einzelnen Bestandteile des Stoffes, angegeben sein. Eine derart direkte Identifizierung mag zwar bei den meisten Stoffen möglich sein, bei bestimmten Stoffen ist dies jedoch im Rahmen der REACH-Verordnung und der CLP-Verordnung nicht machbar oder nicht angemessen. In diesen Fällen müssen andere oder zusätzliche Angaben zur Stoffidentifizierung gemacht werden.

Das bedeutet, dass Stoffe in zwei Hauptgruppen unterteilt werden können:

1. „Genau definierte Stoffe“: Stoffe mit einer definierten qualitativen und quantitativen Zusammensetzung, die auf der Grundlage der in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung verlangten Identifizierungsinformationen ausreichend identifiziert werden kann.
2. „UVCB-Stoffe”: Stoffe mit unbekannter oder variabler Zusammensetzung, komplexe Reaktionsprodukte oder biologische Materialien. Diese Stoffe können durch die oben genannten Parameter nicht ausreichend identifiziert werden.

Die schwankende Zusammensetzung genau definierter Stoffe wird durch den oberen und den unteren Grenzwert des Konzentrationsbereichs/der Konzentrationsbereiche des Hauptbestandteils/der Hauptbestandteile angegeben. Bei UVCB-Stoffen ist die Schwankungsbreite recht hoch und/oder schwer vorhersehbar.

Es ist bekannt, dass es Grenzfälle bei der Entscheidung gibt, ob ein Stoff ein genau definierter Stoff (Reaktionsprodukte mit vielen Bestandteilen und hoher Schwankungsbreite der einzelnen Bestandteile) oder ein UVCB-Stoff (Reaktionsprodukte mit variabler und schwer vorhersehbarer Zusammensetzung) ist. Daher ist der Registrant dafür zuständig, seinen Stoff auf die geeignetste Weise zu identifizieren.

Für „genau definierte Stoffe“ mit nur einem Hauptbestandteil gelten andere Regeln für die Identifizierung und Bezeichnung als für „genau definierte Stoffe“ mit mehreren Hauptbestandteilen. „Genau definierte Stoffe“: Außerdem sind für die verschiedenen Arten von Stoffen, die zu den „UVCB-Stoffen“ zählen, unterschiedliche Regeln für die Identifizierung und Bezeichnung beschrieben.

In den Tabellen **4** und **5** sind die Hauptidentifikatoren für mehrere Beispiele verschiedener

Stoffarten aufgeführt. Diese Beispiele wurden so zu Gruppen zusammengefasst, dass die Gemeinsamkeiten und die Unterschiede bei der Stoffidentifizierung gut zu erkennen sind.

Die Tabellen **4** und **5** beinhalten keine vollständige Liste aller möglichen Stoffarten. Die hier vorgenommene Gruppierung der Stoffe und die dazu genannten Regeln für die Identifizierung und Bezeichnung sind nicht als offizielles System für die Kategorisierung von Stoffen, sondern vielmehr als praktische Hilfe dazu anzusehen, wie die einzelnen Regeln korrekt anzuwenden und wo die entsprechenden Leitlinien in diesem Dokument zu finden sind.

Tabelle 4: Gruppierung der Hauptidentifikatoren bei Beispielen, die für verschiedene Arten von genau definierten ähnlichen Stoffen stehen

Gemeinsame Merkmale	Beispiele oder Vertreter	Hauptidentifikatoren
Stoffe, die durch die chemische Zusammen-setzung genau definiert sind *[Kapitel 4.2.]*	Einkomponentige Stoffe, z. B. - Benzol (95 %) - Nickel (99 %) *[Kapitel 4.2.1]*	Chemische Zusammensetzung: ein Hauptbestandteil ≥ 80 %: - Chemische Identität des Hauptbestandteils (chemische Bezeichnung, CAS-Nummer, EG-Nummer usw.) - Typische Konzentration sowie oberer und unterer Grenzwert
	Mehrkomponentige Stoffe, z. B. definierte Reaktionsprodukte wie Reaktionsmasse von 2-, 3- und 4-Chlortoluen (jeweils 30 %) *[Kapitel 4.2.2]*	Chemische Zusammensetzung: Gemisch (Reaktionsmasse) aus Hauptbestandteilen zwischen jeweils ≥ 10 % und < 80 %: - Chemische Identität jedes Hauptbestandteils - Typische Konzentrationen sowie oberer und unterer Grenzwert der einzelnen Bestandteile und der Reaktionsmasse als solcher
	Stoffe, die durch mehr als die chemische Zusammensetzung definiert sind, z. B. Graphit und Diamant *[Kapitel 4.2.3]*	Chemische Zusammensetzung als ein- oder mehrkomponentiger Stoff UND Andere physikalische oder beschreibende Parameter, z. B. Kristallmorphologie, (geologische) mineralische Zusammensetzung usw.

Tabelle 5: Gruppierung der Hauptidentifikatoren für Beispiele, die für verschiedene Arten von UVCB-Stoffen stehen

Gemeinsame Merkmale		Beispiele oder Vertreter	Hauptidentifikatoren		
			Quelle	*Verfahren*	*Andere Identifikatoren*
UVCB-Stoffe (Stoffe mit unbekannter oder variabler Zusammensetzung, komplexe Reaktionsprodukte und biologische Materialien) *[Kapitel 4.3]*	Biologische Materialien (B)	Extrakte aus biologischen Materialien, z. B. natürliche Duftstoffe, natürliche Öle, natürliche Farbstoffe und Pigmente	- Pflanzen- oder Tierart und -familie - Teil einer Pflanze/eines Tieres	- Extraktion - Fraktionierung, Konzentrierung, Isolierung, Aufreinigung usw. - Derivatisierung*	- Bekannte oder allgemeine Zusammensetzung - Chromatografischer oder anderer Fingerprint - Verweis auf Standards Colour Index
		Komplexe biologische Makromoleküle, z. B. Enzyme, Proteine, DNA- oder RNA-Fragmente, Hormone, Antibiotika			- Standardenzymindex - Genetischer Code - Stereokonfiguration - Extraktion - Funktion/Aktivität - Struktur - Aminosäuresequenz
		Fermentationsprodukte Antibiotika, Biopolymere, Enzymgemische, Vinassen (Produkte der Zuckerfermentation) usw.	- Nährmedium - Eingesetzte Mikroorganismen	- Fermentation - Isolierung von Produkten - Aufreinigungsschritte	- Produktarten: z. B. Antibiotika, Biopolymere, Proteine usw. - Bekannte Zusammensetzung
	Chemische und mineralische	Reaktionsgemische mit schwer vorhersehbarer und/oder variabler Zusammensetzung	Ausgangsstoffe	Art der chemischen Reaktion, z. B. Veresterung, Alkylierung, Hydrierung	- Bekannte Zusammensetzung - Chromatografischer oder anderer Fingerprint - Verweis auf Standards

	Stoffe mit ungenau definier-ter, komplexer oder variabler Zu-sammen-setzung (UVC)	- Fraktionen oder Destillate, z. B. Erdölstoffe - Ton, z. B. Bentonit - Teere	- Rohöle - Kohle/Torf - Mineralgase - Minerale	- Fraktionierung, Destillierung - Umwandlung von Fraktionen - Physikalische Verarbeitung - Rückstände	- Cut-off-Bereiche - Kettenlängenbereich - Verhältnis aromatisch/aliphatisch - Bekannte Zusammensetzung - Standardindex
		Konzentrate oder Schmelzen, z. B. metallische Minerale oder Rückstände aus verschiedenen Schmelz- oder metallurgischen Verfahren, z. B. Schlacken	Erze	- Verhüttung - Wärmebehandlung - Verschiedene metallurgische Verfahren	- Bekannte oder allgemeine Zusammensetzung - Konzentration von Metallen

* Bei den unterstrichenen Verfahren werden neue Moleküle synthetisiert.

Dieses Kapitel ist in Unterkapitel unterteilt, die konkrete Leitlinien für die Stoffidentifizierung für die verschiedenen Stoffarten enthalten. **Abbildung 1** enthält ein Entscheidungsdiagramm, das Sie zum jeweils passenden Kapitel leitet.

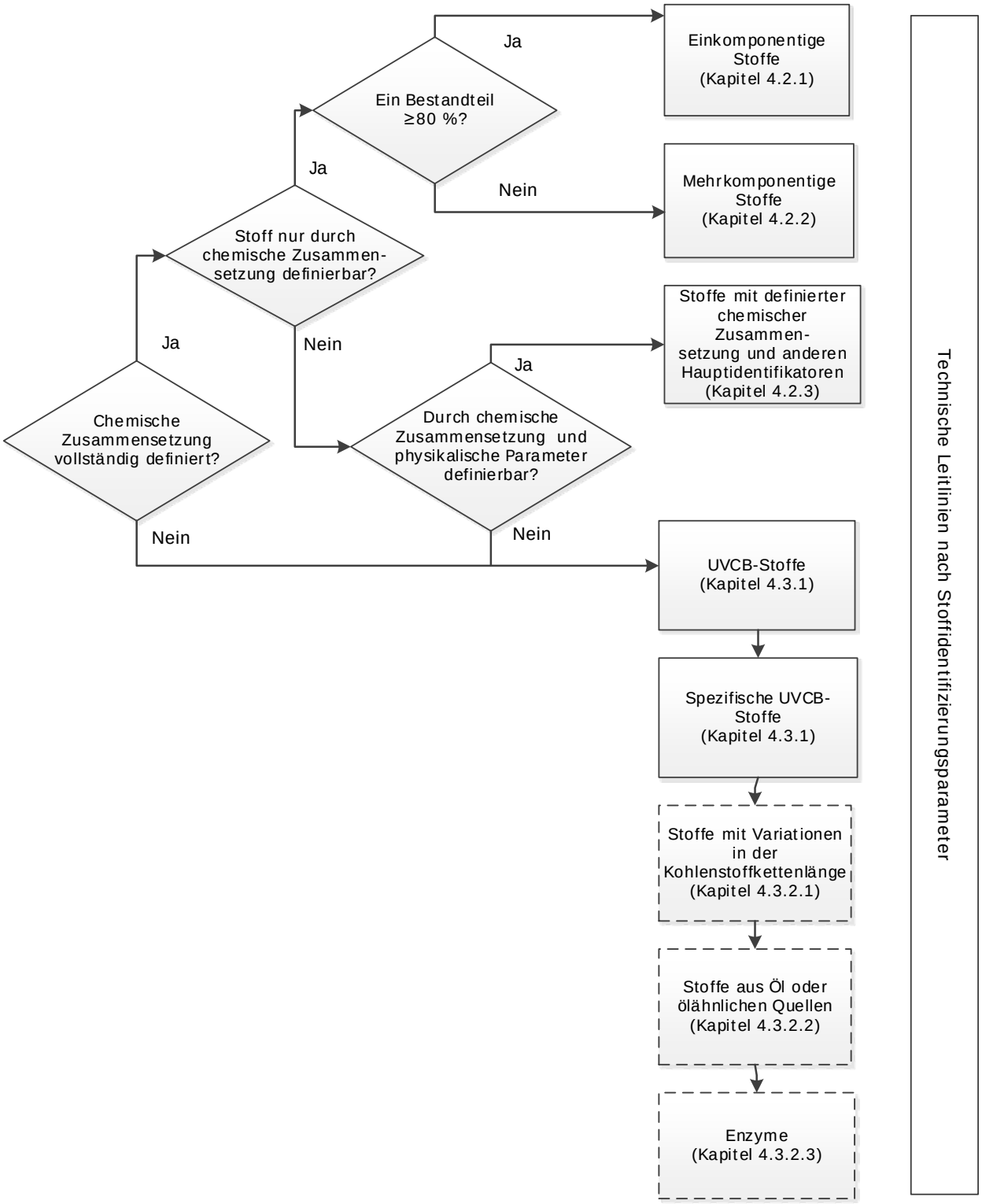
Die Entscheidungshilfe in **Abbildung 1** basiert auf Kriterien, die als Faustregeln zu verstehen sind. Es obliegt dem Registranten, das passendste Kapitel auszuwählen und die Stoffidentität gemäß den Regeln und Kriterien für die jeweilige Stoffart zu erfassen.

Grundregel dabei ist, dass Stoffe so weit wie möglich durch ihre chemische Zusammensetzung und die Identifizierung der Bestandteile definiert werden. Nur, wenn es technisch nicht machbar ist, sollten andere Identifikatoren, wie für die verschiedenen Arten von UVCB-Stoffen angegeben, verwendet werden.

Weicht der Registrant von den in diesen Leitlinien genannten Regeln und Kriterien für die Stoffidentifizierung ab, muss er dies begründen. Die Stoffidentifizierung sollte transparent, nachvollziehbar und einheitlich sein.

Abbildung 1: Entscheidungsdiagramm für das Auffinden der Kapitel und Anhänge

der Leitlinien für die verschiedenen Stoffarten



Es ist/sind eine Beschreibung der Analysemethoden und/oder die bibliografischen Daten zur Identifizierung des Stoffes, gegebenenfalls auch zur Identifizierung der Verunreinigungen und Zusatzstoffe, bereitzustellen (REACH-Verordnung Anhang VI, Abschnitte 2.3.5, 2.3.6 und 2.3.7). Diese Angaben müssen die Reproduktion der Methoden ermöglichen. Außerdem sollten auch typische Ergebnisse der Anwendung der Analyseverfahren bereitgestellt werden.

4.2. Stoffe mit genau definierter Zusammensetzung

Stoffe mit genau definierter Zusammensetzung werden nach dem/den Hauptbestandteil(en) bezeichnet. Bei einigen Arten von Stoffen reicht jedoch die chemische Zusammensetzung allein für die Beschreibung nicht aus. In diesen Fällen sind zur Stoffidentifizierung zusätzlich weitere physikalische Parameter hinsichtlich der chemischen Strukturen anzugeben.

Allgemein gilt, dass die Zusammensetzung zu bis zu 100 % angegeben werden sollte. Für jeden Bestandteil ist dabei eine vollständige chemische Spezifikation einschließlich der Strukturformel bereitzustellen. Bei Stoffen, die durch ihre chemische Zusammensetzung definiert sind, wird unterschieden zwischen:

- Hauptbestandteil: Bestandteil eines Stoffes, der weder ein Zusatzstoff noch eine Verunreinigung ist und der einen erheblichen Teil dieses Stoffes ausmacht und deshalb für die Bezeichnung des Stoffes und seine detaillierte Identifizierung verwendet wird.
- Verunreinigung: Nicht vorgesehener Bestandteil des produzierten Stoffes. Sie kann beispielsweise aus den Ausgangsmaterialien stammen oder das Ergebnis von Sekundär- oder unvollständigen Reaktionen im Produktionsprozess sein. Obwohl Verunreinigungen im fertigen Stoff enthalten sind, wurden sie nicht absichtlich zugefügt.
- Zusatzstoff: Stoff, der absichtlich zur Wahrung der Stabilität eines Stoffes zugesetzt wird

Alle Bestandteile (außer den Zusatzstoffen), die nicht Hauptbestandteile des einkomponentigen oder mehrkomponentigen Stoffes sind, werden als Verunreinigungen angesehen. In einigen Branchen ist es zwar allgemein üblich, für diese Bestandteile den Begriff „Spuren“ zu verwenden, in diesen Leitlinien wird jedoch in diesem Zusammenhang ausschließlich von „Verunreinigungen“ gesprochen.

Für die unterschiedlichen Bestandteile gelten jeweils eigene Anforderungen für die Identifizierung:

- Hauptbestandteile fließen in die Bezeichnung des Stoffes ein, und jeder Hauptbestandteil ist vollständig durch alle relevanten Identifikatoren anzugeben.
- Verunreinigung: Verunreinigungen fließen nicht in die Bezeichnung des Stoffes ein und müssen lediglich durch Name, CAS-Nummer und EG-Nummer und/oder Summenformel angegeben werden.
- Zusatzstoffe fließen in die Angabe der Stoffzusammensetzung (nicht aber in die Bezeichnung) ein und sollten stets vollständig identifiziert werden.

Für die Unterscheidung zwischen einkomponentigen und mehrkomponentigen Stoffen werden folgende Konventionen verwendet:

- Ein einkomponentiger Stoff ist ein Stoff, in dem ein Bestandteil in einer Konzentration von mindestens 80 Massenprozent (w/w) vorliegt und der maximal 20 Massenprozent (w/w) Verunreinigungen enthält.

Einkomponentige Stoffe werden nach diesem einen Hauptbestandteil bezeichnet.

- Ein mehrkomponentiger Stoff ist ein Stoff, der aus mehreren Hauptbestandteilen besteht, deren Konzentration allgemein ≥ 10 Massenprozent (w/w) bis < 80 Massenprozent beträgt.

Mehrkomponentige Stoffe werden als Reaktionsmasse ihrer Hauptbestandteile bezeichnet.

Die genannten Regeln sind als Orientierungshilfe zu verstehen. Eine Abweichung davon ist zulässig, sofern diese fundiert begründet werden kann.

Verunreinigungen sollten normalerweise angegeben werden, sofern ihre Konzentration ≥ 1 % beträgt. Liegen jedoch Verunreinigungen vor, die für die Einstufung und/oder PBT-Beurteilung[11] entscheidend sind, sind diese unabhängig von ihrer Konzentration anzugeben. Allgemein gilt, dass die Angaben zur Zusammensetzung 100 % ergeben sollten.

Zusatzstoffe im Sinne der REACH- und der CLP-Verordnung und in diesen Leitlinien sind Arbeitsstoffe, die zur Wahrung der Stabilität eines Stoffes notwendig sind. Damit sind Zusatzstoffe ein wichtiger Bestandteil des Stoffes, was wiederum bedeutet, dass sie beim Erstellen der Massenbilanz zu berücksichtigen sind. Abseits der REACH-Verordnung und dieser Leitlinien wird der Begriff „Zusatzstoffe“ aber auch für absichtlich zugesetzte Stoffe mit anderen Funktionen verwendet. So können Zusatzstoffe z. B. als pH-Regulatoren oder Farbstoffe dienen. Diese absichtlich zugesetzten Stoffe sind nicht Teil des Stoffes als solchem und werden daher beim Erstellen der Massenbilanz nicht berücksichtigt.

Gemische sind laut Begriffsbestimmung in REACH und CLP beabsichtigte Gemenge oder Gemische von Stoffen und damit nicht als mehrkomponentige Stoffe anzusehen.

Konkrete Leitlinien zu einkomponentigen Stoffen sind in Kapitel 4.2.1 zu finden, während konkrete Leitlinien für mehrkomponentige Stoffe in Kapitel 4.2.2 nachgelesen werden können. Leitlinien zu Stoffen, für die zusätzliche Angaben gemacht werden müssen, (z. B. bestimmte Minerale) sind in Kapitel 4.2.3 enthalten.

4.2.1. Einkomponentige Stoffe

Ein einkomponentiger Stoff ist ein durch seine quantitative Zusammensetzung definierter Stoff, in dem ein Hauptbestandteil mit mindestens 80 Massenprozent (w/w) vertreten ist.

Konventionen für die Bezeichnung

Einkomponentige Stoffe werden nach dem Hauptbestandteil bezeichnet. Die Bezeichnung ist grundsätzlich in englischer Sprache nach den Regeln der IUPAC-Nomenklatur anzugeben (siehe Anhang I). Andere international übliche Bezeichnungen können zusätzlich angegeben werden.

Identifikatoren

Einkomponentige Stoffe werden durch die chemische Bezeichnung und andere Identifikatoren (einschließlich Summen- und Strukturformel) des Hauptbestandteils und die chemische Identität der Verunreinigungen und/oder Zusatzstoffe sowie deren typische(n) Konzentration(en) und Konzentrationsbereich(e) identifiziert, was durch spektroskopische und analytische Angaben zu belegen ist.

Beispiel

Hauptbestandteil	Konzentration (%)	Verunreinigung	Konzentration (%)	Stoffidentität
m-Xylol	91	o-Xylol	5	m-Xylol
o-Xylol	87	m-Xylol	10	o-Xylol

[11] Weitere Informationen zur PBT-Beurteilung und relevanten Kriterien sind in den „Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung“, Kapitel R11: „PBT-Beurteilung“, zu finden.

Normalerweise ist der Hauptbestandteil zu > 80 % vorhanden und sollte durch alle oben genannten Parameter vollständig angegeben werden. Verunreinigungen, die in einer Konzentration von > 1 % vorliegen, sind durch mindestens einen der folgenden Identifikatoren anzugeben: chemische Bezeichnung (IUPAC-Name und/oder CAS-Bezeichnung), CAS-Nummer und EG-Nummer und/oder Summenformel. Verunreinigungen, die für die Einstufung und/oder die PBT-Bewertung[12] entscheidend sind, müssen grundsätzlich und unabhängig von ihrer Konzentration durch dieselben Identifikatoren angegeben werden.

Im Sinne einer korrekten Anwendung der 80 %-Regel sind absichtlich zugesetzte Stoffe, wie z. B. pH-Regulatoren oder Farbstoffe, nicht in die Massenbilanz aufzunehmen.

Die 80 %-Regel wurde für die Anmeldung neuer Stoffe eingeführt (Richtlinie 67/548/EWG). Sie kann als Faustregel angesehen werden. Wird von dieser 80 %-Regel abgewichen, ist dies jedoch zu begründen. Im Folgenden finden Sie einige mögliche Beispiele für begründete Abweichungen:

- Der Hauptbestandteil liegt unter 80 %, aber für den Stoff können ähnliche physikalisch-chemische Eigenschaften und dasselbe Gefahrenprofil wie für andere mehrkomponentige Stoffe mit identischer Identität nachgewiesen werden, die die 80 %-Regel erfüllen.
- Die Konzentrationsbereiche für den Hauptbestandteil und die Verunreinigungen ergeben einen Wert über der 80 %-Grenze, und der Hauptbestandteil ist nur gelegentlich ≤ 80 %.

Beispiele

Stoff	Haupt-bestand-teil	Obere Konz. (%)	Typ. Konz. (%)	Untere Konz. (%)	Ver-un-reini-gung	Obere Konz. (%)	Typ. Konz. (%)	Untere Konz. (%)	Stoff-identi-tät
1	o-Xylol	90	85	65	m-Xylol	35	15	10	o-Xylol
2	o-Xylol m-Xylol	90 35	85 15	65 10	p-Xylol	5	4	1	o-Xylol

Aufgrund der Konzentrationsbereiche des Hauptbestandteils und der Verunreinigung könnten die Stoffe 1 und 2 als mehrkomponentige Stoffe mit den beiden Hauptbestandteilen o-Xylol und m-Xylol oder als einkomponentiger Stoff angesehen werden. In einem solchen Fall sind aber beide Stoffe als einkomponentige Stoffe zu betrachten, da die Konzentration von o-Xylol typischerweise > 80 % liegt.

Analytische Angaben

Zur Bestätigung der Struktur eines einkomponentigen Stoffes sind ausreichende Spektraldaten erforderlich. Für deren Gewinnung können verschiedene spektroskopische Methoden geeignet sein, insbesondere die UV/Vis-Spektroskopie, die IR-Spektroskopie, die NMR-Spektroskopie und die Massenspektroskopie (MS). Bei anorganischen Stoffen können Verfahren wie die Röntgenbeugung (XRD), die Röntgenfluoreszenz (XRF) oder die Atomabsorptionsspektroskopie (AAS) geeigneter sein.

Zur Bestätigung der Zusammensetzung des Stoffes sind chromatografische Methoden, wie

[12] Weitere Informationen zur PBT-Beurteilung und relevanten Kriterien sind in den „Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung“, Kapitel R11: „PBT-Beurteilung“, zu finden.

die Gaschromatografie (GC) oder die Hochleistungsflüssigkeitschromatografie (HPLC), heranzuziehen. Gegebenenfalls können auch andere valide Verfahren zur Trennung der Bestandteile verwendet werden.

Spektroskopische und Analysemethoden unterliegen ständigem Wandel. Aus diesem Grund liegt es in der Verantwortung des Registranten, geeignete Spektral- und Analysedaten vorzulegen.

4.2.2. Mehrkomponentige Stoffe

Mehrkomponentige Stoffe sind Stoffe, die durch ihre quantitative Zusammensetzung definiert sind und in denen mehrere Hauptbestandteile in Konzentrationen zwischen ≥ 10 Massenprozent (w/w) und < 80 Massenprozent (w/w) vertreten sind. Mehrkomponentige Stoffe sind das Ergebnis von Herstellungsverfahren[13].

Gemäß REACH-Verordnung müssen Stoffe so registriert werden, wie sie produziert wurden. Wird ein mehrkomponentiger Stoff hergestellt, muss der mehrkomponentige Stoff registriert werden[14] [15]. In welchem Umfang die unterschiedlichen Schritte zur Produktion des Stoffes durch den Begriff „Herstellung“ abgedeckt sind, ist von Fall zu Fall zu entscheiden. Alle Stoffe, die zuvor durch das EINECS abgedeckt waren (dazu zählten z. B. mehrkomponentige Stoffe, wenn alle einzelnen Bestandteile im EINECS aufgeführt waren), würden sich als Phase-in-Stoffe qualifizieren. Wenn das Gefahrenprofil des Stoffes durch die Angaben zu den einzelnen Bestandteilen ausreichend beschrieben werden kann, muss der Stoff als solcher nicht geprüft werden.

Konventionen für die Bezeichnung

Mehrkomponentige Stoffe sind als Reaktionsmasse der Hauptbestandteile des Stoffes als solchem und nicht der Ausgangsstoffe zu bezeichnen, die zur Produktion des Stoffes benötigt wurden. Allgemein ist dazu das Format „Reaction mass of [Bezeichnungen der Hauptbestandteile]“ zu verwenden. Es empfiehlt sich, die Bezeichnungen der Bestandteile alphabetisch geordnet anzuführen und die einzelnen Bezeichnungen durch die Konjunktion „and“ (und) zu trennen. Bei der Bezeichnung sind nur die Hauptkomponenten zu berücksichtigen, die typischerweise ≥ 10 % des Stoffes ausmachen. Die Bezeichnungen sind grundsätzlich in englischer Sprache nach den Regeln der IUPAC-Nomenklatur anzugeben. Andere international übliche Bezeichnungen können zusätzlich angegeben werden.

Identifikatoren

Mehrkomponentige Stoffe werden durch die chemische Bezeichnung und die Identifikatoren des Stoffes als solchem sowie durch die quantitative und qualitative chemische Zusammensetzung (chemische Identität einschließlich Summen- und Strukturformel) der Bestandteile identifiziert, und der Nachweis erfolgt anhand analytischer Angaben.

Beispiel				
Haupt-bestandteile	Konzen-tration (%)	Verun-reinigung	Konzentration (%)	Stoffidentität

[13] Der Unterschied zwischen einem Gemisch und einem mehrkomponentigen Stoff besteht darin, dass das Gemisch durch Vermengen von zwei oder mehreren Stoffen entsteht, ohne dass eine chemische Reaktion abläuft. Mehrkomponentige Stoffe sind das Ergebnis chemischer Reaktionen.

[14] Eine Reihe von Stoffen wurde in der REACH-Verordnung von der Registrierungspflicht ausgenommen (z. B. die Stoffe, die in Anhang IV aufgeführt sind).

[15] Dieser Ansatz hat für bestimmte Stoffe, wie z. B. Minerale, keine Gültigkeit (weitere Informationen dazu siehe Kapitel 7.5).

m-Xylol o-Xylol	50 45	p-Xylol	5	Reaktionsmasse von m-Xylol und o-Xylol

Bei mehrkomponentigen Stoffen ist die chemische Zusammensetzung bekannt, und für die Identifizierung des Stoffes sind mehrere Hauptbestandteile von Bedeutung. Außerdem ist die chemische Zusammensetzung vorhersehbar und kann in Form typischer Werte und Bereiche angegeben werden. Die Hauptbestandteile sind vollständig anhand aller relevanten Parameter anzugeben. Die Summe der Angaben für die typischen Konzentrationen der Hauptbestandteile (≥ 10 %) und der Verunreinigungen (< 10 %) muss 100 % ergeben.

Im Sinne einer korrekten Anwendung der 10 %- und der 80 %-Regel sind absichtlich zugesetzte Stoffe, wie z. B. pH-Regulatoren oder Farbstoffe, nicht in die Massenbilanz aufzunehmen.

Verunreinigungen, die in einer Konzentration von ≥ 1 % vorliegen, sollten durch mindestens einen der folgenden Identifikatoren angegeben werden: chemische Bezeichnung, CAS-Nummer und EG-Nummer und/oder Summenformel. Verunreinigungen, die für die Einstufung und/oder die PBT-Bewertung entscheidend sind, müssen grundsätzlich und unabhängig von ihrer Konzentration durch dieselben Identifikatoren angegeben werden.

Beispiel

Haupt-bestandteil	Obere Konz. (%)	Typ. Konz. (%)	Untere Konz. (%)	Verunreini-gung	Obere Konz. (%)	Typ. Konz. (%)	Untere Konz. (%)	Stoffidentität
Anilin Naphthalin	90 35	75 20	65 10	Phenanthren	5	4	1	Reaktions-masse aus Anilin und Naphtalin

Nach den Regeln in diesen Leitlinien ist dieser Stoff ein mehrkomponentiger Stoff. Obwohl die Konzentrationswerte für einen der Bestandteile in den Bereich von > 80 % fallen können, bleibt dies die Ausnahme und die typische Konzentration liegt bei < 80 %.

Mitunter ist es einfacher, einen Stoff als mehrkomponentigen Stoff zu betrachten, auch wenn ein Bestandteil in einer Konzentration von ≥ 80 % vorliegt. Angenommen, ein Stoff enthält zwei Bestandteile: einen Bestandteil in einer Konzentration von 85 % und einen anderen Bestandteil in einer Konzentration von 10 %. Der Rest sind Verunreinigungen. Beide Bestandteile tragen zur gewünschten technischen Wirkung des Stoffes bei und sind entscheidend für sie. In diesem Fall kann der Stoff als zweikomponentiger Stoff beschrieben werden, auch wenn ein Bestandteil in einer Konzentration von > 80 % vorliegt.

Analytische Angaben

Wenn Spektraldaten Informationen zur Zusammensetzung des mehrkomponentigen Stoffes bieten, sollten diese Daten bereitgestellt werden. Für deren Gewinnung können verschiedene spektroskopische Methoden geeignet sein, insbesondere die UV/Vis-Spektroskopie, die IR-Spektroskopie, die NMR-Spektroskopie und die Massenspektroskopie. Bei anorganischen Stoffen können Verfahren wie die Röntgenbeugung (XRD), die Röntgenfluoreszenz (XRF) oder die Atomabsorptionsspektroskopie (AAS) geeigneter sein.

Zur Bestätigung der Zusammensetzung des Stoffes sind chromatografische Methoden, wie die Gaschromatografie (GC) oder die Hochleistungsflüssigkeitschromatografie (HPLC), heranzuziehen. Gegebenenfalls können auch andere valide Verfahren zur Trennung der Bestandteile verwendet werden.

Spektroskopische und Analysemethoden unterliegen ständigem Wandel. Aus diesem Grund liegt es in der Verantwortung des Registranten, geeignete Spektral- und Analysedaten vorzulegen.

Registrierung einzelner Bestandteile eines mehrkomponentigen Stoffes

Allgemein gilt, dass beim Erfassen der Identität von Stoffen zum Zweck der (späten Vor-)Registrierung der für mehrkomponentige Stoffe beschriebene Ansatz (d. h. die Registrierung des mehrkomponentigen Stoffes) zu verfolgen ist. Sofern begründbar, können abweichend davon einzelne Bestandteile registriert werden. Eine solche Registrierung einzelner Bestandteile und damit die Abweichung von der Standardvorgehensweise beim Identifizieren (und möglicherweise Registrieren) von Stoffen ist in folgenden Fällen möglich:

- Die Informationsanforderungen verringern sich dadurch nicht.
- Es liegen ausreichend Daten vor, um den Ansatz der Registrierung der einzelnen Bestandteile zu begründen, d. h., der Ansatz sollte im Vergleich zum Standardansatz normalerweise keine zusätzlichen Versuche (an Wirbeltieren) nach sich ziehen.
- Das Registrieren der einzelnen Bestandteile ist effizienter (d. h., Mehrfachregistrierungen von Stoffen werden vermieden, die aus denselben Bestandteilen bestehen).
- Es werden die Angaben zur Zusammensetzung der einzelnen Reaktionsmassen bereitgestellt.

Diese Flexibilität bei der Registrierung darf nicht dazu missbraucht werden, Datenanforderungen zu umgehen. Angenommen, ein mehrkomponentiger Stoff „(C + D)“, der sich aus 50 % C und 50 % D zusammensetzt, soll für eine Menge von 1200 Tonnen pro Jahr registriert werden. Dieser Ansatz würde dann bedeuten, dass zwei Registrierungen mit den folgenden Angaben eingereicht werden:

Stoff C

- Mengenbereich: 600
- Datenanforderungen für >1000 Tonnen (Anhang X)

Stoff D

- Mengenbereich: 600
- Datenanforderungen für >1000 Tonnen (Anhang X)

Dieser Ansatz ist mit der REACH-Anforderung zu kombinieren, dass die Mengen ein und desselben Stoffes pro Rechtsperson zu addieren sind. Für eine korrekte Ermittlung der zu erfüllenden Datenanforderungen empfiehlt es sich daher, wie folgt vorzugehen:

- Addieren Sie alle Mengen der einzelnen Bestandteile (anhand der Mengen im Stoff).
- Beziehen Sie sich auf die höchste Menge eines Stoffes, der diesen Bestandteil enthält.

Die Informationsanforderungen sollten anhand des höchsten Ergebnisses ermittelt werden. Für das Erfassen der Mengenbereiche ist das Ergebnis der Addition der Mengen der einzelnen Bestandteile heranzuziehen. Die praktische Umsetzung dieses Ansatzes wird im Folgenden an einigen einfachen Beispielen beschrieben:

Beispiel 1

Ein mehrkomponentiger Stoff „C + D + E“ ist das Ergebnis eines Verfahrens bei einer Rechtsperson, aus dem mehrere Stoffe resultieren:

- Stoff 1: 50 % C und 25 % D und 25 % E, 1100 Tonnen/Jahr
- Stoff 2: 50 % C und 50 % D, 500 Tonnen/Jahr

Außerdem ist in diesem Fall das Reaktionsprodukt der Ausgangspunkt: Die beiden Stoffe sollen als mehrkomponentige Stoffe registriert werden. Beim Ansatz, die Bestandteile

einzeln zu registrieren[16], würde Folgendes gelten:

In diesem Fall müsste für Stoff D Folgendes gemeldet werden:

- Mengenbereich: (25 % × 1100) + (50 % × 500) = 525 Tonnen/Jahr

Die Ermittlung der Informationsanforderungen erfolgt anhand der strengsten Anforderung. In diesem Fall: > 1000 Tonnen/Jahr, da der Gesamtmengenbereich des mehrkomponentigen Stoffes „C + D + E“ über 1000 Tonnen/Jahr liegt.

Hinweis: Bei diesem Beispiel sollten die Stoffe C und E entsprechend registriert werden.

Beispiel 2

Ein mehrkomponentiger Stoff „G + H + I“ ist das Ergebnis eines Verfahrens bei einer Rechtsperson, aus dem mehrere Stoffe resultieren:

- Stoff 3: 65 % G und 15 % H und 20 % I, 90 Tonnen/Jahr
- Stoff 4: 60 % G und 40 % H, 90 Tonnen/Jahr

Stoff G ist damit wie folgt zu melden:

- Mengenbereich: (65 % × 90) + (60 % × 90) = 112,5 Tonnen/Jahr

Die Ermittlung der Informationsanforderungen erfolgt anhand der strengsten Anforderung. In diesem Fall: > 100 Tonnen/Jahr, da der Gesamtmengenbereich des Bestandteiles G über 100 Tonnen/Jahr liegt.

Hinweis: Bei diesem Beispiel sollten die Stoffe H und I entsprechend registriert werden.

Neben der erwähnten Ermittlung der Informationsanforderungen ist über die Anzahl neuer Studien (an Wirbeltieren) nachzudenken, die durchgeführt werden müssen. Bevor sich der potenzielle Registrant für eine Strategie entscheidet, muss er bedenken, ob genügend Studien (an Wirbeltieren) vorhanden sind und ob der vorgeschlagene Ansatz zu weniger oder mehr Versuchen (an Wirbeltieren) führt. Bei der Entscheidung ist die Strategie zu wählen, die neue Versuche (an Wirbeltieren) vermeidet.

Im Zweifelsfall sollte als Standardweg für das Erfassen der Stoffidentität zum Zwecke der Registrierung stets die Identifizierung des Stoffes wie hergestellt gewählt werden.

4.2.3. Stoffe mit definierter chemischer Zusammensetzung und andere Hauptidentifikatoren

Einige Stoffe (z. B. anorganische Minerale), die durch ihre chemische Zusammensetzung identifiziert werden können, müssen noch durch zusätzliche Identifikatoren spezifiziert werden, um ihre eigene Stoffidentifizierung zu erhalten. Bei diesen Stoffen kann es sich um einkomponentige oder mehrkomponentige Stoffe handeln, die jedoch zur zweifelsfreien Angabe der Stoffidentität zusätzlich zu den in den vorherigen Kapiteln beschriebenen Identifizierungsparametern noch mit weiteren Hauptidentifikatoren versehen werden müssen.

Beispiele
Bei einigen nicht-metallischen Mineralen (aus natürlichen Quellen oder synthetisch

[16] Das Beispiel soll lediglich verdeutlichen, wie die Informationsanforderungen zu ermitteln und Mengen zu melden sind. Ob der Ansatz in diesem Fall gerechtfertigt ist, spielt dabei keine Rolle.

hergestellt) mit eindeutigen Strukturen müssen für eine zweifelsfreie Identifizierung des Stoffes auch die Morphologie und die mineralische Zusammensetzung angegeben werden. Ein Beispiel dafür ist Kaolin (CAS 1332-58-7), das sich aus Kaolinit, Kaliumaluminiumsilikat, Feldspat und Quarz zusammensetzt.

Die aktuellen Entwicklungen im Bereich Nanotechnologie und die Erkenntnisse hinsichtlich der damit verbundenen Gefahren können dazu führen, dass zukünftig auch die Angaben zur Größe der Stoffe erforderlich werden. Der gegenwärtige Entwicklungsstand ist jedoch noch nicht so weit gediehen, dass Leitlinien zur Identifizierung von Stoffen in Nanoform in dieses Dokument aufgenommen werden können.

Konventionen für die Bezeichnung

Grundsätzlich sind bei der Bezeichnung dieselben Konventionen wie bei einkomponentigen Stoffen (siehe Kapitel 4.2.1) oder bei mehrkomponentigen Stoffen (siehe Kapitel 4.2.2) zu befolgen.

Bei anorganischen Mineralen können die mineralogischen Bezeichnungen für die Bestandteile verwendet werden. So ist beispielsweise Apatit ein mehrkomponentiger Stoff, der sich aus einer Gruppe von Phosphatmineralen zusammensetzt, die nach den hohen Konzentrationen an OH^--, F^-- bzw. Cl^--Ionen im Kristall normalerweise als Hydroxylapatit, Fluorapatit und Chlorapatit bezeichnet werden. Die Formel des Gemischs der drei häufigsten Arten lautet wie folgt: $Ca_5(PO_4)_3(OH, F, Cl)$. Ein anderes Beispiel ist Aragonit, eine spezielle Kristallstruktur von Calciumcarbonat.

Identifikatoren

Diese Stoffe werden nach den Regeln für einkomponentige Stoffe (siehe Kapitel 4.2.1) oder für mehrkomponentige Stoffe (siehe Kapitel 4.2.2) identifiziert und bezeichnet. Welche anderen konkreten Hauptparameter für die Identifizierung hinzuzufügen sind, hängt vom Stoff ab. Beispiele für andere Hauptidentifikatoren sind die Elementzusammensetzung mit Spektraldaten, die Kristallstruktur (ermittelt durch Röntgenbeugung), Peakwerte bei der IR-Absorption, der Quellwert, die Kationenaustauschkapazität oder andere physikalische und chemische Eigenschaften.

Bei Mineralen ist es wichtig, zur Identifizierung der mineralogischen Zusammensetzung und der Kristallstruktur die Ergebnisse der Elementzusammensetzung mit den Spektraldaten zu kombinieren. Bestätigt wird dies dann durch charakteristische physikalisch-chemische Eigenschaften, wie die Kristallstruktur (ermittelt durch Röntgenbeugung), die Form, die Härte, das Quellvermögen, die Dichte und/oder die Oberfläche.

Für bestimmte Minerale gibt es noch andere Beispiele für spezifische Hauptidentifikatoren, da Minerale charakteristische physikalisch-chemische Eigenschaften besitzen, die ihre vollständige Identifizierung ermöglichen. Dazu gehören beispielsweise: die sehr niedrige Härte von Talkum, das Quellvermögen von Bentonit, die Formen von Kieselgur, die sehr hohe Dichte von Baryt und die Oberfläche (Stickstoffadsorption).

Analytische Angaben

Für diese Stoffe sind dieselben analytischen Angaben wie für einkomponentige Stoffen (siehe Kapitel 4.2.1) oder für mehrkomponentige Stoffe (siehe Kapitel 4.2.2) zu machen. Bei Stoffen, bei denen Spektraldaten, GC-Daten oder HPLC-Chromatogramme für eine Identifizierung nicht ausreichen, sind Ergebnisse aus anderen analytischen Verfahren, z. B. Ergebnisse aus der Röntgenbeugung bei Mineralen, Ergebnisse aus einer Elementaranalyse usw., anzugeben. Entscheidend ist, dass die gemachten Angaben zur Bestätigung der Struktur des Stoffes ausreichen.

4.3. UVCB-Stoffe

Stoffe mit unbekannter oder variabler Zusammensetzung, komplexe Reaktionsprodukte und biologische Materialien, die sogenannten „UVCB-Stoffe“ (**U**nknown or **V**ariable composition, **C**omplex reaction products or **B**iological materials[17], [18], [19]), können aus den folgenden Gründen durch ihre chemische Zusammensetzung nicht ausreichend identifiziert werden:

- Die Anzahl der Bestandteile ist relativ groß und/oder
- Die Zusammensetzung ist, zu einem beträchtlichen Teil, unbekannt und/oder
- Die Zusammensetzung variiert relativ stark oder ist schwer vorhersehbar.

Dementsprechend sind zur Identifizierung von UVCB-Stoffen neben den bekannten Angaben zu ihrer chemischen Zusammensetzung noch andere Arten von Angaben zu machen.

Aus **Tabelle 5** geht hervor, dass sich die Hauptidentifikatoren für die verschiedenen Arten von UVCB-Stoffen auf die Quelle der Stoffe und das verwendete Verfahren beziehen oder dass sie zu einer Gruppe „anderer Hauptidentifikatoren“ (beispielsweise „chromatografischer oder anderer Fingerprint“) gehören. Die Angaben zur Zahl und Art der Identifikatoren in **Tabelle 5** sollen lediglich die Unterschiedlichkeit der Arten verdeutlichen, ein Anspruch auf Vollständigkeit wird daher mit dieser Tabelle nicht erhoben. Wenn die chemische Zusammensetzung beispielsweise eines komplexen Reaktionsproduktes oder eines Stoffes mit biologischem Ursprung bekannt ist, sollte die Stoffidentifizierung als ein- oder als mehrkomponentiger Stoff erfolgen. Wird ein Stoff als UVCB-Stoff definiert, bedeutet das, dass jede wesentliche Änderung bei der Quelle oder dem Verfahren mit einiger Wahrscheinlichkeit zu einem anderen Stoff führt, der dann erneut registriert werden sollte. Wird ein Reaktionsgemisch als „mehrkomponentiger Stoff“ identifiziert, darf der Stoff aus einer anderen Quelle und/oder einem anderen Verfahren abstammen, sofern die Zusammensetzung des Endstoffes im angegebenen Bereich bleibt. Eine neue Registrierung wäre dann nicht erforderlich.

Allgemeine Leitlinien zu UVCB-Stoffen sind in Kapitel 4.3.1 zu finden, konkrete Leitlinien zu Stoffen mit Varianz in der Kohlenstoffkettenlänge und zu aus Öl oder ölähnlichen Quellen gewonnenen Stoffen und zu Enzymen als spezifische Arten von UVCB-Stoffen finden Sie in Kapitel 4.3.2.

4.3.1. Allgemeine Leitlinien zu UVCB-Stoffen

Dieses Kapitel enthält allgemeine Leitlinien dazu, wie für die Identifizierung von UVCB-Stoffen zusätzlich zu den in Anhang VI (Abschnitt 2) der REACH-Verordnung genannten Parametern zur Stoffidentifizierung bestimmte Hauptidentifikatoren zu verwenden sind.

Angaben zur chemischen Zusammensetzung

UVCB-Stoffe können entweder anhand des IUPAC-Namens der Bestandteile nicht eindeutig angegeben werden, da nicht alle Bestandteile identifizierbar sind, oder sie können allgemein angegeben werden, jedoch nicht mit vollständiger Spezifität, da die exakte Zusammensetzung variieren kann. Aufgrund der fehlenden Differenzierung zwischen Bestandteilen und Verunreinigungen sind die Begriffe „Hauptbestandteile“ und „Verunreinigungen“ bei UVCB-Stoffen als nicht relevant zu betrachten.

---

[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, S. 403-416.

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

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

Dennoch sollte, soweit bekannt, die chemische Zusammensetzung und die Identität der Bestandteile angegeben werden. Beispielsweise reicht es, von „linear fatty acids C8–C16“ (lineare Fettsäuren C8–C16) oder „alcohol ethoxylates with alcohols C10–C14 and 4–10 ethoxylate units“ (Alkoholethoxylate mit Alkoholen C10–C14 und 4–10 Ethoxylateinheiten) zu sprechen. Darüber hinaus können Angaben zur chemischen Zusammensetzung auf der Grundlage etablierter Referenzproben oder Standards gemacht werden; in vielen Fällen können außerdem Indizes und etablierte Codes verwendet werden. Andere allgemeine Angaben zur Zusammensetzung können sogenannte „Fingerprints“ (Fingerabdrücke) sein, also z. B. chromatografische oder Spektralbilder, die ein charakteristisches Muster der Peakverteilung zeigen.

Bei UVCB-Stoffen sollten alle bekannten Bestandteile und alle Bestandteile, die in einer Konzentration von ≥ 10 % vorhanden sind, mindestens durch einen IUPAC-Namen in Englisch und möglichst durch eine CAS-Nummer angegeben werden. Außerdem sollten die typischen Konzentrationen und Konzentrationsbereiche der bekannten Bestandteile bereitgestellt werden. Bestandteile, die für die Einstufung und/oder die PBT-Bewertung[20] des Stoffes entscheidend sind, sind grundsätzlich und unabhängig von ihrer Konzentration durch dieselben Identifikatoren anzugeben.

Unbekannte Bestandteile sind so weit als möglich in Form einer allgemeinen Beschreibung ihrer chemischen Beschaffenheit zu identifizieren. Zusatzstoffe sind vollständig auf dieselbe Weise anzugeben, wie dies für genau definierte Stoffe beschrieben ist.

Hauptparameter für die Identifizierung – Bezeichnung, Quelle und Verfahren

Da die chemische Zusammensetzung allein für die Stoffidentifizierung nicht ausreicht, ist der Stoff im Allgemeinen durch seine Bezeichnung, seinen Ursprung oder seine Quelle und durch die wichtigsten Schritte bei der Verarbeitung zu identifizieren. Andere Stoffeigenschaften können als Identifikatoren ebenfalls eine wichtige Rolle spielen – entweder als relevante allgemeine Identifikatoren (z. B. der Siedepunkt) oder als entscheidende Identifikatoren für bestimmte Gruppen von Stoffen (z. B. katalytische Aktivität bei Enzymen).

1. *Konventionen für die Bezeichnung*

Im Allgemeinen setzt sich die Bezeichnung eines UVCB-Stoffes aus der Quelle und dem Verfahren im folgenden Format zusammen: erst die Quelle und dann das/die Verfahren.

- Aus biologischen Quellen abstammende Stoffe werden durch die Angabe des Namens der Spezies identifiziert.
- Aus nicht-biologischen Quellen abstammende Stoffe werden durch die Angabe der Ausgangsstoffe identifiziert.
- Verfahren werden durch die Angabe der Art der chemischen Reaktion, sofern dabei neue Moleküle synthetisiert werden, oder durch die Angabe der Art des Raffinationsschritts, wie z. B. Extraktion, Fraktionierung oder Konzentrierung, oder durch die Angabe als Rückstand identifiziert.

Beispiele	
EG-Nummer	**EG-Name**

[20] Weitere Informationen zur PBT-Beurteilung und relevanten Kriterien sind in den „Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung“, Kapitel R11: „PBT-Beurteilung“, zu finden.

296-358-2	Lavender, Lavandula hybrida, ext., acetylated
307-507-9	Lavender, Lavandula latifolia, ext., sulfurized, palladium salt

Bei Reaktionsprodukten enthält das EG-Verzeichnis unterschiedliche Formate, z. B.

- EINECS: Hauptausgangsstoff, Reaktionsprodukt(e) des anderen Ausgangsstoffs/der anderen Ausgangsstoffe
- ELINCS: Reaktionsprodukt(e) des Ausgangsstoffs/der Ausgangsstoffe

Beispiele

EG-Nummer	EG-Name
232-341-8	Nitrous acid, reaction products with 4-methyl-1,3-benzenediamine hydrochloride
263-151-3	Fatty acids, coco, reaction products with diethylenetriamine
400-160-5	Reaction products of tall-oil fatty acids, diethanolamine and boric acid
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

In diesen Leitlinien gilt für die Bezeichnung von Reaktionsprodukten das allgemeine Format „Reaction product of [Namen der Ausgangsmaterialien]“. Die Bezeichnungen sind grundsätzlich in englischer Sprache nach den Regeln der IUPAC-Nomenklatur anzugeben. Andere international übliche Bezeichnungen können zusätzlich angegeben werden. Es empfiehlt sich, das Wort „reaction“ in der Bezeichnung durch eine allgemeine Beschreibung der konkreten Art der Reaktion zu ersetzen, z. B. „esterification“ (Veresterung) oder „salt formation“ (Salzbildung) usw. (siehe dazu die Leitlinien in den vier spezifischen UVCB-Unterklassen weiter unten).

2. *Quelle*

Die Quellen können in zwei Gruppen unterteilt werden:

2.1. *Quellen biologischer Art*

Stoffe biologischen Ursprungs sind durch die Gattung, die Spezies und die Familie, z. B. *Pinus cembra, Pinaceae* für *Pinus* (Gattung), *cembra* (Art), *Pinaceae* (Familie), und, falls relevant, durch den Stamm oder genetischen Typ zu definieren. Sofern zutreffend, ist auch das Gewebe oder der Teil des Organismus anzugeben, der für die Extraktion des Stoffes verwendet wurde, z. B. „bone marrow“ (Knochenmark), „pancreas“ (Bauchspeicheldrüse), „stem“ (Stängel), „seeds“ (Samen) oder „roots“ (Wurzeln).

Beispiele	
EG-Nummer	**EG-Name**
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ext. **EG-Beschreibung** Extractives and their physically modified derivatives such as tinctures, concretes, absolutes, essential oils, oleoresins, terpenes, terpene-free fractions, distillates, residues, etc., obtained from Saccharomyces cerevisiae, Saccharomycelaceae.
296-350-9	Arnica mexicana, ext. **EG-Beschreibung** Extractives and their physically modified derivatives such as tinctures, concretes, absolutes, essential oils, oleoresins, terpenes, terpene-free fractions, distillates, residues, etc., obtained from Arnica mexicana, Compositae.

2.2. *Chemische oder mineralische Quellen*

Bei Reaktionsprodukten chemischer Reaktionen sind die Ausgangsstoffe durch ihre IUPAC-Namen in englischer Sprache anzugeben. Mineralische Quellen sind allgemein zu beschreiben. Beispiele hierfür sind „phosphate ores“ (Phosphaterze), „bauxite“ (Bauxit), „china clay“ (Porzellanerde), „mineral gas“ (Erdgas), „coal“ (Kohle), „peat“ (Torf).

3. *Verfahren*

Verfahren werden durch die Angabe der Art der chemischen Reaktion, sofern dabei neue Moleküle synthetisiert werden, oder durch die Angabe der Art des Raffinationsschritts, wie z. B. Extraktion, Fraktionierung, Konzentrierung, oder durch die Angabe als Rückstand einer Raffination identifiziert.

Bei einigen Stoffen, wie z. B. chemischen Derivaten, ist das Verfahren als eine Kombination aus Raffination und Synthese zu beschreiben.

3.1 *Synthese*

Zwischen den Ausgangsstoffen findet eine bestimmte chemische oder biochemische Reaktion statt, bei der der Stoff entsteht. Beispiele für Synthesen sind die Grignard-Reaktion, die Sulfonierung, die enzymatische Aufspaltung durch Protease oder Lipase usw. Viele Derivatisierungsreaktionen gehören ebenfalls hierzu.

Bei neu synthetisierten Stoffen, für die die chemische Zusammensetzung nicht angegeben werden kann, sind neben der Angabe der Reaktion, also der Art der chemischen Reaktion, die Ausgangsstoffe die Hauptidentifikatoren. Die Art der chemischen Reaktion gibt einen Hinweis darauf, welche Moleküle im Stoff zu erwarten sind. Bei der abschließenden chemischen Reaktion gibt es verschiedene Arten, wie z. B. die Hydrolyse, die Veresterung, die Alkylisierung, die Chlorierung usw. Da auf diese Weise aber lediglich allgemeine Angaben zu den möglichen produzierten Stoffen gemacht werden, ist für die vollständige Stoffbeschreibung und -identifizierung in vielen Fällen ein chromatografischer Fingerprint notwendig.

Beispiele	
EG-Nummern	**EG-Name**

294-801-4	Linseed oil, epoxidised, reaction products with tetraethylenepentamine
401-530-9	Reaction product of (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzophenone and triethoxysilane) with (hydrolysis product of silica and methyltrimethoxysilane)

3.2 *Raffination*

Stoffe natürlichen oder mineralischen Ursprungs können häufig raffiniert werden. Die chemische Identität der Bestandteile bleibt dabei unverändert, aber die Konzentration der Bestandteile ändert sich. Dies ist z. B. der Fall, wenn Pflanzengewebe kalt verarbeitet und anschließend der Extraktion mit einem Alkohol unterzogen wird.

Die Raffination kann durch Angabe der Verfahren, wie z. B. der Extraktion, noch näher definiert werden. Die Stoffidentifizierung hängt von der Art des Verfahrens ab:

- Bei Stoffen, die durch physikalische Methoden, wie z. B. Raffination oder Fraktionierung, abgeleitet werden, sind der Cut-off-Bereich und die Parameter der Fraktion anzugeben (z. B. Molekülgröße, Kettenlänge, Siedepunkt, Flüchtigkeitsbereich usw.).
- Bei Stoffen, die durch Konzentrierung abgeleitet werden, z. B. Produkte aus metallurgischen Verfahren, zentrifugierte Niederschläge, Filterrückstände usw., sind der Konzentrierungsschritt sowie die allgemeine Zusammensetzung des resultierenden Stoffes im Vergleich zum Ausgangsstoff anzugeben.

Beispiele	
EG-Nummer	**EG-Name**
408-250-6	Organotungsten compound concentrate (reaction products of tungsten hexachloride with 2-methylpropan-2-ol, nonylphenol and pentane-2,4-dione)

- Bei Rückständen einer konkreten Reaktion, wie z. B. Schlacken, Teeren und schweren Fraktionen, sind das Verfahren sowie die allgemeine Zusammensetzung des resultierenden Stoffes zu beschreiben.

Beispiele	
EG-Nummer	**EG-Name**
283-659-9	Tin, melting residues **EG-Beschreibung** Substance resulting from the use and production of tin and its alloys obtained from primary and secondary sources and including recycled plant intermediates. Composed primarily of tin compounds and may contain other residual nonferrous metals and their compounds.
293-693-6	Soybean meal, protein extn. Rückstand **EG-Beschreibung**

	By-product, containing primarily carbohydrates, produced by an ethanolic extraction of defatted soybean.

- Bei Extrakten sind die Extraktionsmethode, das für die Extraktion verwendete Lösungsmittel und andere relevante Bedingungen (z. B. Temperatur/Temperaturbereich) anzugeben.
- Bei kombinierter Verarbeitung ist neben den Angaben zur Quelle jeder einzelne Verarbeitungsschritt (in allgemeiner Form) anzugeben. Diese kombinierte Verarbeitung ist vor allem bei chemischen Derivaten relevant.

Beispiele:

- Eine Pflanze wird zunächst extrahiert, anschließend wird das Extrakt destilliert, und die destillierte Fraktion des Pflanzenextrakts wird chemisch derivatisiert. Der resultierende Stoff kann weiter aufgereinigt werden. Das aufgereinigte Produkt kann letztendlich durch seine chemische Zusammensetzung genau definiert sein, sodass keine Notwendigkeit besteht, den Stoff als UVCB-Stoff zu identifizieren. Wenn das Produkt jedoch weiter als UVCB-Stoff zu betrachten ist, kann die kombinierte Verarbeitung wie folgt beschrieben werden: „purified chemical derivate of a distilled fraction of a plant extract“.
- Wenn die Weiterverarbeitung eines Extrakts nur in der physikalischen Derivatisierung besteht, ändert sich die Zusammensetzung, ohne dass dabei aber absichtlich neue Moleküle synthetisiert werden. Dennoch führt die Änderung der Zusammensetzung zu einem anderen Stoff, z. B. einem Destillat oder Niederschlag eines Pflanzenextrakts.
- Für die Produktion von Erdölprodukten werden die chemische Derivatisierung und die Fraktionierung häufig miteinander kombiniert. So entstehen beispielsweise bei der Öldestillation und dem anschließenden Cracken eine Fraktion des Ausgangsstoffs sowie auch neue Moleküle. Das heißt, dass in diesem Fall beide Arten von Verfahren angegeben werden sollten, oder aber dass das Destillat als Ausgangsstoff des Crackens zu nennen ist. Dies gilt insbesondere bei Erdölderivaten, die oft das Ergebnis einer Kombination von Verfahren sind. Zur Identifizierung von Erdölstoffen kann aber ein separates eigenes System herangezogen werden (siehe Kapitel 4.3.2.2).

Da ein chemisches Derivat eines Extrakts nicht dieselben Bestandteile enthalten wird wie das Vorläuferextrakt, ist das Derivat als anderer Stoff anzusehen. Diese Regel führt möglicherweise dazu, dass sich die Identifizierung durch Bezeichnung und Beschreibung aus dem früheren EINECS-Namen und der entsprechenden Beschreibung ableitet. Zum Zeitpunkt der Einrichtung des EINECS-Verzeichnisses wurden Extrakte aus unterschiedlichen Verfahren, unterschiedliche Lösungsmittel und sogar physikalische oder chemische Derivate häufig durch einen einzelnen Eintrag abgedeckt. Gemäß REACH-Verordnung sind diese Stoffe jedoch als separate Stoffe zu registrieren.

4. *Andere Parameter für die Stoffidentifizierung*

Neben der chemischen Bezeichnung, der Quelle und der Angabe des Verfahrens sind für UVCB-Stoffe noch alle anderen relevanten Angaben zu machen, die in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung aufgeführt sind.

Speziell für spezifische Arten von UVCB-Stoffen können andere Identifizierungsparameter von Bedeutung sein. Dabei kann es sich beispielsweise um folgende Identifikatoren handeln:

- allgemeine Beschreibung der chemischen Zusammensetzung

- chromatografischer Fingerprint oder andere Art von Fingerprint
- Referenzmaterial (z. B. ISO)
- physikalisch-chemische Parameter (z. B. Siedepunkt)
- Colour-Index-Nummer
- A.I.S.E.-Nummer

Konkrete Leitlinien zu den Regeln und Kriterien für die Identifizierung von UVCB-Stoffen anhand der Bezeichnung, der Quelle und den Angaben zu den Verfahren und geordnet nach den verschiedenen Arten von Quellen und Verfahren finden Sie weiter unten. In den folgenden Abschnitten werden vier Untergruppen von UVCB-Stoffen als Kombination aus biologischen oder chemischen/mineralischen Quellen und Verfahren (Synthese oder Raffination) beschrieben.

UVCB-Untergruppe 1: Stoffe, deren Material biologischen Ursprungs ist und die durch Synthese hergestellt werden

Stoffe biologischen Ursprungs können durch (bio)chemische Verarbeitung verändert werden, sodass Bestandteile erzeugt werden, die im Ausgangsstoff nicht vorhanden waren, wie z. B. chemische Derivate von Pflanzenextrakten oder durch enzymatische Behandlung der Extrakte gewonnene Produkte. So können beispielsweise Proteine durch Protease hydrolysiert werden, um Oligopeptide zu erzeugen, oder aus Holz kann Cellulose karboxyliert werden, um Carboxymethylcellulose (CMC) zu gewinnen.

Fermentationsprodukte können ebenfalls zu dieser UVCB-Untergruppe gehören. Vinasse beispielsweise ist ein Produkt der Zuckerfermentation, das im Vergleich zum Zucker viele unterschiedliche Bestandteile enthält. Werden Fermentationsprodukte weiter aufgereinigt, sind die Stoffe möglicherweise am Ende vollständig durch ihre chemische Zusammensetzung identifizierbar und müssen damit nicht mehr als UVCB-Stoffe identifiziert werden.

Enzyme sind eine Sondergruppe von Stoffen, die durch Extraktion und weitere Raffination aus einer Quelle natürlichen Ursprungs abgeleitet werden können. Zwar können Quelle und Verfahren exakt angegeben werden, konkrete Angaben zum Enzym werden dabei jedoch nicht gewonnen. Für diese Stoffe ist ein eigenes System zur Einstufung, Bezeichnung und Identifizierung zu verwenden (siehe Kapitel 4.3.2.3).

Zur Stoffidentifizierung sind der abschließende Verfahrensschritt und/oder alle anderen Verfahrensschritte anzugeben, die für die Identität des Stoffes von Bedeutung sind.

Das chemische Verfahren ist durch eine allgemeine Beschreibung der Verfahrensart zu benennen (Veresterung, alkalische Hydrolyse, Alkylierung, Chlorierung, Substitution usw.). Außerdem sind relevante Verfahrensumstände anzugeben.

Die Angabe des biochemischen Verfahrens kann durch eine allgemeine Beschreibung der katalysierten Reaktion und die Benennung des Enzyms erfolgen, das die Reaktion katalysiert.

Bei Stoffen, die durch Fermentation produziert werden, oder (Gewebe-)Kulturen von Spezies sollten die fermentierende Spezies, die Art der Fermentation und deren allgemeine Bedingungen (Batch oder kontinuierlich, aerobisch, anaerobisch, anoxisch, Temperatur, pH usw.) sowie alle weiteren Verfahrensschritte angegeben werden, die zur Isolierung der Fermentationsprodukte angewendet wurden, wie z. B. Zentrifugierung, Fällung, Extraktion usw. Werden diese Stoffe weiter raffiniert, kann dies zu einer Fraktion, einem Konzentrat oder einem Rückstand führen. Solche weiter verarbeiteten Stoffe sind durch die zusätzliche Angabe der dafür verwendeten Verfahrensschritte zu identifizieren.

UVCB-Untergruppe 2: Stoffe, deren Material aus chemischen oder mineralischen

Quellen stammt und die durch Synthese hergestellt werden

UVCB-Stoffe, die aus chemischen oder mineralischen Quellen gewonnen und durch ein Verfahren abgeleitet werden, bei dem neue Moleküle synthetisiert werden, sind „Reaktionsprodukte“ („reaction products“). Beispiele für chemische Reaktionsprodukte sind Veresterungs-, Alkylierungs- und Chlorierungsprodukte. Biochemische Reaktionen, bei denen isolierte Enzyme zur Anwendung kommen, sind eine Sonderform chemischer Reaktionen. Sollten komplexe biochemische Synthesepfade mit kompletten Mikroorganismen verwendet werden, ist es jedoch besser, den resultierenden Stoff als Fermentationsprodukt anzusehen und ihn nicht anhand der Ausgangsstoffe, sondern anhand des Fermentationsverfahrens und der fermentierenden Spezies zu identifizieren (siehe UVCB-Untergruppe 4).

Nicht jedes Reaktionsprodukt sollte automatisch als UVCB-Stoff angegeben werden. Kann ein Reaktionsprodukt durch die chemische Zusammensetzung (einschließlich einer gewissen Variabilität) ausreichend definiert werden, sollte die Identifizierung als mehrkomponentiger Stoff bevorzugt werden (siehe Kapitel 4.2.2). Eine Identifizierung als UVCB-Stoff („Reaktionsprodukt“) sollte nur erfolgen, wenn die Zusammensetzung des Reaktionsprodukts unzureichend bekannt oder schwer vorhersehbar ist. Das Identifizieren von Reaktionsprodukten erfolgt anhand der Ausgangsstoffe für die Reaktion und anhand des (bio)chemischen Reaktionsverfahrens, bei dem der Stoff erzeugt wird.

Beispiele		
EG-Nummer	EINECS-Name	CAS-Nummer
294-006-2	Nonanedioic acid, reaction products with 2-amino-2-methyl-1-propanol	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyde, reaction products with diethylene glycol and phenol	91673-32-4

Ein Hauptidentifikator für Reaktionsprodukte ist die Beschreibung des Herstellungsverfahrens. Zur Stoffidentifizierung ist der abschließende oder der relevanteste Verfahrensschritt anzugeben. Das chemische Verfahren ist durch eine allgemeine Beschreibung der Verfahrensart zu benennen (Veresterung, alkalische Hydrolyse, Alkylierung, Chlorierung, Substitution usw.). Außerdem sind relevante Verfahrensumstände anzugeben. Biochemische Verfahren sind durch die Art der Reaktion und die Benennung des Enzyms zu beschreiben, das die Reaktion katalysiert.

UVCB-Untergruppe 3: Stoffe, deren Material biologischen Ursprungs ist und die durch Raffination hergestellt werden

UVCB-Stoffe biologischen Ursprungs, die durch ein Raffinationsverfahren hergestellt werden, bei dem absichtlich keine neuen Moleküle erzeugt werden, können z. B. Extrakte, Fraktionen eines Extrakts, Konzentrate eines Extrakts, aufgereinigte Extrakte oder Verfahrensrückstände von Stoffen biologischen Ursprungs sein.

Sobald ein Extrakt weiter verarbeitet wird, ist der Stoff nicht mehr mit dem Extrakt identisch. Es handelt sich dann vielmehr um einen anderen Stoff, z. B. eine Fraktion oder einen Rückstand eines Extrakts, der zu einer anderen UVCB-Untergruppe gehört. Solche Stoffe sind durch zusätzliche Parameter zur (weiteren) Verarbeitung anzugeben. Wird der Extrakt in chemischen oder biochemischen Reaktionen verändert, bei denen neue Moleküle (Derivate) erzeugt werden, ist die Stoffidentifizierung wie für die UVCB-Untergruppe 2 oder für genau definierte Stoffe (siehe Kapitel 4.2) beschrieben vorzunehmen.

Diese Unterscheidung von weiter verarbeiteten Extrakten kann zur Folge haben, dass die neue Bezeichnung und die Beschreibung von den Angaben im EINECS-Verzeichnis abweichen. Zum Zeitpunkt der Einrichtung des Verzeichnisses wurde eine solche Unterscheidung nicht gemacht, sodass alle Arten von Extrakten mit unterschiedlichen Lösungsmitteln und weiteren Verarbeitungsschritten durch einen einzelnen Eintrag abgedeckt sein können.

Der erste Hauptidentifikator für die Untergruppe von UVCB-Stoffen ist Familie, Gattung und Spezies des Organismus, von dem der Stoff stammt. Sofern zutreffend, ist auch das Gewebe oder der Teil des Organismus anzugeben, der für die Extraktion des Stoffes verwendet wurde, z. B. „bone marrow“ (Knochenmark), „pancreas“ (Bauchspeicheldrüse), „stem“ (Stängel), „seeds“ (Samen) oder „roots“ (Wurzeln). Bei Stoffen mikrobiologischen Ursprungs sind der Stamm und der genetische Typ der Spezies zu definieren.

Stammt der UVCB-Stoff von einer anderen Spezies ab, wird er als anderer Stoff angesehen, auch wenn die chemische Zusammensetzung ähnlich ist.

Beispiele

EG-Nummer	EINECS-Name
290-977-1	Oxidised logwood (Haematoxylon campechianum) extract **EG-Beschreibung** This substance is identified in the colour index by colour index constitution No C.I. 75290 oxidised.
282-014-9	Pancreatic extracts, deproteinated

Der zweite Hauptidentifikator ist die Verarbeitung des Stoffes, z. B. das Extraktionsverfahren, die Fraktionierung, die Aufreinigung oder das Konzentrierungsverfahren oder das Verfahren, das sich auf die Zusammensetzung des Rückstands auswirkt. Aus Raffinationen von Extrakten durch unterschiedliche Verfahren, z. B. unter Verwendung unterschiedlicher Lösungsmittel oder unterschiedlicher Aufreinigungsschritte, resultieren demzufolge unterschiedliche Stoffe.

Je mehr Schritte zur Raffination durchgeführt werden, desto besser lässt sich der Stoff durch seine chemische Zusammensetzung definieren. Spezies aus unterschiedlichen Quellen oder Modifikationen durch unterschiedliche Verfahren führen in solchen Fällen nicht automatisch zu einem anderen Stoff.

Ein Hauptidentifikator für Stoffe biologischen Ursprungs ist die Beschreibung der relevanten Verfahren. Bei Extrakten ist das Extraktionsverfahren so ausführlich zu beschreiben, wie dies für die Identität des Stoffs erforderlich ist. Als Minimum ist das verwendete Lösungsmittel anzugeben.

Wurden für die Herstellung des Stoffes weitere Verarbeitungsschritte verwendet, z. B. eine Fraktionierung oder Konzentrierung, ist die Kombination der relevanten Verarbeitungsschritte zu beschreiben, z. B. die Kombination von Extraktion und Fraktionierung einschließlich der Cut-off-Bereiche.

UVCB-Untergruppe 4: Stoffe, deren Material aus chemischen oder mineralischen Quellen stammt und die durch Raffination hergestellt werden

Stoffe nicht-biologischen Ursprungs, also Stoffe, die Minerale, Erze, Kohle, Erdgas oder Rohöl oder andere Rohstoffe für die chemische Industrie sind oder die aus Mineralen, Erzen,

Kohle, Erdgas oder Rohöl oder aus anderen Rohstoffen für die chemische Industrie stammen und die aus der Verarbeitung ohne beabsichtigte chemische Reaktionen resultieren, können (aufgereinigte) Fraktionen, Konzentrate oder Rückstände dieser Verfahren sein.

Kohle und Rohöl kommen bei Destillations- oder Vergasungsverfahren zum Einsatz, um beispielsweise Stoffe wie Erdölstoffe und Brenngase, aber auch Rückstände wie Teere und Schlacken zu produzieren. Destillierte oder anderweitig fraktionierte Produkte werden sehr häufig sofort, auch in chemischen Reaktionen, weiterverarbeitet. In solchen Fällen ist die Stoffidentifizierung wie für die UVCB-Untergruppe 2 beschrieben vorzunehmen, da das Verfahren relevanter als die Quelle ist.

Erdölstoffe sind mit einem speziellen Identifizierungssystem zu identifizieren (siehe Kapitel 4.3.2.2). Zu den Stoffen, für die dieses System gilt, gehören Fraktionen und Produkte chemischer Reaktionen.

Andere Stoffe, die zur UVCB-Untergruppe 4 gehören können, sind Erze, Erzkonzentrate und Schlacken mit unterschiedlichem Gehalt an Metallen, die durch metallurgische Verarbeitung extrahiert werden können.

Minerale, wie z. B. Bentonit oder Calciumcarbonat, können beispielsweise durch Säureauflösung und/oder chemische Fällung oder in Ionenaustauschsäulen verarbeitet werden. Wenn die chemische Zusammensetzung vollständig definiert ist, sollten Minerale gemäß den Leitlinien im entsprechenden Teil von Kapitel 4.2 identifiziert werden. Werden Minerale ausschließlich durch mechanische Methoden, wie Mahlen, Sieben, Zentrifugieren, Flotieren usw., verarbeitet, werden sie weiterhin als dieselben Stoffe wie vor der Verarbeitung angesehen. Minerale, die durch ein Herstellungsverfahren produziert werden, können – zum Zweck der Identifizierung[21] – als mit dem natürlich vorkommenden Äquivalent identisch angesehen werden, vorausgesetzt, die Zusammensetzung ist sehr ähnlich und das Toxizitätsprofil ist identisch.

Ein Hauptidentifikator für Stoffe nicht-biologischen Ursprungs ist die Beschreibung des relevanten Verfahrensschritts/der relevanten Verfahrensschritte.

Bei Fraktionen ist das Fraktionierungsverfahren mit den Parametern und dem Cut-off-Bereich für die isolierte Fraktion und, sofern relevant, eine Beschreibung vorheriger Verfahrensschritte anzugeben.

Für den Konzentrierungsschritt sind folgende Angaben zu machen: Art des Verfahrens, z. B. Verdampfung, Fällung usw., Verhältnis zwischen der Ausgangskonzentration und der Endkonzentration der Hauptbestandteile sowie Angaben zu vorherigen Verfahrensschritten.

Ein Hauptidentifikator für Rückstände nicht-biologischen Ursprungs ist die Beschreibung des Verfahrens, aus dem der Rückstand stammt. Das Verfahren kann eine beliebige physikalische Reaktion sein, die Rückstände erzeugt, wie z. B. Aufreinigung, Fraktionierung, Konzentrierung.

Block „Analytical information“

Wenn Spektraldaten Informationen zur Zusammensetzung des UVCB-Stoffes bieten, sollten diese Daten bereitgestellt werden. Für die Erzeugung von Spektren kommen verschiedene spektroskopische Methoden (UV/Vis, IR, NMR oder Massenspektrum) zum Einsatz. Methoden und Erkenntnisse, wie diese Methoden zu verwenden sind, unterliegen ständigem Wandel. Aus diesem Grund liegt es in der Verantwortung des Registranten, geeignete Spektraldaten vorzulegen.

Zur Beschreibung der Zusammensetzung des Stoffes ist ein Chromatogramm

[21] Die Verwendung desselben Ansatzes bei der Identifizierung von natürlich vorkommenden Mineralen einerseits und chemisch produzierten Mineralen andererseits bedeutet nicht zwangsläufig, dass die gesetzlichen Anforderungen (z. B. Ausnahmen von der Registrierungspflicht) dieselben sind.

bereitzustellen, das als Fingerprint verwendet werden kann. Gegebenenfalls können auch andere gültige Verfahren zur Trennung der Bestandteile verwendet werden.

4.3.2. Spezifische Arten von UVCB-Stoffen

Dieser Abschnitt enthält Leitlinien zu spezifischen Gruppen von UVCB-Stoffen: Stoffe mit Variation in der Kohlenstoffkettenlänge (4.3.2.1); Stoffe aus Öl oder ölähnlichen Quellen (4.3.2.2); und Enzyme (4.3.2.3).

4.3.2.1 Stoffe mit Variation in der Kohlenstoffkettenlänge

Zu dieser Gruppe von UVCB-Stoffen gehören langkettige Alkylstoffe mit Variation in der Kohlenstoffkettenlänge, wie z. B. Paraffine und Olefine. Diese Stoffe stammen entweder aus natürlichen Fetten oder Ölen oder werden synthetisch produziert. Die natürlichen Fette stammen von Pflanzen oder Tieren. Stoffe mit langer Kohlenstoffkette, die von Pflanzen abstammen, haben normalerweise nur Ketten mit einer geraden Anzahl von Kohlenstoffatomen, während Stoffe mit langer Kohlenstoffkette, die aus tierischen Quellen gewonnen werden, (teilweise) auch Ketten mit ungerader Anzahl von Kohlenstoffatomen besitzen. Synthetisch produzierte Stoffe mit langer Kohlenstoffkette können Ketten mit gerader und mit ungerader Anzahl an Kohlenstoffatomen besitzen.

Identifikatoren und Konventionen für die Bezeichnung

Zu dieser Gruppe gehören Stoffe, deren einzelnen Bestandteile sich durch folgendes einheitliches Strukturmerkmal auszeichnen: Sie besitzen mindestens eine langkettige Alkylgruppe, häufig mit einer angehängten funktionellen Gruppe. Die einzelnen Bestandteile unterscheiden sich dabei in mindestens einem der folgenden Merkmale der Alkylkettengruppe:

- Länge der Kohlenstoffkette (Kohlenstoffanzahl)
- Sättigung
- Aufbau (linear oder verzweigt)
- Stellung der funktionellen Gruppe

Die chemische Identität der Bestandteile kann anhand der folgenden drei Deskriptoren ausreichend beschrieben und systematisch benannt werden:

- **Alkyl-Deskriptor**: Dieser Deskriptor gibt die Anzahl der Kohlenstoffatome in der/den Kohlenstoffkettenlänge(n) der Alkylgruppe(n) an.
- **Funktionalitäts-Deskriptor**: Dieser Deskriptor identifiziert die funktionelle Gruppe des Stoffes, z. B. Amin, Ammonium, Carbonsäure.
- **Salz-Deskriptor**: Dieser Deskriptor gibt das Kation/Anion aller Salze an, z. B. Natrium (Na^+), Carbonat (CO_3^{2-}), Chlorid (Cl^-).

Alkyl-Deskriptor

- Im Allgemeinen bezieht sich der Alkyl-Deskriptor C_{x-y} auf gesättigte, lineare Alkylketten bestehend aus allen Kettenlängen von x bis y, z. B. C_{8-12} entspricht C_8, C_9, C_{10}, C_{11} und C_{12}.
- Es ist anzugeben, ob der Alkyl-Deskriptor sich nur auf Alkylketten mit gerader oder mit ungerader Anzahl von Kohlenstoffatomen bezieht, zum Beispiel: „C_{8-12} (even numbered)“.
- Es ist anzugeben, ob der Alkyl-Deskriptor sich (auch) auf verzweigte Alkylketten

bezieht, zum Beispiel: „C_{8-12} (branched)“ oder „$C_{8–12}$ (linear and branched)“.

- Es ist anzugeben, ob sich der Alkyl-Deskriptor (auch) auf ungesättigte Alkylketten bezieht, zum Beispiel: „C_{12-22} (C18 unsaturated)“.
- Wird eine enge Verteilung der Alkylkettenlänge angegeben, deckt dies keine breitere Verteilung ab (und umgekehrt). So deckt zum Beispiel $C_{10–14}$ nicht $C_{8–18}$ ab.
- Der Alkyl-Deskriptor kann sich auch auf die Quelle der Alkylketten, z. B. Kokos oder Talg, beziehen. Die Kohlenstoffkettenlängenverteilung muss dann aber der der Quelle entsprechen.

Das oben beschriebene System sollte für die Beschreibung von Stoffen mit einer Variation in der Kohlenstoffkettenlänge verwendet werden. Es eignet sich jedoch nicht für genau definierte Stoffe, die durch eine eindeutige chemische Struktur identifiziert werden können.

Die Angaben zum Alkyl-Deskriptor, zum Funktionalitäts-Deskriptor und zum Salz-Deskriptor bilden die Grundlage für die Bezeichnung dieser Art von UVCB-Stoffen. Im Sinne einer genaueren Identifizierung dieser Stoffe kann es sinnvoll sein, zusätzlich Angaben zur Quelle und zum Verfahren zu machen.

Beispiele		
Deskriptoren		**Name**
Alkyl-Deskriptor **Funktionalitäts-Deskriptor** **Salz-Deskriptor**	alkyl chain lengths C_{10-18} fatty acids (carboxylic acid) cadmium salts	fatty acids (C10-18) cadmium salts
Alkyl-Deskriptor **Funktionalitäts-Deskriptor** **Salz-Deskriptor**	di-C_{10-18}-alkyl-dimethyl ammonium chloride	di-C10-18-alkyl-dimethylammonium chloride
Alkyl-Deskriptor **Funktionalitäts-Deskriptor** **Salz-Deskriptor**	trimethyl tallow-alkyl ammonium chloride	trimethyl-tallowalkyl-ammonium chloride

4.3.2.2 Stoffe, die aus Öl oder ölähnlichen Quellen gewonnen werden

Stoffe, die aus Öl (Erdölstoffe) oder ölähnlichen Quellen (z. B. Kohle) gewonnen werden, sind häufig sehr komplex und besitzen eine variable oder teilweise unklare Zusammensetzung. In diesem Kapitel wird anhand von Erdölstoffen gezeigt, wie diese spezifische Art von UVCB-Stoffen zu identifizieren ist. Derselbe Ansatz kann auch auf andere Stoffe angewendet werden, die aus ölähnlichen Quellen, wie z. B. Kohle, gewonnen werden.

Ausgangsstoffe bei der Erdölraffination können Rohöl und spezifische Raffinerieläufe sein, die durch ein oder mehrere Verfahren gewonnen werden. Die Zusammensetzung der Endprodukte hängt vom verwendeten Rohöl (mit seiner je nach Herkunft schwankenden Zusammensetzung) und von den anschließenden Raffinationsverfahren ab. Das bedeutet, dass es bei der Zusammensetzung von Erdölstoffen eine natürliche und verfahrensunabhängige Variationsbreite gibt.[17]

1. *Konventionen für die Bezeichnung*

Es wird empfohlen, bei der Identifizierung von Erdölstoffen ein eingeführtes Nomenklatursystem für die Bezeichnung zu verwenden[22]. In der Regel setzt sich die Bezeichnung aus folgenden Elementen zusammen: Raffinationsverfahren, Quelle des Laufes und allgemeine Zusammensetzung oder Merkmale. Enthält der Stoff > 5 Massenprozent (w/w) aromatische Kohlenwasserstoffe mit kondensierten 4er- bis 6er-Ringen, ist diese Angabe in die Beschreibung aufzunehmen. Bei Erdölstoffen mit einer EINECS-Nummer ist der im EG-Verzeichnis eingetragene Name zu verwenden.

2. *Identifikatoren*

Bei der Identifizierung von Erdölstoffen sind im Allgemeinen die folgenden Begriffe und Definitionen zu verwenden: Quelle des Laufes, Raffinationsverfahren, allgemeine Zusammensetzung, Anzahl der Kohlenstoffatome, Siedebereich oder andere geeignete physikalische Merkmale und vorherrschende Kohlenwasserstoffart[22].

Zur Identifizierung sind die in Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung aufgeführten Identifikationsparameter anzugeben. Es ist bekannt, dass Erdölstoffe eher nach Leistungsspezifikationen als nach Spezifikationen für die Zusammensetzung hergestellt werden. Aus diesem Grund sind Merkmale wie der Name, der Kohlenstoffkettenlängenbereich, der Siedepunkt, die Viskosität, Cut-off-Werte und andere physikalische Eigenschaften für die möglichst genaue Identifizierung des Erdölstoffes allgemein hilfreicher als Angaben zur Zusammensetzung.

Auch wenn die chemische Zusammensetzung nicht der primäre Identifikator für UVCB-Stoffe ist, sind die bekannten Hauptbestandteile (≥ 10 %) anzugeben, und die Zusammensetzung ist in allgemeiner Form, z. B. mit Molekulargewichtsbereich, Aliphat oder Aromat, Hydrierungsgrad und anderen wichtigen Informationen, zu beschreiben. Darüber hinaus sind alle anderen Bestandteile anzugeben, die in einer niedrigen Konzentration vorhanden sind, sofern diese für die Gefahreneinstufung von Bedeutung sind. Für diese Bestandteile sind die Bezeichnung und die typische Konzentration zu nennen.

4.3.2.3 Enzyme

Enzyme werden meist durch Fermentation von Mikroorganismen produziert. Sie können aber auch pflanzlicher oder tierischer Herkunft sein. Das flüssige Enzymkonzentrat, das aus der Fermentation oder Extraktion und der anschließenden Aufreinigung resultiert, enthält neben Wasser das aktive Enzymprotein und andere Bestandteile, die aus Rückständen aus der Fermentation bestehen, wie z. B. Proteine, Peptide, Aminosäuren, Kohlenwasserstoffe, Lipide und anorganische Salze.

Das Enzymprotein und die anderen Bestandteile, die aus dem Fermentations- oder Extraktionsverfahren stammen, nicht aber das Wasser, das ohne Auswirkung auf die Stabilität des Enzymproteins oder ohne Änderung seiner Zusammensetzung abgetrennt werden kann, sind zu Identifizierungszwecken als der Stoff anzusehen.

Der Enzymstoff enthält typischerweise 10 bis 80 Massenprozent (w/w) des Enzymproteins. Der Anteil der anderen Bestandteile hängt davon ab, welcher Produktionsorganismus, welches Fermentationsmedium und welche Betriebsparameter beim Fermentationsverfahren zum Einsatz kamen und welches nachgeschaltete Aufreinigungsverfahren angewendet wurde. Die Zusammensetzung liegt jedoch typischerweise in den in der folgenden Tabelle angegebenen Bereichen.

---

[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.

Aktives Enzymprotein	10-80 %
Andere Proteine + Peptide und Aminosäuren	5-55 %
Kohlenhydrate	3-40 %
Lipide	0-5 %
Anorganische Salze	1-45 %
Gesamt	100 %

Der Enzymstoff sollte aufgrund seiner Variabilität und seiner teilweise unbekannten Zusammensetzung als UVCB-Stoff angesehen werden. Das Enzymprotein ist als Bestandteil des UVCB-Stoffes zu betrachten. Hochgradig aufgereinigte Enzyme können als (einkomponentige oder mehrkomponentige) Stoffe mit genau definierter Zusammensetzung identifiziert und entsprechend bezeichnet werden.

Im EINECS ist die katalytische Aktivität der Hauptidentifikator für Enzyme. Enzyme werden als generische Einträge ohne weitere Spezifikation oder als spezifische Einträge mit Angabe des Quellorganismus oder des Substrats aufgeführt.

Beispiele

EG-Nummer	EINECS-Name	CAS-Nummer
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Proteinase, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Elastase (pig pancreas)	39445-21-1
262-402-4	Mannanase	60748-69-8

In einer Studie zu Enzymen im Auftrag der Europäischen Kommission wurde vorgeschlagen, Enzyme nach dem internationalen System für Enzymnomenklatur der IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology) zu identifizieren.[23] Dieser Ansatz wurde in diesen Leitlinien übernommen, da er eine im Vergleich zur EINECS systematischere, detailliertere und umfassendere Identifizierung ermöglicht.

1. *Konventionen für die Bezeichnung*

Enzyme werden gemäß den Regeln der IUBMB-Nomenklatur benannt.

Das IUBMB-Klassifikationssystem sieht für jede Enzymart und jede katalytische Funktion

[23] UBA (2000) Umweltbundesamt Österreich. Collection of Information on Enzymes. Abschlussbericht. 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.

eine eindeutige vierstellige Nummer vor (z. B. 3.2.1.1 für α-Amylase)[24]. Jede Nummer kann Enzyme variabler Aminosäuresequenz und variablen Ursprungs umfassen, die Enzymfunktionalität aber ist identisch. Für die Stoffidentifizierung sollten der Name und die Nummer aus der IUBMB-Nomenklatur verwendet werden. Die IUBMB-Nomenklatur unterteilt die Enzyme in sechs Hauptgruppen:

1. Oxidoreduktasen
2. Transferasen
3. Hydrolasen
4. Lyasen
5. Isomerasen
6. Ligasen

Im Folgenden finden Sie ein Beispiel, wie ein Eintrag nach der IUBMB-Nomenklatur aussehen könnte:

EC 3.4.22.33

Accepted name: fruit bromelain

Reaction: Hydrolysis of proteins with broad specificity for peptide bonds. Bz-Phe-Val-Arg ┼NHMec is a good synthetic substrate, but there is no action on Z-Arg-Arg-NHMec (*c.f.* stem bromelain)

Other name(s): juice bromelain; ananase; bromelase; bromelin; extranase; juice bromelain; pinase; pineapple enzyme; traumanase; fruit bromelain FA2

Comments: From the pineapple plant, *Ananas comosus*. Scarcely inhibited by chicken cystatin. Another cysteine endopeptidase, with similar action on small molecule substrates, pinguinain (formerly EC 3.4.99.18), is obtained from the related plant, *Bromelia pinguin*, but pinguinain differs from fruit bromelain in being inhibited by chicken cystatin [4].[25] In peptidase family C1[26] (papain family). Formerly EC 3.4.22.5 and included in EC 3.4.22.4, CAS registry number: 9001-00-7

Links to other databases:

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

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

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

General References:

Sasaki, M., Kato, T. and Iida, S. Antigenic determinant common to four kinds of thiol

---

[24] Diese Nummer wird entweder „EC-Nummer“ („Enzyme Commission“-Nummer) oder „IUBMB-Nummer“ genannt. Um Missverständnissen vorzubeugen, empfiehlt es sich, beim vierstelligen Nummerncode der IUBMB von „IUBMB-Nummer“ zu sprechen.

[25] Rowan, A.D., Buttle, D.J. und 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

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]

Beispiele für die Enzymeinstufung nach dem IUBMB-System (http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html) **Proteasen werden nach den folgenden Kriterien nummeriert:**	
3.	**Hydrolasen**
3.4	**Mit Wirkung auf Peptidbindungen (Peptidasen), mit Unterklassen:**
3.4.1	α-Amino-Acyl-Peptidhydrolasen (jetzt in EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidyl-Aminosäure-Hydrolasen (jetzt in EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptidhydrolasen (jetzt in EC 3.4.13)
3.4.4	Peptidylpeptidhydrolasen (jetzt innerhalb von EC 3.4 neu eingestuft)
3.4.11	Aminopeptidasen
3.4.12	Peptidyl-Aminosäure-Hydrolasen oder Acyl-Aminosäure-Hydrolasen (jetzt innerhalb von 3.4 neu eingestuft)
3.4.13	Dipeptidasen
3.4.14	Dipeptidylpeptidasen und Tripeptidylpeptidasen
3.4.15	Peptidyldipeptidasen
3.4.16	Serin-Carboxypeptidasen
3.4.17	Metallocarboxypeptidasen
3.4.18	Cystein-Carboxypeptidasen
3.4.19	Omega-Peptidasen
3.4.21	Serin-Endopeptidasen
	Des Weiteren werden spezifische Enzyme identifiziert:
3.4.21.1	Chymotrypsin

3.4.21.2	Chymotrypsin C
3.4.21.3	Metridin
3.4.21.4	Trypsin
3.4.21.5	Thrombin
3.4.21.6	Gerinnungsfaktor Xa
3.4.21.7	Plasmin
3.4.21.8	jetzt von EC 3.4.21.34 und EC 3.4.21.35 abgedeckt
3.4.21.9	Enteropeptidase
3.4.21.10	Akrosin
3.4.21.11	jetzt von EC 3.4.21.36 und EC 3.4.21.37 abgedeckt
3.4.21.12	12 α-lytische Endopeptidase
…	
3.4.21.105	
3.4.99	Endopeptidasen mit unbekanntem Katalysemechanismus

Beispiele aus EINECS mit zusätzlicher Angabe der IUBMB-Nummer

EG-Nummer	EINECS-Name	CAS-Nummer	IUBMB-Nummer
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisin	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cellulase	9012-54-8	3.2.1.4

2. *Identifikatoren*

Enzymstoffe werden nach dem enthaltenen Enzymprotein (IUBMB-Nomenklatur) und den anderen Bestandteilen aus der Fermentation identifiziert. Außer dem Enzymprotein ist üblicherweise keines der spezifischen Bestandteile in Konzentrationen über 1 % vorhanden. Wenn die Identitäten dieser spezifischen Bestandteile unbekannt sind, können sie in Form eines Gruppenansatzes (also als Proteine, Peptide, Aminosäuren, Kohlenhydrate, Lipide und

anorganische Salze) angegeben werden. Ist ihre Identität aber bekannt, sind die Bestandteile anzugeben, und liegt ihre Konzentration über 10 % oder sind sie für die Einstufung und Kennzeichnung und/oder die PBT-Beurteilung von Bedeutung, müssen sie identifiziert werden[27].

Enzymproteine

Enzymproteine im Konzentrat sind durch folgende Angaben zu identifizieren:

- IUBMB-Nummer
- Bezeichnungen nach IUBMB (systematische Bezeichnung, Enzymnamen, Synonyme)
- Kommentare der IUBMB
- Reaktion und Reaktionstyp
- gegebenenfalls EG-Nummer und EG-Name
- gegebenenfalls CAS-Nummer und CAS-Bezeichnung

Die durch das Enzym induzierte Reaktion sollte angegeben werden. Diese Reaktion ist durch die IUBMB definiert.

Beispiel

.alpha.-amylase: Polysaccharide containing .alpha.-(1-4)-linked glucose units + H2O = maltooligosaccharides; endohydrolysis of 1,4-.alpha.-d-glucosidic linkages in polysaccharides containing three or more 1,4-.alpha.-linked d-glucose units.

Entsprechend der Enzymklasse ist ein Reaktionstyp zuzuweisen. Dies kann eine Oxidation, Reduktion, Eliminierung, Addition oder ein Reaktionsname sein.

Beispiel

.alpha.-amylase: O-glycosyl bond hydrolysis (endohydrolysis).

Bestandteile neben dem Enzymprotein

Alle Bestandteile, die in einer Konzentration von ≥ 10 Massenprozent (w/w) vorhanden oder für die Einstufung und Kennzeichnung und/oder die PBT-Beurteilung[28] von Bedeutung sind, sollten identifiziert werden. Die Identität von Bestandteilen in Konzentrationen unter 10 % kann als chemische Gruppe angegeben werden, wobei deren typische Konzentration(en) oder Konzentrationsbereiche zu benennen sind. Folgende Gruppen können angegeben werden:

- (Glyko-)Proteine
- Peptide und Aminosäuren

---

[27] Weitere Informationen zur PBT-Beurteilung und relevanten Kriterien sind in den *Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung*, Kapitel R11: *PBT-Beurteilung*, zu finden.

[28] Weitere Informationen zur PBT-Beurteilung und zu relevanten Konzentrationsgrenzwerten finden Sie im Abschnitt zur PBT-Beurteilung im Dokument „RIP 3.2 Technical Guidance Document For Preparing the Chemical Safety Assessment“.

- Kohlenhydrate
- Lipide
- Anorganische Stoffe (z. B. Natriumchlorid oder andere anorganische Salze)

Wenn sich die anderen Bestandteile eines Enzymkonzentrats nicht ausreichend identifizieren lassen, sollte, wie bei anderen UVCB-Stoffen biologischen Ursprungs auch, der Name des Produktionsorganismus (Gattung und Stamm oder genetischer Typ, sofern relevant) angegeben werden.

Sofern vorhanden, können weitere Parameter bereitgestellt werden, wie beispielsweise funktionelle Parameter (d. h. pH-Wert oder Temperaturoptimum und -bereiche), kinetische Parameter (z. B. spezifische Aktivität oder Turnover-Zahl), Liganden, Substrate und Produkte und Cofaktoren.

5. Kriterien für die Überprüfung, ob Stoffe identisch sind

Beim Überprüfen, ob Stoffe von anderen Herstellern/Importeuren als identisch angesehen werden können, sind einige Regeln zu beachten. Diese Regeln, die bei der Einrichtung des EINECS zur Anwendung kamen, sollten als allgemeine Grundlage für das Identifizieren und Bezeichnen eines Stoffes und damit für das Finden potenzieller Co-Registranten dieses konkreten Stoffes angesehen werden [5], [6], [16], [29], [30]. Stoffe, die nicht als identisch angesehen wurden, können aber mit einer fundierten Begründung möglicherweise als strukturell verwandt angesehen werden. Sofern wissenschaftlich begründbar, kann auch für diese Stoffe eine gemeinsame Nutzung von Daten möglich sein. Dieses Thema ist jedoch nicht Gegenstand dieser Leitlinien. Informationen dazu sind vielmehr in den *Leitlinien zur gemeinsamen Nutzung von Daten* zu finden.

- Für einkomponentige Stoffe ist die „≥ 80%"-Regel und für mehrkomponentige Stoffe die „< 80 % / ≥ 10 %"-Regel anzuwenden.

Es wird nicht zwischen der technischen Qualität, dem Reinheitsgrad und der analytischen Qualität der Stoffe unterschieden. Das bedeutet, dass ein „identischer" Stoff je nach Qualität ein unterschiedliches Reinheits-/Verunreinigungsprofil haben kann. Genau definierte Stoffe sollten jedoch den-/dieselben Hauptbestandteil(e) haben, und die einzigen zulässigen Verunreinigungen sind die Verunreinigungen, die aus dem Produktionsprozess stammen (siehe Details dazu in Kapitel 4.2), sowie Zusatzstoffe, die zur Wahrung der Stabilität des Stoffes benötigt werden.

- Hydratisierte und anhydrische Formen von Verbindungen sind zum Zweck einer Registrierung als identischer Stoff anzusehen.

Beispiele

Name und Formel	CAS-Nummer	EG-Nummer	Regel
Copper sulphate (CuH_2O_4S)	7758-98-7	231-847-6	
Sulphuric acid copper(2+) salt (1:1), pentahydrate ($Cu.H_2O_4\ S \cdot 5\ H_2O$)	7758-99-8		Dieser Stoff ist durch Registrierung seiner anhydrischen Form abgedeckt (EG-Nummer: 231-847-6)

Hydratisierte und anhydrische Formen haben unterschiedliche chemische Bezeichnungen und unterschiedliche CAS-Nummern.

- Säuren und Basen sowie deren Salze sind als unterschiedliche Stoffe zu betrachten.

[29] Vollmer et al. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, S. 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.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
201-186-8	Peracetic acid $C_2H_4O_3$	Dieser Stoff ist als nicht identisch mit z. B. seinem Natriumsalz (EINECS 220-624-9) anzusehen.
220-624-9	Sodium glycollate $C_2H_4O_3$. Na	Dieser Stoff ist als nicht identisch mit z. B. seiner korrespondierenden Säure (EINECS 201-186-8) anzusehen.
202-426-4	2-Chloroaniline C_6H_6ClN	Dieser Stoff ist als nicht identisch z. B. mit 2-Chloranilinhydrobromid (1:1) (C_6H_6ClN, HBr) anzusehen.

- Einzelne Salze (z. B. Natrium oder Kalium) sind als unterschiedliche Stoffe anzusehen.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
208-534-8	Sodium benzoate $C_7H_5O_2$, Na	Dieser Stoff ist als nicht identisch mit z. B. dem Kaliumsalz (EINECS 209-481-3) anzusehen.
209-481-3	Potassium benzoate $C_7H_5O_2$, K	Dieser Stoff ist als nicht identisch mit z. B. dem Natriumsalz (EINECS 208-534-8) anzusehen.

- Verzweigte oder lineare Alkylketten sind als unterschiedliche Stoffe anzusehen.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
295-083-5	Phosphoric acid, dipentyl ester, branched and linear	Dieser Stoff ist nicht als identisch mit den Einzelstoffen Phosphorsäure, Dipentylester, verzweigt oder Phosphorsäure, Dipentylester, linear anzusehen.

- Verzweigte Gruppen sind in der Bezeichnung als solche zu erwähnen. Stoffe mit Alkylgruppen, zu denen keine weiteren Angaben gemacht werden, decken lediglich die unverzweigten linearen Ketten ab, sofern nicht anders angegeben.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
306-791-1	Fatty acids, C12–16	Nur Stoffe mit linearen und unverzweigten Alkylgruppen werden als identischer Stoff angesehen.
279-420-3	Alcohols, C12–14	
288-454-8	Amines, C12–18-alkylmethyl	

- Stoffe mit Alkylgruppen und Zusatzangaben wie „iso“, „neo“, „branched“ (verzweigt) usw. sind als nicht identisch mit den Stoffen ohne diese Zusatzangabe anzusehen.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
266-944-2	Glycerides, C_{12-18} This substance is identified by SDA Substance Name: C12-C18 trialkyl glyceride and SDA Reporting Number: 16-001-00	Dieser Stoff ist als nicht identisch mit dem Stoff $C_{12-18-iso}$ mit gesättigten Alkylketten anzusehen, der an jeder Stelle verzweigt ist.

- Ohne eine ausdrückliche Angabe gilt, dass Alkylketten in Säuren, Alkoholen usw. ausschließlich für gesättigte Ketten stehen. Ungesättigte Ketten sind als solche anzugeben und als unterschiedliche Stoffe anzusehen.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
200-313-4	Stearic acid, pure C18H36O2	Dieser Stoff ist als nicht identisch mit Ölsäure, rein, C18H34O2 (EINECS 204-007-1) anzusehen.

- Stoffe mit chiralen Zentren

Stoffe mit nur einem chiralen Zentrum können in links- und in rechtshändiger Form (Enantiomere) vorliegen. Sofern nichts auf das Gegenteil hindeutet, wird davon

ausgegangen, dass ein Stoff eine gleiche (racemische) Mischung aus beiden Formen ist.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
201-154-3	2-chloropropan-1-ol	Die einzelnen Enantiomere (R)-2-Chlorpropan-1-ol und (S)-2-Chlorpropan-1-ol sind als nicht gleich diesem Eintrag anzusehen.

Wurde ein Stoff mit einer einzeln enantiomerischen Form angereichert, gelten die Regeln für mehrkomponentige Stoffe. Racemate werden ebenfalls als mehrkomponentige Stoffe angesehen.

Stoffe mit mehreren chiralen Zentren können in 2^n-Formen vorliegen (wobei „n“ für die Anzahl der chiralen Zentren steht). Diese unterschiedlichen Formen können jede für sich unterschiedliche physikalisch-chemische, toxikologische und/oder ökotoxikologische Eigenschaften haben. Sie sind als separate Stoffe anzusehen.

- Anorganische Katalysatoren

Anorganische Katalysatoren werden als Gemische angesehen. Zum Zweck der Identifizierung sollten Komponentenmetalle oder Metallverbindungen als Einzelstoffe (ohne Angabe der Verwendung) betrachtet werden.

Beispiele		
	Name	**Regel**
	Cobalt oxide-aluminium oxide catalyst	Ist separat zu identifizieren als: - Cobalt II oxide - Cobalt III oxide - Aluminium oxide - Aluminium cobalt oxide

- Enzymkonzentrate mit identischer IUBMB-Nummer können, sofern nicht unterschiedliche Produktionsorganismen verwendet werden, als identischer Stoff angesehen werden, vorausgesetzt, die Gefahreneigenschaften weichen nicht deutlich voneinander ab und rechtfertigen die identische Einstufung.

Mehrkomponentige Stoffe

Die Richtlinie 67/548/EWG regelte das Inverkehrbringen von Stoffen. Die Art und Weise der Produktion der Stoffe spielte dabei keine Rolle. Daher war ein in Verkehr gebrachter mehrkomponentiger Stoff durch das EINECS abgedeckt, sofern *alle* einzelnen Bestandteile im EINECS aufgeführt wurden. So war beispielsweise das Difluorbenzol-Isomerengemisch durch die EINECS-Einträge „1,2-Difluorobenzene“ (206-680-7), „1,3-Difluorobenzene“ (206-

746-5) und „1,4-Difluorobenzene“ (208-742-9) abgedeckt, obgleich das Isomerengemisch selbst nicht im EINECS eingetragen war.

Die REACH-Verordnung hingegen verlangt, dass der hergestellte Stoff registriert wird. In welchem Umfang die unterschiedlichen Schritte zur Produktion des Stoffes (z. B. verschiedene Aufreinigungs- oder Destillationsschritte) durch den Begriff „Herstellung“ abgedeckt sind, ist fallweise zu entscheiden. Wird ein mehrkomponentiger Stoff produziert, muss er registriert werden (es sei denn, er ist durch eine Registrierung der einzelnen Bestandteile abgedeckt, siehe Kapitel 4.2.2.4). Wenn beispielsweise das Difluorbenzol-Isomerengemisch produziert wird, ist „Difluorobenzene“ (Difluorbenzol), als Isomerengemisch, zu registrieren. Dabei gilt aber für mehrkomponentige Stoffe, dass für den Fall, dass das Gefahrenprofil des Stoffes durch die Angaben zu den einzelnen Bestandteilen ausreichend beschrieben werden kann, der Stoff als solcher nicht geprüft werden muss. Werden die einzelnen Isomere 1,2-Difluorbenzol, 1,3-Difluorbenzol und 1,4-Difluorbenzol einzeln produziert und anschließend gemischt, müssen die einzelnen Isomere registriert werden, und das Isomerengemisch würde als Gemisch angesehen werden.

Ein mehrkomponentiger Stoff mit den Hauptbestandteilen A, B und C darf nicht als identisch mit einem mehrkomponentigen Stoff mit den Hauptbestandteilen A und B oder als identisch mit einer Reaktionsmasse aus A, B, C und D angesehen werden.

- Ein mehrkomponentiger Stoff gilt nicht als mit einem Stoff identisch, der nur einen Teil der einzelnen Bestandteile enthält.

Beispiele

EG-Nummer	Name	Regel
207-205-6	2,5-Difluorotoluene	Diese beiden Stoffe werden nicht als mit dem Difluortoluol-Isomerengemisch identisch angesehen, da sie nur einen Teil aller möglichen Isomere darstellen.
207-211-9	2,4-Difluorotoluene	

- Die Registrierung eines mehrkomponentigen Stoffes deckt nicht die einzelnen Bestandteile ab.

Beispiele

EG-Nummer	Name	Regel
208-747-6	1,2-Dibromoethylene	Dieser Stoff beschreibt ein Gemisch aus cis- und trans-Isomeren. Die einzelnen Stoffe „(1Z)-1,2-Dibromoethene“ und „(1E)-1,2-Dibromoethene“ sind nicht durch die Registrierung des Isomerengemischs abgedeckt.

UVCB-Stoffe

- Ein UVCB-Stoff mit einer engen Verteilung der Bestandteile wird nicht als identisch mit einem UVCB-Stoff mit einer breiteren Zusammensetzung angesehen (und umgekehrt).

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
288-450-6	Amines, C12-18-alkyl, acetates	Die Stoffe „amines, C12–14-alkyl, acetates“, „amines, C12–20-alkyl, acetates“, „amines, dodecyl (C12-alkyl), acetates“ oder Stoffe mit ausschließlich geradzahligen Alkylketten werden als nicht identisch mit diesem Stoff angesehen.

- Ein Stoff, der durch eine Spezies/Gattung charakterisiert ist, wird als nicht identisch mit einem Stoff angesehen, der aus einer anderen Spezies/Gattung isoliert wurde.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
296-286-1	Glycerides, sunflower-oil di-	Dieser Stoff wird als nicht identisch mit „Glycerides, soya di-“ (EINECS: 271-386-8) und als nicht identisch mit „Glycerides, tallow di-“ (EINECS: 271-388-9) angesehen.
232-401-3	Linseed oil, epoxidized	Dieser Stoff wird als nicht identisch mit „Linseed oil, oxidized“ (EINECS: 272-038-8), als nicht identisch mit „Linseed oil, maleated“ (EINECS: 268-897-3) und als nicht identisch mit „Castor oil, epoxidized“ (nicht im EINECS aufgeführt) angesehen.

- Ein aufgereinigtes Extrakt oder ein aufgereinigtes Konzentrat gilt als anderer Stoff als das Extrakt.

Beispiele		
EG-Nummer	**Name**	**Regel**
232-299-0	Rape oil	Der Stoff „(Z)-Docos-13-enoic acid

	Extractives and their physically modified derivates. It consists primarily of the glycerides of the fatty acids erucic, linoleic and oleic. (Brassica napus, Cruciferae)	(erucic acid)“ ist ein Bestandteil des Stoffes „Rape oil“. Erucasäure („Erucic acid“) gilt nicht als identisch mit Rapsöl („Rape oil“), da dieser Stoff als reiner Stoff aus Rapsöl isoliert wird. Erucasäure hat einen eigenen EINECS-Eintrag (204-011-3). Ein isoliertes Gemisch aus Palmitinsäure, Ölsäure, Linolsäure, Linolensäure, Erucasäure und Gadoleinsäure gilt als nicht identisch mit Rapsöl, da diese Bestandteile nicht das ganze Öl ausmachen.

6. Stoffidentität bei (SPÄTER) Vorregistrierung und Anfrage

Leitlinien zur Vorgehensweise bei der Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen sind in Kapitel 4 dieses Dokuments zu finden. Anhand dieser Leitlinien sollte ermittelt werden, ob ein Stoff im Rahmen der REACH-Verordnung und der CLP-Verordnung als identisch angesehen werden kann. Im Folgenden wird dieses Thema weiter für die (späte) Vorregistrierung von Phase-in-Stoffen und für Anfragen bei Nicht-Phase-in-Stoffen ausgeführt.

Gemäß Artikel 4 kann ein Hersteller oder Importeur für alle Verfahren nach Titel III, bei denen Gespräche mit anderen Herstellern oder Importeuren geführt werden, einen Dritten als Vertreter benennen, wobei er für die Erfüllung seiner Verpflichtungen aus der REACH-Verordnung in vollem Umfang selbst verantwortlich bleibt.

6.1. (SPÄTE) Vorregistrierung

Ziel der (späten) Vorregistrierung ist es, potenzielle Registranten ein- und desselben Stoffes zusammenzubringen, um die Mehrfachdurchführung von Studien, insbesondere von Versuchen an Wirbeltieren, zu vermeiden. Die (späte) Vorregistrierung bezieht sich ausschließlich auf Phase-in-Stoffe.

Weitere Informationen zur (späten) Vorregistrierung und darüber, wer noch von ihr profitieren kann, finden Sie in den *Leitlinien zur gemeinsamen Nutzung von Daten* unter http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach und auf der themenspezifischen ECHA-Website unter http://echa.europa.eu/regulations/reach/registration/data-sharing/pre-registration zu entnehmen.

6.2. Anfrage

Für Nicht-Phase-in-Stoffe oder Phase-in-Stoffe, die nicht vorregistriert wurden, muss sich der potenzielle Registrant vor der Registrierung bei der Agentur erkundigen, ob für denselben Stoff bereits eine Registrierung vorgenommen wurde (Artikel 26 der REACH-Verordnung). Zusammen mit der Anfrage sind die folgenden Informationen zu übermitteln:

- Identität des potenziellen Registranten gemäß Anhang VI Abschnitt 1 der REACH-Verordnung mit Ausnahme der Standorte der Betriebe des Registranten
- Identität des Stoffes gemäß Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung
- Angabe, für welche Informationsanforderungen der potenzielle Registrant neue Studien mit Wirbeltierversuchen durchführen müsste
- Angabe, für welche Informationsanforderungen der potenzielle Registrant sonstige neue Studien durchführen müsste

Der potenzielle Registrant sollte die Identität und die Bezeichnung des Stoffes gemäß den in Kapitel 4 dieser Leitlinien ausgeführten Regeln bereitstellen.

Die Agentur wird ermitteln, ob derselbe Stoff bereits zuvor registriert wurde. Auch dabei sind die in Kapitel 4 dieser Leitlinien dargelegten Regeln anzuwenden. Das Ergebnis der Ermittlungen wird dem potenziellen Registranten mitgeteilt, und alle vorherigen oder alle anderen potenziellen Registranten werden entsprechend informiert.

Weitere Informationen zum Anfrageprozess finden Sie in den *Leitlinien zur gemeinsamen Nutzung von Daten* und auf der themenspezifischen ECHA-Webseitehttps://www.echa.europa.eu/web/guest/regulations/reach/registration/data-sharing/inquiry.

7. Beispiele

Die Beispiele auf den folgenden Seiten sollen lediglich veranschaulichen, wie der Leser die Leitlinien in diesem Dokument umsetzen kann. Sie stellen keine Präzedenzfälle bezüglich der Pflichten dar, die sich aus der REACH-Verordnung ergeben.

Die Veranschaulichung erfolgt anhand der folgenden Beispiele:

- Diethylperoxycarbonat („diethyl peroxydicarbonate“) soll als Beispiel für einen einkomponentigen Stoff dienen, der ein Lösungsmittel enthält, das auch als Stabilisator fungiert (siehe Kapitel 7.1).
- Zolimidin („Zolimidine“) soll als Beispiel für einen Stoff dienen, der als einkomponentiger oder als mehrkomponentiger Stoff identifiziert werden könnte (siehe Kapitel 7.2).
- Ein Isomerengemisch („mixture of isomers“), das sich bei der Herstellungsreaktion bildet, soll als Beispiel für einen mehrkomponentigen Stoff dienen (siehe Kapitel 7.3). Dieser Stoff wurde bisher von den EINECS-Einträgen der einzelnen Isomere abgedeckt.
- Der Duftstoff AH („Fragrance AH“) soll als Beispiel für einen in unterschiedlichen Qualitäten produzierten Stoff dienen, der als Reaktionsmasse von fünf Bestandteilen mit Konzentrationsbereichen beschrieben werden kann (siehe Kapitel 7.4). Dieser Stoff ist auch ein Beispiel für eine gerechtfertigte Abweichung von der 80 %- und der 10 %-Regel.
- Nicht-metallische Minerale, einschließlich Montmorillonit („montmorillonite“), sollen als Beispiel für einen genau definierten Stoff dienen, bei dem eine zusätzliche physikalische Beschreibung erforderlich ist (siehe Kapitel 7.5).
- Ein ätherisches Öl aus Lavadin Grosso („essential oil of lavandin grosso“) soll als Beispiel für einen UVCB-Stoff dienen, der aus Pflanzen gewonnen wird (siehe Kapitel 7.6).
- Der Stoff „Chrysanthemenöl und daraus isolierte Isomere“ („chrysanthemum oil and isomers isolated thereof“) soll als Beispiel für einen UVCB-Stoff biologischen Ursprungs dienen, der weiter verarbeitet wird (siehe Kapitel 7.7).
- Der Stoff „Phenol, isopropyliert, Phosphat“ („Phenol, isopropylated, phosphate“) soll als Beispiel für einen UVCB-Stoff mit variabler Zusammensetzung dienen, der nicht vollständig definiert werden kann (siehe Kapitel 7.8).
- Quaternäre Ammoniumverbindungen („quaternary ammonium compounds“) sollen als Beispiel für Stoffe mit variabler Kohlenstoffkettenlänge dienen (siehe Kapitel 7.9).
- Kapitel 7.10 enthält zwei Beispiele für Erdölstoffe: Benzinverschnittlauf und Gasöle.
- Kapitel 7.11 erläutert anhand zweier Beispiele, Laccase und Amylase, das Identifizieren von Enzymen.

7.1. Diethylperoxydicarbonat

Der Stoff „Diethylperoxydicarbonat“ („diethyl peroxydicarbonate“; EG-Nummer 238-707-3, CAS-Nummer 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) wird als 18%ige Lösung in Isododecan (EG-Nummer 250-816-8, CAS-Nummer 31807-55-3) produziert. Isododecan fungiert auch als Stabilisator gegen die explosiven Eigenschaften. Die höchstmögliche Konzentration, die einen sicheren Umgang mit dem Stoff gewährleistet, ist eine 27%ige Lösung.

Wie sollte der oben beschriebene Stoff zu Registrierungszwecken identifiziert und bezeichnet werden?

Laut Definition des Begriffs „Stoff“ in der REACH-Verordnung sollten Lösungsmittel, die

abgetrennt werden können, ohne dass sich dies auf die Stabilität des Stoffes auswirkt oder sich dessen Zusammensetzung ändert, ausgeschlossen werden. Da im oben genannten Fall Isododecan auch als Stabilisator fungiert und aufgrund der explosiven Eigenschaften des Stoffes nicht vollständig abgetrennt werden kann, ist Isododecan als Zusatzstoff und nicht allein als Lösungsmittel zu betrachten. Dennoch sollte der Stoff als einkomponentiger Stoff angesehen werden. Damit sollte der Stoff als Lösung mit der niedrigsten Konzentration an Isododecan registriert werden, die einen sicheren Umgang gewährleistet:

„Diethyl peroxydicarbonate (upper concentration limit: . 27%)". Isododecan sollte unter „Additives" (Zusatzstoffe) gemeldet werden, und die stabilisierende Funktion sollte angegeben werden.

7.2. ZOLIMIDIN

Die hergestellte methanolische Lösung enthält Zolimidin („zolimidine"; EG-Nummer 214-947-4, CAS-Nummer 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) und Imidazol („imidazole"; EG-Nummer 206-019-2, CAS-Nummer 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Nach Entfernung des Lösungsmittels Methanol und Optimierung des Herstellungsverfahrens hat der Stoff einen Reinheitsbereich von 74 % bis 86 % Zolimidin und 4 % bis 12 % Imidazol.

Wie sollte der oben beschriebene Stoff zu Registrierungszwecken identifiziert und bezeichnet werden?

Laut Definition des Begriffs „Stoff" in der REACH-Verordnung sollten Lösungsmittel, die abgetrennt werden können, ohne dass sich dies auf die Stabilität des Stoffes auswirkt oder sich dessen Zusammensetzung ändert, ausgeschlossen werden. Wie im oben beschriebenen Fall kann Methanol problemlos abgetrennt werden; der lösungsmittelfreie Stoff muss registriert werden.

Im Allgemeinen gilt, dass ein Stoff als einkomponentiger Stoff zu betrachten ist, wenn einer der Hauptbestandteile in einer Konzentration von ≥ 80 % vorhanden ist. Sind mehrere Hauptbestandteile in einer Konzentration zwischen ≥ 10 % und < 80 % vorhanden, gilt der Stoff als mehrkomponentiger Stoff. Das Beispiel oben ist ein Grenzfall, da die Schwellenwerte überschritten werden. Aus diesem Grund kann der Stoff als einkomponentiger Stoff Zolimidin („zolimidine") oder als mehrkomponentiger Stoff als Reaktionsmasse von Zolimidin und Imidazol („reaction mass of zolimidine and imidazole") angesehen werden.

Bei solchen Grenzfällen kann die typische Konzentration der Hauptbestandteile herangezogen werden, um zu entscheiden, wie der Stoff am besten zu beschreiben ist:

(1) Liegt die typische Konzentration von Zolimidin bei 77 % und von Imidazol bei 11 %, empfiehlt es sich, den Stoff als Reaktionsmasse von Zolimidin und Imidazol zu betrachten.

(2) Liegt die typische Konzentration von Zolimidin bei 85 % und von Imidazol bei 5 %, empfiehlt es sich, den Stoff als einkomponentigen Stoff Zolimidin zu betrachten.

7.3. Isomerengemisch

Der fragliche Stoff ist ein Gemisch (Reaktionsmasse) aus zwei Isomeren, das sich während der Herstellungsreaktion bildet. Die einzelnen Isomere wurden an das EINECS gemeldet. Die Richtlinie 67/548/EWG regelte das Inverkehrbringen von Stoffen. Da die Art und Weise der Produktion des Stoffes keine Rolle spielte, war das Gemisch durch die EINECS-Einträge der beiden einzelnen Isomere abgedeckt. Die REACH-Verordnung hingegen verlangt, dass der hergestellte Stoff registriert wird. In welchem Umfang die unterschiedlichen durchgeführten Schritte zur Produktion des Stoffes durch den Begriff „Herstellung" abgedeckt sind, ist fallweise zu entscheiden. Wird das Isomerengemisch als mehrkomponentiger Stoff (entsprechend den Leitlinien in Kapitel 4.2.2) registriert, ist es nicht nötig, den Stoff als

solches zu prüfen, sofern das Gefahrenprofil des Stoffes durch die Angaben zu den einzelnen Bestandteilen ausreichend beschrieben werden kann. Zur Anzeige des Phase-in-Status sollte aber auf die EINECS-Einträge der einzelnen Isomere verwiesen werden.

1. *Bezeichnung und andere Identifikatoren*

Beispiele	
IUPAC-Name oder andere internationale chemische Bezeichnung (des Stoffes)	Reaction mass of 2,2'-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol and 2,2'-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
Andere Bezeichnungen (des Stoffes)	2,2′-[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol Reaction mass of Ethanol, 2,2′-[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- and water Ethanol, 2,2′-[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- (9CI) isomeric compound
EG-Nummer (des Stoffes) **EG-Name** **EG-Beschreibung**	Es existiert keine EG-Nummer für das Gemisch, da das Gemisch nicht an das EINECS gemeldet wurde. Der Stoff war aber durch die EINECS-Einträge für die Bestandteile (279-502-9, 279-501-3) abgedeckt. Das Gemisch sollte daher als Phase-in-Stoff angesehen werden.
CAS-Nummer (des Stoffes) **CAS-Bezeichnung**	nicht verfügbar nicht verfügbar
EG-Nummer (Bestandteil A) **EG-Name** **EG-Beschreibung**	279-502-9 2,2′-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
EG-Nummer (Bestandteil B) **EG-Name** **EG-Beschreibung**	279-501-3 2,2′-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
CAS-Nummer (Bestandteil A) **CAS-Bezeichnung**	80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
CAS-Nummer (Bestandteil B) **CAS-Bezeichnung**	80584-88-9 Ethanol, 2,2′-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
Sonstiger Identifizierungscode **Referenznummer**	ENCS number 5-5917

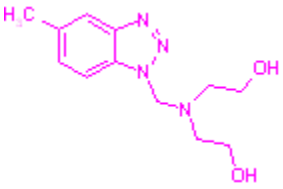
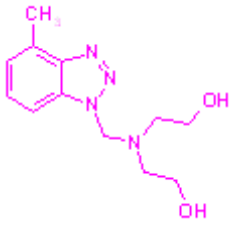
2. *Angaben zur Zusammensetzung – Hauptbestandteile*

Hauptbestandteile						
	IUPAC-Name	CAS-Nummer	EG-Nummer	Summenformel nach Hill	Typ. Konz. (Ma%)	Konz.bereich (Ma%)
A	Ethanol, 2,2′-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
B	Ethanol, 2,2′-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

Hauptbestandteile		
	Andere Bezeichnungen	
A	2,2′-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	
B	2,2′-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	

Hauptbestandteile		
	EG-Name	EG-Beschreibung
A	2,2′-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/
B	2,2′-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/

Hauptbestandteile		
	CAS-Bezeichnung	CAS-Nummer
A	Ethanol, 2,2′-[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0
B	Ethanol, 2,2′-[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9

	Hauptbestandteile Summenformel nach CAS	Strukturformel	SMILES-Code
A	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12
B	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12

Hauptbestandteile	Molekulargewicht [g mol-1]	Molekulargewichtsbereich
A	250	/
B	250	/

7.4. Duftstoff AH

Der Duftstoff AH („fragrance AH“) besteht aus Gamma-(iso-alpha)-Methylionon und dessen Isomeren. Er wird in drei unterschiedlichen Qualitäten (Qualität A, B und C) produziert, die sich hinsichtlich des Isomerenverhältnisses voneinander unterscheiden.

Die folgende Tabelle bietet einen Überblick über die Zusammensetzung der unterschiedlichen Qualitäten.

Zusammensetzung der unterschiedlichen Qualitäten des Duftstoffes AH				
Konzentrationsbereich [%]	**Qualität A**	**Qualität B**	**Qualität C**	**Gesamtbereich**
Gamma-(iso-alpha)-Methylionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
Delta-(iso-beta)-Methylionon	6 - 10	3 - 7	3 – 7	3 - 10
Alpha-n-Methylionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
Gamma-n-Methylionon	0,5 - 1.5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
Beta-n-Methylionon	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5-15
Pseudomethylionon	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Für die Stoffidentifizierung gibt es mehrere Möglichkeiten:

- Qualität A enthält mindestens 80 % des Isomers Gamma-(iso-alpha)-Methylionon und könnte daher als einkomponentiger Stoff mit dem Isomer Gamma-(iso-alpha)-Methylionon als Basis und den anderen Isomeren als Verunreinigungen angesehen werden.
- Die Qualitäten B und C enthalten weniger als 80 % des Isomers Gamma-(iso-alpha)-Methylionon und ≥ 10 % andere Isomere. Sie könnten daher als mehrkomponentige Stoffe angesehen werden:
  - Qualität B: als Reaktionsmasse von Gamma-(iso-alpha)-Methylionon (65 % bis 75 %) und Alpha-n-Methylionon (10 % bis 20 %) mit den anderen Isomeren als Verunreinigungen.
  - Qualität C: als Reaktionsmasse von Gamma-(iso-alpha)-Methylionon (50 % bis 60 %) und Alpha-n-Methylionon (20 % bis 30 %) mit den anderen Isomeren als Verunreinigungen.

Die Zusammensetzung ist variabel, und manchmal ist ein Isomer in einer Konzentration von ≥ 10 % (normalerweise damit Hauptbestandteil) und manchmal in einer Konzentration von < 10 % (normalerweise damit Verunreinigung) vorhanden.

Es wäre möglich, die unterschiedlichen Qualitäten separat zu registrieren, was drei Registrierungen zur Folge hätte. Das würde aber möglicherweise die Anwendung eines Analogiekonzeptes bei den Daten rechtfertigen.

Alternativ käme auch Folgendes in Betracht:

- eine Registrierung als einkomponentiger Stoff mit zwei Unterqualitäten: In diesem Fall weichen die Unterqualitäten von der 80 %-Regel ab (siehe Kapitel 4.2.1).
- eine Registrierung als definierte Reaktionsmasse von fünf Isomeren (mehrkomponentiger Stoff): In diesem Fall weichen einige Isomere (Hauptbestandteile) von der 10 %-Regel ab, die zwischen Hauptbestandteilen und Verunreinigungen unterscheidet (siehe Kapitel 4.2.2).
- eine Registrierung als definierte Reaktionsmasse, bei der die Variabilität der Zusammensetzung durch den vollständigen Bereich der einzelnen Isomere abgedeckt wird

Folgende Faktoren können dabei von Bedeutung sein:

- Die drei Qualitäten haben identische oder sehr ähnliche physikalisch-chemische Eigenschaften.
- Die drei Qualitäten haben ähnliche Verwendungen und Expositionsszenarien.
- Alle Qualitäten haben dieselbe Gefahreneinstufung und Kennzeichnung, und der Inhalt der Sicherheitsdatenblätter und Sicherheitsberichte ist identisch.
- Die vorhandenen Prüfdaten (und weitere Prüfungen) decken die Variabilität der drei Qualitäten ab.

In diesem Beispiel wird die Identifizierung des Stoffes als definierte Reaktionsmasse von fünf Isomeren (mehrkomponentiger Stoff) beschrieben. Aufgrund der Abweichung von der 80 %-Regel (siehe Kapitel 4.2.1) und der 10 %-Regel (siehe Kapitel 4.2.2) ist eine Begründung erforderlich. Da jede Qualität als solche produziert wird, sollte die Zusammensetzung aller drei Qualitäten im Registrierungsdossier angegeben werden. Formell gesehen könnten jedoch zwei Registrierungen notwendig sein: (1) „Gamma (iso-alpha) methyl ionone“ und (2) „Reaction mass of gamma (iso-alpha) methyl ionone and alpha-n-methyl ionone“.

Stoffidentifizierung

Der Duftstoff AH wird in drei unterschiedlichen Qualitäten (A, B und C) mit identischer qualitativer, aber unterschiedlicher quantitativer Zusammensetzung produziert. Alle drei Qualitäten werden in einem Registrierungsdossier für einen mehrkomponentigen Stoff beschrieben. Dies bedeutet zwar, dass die 80 %-Regel und die 10 %-Regel nicht strikt angewendet werden, die Registrierung als ein mehrkomponentiger Stoff ist aber gerechtfertigt, da (1) vorhandene Prüfdaten die Variabilität der drei Qualitäten abdecken, (2) die drei Qualitäten sehr ähnliche physikalisch-chemische Eigenschaften besitzen, (3) alle Qualitäten dieselbe Gefahreneinstufung und Kennzeichnung aufweisen (sodass die Sicherheitsdatenblätter identisch sind) und (4) für die drei Qualitäten sehr ähnliche Verwendungen und Expositionsszenarien gelten (sodass die Stoffsicherheitsberichte ähnlich sind).

1. *Bezeichnung und andere Identifikatoren*

IUPAC-Name oder andere internationale chemische Bezeichnung	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-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-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
Andere Bezeichnungen	Methyl Ionone Gamma Quality A Methyl Ionone Gamma Quality B Methyl Ionone Gamma Quality C
EG-Nummer EG-Name EG-Beschreibung	nicht verfügbar / /
CAS-Nummer CAS-Bezeichnung	nicht verfügbar /

2. *Angaben zur Zusammensetzung – Hauptbestandteile*

Theoretisch sind weitere Enantiomere möglich. Es wurden jedoch die folgenden Isomere analysiert:

Hauptbestandteile						
	IUPAC-Name	CAS-Nummer	EG-Nummer	Summenformel nach Hill	Min. Konz. (Ma%)	Max. Konz. (Ma%)
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-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30

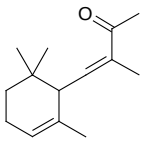
D	1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one	nicht verfügbar	nicht verfügbar	C14H22O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

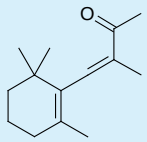
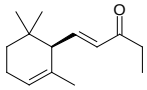
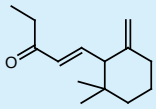
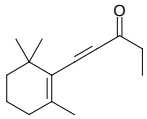
Hauptbestandteile	
	Andere Bezeichnungen
A	alpha-iso-methyl ionone; gamma methyl ionone
B	beta-iso-methyl ionone; delta methyl ionone
C	alpha-n-methyl ionone
D	gamma-n-methyl ionone
E	beta-n-methyl ionone

Hauptbestandteile		
	EG-Name	**EG-Beschreibung**
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
C	[*R-(E)*]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
D	1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/

Hauptbestandteile		
	CAS-Bezeichnung	**CAS-Nummer**
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	nicht verfügbar	nicht verfügbar
E	1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	127-43-5

Hauptbestandteile		
	Sonstiger Identifizierungscode	**Referenznummer**
A	2714 07.036	FEMA EU-Aromastoffverzeichnis
B	07.041	EU-Aromastoffverzeichnis
C	2711 07.009	FEMA EU-Aromastoffverzeichnis
D	nicht verfügbar	nicht verfügbar
E	2712 07.010	FEMA EU-Aromastoffverzeichnis

Hauptbestandteile			
	Summenformel nach CAS	**Strukturformel**	**SMILES-Code**
A	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C

B	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C
C	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC
D	$C_{14}H_{22}O$		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC
E	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

Hauptbestandteile		
	Molekulargewicht [g mol^{-1}]	**Molekulargewichtsbereich**
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. *Angaben zur Zusammensetzung – Verunreinigungen und Zusatzstoffe*

Verunreinigungen						
	IUPAC-Name	**CAS-Nummer**	**EG-Nummer**	**Summen-formel**	**Typ. Konz. (Ma%)**	**Konz.bereich (Ma%)**
F						

Anzahl nicht-spezifizierter Verunreinigungen: Gesamtkonzentration nicht-spezifizierter Verunreinigungen:				11 (Pseudomethylionone) 0,5–3 Massenprozent (w/w)		
Block „Additives“						
	IUPAC-Name	**CAS-Nummer**	**EG-Nummer**	**Summenformel**	**Typ. Konz. (Ma%)**	**Konz.bereich (Ma%)**
G	Butylated Hydroxytoluene (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0,1	0,05 – 0,15

4. *Angaben zu den anderen Qualitäten*

Die folgende Tabelle enthält eine Übersicht über die Bereiche der fünf Hauptbestandteile in den drei unterschiedlichen Qualitäten:

Konzentrationsbereich [%]	Qualität A	Qualität B	Qualität C
gamma (iso-alpha) methyl ionone	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (iso-beta) methyl ionone	6 - 10	3 - 7	3 – 7
alpha n-methyl ionone	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-methyl ionone	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4
beta n-methyl ionone	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo methyl ionones	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Minerale

Nach der Definition ist ein Mineral eine in der Erdkruste vorkommende Kombination anorganischer Bestandteile, die eine definierte chemische Zusammensetzung, eine Kristallform (von hoch kristallin bis amorph) und bestimmte physikalisch-chemische Eigenschaften aufweist.

Minerale sind von der Registrierungspflicht ausgenommen, wenn sie der Begriffsbestimmung für „Naturstoff“ (*Artikel 3 Abschnitt 39* der REACH-Verordnung) entsprechen und wenn sie nicht chemisch verändert werden (*Artikel 3 Abschnitt 40* der REACH-Verordnung). Dies trifft auf Minerale zu, deren chemische Struktur unverändert bleibt, auch wenn sie einem chemischen Verfahren oder einer chemischen Behandlung oder

einer physikalischen mineralogischen Umwandlung, zum Beispiel zur Beseitigung von Verunreinigungen, unterzogen wurden.

Einige Minerale können anhand ihrer chemischen Zusammensetzung eindeutig beschrieben werden (siehe Kapitel 4.2.1 und 4.2.2 für ein- und mehrkomponentige Stoffe), bei anderen Mineralen lässt die chemische Zusammensetzung allein nicht zu, sie eindeutig zu identifizieren (siehe Kapitel 4.2.3).

Im Unterschied zu anderen ein- oder mehrkomponentigen Stoffen muss bei vielen Mineralen die Identifizierung anhand der chemischen Zusammensetzung *und* der internen Struktur (wie sie sich z. B. bei der Röntgenbeugung darstellt) erfolgen, da nur diese beiden Aspekte zusammen es ermöglichen, die wesentlichen Merkmale des Minerals aufzuzeigen und dessen physikalisch-chemischen Eigenschaften zu bestimmen.

Wie bei anderen mehrkomponentigen Stoffen ist auch bei Mineralen als Teil der Identifizierung die CAS-Nummer zu verwenden (d. h. die Kombination der anorganischen Bestandteile). Die CAS-Nummern der anorganischen Bestandteile (gemäß Definition durch die systematische Mineralogie) dienen der Beschreibung der einzelnen Bestandteile. Wenn ein einzelner anorganischer Bestandteil (ein einkomponentiger Stoff) produziert würde, sollte zur Identifizierung des Stoffes die CAS-Nummer dieses Stoffes verwendet werden. Dafür ein Beispiel:

- Das Mineral Kaolin (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) besteht hauptsächlich aus primären und sekundären Kaoliniten (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), einem hydratisierten Alumosilicat-Tonmineral.

Wenn Kaolin einem Raffinationsvorgang unterzogen würde, um einen einzelnen Bestandteil von Kaolin, z. B. Kaolinite, zu produzieren, würden die EINECS- und die CAS-Nummern für den Stoff wie folgt lauten: EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Das Mineral Bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), das im EINECS als „A colloidal clay. Consists primarily of montmorillonite“ beschrieben ist, enthält zu einem hohen Anteil, aber nicht ausschließlich, den anorganischen Bestandteil Montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0).

Wenn reines Montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) produziert würde, müsste zum Identifizieren des Stoffes die CAS-Nummer von Montmorillonit verwendet werden.

Hervorzuheben ist, dass Bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) und Montmorillonite (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) nicht als identischer Stoff gelten.

Zusammenfassend kann gesagt werden: Minerale werden generell nach ihrem/ihren anorganischen Bestandteil(en) bezeichnet. Sie können als einkomponentige oder mehrkomponentige Stoffe angesehen werden (allgemeine Leitlinien siehe Kapitel 4.2.1 und 4.2.2). Bei einigen Mineralen reicht die Angabe der chemischen Zusammensetzung nicht aus, um sie eindeutig zu beschreiben. In diesen Fällen sind für eine ausreichende Identifizierung zusätzliche physikalische Charakterisierungen oder Verfahrensparameter erforderlich (siehe Kapitel 4.2.3). Die folgende Tabelle enthält einige Beispiele.

Beispiele für Minerale

Name	CAS	EINECS	Zusätzliche Beschreibung
Cristobalite	14464-46-1	238-455-4	O_2Si (crystal system: cubic/tetragonal)
Quartz	14808-60-7	238-878-4	O_2Si (crystal system: trigonal/hexagonal)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Also known as Diatomite, Kieselgur and Celite Description: A soft siliceous solid composed of skeletons of small prehistoric aquatic plants. Contains primarily silica.
Dolomite	16389-88-1	240-440-2	$CH_2O_3.1/2Ca.1/2Mg$
Feldspar-group minerals	68476-25-5	270-666-7	An inorganic substance that is the reaction product of high temperature calcination in which aluminium oxide, barium oxide, calcium oxide, magnesium oxide, silicon oxide, and strontium oxide in varying amounts are homogeneously and ionically interdiffused to form a crystalline matrix.
Talc	14807-96-6	238-877-9	$Mg_3H_2(SiO_3)_4$
Vermiculite	1318-00-9	-	$(Mg_{0.33}[Mg_{2-3}(Al_{0-1}Fe_{0-1})_{0-1}](Si_{2.33-3.33}\ Al_{0.67-1.67})\ (OH)_2O_{10}\ .4H_2O)$

Für Minerale erforderliche analytische Angaben

Elementzusammensetzung	Die chemische Zusammensetzung gibt einen Gesamtüberblick über die Zusammensetzung des Minerals ohne Berücksichtigung der Anzahl der Bestandteile und deren Anteile im Mineral. Es ist üblich, die chemische Zusammensetzung für Oxide anzugeben.
Spektraldaten (XRD oder Äquivalent)	Mit der Röntgenbeugung (XRD) oder anderen Verfahren können Minerale anhand ihrer kristallografischen Struktur identifiziert werden. Zur Identifizierung sollten die charakteristischen XRD- oder IR-Peaks, die das Mineral identifizieren, sowie eine kurze Beschreibung der Analysemethode oder bibliografische Verweise angegeben werden.
Typische physikalisch-chemische Eigenschaften	Minerale besitzen charakteristische physikalisch-chemische Eigenschaften, anhand derer ihre Identifizierung vervollständigt werden kann. Dies sind z. B.: -sehr geringe Härte -Quellvermögen -Formen von Kieselgur (Lichtmikroskop) -sehr hohe Dichte -Oberfläche (Stickstoffadsorption)

7.6. Ätherisches Öl aus Lavandin grosso

Ätherische Öle sind Stoffe, die aus Pflanzen gewonnen werden. Daher können ätherische Öle auch als von Pflanzen abstammende Stoffe charakterisiert werden.

Im Allgemeinen sind von Pflanzen abstammende Stoffe komplexe natürliche Stoffe, die gewonnen werden, indem eine Pflanze oder deren Teile einer Behandlung, beispielsweise einer Extraktion, Destillation, Pressung, Fraktionierung, Aufreinigung, Konzentrierung oder Fermentation, unterzogen wird/werden. Die Zusammensetzung dieser Stoffe variiert nach Gattung, Spezies, Wachstumsbedingungen und Erntezeitraum der Quellen und den angewendeten Verarbeitungsverfahren.

Ätherische Öle könnten anhand ihrer Hauptbestandteile definiert werden, wie dies für mehrkomponentige Stoffe üblich ist. Sie können jedoch aus mehreren Hundert Bestandteilen bestehen, die abhängig von vielen Faktoren (z. B. Gattung, Spezies, Wachstumsbedingungen, Erntezeit, verwendeten Verfahren) stark variieren können. Eine Beschreibung der Hauptbestandteile reicht daher häufig nicht aus, um diese UVCB-Stoffe zu beschreiben. Ätherische Öle sollten anhand der Pflanzenquelle und des Behandlungsverfahrens, wie in Kapitel 4.3.1 (für UVCB-Untergruppe 3) erörtert, beschrieben werden.

Häufig sind für ätherische Öle Industriestandards vorhanden (für viele ätherische Öle gibt es auch ISO-Normen). Angaben zu Standards und Normen können zusätzlich beigesteuert werden. Die Stoffidentifizierung sollte aber auf der Grundlage des tatsächlich hergestellten Stoffes erfolgen.

Im folgenden Beispiel wird der Stoff „Ätherisches Öl aus Lavandin grosso“ („essential oil of

Lavandin grosso“) beschrieben, für den eine ISO-Norm (ISO 8902-1999) verfügbar ist.

1. *Bezeichnung und andere Identifikatoren*

Quelle

Spezies	*Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae)

Verfahren

Beschreibung der (bio)chemischen Reaktionsprozesse zur Herstellung des Stoffes:
Water steam distillation of the flowering tops of *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) and subsequent separation of the water from the Essential Oil; The subsequent separation is a spontaneous, physical process, which normally takes place in a separator (a so-called "florentine flask") enabling an easy isolation of the separated oil. The temperature at this stage of the distillation process is about 40 °C.

Name

IUPAC-Name oder andere internationale chemische Bezeichnung	Essential oil of Lavendula hybrida grosso (Lamiaceae)
EG-Nummer EG-Name EG-Beschreibung	297-385-2 Lavender, Lavandula hybrida grosso, ext. Extractives and their physically modified derivatives such as tinctures, concretes, absolutes, essential oils, oleoresins, terpenes, terpene-free fractions, distillates, residues, etc., obtained from Lavandula hybrida grosso, Labiatae[31].
CAS-Nummer CAS-Bezeichnung	93455-97-1 Lavender, Lavandula hybrida grosso, ext.

[31] „Labiatae“ und „Lamiaceae“ sind Synonyme.

2. *Angaben zur Zusammensetzung – bekannte Bestandteile*

Bekannte Bestandteile					
	Chemische Bezeichnung **EG** **CAS** **IUPAC** **andere**	**Zahl** **EG** **CAS**	**Summen-formel nach Hill**	**Typische Konz. (Ma%)**	**Konz.-bereich (Ma%)**
A	**EG** linalyl acetate **CAS** 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, acetate **IUPAC** 3,7-Dimethyl octa-1,6-dien-3-yl acetate	**EG** 204-116-4 **CAS** 115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	33	28 – 38
B	**EG** linalool **CAS** 1,6-octadien-3-ol, 3,7-dimethyl- **IUPAC** 3,7-Dimethyl octa-1,6-diene-3-ol	**EG** 201-134-4 **CAS** 78-70-6	$C_{10}H_{18}O$	29,5	24 – 35
C	**EG** Bornan-2-one **CAS** Bicyclo[2.2.1] heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- **IUPAC** 1,7,7-Trimethylbicyclo[2.2.1]-2-heptanone **Andere** camphor	**EG** 200-945-0 **CAS** 76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	7	6 – 8
D	**EG** Cineole **CAS** 2-oxabicyclo [2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- **IUPAC** 1,3,3-Trimethyl-2-oxabicyclo[2.2.2]octane **Andere** 1,8-cineole	**EC** 207-431-5 **CAS** 470-82-6	$C_{10}H_{18}O$	5,5	4 – 7

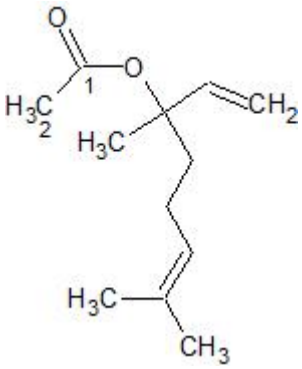
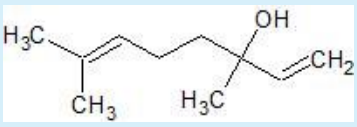
E	**EG** P-menth-1-en-4-ol **CAS** 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- **IUPAC** 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol **Andere** terpinene-4-ol	**EG** 209-235-5 **CAS** 562-74-3	$C_{10}H_{18}O$	3,25	1,5 – 5
F	**EG** 2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetate **CAS** 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate **IUPAC** 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol **Andere** (±)-Lavandulol acetate	**EG** 247-327-7 **CAS** 25905-14-0	$C_{12}H_{20}O_2$	2,25	1,5 – 3
G	**EG** DL-borneol **CAS** Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, (1R,2S,4R)-rel- **IUPAC** (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol **Andere** borneol	**EG** 208-080-0 **CAS** 507-70-0	$C_{10}H_{18}O$	2,25	1,5 – 3
H	**EG** Caryophyllene **CAS** Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (1R,4E,9S)- **IUPAC** (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylene bicyclo[7.2.0]undec-4-ene **Andere** trans-beta-caryophyllene	**EG** 201-746-1 **CAS** 87-44-5	$C_{15}H_{24}$	1,75	1 – 2,5

I	**EG** (E)-7,11-dimethyl-3-methylenedodeca-1,6,10-triene **CAS** 1,6,10-Dodecatriene, 7,11-dimethyl-3-methylene-, (6E)- **IUPAC** (E)-7,11-Dimethyl-3-methylene-1,6,10-dodecatriene **Andere** trans-beta-farnesene	**EG** 242-582-0 **CAS** 18794-84-8	$C_{15}H_{24}$	1,1	0,2 – 2
J	**EG** (R)-p-mentha-1,8-diene **CAS** cyclohexen, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (4R)- **IUPAC** (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexene **Andere** limonene	**EG** 227-813-5 **CAS** 5989-27-5	$C_{10}H_{16}$	1	0,5 – 1,5
K	**EG** 3,7-dimethylocta-1,3,6-triene **CAS** 1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl- **IUPAC** 3,7-Dimethylocta-1,3,6-triene **Andere** cis-beta-ocimene	**EG** 237-641-2 **CAS** 13877-91-3	$C_{10}H_{16}$	1	0,5 – 1,5

Bekannte Bestandteile ≥ 10 %

Bekannte Bestandteile		
	EG-Name	**EG-Beschreibung**
A	linalyl acetate $C_{12}H_{20}O_2$	
B	linalool $C_{10}H_{18}O$	

Bekannte Bestandteile		
	CAS-Bezeichnung	**Verwandte CAS-Nummern**
A	linalyl acetate $C_{12}H_{20}O_2$	115-95-7
B	linalool $C_{10}H_{18}O$	78-70-6

Bekannte Bestandteile			
	Summenformel nach CAS	**Strukturformel**	**SMILES-Code**
A	$C_{12}H_{20}O_2$		
B	$C_{10}H_{18}O$		

Bekannte Bestandteile		
	Molekulargewicht	**Molekulargewichtsbereich**
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Chrysanthemenöl und daraus isolierte Isomere

Ein Unternehmen produziert ein Chrysanthemenöl, das nach dem Zerkleinern von Blüten und Blättern aus *Chrysanthemum cinerariafolim*, Compositae mit einem Wasser/Ethanol-Gemisch (1:10) als Lösungsmittel extrahiert wird. Nach der Extraktion wird das Lösungsmittel entfernt, und der „reine" Extrakt wird in weiteren Schritten bis zum endgültigen Chrysanthemenöl aufgereinigt.

Zusätzlich werden aus dem Extrakt zwei Isomere isoliert als Reaktionsmasse von:

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)-; CAS-Nummer 4466-14-2) und

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)-; CAS-Nummer 1172-63-0

Darüber hinaus hat das Unternehmen beschlossen, auch die isomerische Reaktionsmasse von Jasmolin I und II zu synthetisieren.

Das Unternehmen stellt sich die folgenden Fragen:

1. Wie ist das Chrysanthemenöl zu Registrierungszwecken zu identifizieren?
2. Ist die Reaktionsmasse der isolierten Isomere Jasmolin I und II mit der Registrierung des Öles abgedeckt?
3. Kann das synthetisierte Gemisch der beiden Isomere als identisch mit dem Gemisch der Isomere angesehen werden, das aus dem Chrysanthemenöl isoliert wird?

1. Wie ist das Chrysanthemenöl zu Registrierungszwecken zu identifizieren?

Chrysanthemenöl gilt als UVCB-Stoff, der durch seine chemische Zusammensetzung nicht ausreichend identifiziert werden kann (ausführliche Leitlinien dazu siehe Kapitel 4.3). Für die Identifizierung sind daher dringend andere Parameter, wie Quelle und Verfahren, erforderlich. Chrysanthemenöl ist biologischen Ursprungs und sollte anhand der Spezies, des Teiles des Organismus, aus dem es gewonnen wird, und des Raffinationsverfahrens (Extraktion mit Lösungsmittel) identifiziert werden. Die chemische Zusammensetzung und die Identität der Bestandteile sind aber, soweit bekannt, anzugeben. Die Beschreibung der Zusammensetzung kann oft allgemeiner erfolgen.

Folgende Angaben gelten als notwendig, um den Stoff ausreichend zu identifizieren:

Name des Stoffes	***Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae; oil obtained from crushed blossoms and leaves by extraction with water:ethanol (1:10)**
Quelle	
Gattung, Spezies, Subspezies	Chrysanthemum cinerariafolium, Compositae;

Teil der für das Öl verwendeten Pflanze	Blossoms and leaves
Verfahren	
Herstellungsmethode	Crushing followed by extraction
Für Extraktion verwendetes Lösungsmittel	Water:ethanol (1:10)

Angaben zur Zusammensetzung – bekannte Bestandteile in Massenprozent (w/w)

Name des Bestandteiles	EG-Nr.	CAS-Nr.	Min. %	Max. %
Pyrethrin I: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl) cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-chrysanthemate	204-455-8	121-21-1	30	38
Pyrethrin II: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl) cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerin I: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerin II: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropane carboxylate	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolin I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent -2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclo propanecarboxylate	keine	4466-14-2	4	10

Jasmolin II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclo pent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]- 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	keine	1172-63-0	4	10
Darüber hinaus enthält der Stoff bis zu 40 Bestandteile in einer Konzentration von unter 1 %.				

Man könnte auch erwägen, den Stoff als genau definierten mehrkomponentigen Stoff mit sechs Hauptbestandteilen (Reaktionsmasse von Pyrethrin I, Pyrethrin II, Cinerin I, Cinerin II, Jasmolin I und Jasmolin II) zu identifizieren.

Der Stoff würde als „Naturstoff“ gelten, wenn das Herstellungsverfahren lediglich im Zerkleinern bestünde, und er wäre von der Registrierungspflicht ausgenommen, es sei denn, er würde die Kriterien für eine Einstufung als gefährlich gemäß Richtlinie 67/548/EWG erfüllen.

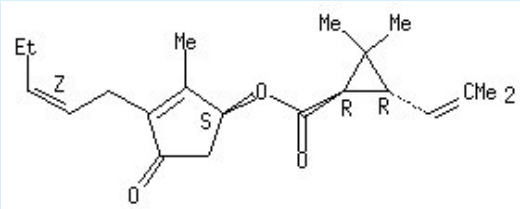
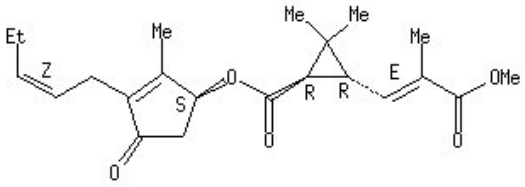
2. Ist die Reaktionsmasse der isolierten Isomere Jasmolin I und II mit der Registrierung des Öles abgedeckt?

Die Reaktionsmasse der isolierten Isomere Jasmolin I und II ist durch die Registrierung von „*Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae oil“ nicht abgedeckt, da ein einzelner Bestandteil/einzelne Bestandteile nicht durch den ganzen UVCB-Stoff abgedeckt ist/sind (und umgekehrt). Die Reaktionsmasse von Jasmolin I und II gilt als ein unterschiedlicher Stoff.

Die Reaktionsmasse von Jasmolin I und Jasmolin II kann als mehrkomponentiger Stoff (ausführliche Leitlinien siehe Kapitel 4.2.3) mit zwei Hauptbestandteilen angesehen werden.

Folgende Angaben gelten als notwendig, um den Stoff ausreichend zu identifizieren:

IUPAC-Name des Stoffes	Reaction mass of (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent -2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclo propanecarboxylate) und (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)
Andere Bezeichnung	Reaction mass of Jasmolin I and Jasmolin II
Reinheit des Stoffes	95–98 % (w/w)
Angaben zur Zusammensetzung – Hauptbestandteile in Massenprozent (w/w)	

Name des Bestandteiles	EG-Nr.	CAS-Nr.	Min. %	Max. %
Jasmolin I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclo propanecarboxylate	keine	4466-14-2	40	60
Summenformel Strukturformel Molekulargewicht		 $C_{22}H_{30}O_5$ M = 374 g/mol		
Jasmolin II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclo pent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarbo xylate Summenformel Strukturformel Molekulargewicht	keine	1172-63-0  C21H30O3 M = 330 g/mol	35	65

3. Kann das synthetisierte Gemisch (Reaktionsmasse) der beiden Isomere als identisch mit dem Gemisch der Isomere angesehen werden, das aus dem Chrysanthemenöl isoliert wird?

Bei chemisch genau definierten Stoffen, die durch ihre Bestandteile ausreichend beschrieben sind, spielt es keine Rolle, ob der Stoff aus einem Extrakt isoliert oder durch ein chemisches Verfahren synthetisiert wird. Daher kann die synthetisierte Reaktionsmasse von Jasmolin I und Jasmolin II als identisch mit dem aus dem Chrysanthemenöl isolierten Isomerengemisch angesehen werden, auch wenn dies aus unterschiedlichen Herstellungsverfahren abgeleitet wird, sofern die Reinheit des Gemischs und der Konzentrationsbereich der Hauptbestandteile identisch sind.

4. Schlussfolgerung

Zwei Stoffe werden identifiziert:

1. *Chrysanthemum cinerariafolium*, Compositae; aus zerkleinerten Blüten und Blättern und durch Extraktion mit Wasser:Ethanol (1:10) gewonnenes Öl
2. Reaktionsmasse der Isomere Jasmolin I und Jasmolin II, unabhängig vom Verfahren zur Herstellung des Stoffes

Wenn die oben genannten Stoffe *ausschließlich* in Pflanzenschutzmitteln und Biozid-Produkten verwendet würden, würden sie gemäß REACH-Verordnung (*Artikel 15*) als registriert gelten.

7.8. Phenol, isopropyliert, Phosphat

Der Stoff „Phenol, isopropyliert, Phosphat (3:1)“ („phenol, isopropylated, phosphate (3:1)“) ist ein UVCB-Stoff, bei dem die Variabilität der isopropylierten Entität nicht vollständig definiert werden kann.

1. *Bezeichnung und andere Identifikatoren*

IUPAC-Name oder andere internationale chemische Bezeichnung	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)
Andere Bezeichnungen	Phenol, isopropylated, phosphate Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (based on a 1:1 mol ratio propylene to phenol)
EG-Nummer **EG-Name** **EG-Beschreibung**	273-066-3 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) /
CAS-Nummer **CAS-Bezeichnung**	68937-41-7 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)

2. Angaben zur Zusammensetzung – Hauptbestandteile

Hauptbestandteile					
IUPAC-Name	**CAS-Nummer**	**EG-Nummer**	**Summenformel nach Hill**	**Typ. Konz. (Ma%)**	**Konz.-bereich (Ma%)**
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Unspezifiziert		

Hauptbestandteile	
EG-Name	**EG-Beschreibung**
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	/
CAS-Bezeichnung	**CAS-Nummer**
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7

7.9. Quaternäre Ammoniumverbindungen

Ein Unternehmen synthetisiert die folgenden Stoffe:

Stoff A

Quaternäre Ammoniumverbindungen, di-C_{10-18}-Alkyldimethyl, Chloride

EG-Nummer 294-392-2

CAS-Nummer 91721-91-4

Kohlenstoffkettenlängenverteilung:

- C_{10} 10 %
- C_{11} 5,5 %
- C_{12} 12 %
- C_{13} 7,5 %
- C_{14} 18 %
- C_{15} 8 %
- C_{16} 24 %

C_{17} 7 %

C_{18} 8 %

Stoff B

Quaternäre Ammoniumverbindungen, Dikokosalkyldimethyl, Chloride

EG-Nummer 263-087-6

CAS-Nummer 61789-77-3

Die genaue Zusammensetzung dieses Stoffes ist dem Unternehmen nicht bekannt.

Stoff C

Didodecyldimethylammonuimbromid

Stoff D

Didodecyldimethylammoniumchlorid

Stoff E

Stoff E wird als Reaktionsmasse von Didodecyldimethylammonuimbromid und Didodecyldimethylammoniumchlorid (Reaktionsmasse von Stoff C und D) hergestellt.

Stoff F

Quaternäre Ammoniumverbindungen, di-$C_{14–18}$-Alkyldimethylammonium, Chloride

EG-Nummer 268-072-8

CAS-Nummer 68002-59-5

Kohlenstoffkettenlängenverteilung:

C_{14} 20%

C_{15} 10 %

C_{16} 40%

C_{17} 10 %

C_{18} 20%

Stoff G

Quaternäre Ammoniumverbindungen, di-$C_{4–22}$-Alkyldimethyl, Chloride

Kohlenstoffkettenlängenverteilung (ein einzelner Strich (’) steht für eine Doppelbindung, ein doppelter Strich (”) für eine Dreifachbindung):

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 %

Bisher verwendet das Unternehmen nur Stoff B, „Quaternäre Ammoniumverbindungen, Dikokosalkyldimethyl, Chloride“ („Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl chlorides“, EG-Nummer 263-087-6 und CAS-Nummer 61789-77-3) für die Bezeichnung, da diese am besten zu allen Stoffen passt (Stoffe A bis G). Das Unternehmen möchte wissen, ob es möglich ist, alle Stoffe (A bis G) durch eine Registrierung von Stoff B abzudecken.

1. Allgemeine Bemerkungen

Kohlenwasserstoffe (Paraffine, Olefine), die von Fetten und Ölen oder synthetischen Ersatzstoffen abstammen, werden durch ihre Kohlenstoffkettenverteilung oder durch ihren Ursprung (Alkyl-Deskriptor), durch eine funktionelle Gruppe (Funktionalitäts-Deskriptor), z. B. Ammonium, und das Anion/Kation (Salz-Deskriptor), z. B. Chlorid, identifiziert. Die Kohlenstoffkettenlängenverteilung, z. B. „$C_{8–18}$“, steht für

gesättigt

linear (unverzweigt)

alle Kohlenstoffzahlen inklusive (C_8, C_9, C_{10}, C_{11},…., C_{18}), wobei eine enge Verteilung keine breitere Verteilung abdeckt (und umgekehrt)

Anderenfalls sollte die Angabe wie folgt gemacht werden:

ungesättigt ($C_{16\ \text{unsaturated}}$)

verzweigt ($C_{10\ \text{branched}}$)

geradzahlig ($C_{12\text{-}18\ \text{even-numbered}}$)

Kohlenstoffketten, die durch die Quelle beschrieben werden, z. B. Talgalkylamine, müssen in der Beschreibung die Verteilung in der Quelle enthalten:

Die Talgalkylamine sind zu 99 % primäre Alkylamine mit linearer Kette und der folgenden Kohlenstoffkettenlängenverteilung (Ullmann, 1985) [ein einzelner Strich (′) steht für eine Doppelbindung, ein doppelter Strich (″) für eine Dreifachbindung]:

C12 1 %

C14 3 %

C14′ 1 %

C15 0,5 %

C16 29 %

C16′ 3 %

C17 1 %

C18 23 %

C18′ 37 %

C18″ 1,5 %

2. Wie sind die Stoffe zu Registrierungszwecken zu identifizieren?

Jeder Stoff wird mit Stoff B (der bisher für die Bezeichnung verwendet wurde) verglichen, um zu entscheiden, ob die beiden Stoffe als identisch angesehen werden können.

Vergleich von Stoff A mit Stoff B

Für den Bestandteil „Kokos“ („coco“) des Stoffes B ist die folgende Kettenlängenverteilung zu finden (Ullmann, 1985) [ein einzelner Strich (′) steht für eine Doppelbindung, ein doppelter Strich (″) für eine Dreifachbindung]:

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

Damit weicht die Kettenlängenverteilung bei Stoff A von der Kettenlängenverteilung beim „Kokos“-Stoff-B ab. Da beide Stoffe eine deutlich unterschiedliche qualitative und quantitative Zusammensetzung aufweisen, können sie nicht als identisch angesehen werden.

Vergleich von Stoff B mit Stoff C

Stoff B, „Quaternäre Ammoniumverbindungen, Dikokosalkyldimethyl, Chloride“ („Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides“), beschreibt ein Gemisch aus Bestandteilen mit unterschiedlich langen Kohlenstoffketten (C_6 bis C_{18} geradzahlig, linear, gesättigt und ungesättigt), wohingegen Stoff C nur einen Bestandteil mit einer definierten und gesättigten Kettenlänge (C_{12}) und einem anderen Anion (Bromid) beschreibt. Daher kann Stoff C nicht als identisch mit Stoff B angesehen werden.

Vergleich von Stoff B mit Stoff D

Stoff B, „Quaternäre Ammoniumverbindungen, Dikokosalkyldimethyl, Chloride“ („Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides“), beschreibt ein Gemisch aus Bestandteilen mit unterschiedlich langen Kohlenstoffketten (C_6 bis C_{18} geradzahlig, linear, gesättigt und ungesättigt), wohingegen Stoff D nur einen Bestandteil mit einer definierten und gesättigten Kettenlänge (C_{12}) und demselben Anion (Chlorid) beschreibt. Stoff B und D tragen eine unterschiedliche Bezeichnung und können nicht als identisch angesehen werden, da ein einzelner Bestandteil nicht durch ein Gemisch abgedeckt wird, das einen bestimmten Bestandteil enthält (und umgekehrt).

Vergleich von Stoff B mit Stoff E

Stoff E ist ein Gemisch aus den Stoffen C und D. Beide Stoffe haben eine gesättigte Kohlenstoffkette C_{12}, aber unterschiedliche Anionen (Bromid und Chlorid). Stoff B, „Quaternäre Ammoniumverbindungen, Dikokosalkyldimethyl, Chloride“ („Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides“), beschreibt ein Gemisch aus Bestandteilen mit unterschiedlich langen Kohlenstoffketten (C_6 bis C_{18} geradzahlig, linear, gesättigt und ungesättigt) und Chlorid als Anion. Stoff E hingegen wird nur durch die Kohlenstoffkettenlänge C_{12} mit Bromid als zusätzlichem Anion beschrieben. Damit können Stoff B und Stoff E nicht als identisch angesehen werden, und Stoff E muss separat registriert werden.

Vergleich von Stoff B mit Stoff F

Stoff F, „Quaternäre Ammoniumverbindungen, di-$C_{14–18}$-Alkyldimethylammonium, Chloride“ („Quaternary ammonium compounds, di-$C_{14–18}$-alkyldimethylammonium, chlorides“) ist ein Gemisch aus Bestandteilen mit unterschiedlich langen Kohlenstoffketten (C_{14} bis C_{18} gerad- und ungeradzahlig, linear und gesättigt). Stoff F unterscheidet sich in der Zusammensetzung und im Bereich der Kohlenstoffkettenlängenverteilung von Stoff B. Stoff F hat eine enge Kohlenstoffkettenlängenverteilung und zusätzlich die Kohlenstoffketten C_{15} und C_{17}. Damit können Stoff B und Stoff F nicht als identisch angesehen werden.

Vergleich von Stoff B mit Stoff G

Die Stoffe B und G scheinen sehr ähnlich zu sein, da die Kohlenstoffkettenlängenverteilung fast im selben Bereich liegt. Stoff G enthält jedoch zusätzlich die Kohlenstoffkettenlängen C_4, C_{20} und C_{22}. Die Kohlenstoffkettenlängenverteilung von Stoff G umfasst einen breiteren Bereich als die von Stoff B. Damit können Stoff B und Stoff G nicht als identisch angesehen werden.

3. Schlussfolgerung

Kohlenwasserstoffe (Paraffine, Olefine) können nur als identische Stoffe angesehen werden, wenn alle drei Deskriptoren (Alkyl, Funktionalität und Salz) identisch sind.

Im Beispiel oben unterscheiden sich die Deskriptoren immer voneinander. Damit können die Stoffe nicht durch die alleinige Registrierung von Stoff B abgedeckt werden.

7.10. Erdölstoffe

In den Leitlinien für spezifische UVCB-Stoffe in Kapitel 4.3.3.2 werden zwei Beispiele beschrieben.

7.10.1. Benzinverschnittlauf (C4-C12)

1. *Bezeichnung und andere Identifikatoren*

Name

IUPAC-Name oder andere internationale chemische Bezeichnung	Naphtha (petroleum), catalytic reformed

Quelle

Identifizierung oder Beschreibung der Laufquelle	Crude oil

Verfahren

Beschreibung des Raffinationsverfahrens	**Catalytic reforming process**
Kohlenstoffbereich	C4–C12
Siedepunktbereich oder „Cut off“	30 °C bis 220 °C
Andere physikalische Eigenschaften, z. B. Viskosität	below 7 mm^2 /s at 40 °C (Viscosity)
EG-Nummer **CAS-Nummer** **EG-Name/CAS-Bezeichnung** **EG-Beschreibung/CAS-Beschreibung**	273-271-8 68955-35-1 Naphtha (petroleum), catalytic reformed A complex combination of hydrocarbons produced by the distillation of products from a catalytic reforming process. It consists of hydrocarbons having carbon numbers predominantly in the range of C4 through C12 and boiling in the range of approximately 30°C to 220°C (90°F to 430°F). It contains a relatively large proportion of aromatic and branched chain hydrocarbons. This stream may contain 10 vol-% or more benzene.

2. *Angaben zur Zusammensetzung*

Bekannte Bestandteile			
IUPAC-Name	**CAS-Nummer**	**EG-Nummer**	**Konz.bereich (Ma%)**
Benzene	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluene	108-88-3	203-625-9	20-25
Xylene	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Gasöle (Erdöl)

1. *Bezeichnung und andere Identifikatoren*

IUPAC-Name oder andere internationale chemische Bezeichnung	Gas oils (petroleum), heavy atmospheric

Quelle

Identifizierung oder Beschreibung der Laufquelle	Crude oil

Verfahren

Beschreibung des Raffinationsverfahrens	**Atmospheric distillation**
Kohlenstoffbereich	C7–C35
Siedepunktbereich oder „Cut off“	121°C to 510°C
Andere physikalische Eigenschaften, z. B. Viskosität	20 mm^2/s at 40°C (Viscosity)

EG-Nummer	272-184-2
CAS-Nummer	68783-08-4
EG-Name / CAS-Bezeichnung	Gas oils (petroleum), heavy atmospheric
EG-Beschreibung / CAS-Beschreibung	A complex combination of hydrocarbons obtained by the distillation of crude oil. It consists of hydrocarbons having carbon numbers predominantly in the range of C7 to C35 and boiling in the range of approximately 121°C to 510°C (250°F to 950°F).

2. *Chemische Zusammensetzung*

Keine Angaben verfügbar.

7.11. Enzyme

In den Leitlinien für spezifische UVCB-Stoffe in Kapitel 4.3.2.3 werden zwei Beispiele für Enzymkonzentrate genannt: Subtilisin (identifiziert durch die IUBMB-Nomenklatur + andere Bestandteile) und α-Amylase (identifiziert durch die IUBMB-Nomenklatur + den Produktionsorganismus)

7.11.1. Subtilisin

Enzymprotein	**Subtilisin**
IUBMB-Nummer	3.4.21.62
Bezeichnungen nach IUBMB (Systematische Bezeichnung, Enzymname, Synonyme)	Subtilisin; alcalase; alcalase 0.6L; alcalase 2.5L; ALK-enzyme; bacillopeptidase A; bacillopeptidase B; Bacillus subtilis alkaline proteinase bioprase; bioprase AL 15; bioprase APL 30; colistinase; (see also comments); subtilisin J; subtilisin S41; subtilisin Sendai; subtilisin GX; subtilisin E; etc.

Kommentare der IUBMB	Subtilisin is a serine endopeptidase, type example of peptidase family S8. It contains no cysteine residues (although these are found in homologous enzymes). Species variants include subtilisin BPN' (also subtilisin B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse, Nagarse proteinase, subtilisin Novo, bacterial proteinase Novo) and subtilisin Carlsberg (subtilisin A, subtilopeptidase A, alcalase Novo). Formerly EC 3.4.4.16 and included in EC 3.4.21.14. Similar enzymes are produced by various *Bacillus subtilis* strains and other *Bacillus* species [1,3]
Reaktion	Hydrolysis of proteins with broad specificity for peptide bonds, and a preference for a large uncharged residue in P1. Hydrolyses peptide amides
Reaktionstyp	Hydrolases; Acting on peptide bonds (peptidases); Serine endopeptidases
EG-Nummer	232-752-2
EG-Name	Subtilisin
CAS-Nummer	9014-01-1
CAS-Bezeichnung	Subtilisin
Konzentration des Enzymproteins	26 %
Andere Bestandteile	
Andere Proteine, Peptide und Aminosäuren Kohlenhydrate Lipide Anorganische Salze	39 % 11 % 1 % 23 %
Weitere Parameter	

Substrate und Produkte	proteins or oligopeptides, water peptides

7.11.2. α-Amylase

Enzymprotein	**α-Amylase**
IUBMB-Nummer	3.2.1.1.
Bezeichnungen nach IUBMB (Systematische Bezeichnung, Enzymname, Synonyme)	1,4-α-D-glucan glucanohydrolase; glycogenase; α-amylase; alpha-amylase; endoamylase; Taka-amylase A
Kommentare der IUBMB	Acts on starch, glycogen and related polysaccharides and oligosaccharides in a random manner; reducing groups are liberated in the α-configuration. The term 'α' relates to the initial anomeric configuration of the free sugar group released and not to the configuration of the linkage hydrolysed.
Reaktion	Endohydrolysis of 1,4- α-D-glucosidic linkages in polysaccharides containing three or more 1,4-α- linked D-glucose units
Reaktionstyp	hydrolases; glycosidases; glycosidases, i.e. enzymes hydrolysing O- and S- glycosyl compounds
EG-Nummer	232-565-6
EG-Name	Amylase, α–
CAS-Nummer	9000-90-2

Verwandte CAS-Nummern	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (all deleted)
CAS-Bezeichnung	Amylase, α–
Konzentration des Enzymproteins	37 %
Andere Bestandteile	
Andere Proteine, Peptide und Aminosäuren Kohlenhydrate Anorganische Salze	30 % 19 % 14 %
Weitere Parameter	
Substrate und Produkte	starch; glycogen; water; polysaccharide; oligosaccharide;

Anhang I – Hilfsmittel

Dieser Anhang enthält eine Liste mit Namen und Adressen von Websites, Datenbanken und Handbüchern, die bei der Suche nach den entsprechenden IUPAC-, CAS- und EG-Namen, CAS- und EG-Nummern, Summen- und Strukturformeln, einschließlich SMILES-Notation, und anderen für die Stoffidentifizierung erforderlichen Parametern hilfreich sein können. Kommerzielle Datenbanken und Hilfsmittel wurden nicht in die Liste aufgenommen.

Allgemeines		
Stoffidentifizierungsparameter	**Quelle**	**Beschreibung**
U.S. Department of Health and Human Services	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	Gruppe von Datenbanken und Tools für die Suche nach chemischen Angaben
Perkin Elmer Informatics	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	Kostenlos nutzbare Datenbank mit Angaben zu chemischen Strukturen und physikalischen Eigenschaften sowie Hyperlinks zu relevanten Informationen
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	http://accelrys.com/products/informatics/	Chemie-Software; alphabetische Liste der Accord-Produkte

Bezeichnung und andere Identifikatoren		
Stoff-identifizierungs-parameter	**Quelle**	**Beschreibung**
IUPAC-Name	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	Offizielle IUPAC-Website
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	Chemische Nomenklatur und Empfehlungen der IUPAC (unter Zuständigkeit der IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Basiswerk zur IUPAC-Nomenklatur, Aktualisierung für 2006 erwartet.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993) (Ergänzung des Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Basiswerk zur IUPAC-Nomenklatur, Aktualisierung für 2006 erwartet.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (Recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Basiswerk zur IUPAC-Nomenklatur, Aktualisierung für Juli 2005 erwartet.
IUPAC-Name	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Basiswerk zur IUPAC-Nomenklatur
	Principles of Chemical Nomenclature: A Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Einführungswerk, das auf alle Arten von Verbindungen eingeht
IUPAC-Name	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Kommerzielles Computerprogramm zur Namensgenerierung, das bei der Bezeichnung von mäßig komplexen Strukturen sehr hilfreich sein kann. Für kleine Moleküle ist das Programm als Freeware erhältlich (von der IUPAC empfohlen).

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	IUPAC-Nomenklatur der organischen Chemie (von der IUPAC empfohlen)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Vollständige Liste der anerkannten Trivial- und halbsystematischen Stammnamen organischer Verbindungen
	http://www.chemexper.com/	Ziel von „ChemExper Chemical Directory“ ist der Aufbau einer allgemeinen und kostenlos zugänglichen Chemikaliendatenbank im Internet. Diese Datenbank enthält Chemikalien zusammen mit ihren charakteristischen physikalischen Eigenschaften. Es steht jedem frei, über einen Webbrowser chemische Angaben zu senden und Informationen abzurufen.
IUBMB-Nomenklatur	http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/ oder http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb	IUBMB-Datenbank zur biochemischen Nomenklatur (unter Zuständigkeit der IUBMB) Andere
Andere Bezeich-nungen	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Colour Index Generic Names, Colour Index International, Fourth Edition Online
	http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp	INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients), offizielle Website des Personal Care Products Council
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	US-EPA-Stoffe mit variierenden Kohlenstoffkettenlängen (Alkylbereiche mit CX-Y-Notation) Andere
Identifika-toren	http://www.cenorm.be	CE-Normen, offizielle Website des Europäischen Komitees für Normung
EG-Nummer	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	EG-Verzeichnis zum Durchsuchen von EINECS, ELINCS, NLP und Richtlinie 67/548/EWG *Anhang I*

CAS-Nummer	http://www.cas.org	Offizielle Website des CAS Registry-Service
	http://www.chemistry.org	Offizielle Website der American Chemical Society

Summen- und Strukturformel		
Stoff-identifi-zierungs-parameter	**Quelle**	**Beschreibung**
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator___checker/index.html	Kostenloser SMILES-Generator
Molekular-gewicht und SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, Freeware (auch kommerziell erhältlich)
Verschie-dene physika-lisch-chemische Parameter	http://www2.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface	Die EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ ist eine Windows®-basierte Sammlung von Modellen zur Abschätzung physikalischer/chemischer Eigenschaften von Stoffen und zu deren Verhalten und Verbleib in der Umwelt, die vom Office of Pollution Prevention and Toxics der EPA und der Syracuse Research Corporation (SRC) entwickelt wurde.

Anhang II – Technische Leitlinien nach Stoffidentifizierungsparameter

Die Informationen in diesem Anhang richten sich an Leser dieser Leitlinien, die mit den technischen Regeln der Nomenklatur, der Verwendung der verschiedenen Registernummern und den Notationsregeln für Summen- und Strukturangaben, Spektraldaten usw. nicht vertraut sind.

Sie finden hier eine allgemeine Einführung in Form einer Zusammenfassung der Hauptprinzipien und Verweise auf Quellen zum Nachlesen der vollständigen Informationen.

Die hier enthaltenen Informationen sind vereinfacht, nicht vollständig oder erschöpfend und für den professionellen Nutzer nicht detailliert genug. Sie sind in keinem Fall als mit der offiziellen Quelle gleichwertig zu betrachten.

1 Name(n) nach der IUPAC-Nomenklatur oder anderen internationalen Nomenklaturen

Bei der Registrierung ist der englische IUPAC-Name oder eine andere genau definierte international übliche Bezeichnung des Stoffes anzugeben.

IUPAC-Namen basieren auf der internationalen chemischen Standardnomenklatur der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC; für entsprechende Verweise siehe Anhang I). Die IUPAC-Nomenklatur ist ein systematischer Ansatz zur Bezeichnung von organischen und anorganischen Stoffen. Sie verwendet zur Beschreibung der Art und der Stellung der funktionellen Gruppen im Stoff Präfixe, Suffixe und Infixe.

Im Beispiel **penta-1,3-dien-1-ol**

ist **penta-1,3-** das Präfix,

-di das Infix und

-ol das Suffix.

en- ist die Basis des Namens, der Stammname.

Der Regelsatz wurde im Laufe eines Jahre umfassenden Zeitraums aufgestellt und wird stetig weiterentwickelt, um neue Komponenten der molekularen Vielfalt zu integrieren und erkannte mögliche Widersprüche oder Unklarheiten zu beseitigen. Der Regelsatz der IUPAC kann nur für genau definierte Stoffe verwendet werden.

Im Folgenden finden Sie einige allgemeine Leitlinien zur Struktur der (englischen) IUPAC-Namen. Ausführliche Hinweise entnehmen Sie bitte den Leitlinien in Kapitel 4 dieses Dokuments.

1.1 Organischer Stoff

Schritt 1 Zunächst ist die Anzahl der Kohlenstoffatome in der längsten durchgehenden Kohlenstoffkette zu ermitteln. Nach dieser Anzahl richtet sich das Präfix, also der erste Teil des Stammnamens:

Anzahl der Kohlenstoffatome	Stamm
1	meth-

2	eth-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	oct-
N	….

Schritt 2 Jetzt muss die Sättigung der Kette bestimmt werden. Nach dieser Sättigung richtet sich das Suffix, also der zweite Teil des Stammnamens:

Sättigung	Bindungen	Suffix
Ungesättigt	Doppel-bindung Dreifach-bindung	-ene -yn
Gesättigt	-	-ane

Sind mehrere Doppel- oder Dreifachbindungen vorhanden, wird die Anzahl der Bindungen durch „mono“, „di“, „tri“ usw. vor dem Suffix angegeben:

Penten („Pentene“) mit 2 Doppelbindungen: pentadiene

Schritt 3 Präfix, Suffix und Hinzufügungen werden mit dem Stammnamen zusammengesetzt.

Hinweis: Als Stammname können auch die von der IUPAC anerkannten Trivialnamen und halbsystematischen Bezeichnungen verwendet werden:

Benzene, Toluene usw.

Schritt 4 Anhand der Tabelle unten ist Folgendes durchzuführen:

- Identifizieren der Substituenten und/oder funktionellen Gruppen: Kohlenstoff- oder Nicht-Kohlenstoffgruppen an der unter Schritt 1 ermittelten Kette der Kohlenstoffatome
- Bestimmen der Rangordnung der Substituenten und/oder funktionellen Gruppen
- Hinzufügen des Suffixes für den ersten Substituenten/die erste funktionelle Gruppe sowie aller weiteren Suffixe entsprechend der Rangordnung
- Hinzufügen des Präfixes für die anderen Substituenten und funktionellen Gruppen

in alphabetischer Reihenfolge

Rang	Gruppe	Formel	Suffix	Präfix
1	Carboxyl-gruppe	R-COOH	-oic acid	Carboxy
2	Estergruppe	R-CO-O-R	-oate	-
3	Amidgruppe	$R\text{-}CONH_2$	-amide	Carbamoyl
4	Cyanid-gruppe	R-CN	-nitrile	Cyano
5	Aldehyd-gruppe	R-CHO	-al	Oxo
6	Ketogruppe	R-CO-R	-one	Oxo
7	Hydroxyl-gruppe	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Thiolgruppe	R-SH	-thiol	Sulfanyl
9	Amino-gruppe	$R\text{-}NH_2$	-amine	Amino

1.2 Anorganischer Stoff

1.2.1 Bezeichnung einfacher anorganischer Stoffe

Die Bezeichnung anorganischer Stoffe erfolgt nach einem Regelsatz („Red Book“ der IUPAC, siehe Verweis in Kapitel 7.1), der – ganz grundlegend – Folgendes besagt:

1 Anionen mit nur einem Atom werden mit dem Suffix „-ide“ bezeichnet:

O^{2-} ist „oxide“

2 Einfache ionische Verbindungen werden mit dem Kation und daran anschließend dem Anion bezeichnet. Bei Kationen mit Ladungen >1 werden die Ladungen unmittelbar hinter dem Elementnamen als römische Ziffern in Klammern angegeben:

Cu^{2+} ist „copper(II)“

3 Hydrate werden als die ionische Verbindung, gefolgt von einem Zahlwortpräfix und „-hydrate“ bezeichnet. Die Zahlwortpräfixe sind „mono-“, „di-“, „tri-“, „tetra-“, „penta-“, „hexa-“, „hepta-“, „octa-“, „nona-“, „deca-“:

$CuSO_4 \cdot 5H_2O$ ist „copper(II) sulphate pentahydrate“

Hinweis: Zu Registrierungszwecken gelten Hydrate und, wo zutreffend, die anhydrische Form eines konkreten Metallsalzes als identisch.

4 Anorganische Molekularverbindungen werden zur Bezeichnung mit einem Präfix (siehe Hydrate) vor jedem Element versehen. Das stärker elektronegative Element wird mit einem „-ide“-Suffix an die letzte Stelle gesetzt:

CO2 ist „carbon dioxide“, und CCl4 ist „carbon tetrachloride“.

5 Säuren werden nach dem Anion bezeichnet, das sich beim Lösen der Säure in Wasser bildet. Dabei gibt es verschiedene Möglichkeiten:

a Wenn die Säure beim Lösen in Wasser in ein Anion mit der Bezeichnung „x-ide“ dissoziiert, wird die Säure als „hydro-x-ic acid“ bezeichnet:

„hydrochloric acid“ bildet ein „chloride“-Anion.

b Wenn die Säure beim Lösen in Wasser in ein Anion mit der Bezeichnung „x-ate“ dissoziiert, wird die Säure als „x-ic acid“ bezeichnet:

„chloric acid“ dissoziiert in Wasser zu „chlorate“-Anionen.

c Wenn die Säure beim Lösen in Wasser in ein Anion mit der Bezeichnung „x-ite“ dissoziiert, wird die Säure als „x-ous acid“ bezeichnet:

„chlorous acid“ dissoziiert zu „chlorite“-Anionen.

1.2.2 Bezeichnung mineralogischer Phasen

Komplexe mineralogische Phasen enthalten im Allgemeinen drei oder mehr Elemente in Kombination. Die meisten vorhandenen Elemente sind an Sauerstoff gebunden, und um die Identifizierung zu vereinfachen, betrachten Mineralogen die komplexen Verbindungen in der Regel als aus Oxiden aufgebaut, von denen ein Teil basisch und der andere sauer ist. Bei Silicaten beispielsweise ist es üblich, diese entweder als Summe einer Anzahl von Oxiden oder als Salze der Kieselsäure bzw. als Aluminosilicatsäuren darzustellen. Dementsprechend kann „calcium orthosilicate“ als $2CaO.SiO_2$, eine Kombination separater Oxide, oder als Ca_2SiO_4, das Calciumsalz der Kieselsäure H_4SiO_4, dargestellt werden. Dasselbe gilt für andere komplexe Mineraloxide: Sie werden mit einem Präfix vor jedem Oxid bezeichnet (z. B. Ca_3SiO_5 = Tricalcium silicate = $3CaO.SiO_2$). In einigen Industriezweigen wurde eine weitere Vereinfachung eingeführt, um die Formel der Verbindungen kürzer zu gestalten. So wird beispielsweise Portlandzementklinker, $2CaO.SiO_2$ (Calciumorthosilicat oder Dicalciumsilicat) gekürzt zu C_2S, wobei C = CaO und S = SiO_2 ist. Müssen komplexe mineralogische Phasen bezeichnet oder identifiziert werden, empfiehlt es sich, Standardveröffentlichungen der Mineralogie oder Industrie heranzuziehen.

1.3 Naturprodukte und dazugehörige Komponenten

Für Naturprodukte hat die IUPAC eine Reihe von Regeln für die systematische Bezeichnung entwickelt. Zusammengefasst sagen diese aus, dass für Stoffe, die aus einer natürlichen Quelle extrahiert werden, der Name nach Möglichkeit auf dem Familien-, Gattungs- oder Speziesnamen des Organismus basiert, aus dem der Stoff extrahiert wird:

Bei einem hypothetischen Protein *Hypothecalia Examplare* ist die Basis für die Bezeichnungen „hypothecalia“ und/oder „examplare“, z. B. „Horse Examplare“.

Falls möglich, sollte sich in der Bezeichnung die bekannte oder wahrscheinliche Verteilung des Naturprodukts widerspiegeln. Bei Stoffen, die in mehreren verwandten Familien vorkommen, kann als Grundlage für die Bezeichnung eines Stoffes gegebenenfalls auch die Klasse oder Ordnung verwendet werden. Die Bezeichnung von Naturprodukten unbekannter Struktur sollte keine Präfixe, Suffixe und/oder Infixe enthalten, die in der Nomenklatur für organische Stoffe verwendet werden:

„Condensation product of Horse examplare, Valarine added to the N-terminus“

Viele Naturstoffe gehören zu genau definierten Strukturklassen, die jeweils durch einen Satz übergeordneter Strukturen charakterisiert werden können, die eng miteinander verwandt sind, also die jeweils von einer Grundstruktur ableitbar sind. Die Bezeichnung einer solchen geeigneten übergeordneten Basisstruktur kann als Grundlage für die systematische Bezeichnung für diese Naturstoffe dienen:

Zu den genau bekannten übergeordneten Strukturen gehören Alkaloide, Steroide, Terpenoide und Vitamine

Eine übergeordnete Basisstruktur sollte das Grundgerüst widerspiegeln, das den meisten Stoffen in dieser Klasse gemein ist. Naturstoffe oder Derivate werden nach der übergeordneten Struktur und mit ergänzenden Präfixen, Suffixen oder Infixen bezeichnet, die Folgendes angeben:

- Änderungen am Grundgerüst
- Austausch von Grundgerüstatomen
- Änderungen im Hydrierungsstatus, der durch die Bezeichnung der übergeordneten Struktur impliziert wird
- Atome oder Gruppen, die Wasserstoffatome der übergeordneten Struktur ersetzen
- Strukturen, die nicht bereits durch die Bezeichnung der übergeordneten Struktur impliziert werden oder die von der implizierten abweichen

„Thiamin chloride is also known as vitamin B_1“

Ausführlichere Informationen zur systematischen Bezeichnung von Naturprodukten und verwandten Stoffen sind über die IUPAC zu beziehen (siehe Anhang I).

1.4 IUPAC-Name kann nicht abgeleitet werden

Wenn es nicht möglich ist, für bestimmte Stoffe einen IUPAC-Namen abzuleiten, kann, speziell für diese Stoffe, eine andere international anerkannte Nomenklatur verwendet werden, wie z. B.:

- Minerale und Erze; mineralogische Bezeichnungen
- Erdölstoffe
- generische Colour-Index-Bezeichnungen[3]
- Ölzusatzstoffe
- INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients)[4]
- SDA (Soap and Detergent Association)-Namen bei Tensiden[5]
- usw.

2 Andere Bezeichnungen

Es ist sinnvoll, bei der Registrierung gemäß REACH-Verordnung alle relevanten Namen/Bezeichnungen und/oder öffentlichen Identifikatoren in allen Sprachen anzugeben, unter denen ein Stoff in der EU in Verkehr ist oder in Verkehr gebracht werden wird. Dazu gehören beispielsweise Handelsnamen, Synonyme und Abkürzungen.

- http://www.colour-index.com, Colour Index International, Fourth Edition Online
- http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp, INCI, offizielle Website des Personal Care Products Council

- http://www.cleaninginstitute.org/, offizielle Website des American Cleaning Institute (ACI).**3**

EG-Nummer aus EINECS, ELINCS oder NLP (EG-Verzeichnis)

Die EG-Nummer, also die EINECS-, ELINCS- oder NLP-Nummer, ist die offizielle Nummer des jeweiligen Stoffes in der Europäischen Union. Sie ist in den offiziellen Veröffentlichungen von EINECS, ELINCS und NLP sowie der Europäischen Chemikalienagentur zu finden.

Die EG-Nummer besteht aus sieben Ziffern im Format $x_1x_2x_3$-$x_4x_5x_6$-x_7. Die erste Ziffer steht für das Verzeichnis/die Liste, in dem/der der Stoff aufgeführt ist:

Liste	Erste Ziffer der EG-Nummer
EINECS	2 oder 3
ELINCS	4
NLP	5

4 CAS-Bezeichnung und CAS-Nummer

Der zur American Chemical Society (ACS) gehörige Chemical Abstracts Service (CAS) weist jeder Chemikalie, die in die CAS Registry-Datenbank eingetragen wird, eine CAS-Bezeichnung und eine CAS-Nummer zu. Die Bezeichnungen und Nummern werden in fortlaufender Folge Stoffen zugewiesen, die von CAS-Wissenschaftlern als eigenständig identifiziert wurden. Jeder Stoff, der beim Chemical Abstracts Service registriert wurde, erhält eine Bezeichnung entsprechend der CAS-Nomenklatur, die auf Empfehlung des ACS Committee on Nomenclature von der ACS angenommen wird (siehe Verweise in Anhang I).

4.1 CAS-Bezeichnung

Die CAS-Bezeichnung ist die vom Chemical Abstract Service vergebene Bezeichnung; sie unterscheidet sich vom IUPAC-Namen. Die CAS-Nomenklatur basiert auf bestimmten Kriterien, die nicht immer ausreichen, um den Namen für einen Stoff ableiten zu können. Aus diesem Grund empfiehlt es sich im Allgemeinen, sich an den Chemical Abstract Service zu wenden, um dort die korrekte CAS-Bezeichnung zu erhalten.

Die Grundregeln der Nomenklatur lauten, kurz zusammengefasst, wie folgt:

- Ein „Hauptteil“ des Stoffes wird als Kopf („header“) oder „Elter“ („parent“) ausgewählt.
- Substituenten werden nach dem Kopf/Elter aufgeführt, was als „umgekehrte Reihenfolge“ („inverted order“) bezeichnet wird.
- Sind mehrere Substituenten vorhanden, werden diese in alphabetischer Reihenfolge (einschließlich der Präfixe) aufgeführt:

„o-Xylen-3-ol“ ist „Benzene, 1,2-dimethyl, 3-hydroxy“

4.2 CAS-Nummer

CAS-Nummern können beim Chemical Abstract Service abgerufen werden.

Eine CAS-Nummer setzt sich aus mindestens 5 Ziffern zusammen und wird, durch Bindestriche getrennt, in drei Teile unterteilt. Der zweite Teil besteht immer aus 2 Ziffern und der dritte Teil aus 1 Ziffer:

$$N_i \ldots\ldots N_4\, N_3 - N_2\, N_1 - R$$

Für die Prüfung der CAS-Nummer steht eine „Prüfsumme“ zur Verfügung:

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

Die CAS-Nummer muss der Prüfsumme nach korrekt sein.

5 Sonstige Identifizierungscodes

Es können auch andere international anerkannte Identitätscodes angegeben werden. Beispiele dafür sind:

- UN-Nummer
- Colour-Index-Nummer
- Farbstoffnummer

6 Summenformel, Strukturformel und SMILES

6.1 Summenformel

Summenformeln bestehen aus den chemischen Symbolen für die einzelnen Elemente und Ziffern, die die Anzahl der Atome des jeweiligen Elements in einem einzigen Molekül des Stoffes angeben.

Die Summenformel sollte nach Hill (der herkömmlichen Methode) und zusätzlich nach dem CAS-System angegeben werden, sofern sich diese Darstellung von der Formel nach Hill unterscheidet.

Bei der Aufstellung der Formel nach Hill kann wie folgt vorgegangen werden:

1. Identifizieren Sie die Elemente, und listen Sie die chemischen Symbole auf.
2. Ordnen Sie die Elemente in der richtigen Reihenfolge an:

   a. Kohlenstoffhaltige Stoffe:

   Alle einzelnen Elemente werden mit ihrem chemischen Symbol in der folgenden Reihenfolge aufgeführt:

   (1) Kohlenstoff,

   (2) Wasserstoff,

   (3) andere Elementsymbole in alphabetischer Reihenfolge:

   Pentan: C5H12

   Penten: C5H10

   Pentanol: C5H12O

   b. Nicht-kohlenstoffhaltige Stoffe:

Alle einzelnen Elemente werden in alphabetischer Reihenfolge angegeben:

Salzsäure: ClH

3. Geben Sie für jedes Element, dessen Atomanzahl >1 ist, die Anzahl der Atome als tiefergestellte Ziffer nach dem jeweiligen chemischen Symbol an.

4. Fügen Sie am Ende der Summenformel und getrennt durch einen Punkt oder ein Komma Angaben hinzu, die keinen Zusammenhang mit der Hauptstruktur haben:

Natriumbenzoat ist „C7H6O2, sodium salt“.

Kupfersulfatdihydrat ist „CuO4S.2H2O“.

Kann bei einem Stoff die Hill-Methode nicht angewendet werden, sollte die Summenformel auf andere Weise angegeben werden, z. B. als empirische Formel, als einfache Beschreibung der Atome und des Verhältnisses der vorhandenen Atome oder als Formel nach dem Chemical Abstract Service (siehe Kapitel 4 dieser Leitlinien).

6.2 Strukturformel

Strukturformeln werden für die Darstellung der Anordnung der Moleküle innerhalb des Stoffes und deren Beziehung untereinander benötigt. Die Strukturformel sollte die Stellung der Atome, Ionen oder Gruppen und die Art der Bindungen angeben, durch die diese miteinander verbunden sind. Das schließt auch Isomerie, d. h. cis/trans, Chiralität, Enantiomere usw., ein.

Die Strukturformel kann in Form einer Summenformel und/oder in Form eines Strukturdiagramms angegeben werden.

- Strukturformel in der Form einer Summenformel

1. Notieren Sie alle Elemente gruppenweise und in der Reihenfolge ihres Auftretens:

n-Pentan: CH3CH2CH2CH2CH3

2. Jeder Substituent wird in Klammern direkt nach dem Atom aufgeschrieben, an das er gebunden ist:

2-Methylbutan: CH3CH(CH2)CH2CH3

3. Doppel- oder Dreifachbindungen sind zwischen den entsprechenden Elementgruppen anzugeben:

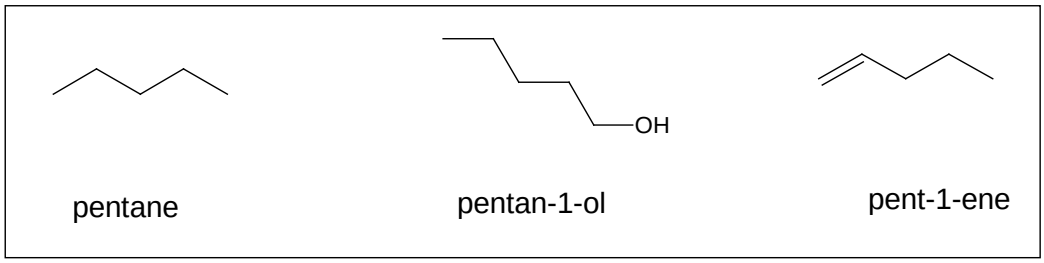
Pent-1-en: CH2=CHCH2CH2CH3

- Strukturformel in der Form eines Strukturdiagramms

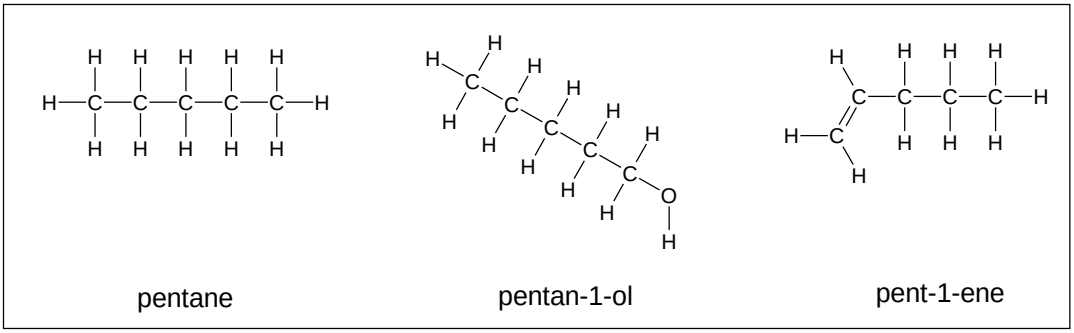
In Strukturdiagrammen werden die Elemente und die Bindungen zwischen den Elementen in 2D- oder 3D-Bildern dargestellt. Dafür gibt es mehrere Methoden:

1. Es werden alle Nicht-Kohlenstoffelemente und die Wasserstoffatome dargestellt,

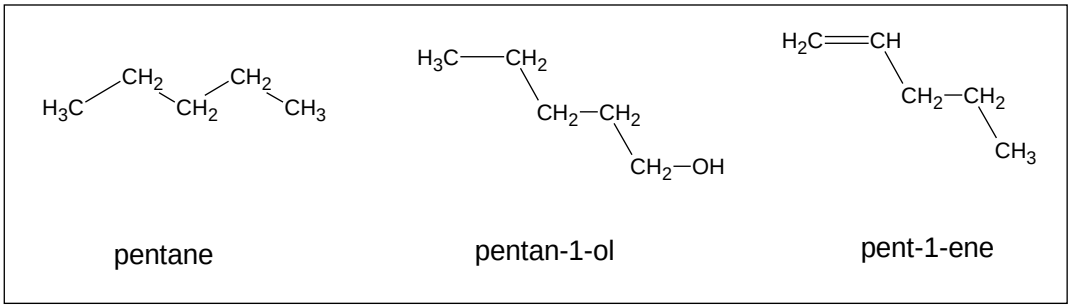
die an Nicht-Kohlenstoffelementen hängen.



2. Es werden alle Elemente namentlich dargestellt:



3. Es werden Kohlenstoff und Wasserstoff als Gruppen (z. B. CH3), alle Nicht-Kohlenstoffelemente und alle Wasserstoffatome dargestellt, die nicht an Kohlenstoff gebunden sind:



6.3 SMILES-Notation

SMILES ist die Abkürzung für „Simplified Molecular Input Line Entry Specification“.[32] Es handelt sich dabei um ein chemisches Notationssystem, bei dem Molekülstrukturen als lineare Zeichenketten dargestellt werden. Bei der standardmäßigen SMILES-Notation ist der Name eines Moleküls gleichbedeutend mit seiner Struktur: Es wird indirekt ein zweidimensionales Bild der Molekülstruktur dargestellt. Da zweidimensionale chemische Strukturen auf unterschiedliche Weise gezeichnet werden können, gibt es für ein- und dasselbe Molekül mehrere korrekte SMILES-Notationen. Grundlage von SMILES ist die Darstellung eines Valenzmodells eines Moleküls. Für Moleküle, die nicht durch ein Valenzmodell dargestellt werden können, ist eine solche Beschreibung daher nicht geeignet.

SMILES-Notationen setzen sich zusammen aus Atomen, die durch Elementsymbole

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

spezifiziert sind, Bindungen, runde Klammern zur Darstellung der Verzweigung und Ziffern zur Darstellung cyclischer Strukturen. Eine SMILES-Notation stellt die Molekülstruktur als Graph mit optionalen Angaben zur Chiralität dar. SMILES-Notationen, die die Struktur nur hinsichtlich der Bindungen und Atome beschreiben, werden als „Generic SMILES“ bezeichnet, während SMILES-Notationen, bei denen isotopische und chirale Spezifikationen geschrieben werden, als „Isomeric SMILES“ bezeichnet werden.

Für die SMILES-Notation gelten, kurz zusammengefasst, die folgenden Grundregeln:

1. Atome werden durch ihr Atomsymbol dargestellt.
2. Mit Ausnahme der Wasserstoffatome wird jedes Atom einzeln angegeben.
   a. Elemente der „organischen Teilmenge“ B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br und I werden ohne eckige Klammern und ohne H hinter dem Elementsymbol geschrieben, sofern die Anzahl der Wasserstoffatome mit der/den niedrigsten Standardvalenz(en) entsprechend den expliziten Bindungen übereinstimmt:

Element in „organischer Teilmenge“	„Niedrigste Standardvalenz(en)“
B	3
C	4
N	3 und 5
O	2
P	3 und 5
S	2, 4 und 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

   b. Elemente in der „organischen Teilmenge“ werden in eckigen Klammern geschrieben, sobald die Anzahl der Wasserstoffatome nicht mit der niedrigsten Standardvalenz übereinstimmt:

      Ammonium-Kation ist NH4+

   c. Elemente, die nicht zur „organischen Teilmenge“ gehören, werden in eckigen Klammern und mit H hinter dem Elementsymbol geschrieben.
3. Aliphatische Atome werden in Großbuchstaben, aromatische Atome in Kleinbuchstaben angegeben:

   Benzol ist c1ccccc1 und Cyclohexan ist C1CCCCC1
4. Wasserstoff wird nur in den folgenden Fällen angegeben:

a. Das Wasserstoffatom ist geladen, z. B. ein Proton ([H+]).

b. Die Wasserstoffatome sind an andere Wasserstoffatome gebunden, z. B. molekulares Wasserstoffatom ([H][H]).

c. Die Wasserstoffatome sind an mehr als ein anderes Atom gebunden, z. B. verbrückende Wasserstoffatome.

d. Das isotopische Wasserstoffatom wird spezifiziert, z. B. Deuterium ([2H]).

e. Das Wasserstoffatom ist an ein chirales Atom gebunden.

5. Die vier grundlegenden Bindungen werden wie folgt dargestellt:

Bindung	SMILES-Notation
Einfachbindung	- (muss nicht dargestellt werden)
Doppelbindung	=
Dreifachbindung	#
Aromatische Bindung	Kleinbuchstaben

6. Substituenten werden in Klammern unmittelbar hinter den Atomen dargestellt, an die sie gebunden sind:

2-Methylbutan ist CC(C)CC

a Substituenten werden stets direkt hinter den entsprechenden Atomen angegeben, d. h., vor ihnen darf kein Symbol für eine Doppel- oder Dreifachbindung stehen:

Pentansäure ist CCCCC(=O)O

b. Substituenten innerhalb von Substituenten sind zulässig:

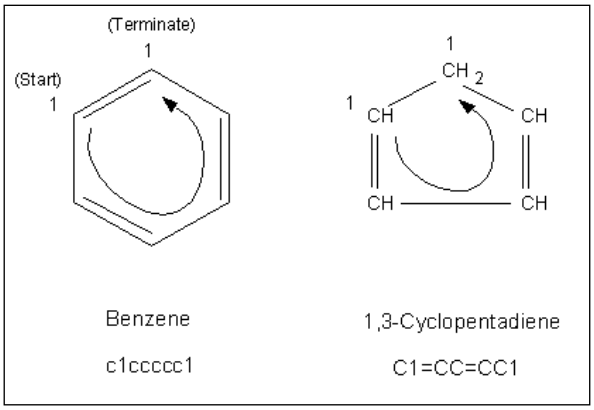
2-(1-Methylethyl)butan ist CC(C(C)C)CC

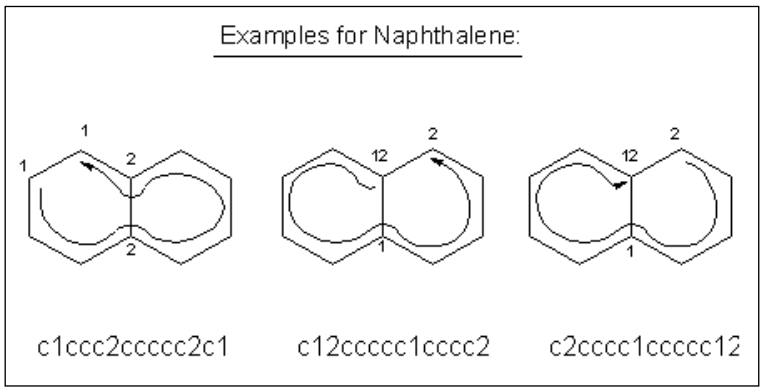
7. Bei cyclischen Strukturen wird mithilfe der Ziffern 1 bis 9 das Anfangs- und das Endatom des Rings angegeben.

a. Anfangs- und Endatom ein- und desselben Rings werden mit derselben Ziffer nummeriert. Das Anfangs- und das Endatom müssen aneinander gebunden sein.

b. Die Ziffern werden unmittelbar hinter den Atomen geschrieben, die die Anfangs- und die Endposition einnehmen.

c. Ein Anfangs- oder ein Endatom kann mit zwei aufeinanderfolgenden Ziffern verknüpft werden.





8. Getrennte Verbindungen sind als individuelle Strukturen oder Ionen, getrennt durch einen Punkt (.) zu kennzeichnen. Benachbarte Atome, die durch einen Punkt voneinander getrennt sind, sind nicht direkt aneinander gebunden.

Aminopropenhydrochlorid ist C=CC(N).HCl

9. Die isomerische Konfiguration wird durch die Schrägstrich-Zeichen „\“ und „/“ angegeben. Diese Zeichen zeigen die relative Richtung zwischen zwei isomerischen Bindungen an. (cis = „/ \“, trans = „/ /“). SMILES verwendet lokale Chiralität, d. h., die Chiralität muss vollständig angegeben werden:

cis-1,2-Dibromethen ist Br/C=C\Br

trans-1,2-Dibromethen ist Br/C=C/Br

10. Enantiomere oder Chiralität werden durch das „@“-Symbol angegeben. Das Symbol „@“ zeigt an, dass die nächsten Nachbarn des chiralen Atoms entgegen dem Uhrzeigersinn aufgeführt sind. Das Symbol „@@“ bedeutet, dass die Atome im Uhrzeigersinn aufgeführt sind. Das chirale Atom und das „@“-Symbol werden in eckige Klammern gesetzt:

2-Chloro-2-hydroxypropionsäure mit

spezifizierter Chiralität ist C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)

11. Isotopische Spezifikationen werden angegeben, indem dem Atomsymbol eine Zahl vorangestellt wird, die der jeweiligen integralen Atommasse entspricht. Eine Atommasse kann immer nur innerhalb eckiger Klammern angegeben werden:

Carbon-13 ist [13C] und Sauerstoff-18 ist [18O]

Für die Ermittlung der SMILES-Notation steht eine Reihe von Hilfsmitteln (SMILES-

Generatoren) zur Verfügung (siehe Anhang I).

7 Angaben zur optischen Aktivität

Die optische Aktivität beschreibt das Vermögen asymmetrischer Stoffe, die Richtung linearen polarisierten Lichtes zu drehen. Solche Stoffe und deren Spiegelbilder werden als Enantiomere bezeichnet und besitzen ein oder mehrere chirale Zentren. Enantiomere unterscheiden sich zwar in der geometrischen Anordnung, zeichnen sich aber durch identische chemische und physikalische Eigenschaften aus. Da die einzelnen Arten von Enantiomeren polarisiertes Licht unterschiedlich beeinflussen, kann die optische Aktivität verwendet werden, um zu ermitteln, welches Enantiomer in einer Probe vorliegt und auch wie rein der Stoff ist. Der Drehwinkel ist eine inhärente Eigenschaft des Moleküls.

Enantiomere haben immer entgegengesetzte Drehungen: Sie polarisieren das Licht im selben Maße, aber in entgegengesetzter Richtung. Die optische Aktivität eines Enantiomerengemischs weist damit auf das Verhältnis zwischen den beiden Enantiomeren hin. Ein 50:50-Gemisch von Enantiomeren hat die optische Aktivität 0.

Die beobachtete Drehung hängt von der Konzentration, der Länge des Probenröhrchens, der Temperatur und der Wellenlänge der Lichtquelle ab.

Die optische Aktivität ist damit der definierende Parameter für die Identifizierung asymmetrischer Stoffe und der einzige Parameter, der es ermöglicht, den Stoff von seinem Spiegelbild zu unterscheiden. Aus diesem Grund sollte, sofern zutreffend, die optische Aktivität angegeben werden.

Die Standardangabe für die optische Aktivität ist der spezifische Drehwinkel. Der spezifische Drehwinkel ist definiert als der beobachtete Drehwinkel des Lichtes bei 5896 Ångström mit einer Schichttiefe von 1 dm und einer Probenkonzentration von 1 g/ml. Der spezifische Drehwinkel ergibt sich aus der Division des beobachteten Drehwinkels durch die Schichttiefe (dm), multipliziert mit der Konzentration (g/ml).

Die optische Aktivität kann mit verschiedenen Methoden gemessen werden. Am häufigsten kommen dabei folgende Methoden zum Einsatz:

- Optische Drehung: Dabei wird die Drehung der Polarisationsebene eines Lichtstrahls auf seinem Weg durch die Probe gemessen.
- Circulardichroismus: Dabei wird die Absorption rechts- und linkspolarisierten Lichtes durch eine Probe gemessen.

Wenn der Stoff das Licht nach rechts (im Uhrzeigersinn) dreht, wird dies als rechtsdrehend (dextrorotatory) bezeichnet und durch ein Pluszeichen (+) angegeben. Dreht der Stoff das Licht nach links (entgegen dem Uhrzeigersinn), wird dies als linksdrehend (laevorotatory) bezeichnet und durch ein Minuszeichen (−) angegeben.

8 Molekulargewicht oder Molekulargewichtsbereich

Das Molekulargewicht ist das Gewicht eines Moleküls eines Stoffes, ausgedrückt in atomaren Masseeinheiten (amu) oder als molare Masse (g/mol). Das Molekulargewicht kann aus der Summenformel des Stoffes berechnet werden: Es handelt sich dabei um die Summe der Atomgewichte der Atome, die das Molekül bilden. Für bestimmte Moleküle, wie beispielsweise bestimmte Proteine oder nicht definierte Reaktionsgemische, bei denen die Ermittlung eines einzelnen Molekulargewichts nicht möglich ist, kann ein Molekulargewichtsbereich angegeben werden.

Das Molekulargewicht von Stoffen kann auf unterschiedliche Weise ermittelt werden:

- Für die Ermittlung der Molekulargewichte von gasförmigen Stoffen kann das Avogadrosche Gesetz verwendet werden, nach welchem gleiche Volumina beliebiger Gase bei gleichem Druck und gleicher Temperatur eine spezifische Anzahl von Molekülen enthalten.

$PV = nRT = NkT$

n = Anzahl Mole

R = universelle Gaskonstante = 8,3145 J/mol K

N = Anzahl Moleküle

k = Boltzmann-Konstante = 1,38066 × 10−23 J/K = 8,617385 × 10−5 eV/K

k = R/NA

NA = Avogadro-Konstante = 6,0221 × 1023 mol

- Bei Flüssigkeiten und festen Stoffen kann das Molekulargewicht ermittelt werden, indem deren Wirkung auf den Schmelzpunkt, den Siedepunkt, den Dampfdruck oder den osmotischen Druck eines Lösungsmittels bestimmt wird.
- Massenspektrometrie – eine sehr genaue Messmethode
- Bei Molekülen komplexer Stoffe mit hohen Molekulargewichten, wie z. B. Proteinen oder Viren, kann das Molekulargewicht beispielsweise durch Messung der Sedimentationsgeschwindigkeit in einer Ultrazentrifuge oder durch Lichtstreuungsfotometrie ermittelt werden.
- Für die Berechnung des Molekulargewichts auf der Grundlage eines Strukturdiagramms oder einer Summenformel des Stoffes stehen verschiedene Hilfsmittel zur Verfügung (siehe Anhang I).

9 Stoffzusammensetzung

Für jeden Stoff ist die Stoffzusammensetzung als Kombination aus den Hauptbestandteilen, den Zusatzstoffen und den Verunreinigungen gemäß den in Kapitel 4 dieser Leitlinien beschriebenen Regeln und Kriterien zu melden.

Jeder Bestandteil, jeder Zusatzstoff oder jede Verunreinigung muss ordnungsgemäß durch folgende Angaben identifiziert werden:

- Bezeichnung (IUPAC-Name oder andere international übliche Bezeichnung)
- CAS-Nummer (sofern vorhanden)
- EG-Nummer (sofern vorhanden)

Für jeden Bestandteil, jeden Zusatzstoff oder jede Verunreinigung sollte der Prozentsatz (vorzugsweise nach Masse, sonst nach Volumen), wo möglich, als der Prozentbereich im handelsüblichen Stoff angegeben werden.

Für den/die Bestandteil(e) sollte der typische Reinheitsgrad mit dem oberen und dem unteren Grenzwert für typische handelsübliche Chargen angegeben werden; für Zusatzstoffe und Verunreinigungen sollte(n) der typische Reinheitsgrad oder der obere und der untere Grenzwert gemeldet werden. Normalerweise sollten die angegebenen Werte in der Summe 100 % ergeben.

10 Spektraldaten

Spektraldaten sind erforderlich, um die Struktur zu bestätigen, die für einen einkomponentigen Stoff angegeben wurde, oder um zu bestätigen, dass ein Reaktionsgemisch keine Zubereitung ist. Für die Erzeugung von Spektren können verschiedene Methoden verwendet werden (UV/Vis, IR, NMR oder Massenspektrum). Nicht alle Methoden sind für alle Arten von Stoffen gleichermaßen geeignet. Wo möglich, enthält dieses Dokument Hinweise auf geeignete Spektren für die verschiedenen Stoffarten (ECB, 2004; ECB, 2005).

Für etliche der eingeführten Methoden sollten im Spektrum selbst oder in Anhängen die folgenden Angaben gemacht werden:

UV/Vis-Spektrum

- Identität des Stoffes
- Lösungsmittel und Konzentration
- Bereich
- Position (und Epsilon-Werte) der dominanten Peaks
- Säurewirkung
- alkalische Wirkung

IR-Spektrum

- Identität des Stoffes
- Medium
- Bereich
- Ergebnisse (mit Angabe der dominanten Peaks, die für die Identifizierung, z. B. die Interpretation des Fingerprint-Bereichs, wichtig sind)

NMR-Spektrum

- Identität des Stoffes
- Atomkern und Frequenz
- Lösungsmittel
- gegebenenfalls interne oder externe Referenz
- Ergebnisse (mit Angabe der Signale, die für die Stoffidentifizierung wichtig sind, und der Signale, die mit dem Lösungsmittel und den Verunreinigungen korrespondieren)
- Bei 1H-NMR-Spektren sollte die Integrationskurve zur Verfügung gestellt werden.
- Die Intensität schwacher NMR-Peaks sollte vertikal erhöht und komplexe Muster sollten erweitert werden.
-

Massenspektrum

- Identität des Stoffes
- Beschleunigungsspannung
- Ladeverfahren (direktes Einbringen, über GC usw.)
- Ionisationsmethode (Elektronenstoß, chemische Ionisation, Felddesorption usw.)
- das Molekülion (M)

- signifikante Fragmente für die Identifizierung des Stoffes
- M/z-Werte oder Zuordnungen der Peaks, die für die Identifizierung der Struktur wichtig sind
- Komplexe Muster sollten erweitert werden.

Andere international anerkannte Methoden können ebenfalls verwendet werden, sofern die Spektraldaten die Identifizierung des Stoffes, z. B. die interne Struktur, bestätigen. Beispiele dafür sind die Röntgenbeugung (XRD) zur Identifizierung der Bestandteile komplexer Mineraloxide und die Röntgenfluoreszenz (XRF) zur Analyse ihrer chemischen Zusammensetzung.

Im Sinne eines klaren Verständnisses und/oder der Interpretation der Spektren ist Folgendes erforderlich:

- Vermerken Sie signifikante Wellenlängen oder andere wichtige Daten.
- Stellen Sie zusätzliche Angaben bereit, wie z. B. das Spektrum der Ausgangsstoffe.
- Geben Sie bei einigen Methoden, wie oben erwähnt, das Lösungsmittel und/oder andere wichtige Details an.
- Stellen Sie statt der Originale gut leserliche Kopien mit ordnungsgemäß bezeichneten Skalen bereit.
- Machen Sie Angaben zu den verwendeten Stoffkonzentrationen.
- Stellen Sie sicher, dass die intensivsten stoffbezogenen Peaks in der Nähe der höchsten Skalenmarkierung liegen.

11 Hochleistungsflüssigkeitschromatografie, Gaschromatografie

Sofern der Art des Stoffes angemessen, muss zur Bestätigung seiner Zusammensetzung ein Chromatogramm bereitgestellt werden. Ein geeignetes Chromatogramm bestätigt beispielsweise das Vorhandensein von Verunreinigungen, Zusatzstoffen und der Bestandteile eines Reaktionsgemischs. Die beiden besten eingeführten Verfahren zur Trennung und Identifizierung von Gemischen sind die Gaschromatografie (GC) und die Hochleistungsflüssigkeitschromatografie (High Performance Liquid Chromatography, HPLC). Diese beiden Verfahren basieren auf der Interaktion einer mobilen Phase mit einer stationären Phase, was die Trennung der Bestandteile eines Gemischs bewirkt.

Für GC/HPLC-Chromatogramme sollten auf dem Chromatogramm selbst oder in Anhängen (ECB, 2004; ECB, 2005) die folgenden Angaben gemacht werden:

HPLC

- Identität des Stoffes
- Säuleneigenschaften, z. B. Durchmesser, Füllung, Länge
- Temperatur, auch Temperaturbereich, sofern verwendet
- Zusammensetzung der mobilen Phase, auch Bereich, sofern verwendet
- Konzentrationsbereich des Stoffes
- Visualisierungsmethode, z. B. UV/Vis
- Ergebnisse (mit Angabe der dominanten Peaks, die für die Stoffidentifizierung wichtig sind)

GC

- Identität des Stoffes
- Säuleneigenschaften, z. B. Durchmesser, Füllung, Länge

- Temperatur, auch Temperaturbereich, sofern verwendet
- Injektionstemperatur
- Trägergas und Druck des Trägergases
- Konzentrationsbereich des Stoffes
- Visualisierungsmethode, z. B. Massenspektrum
- Peak-Identifizierung
- Ergebnisse (mit Angabe der dominanten Peaks, die für die Stoffidentifizierung wichtig sind)

12 Beschreibung der analytischen Methoden

Anhang VI der REACH-Verordnung verlangt, dass der Registrant die Analysemethoden beschreibt und/oder die bibliografischen Verweise für die Methoden bereitstellt, die er für die Identifizierung des Stoffes und gegebenenfalls für die Identifizierung von Verunreinigungen und Zusatzstoffen verwendet hat. Diese Angaben müssen die Reproduktion der Methoden ermöglichen.

Anhang III - Stoffidentifizierung und gemeinsame Dateneinreichung

Im Kernteil dieser Leitlinien sind die allgemeinen Grundsätze dargelegt, die potenzielle Registranten bei der Identifizierung der zu registrierenden, für ihre Rechtsperson spezifischen Stoffe einhalten müssen. Dieser Anhang enthält praktische Hinweise für potenzielle Registranten, wie die Grundsätze für die Stoffidentifizierung bei der gemeinsamen Festlegung der Identität und des Umfangs der Stoffidentität im Hinblick auf die gemeinsame Registrierung gemäß dem in der REACH-Verordnung vorgesehenen Prinzip „Ein Stoff - eine Registrierung“ (OSOR-Prinzip) anzuwenden sind. Weitere Informationen zu den gemeinsamen Registrierungspflichten und zu dem Prozess der gemeinsamen Datennutzung im Allgemeinen können unter folgender Internetadresse abgerufen werden: http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach. Implizit gilt, dass die gleichen Grundsätze für die Stoffidentifizierung, die im Kernteil der Leitlinien dargelegt sind, je nach Stoffart für die einheitliche Stoffidentität bei gemeinsamer Registrierung anwendbar sind.

In den ersten Sätzen von Artikel 11 Absatz 1 und Artikel 19 Absatz 1 der REACH-Verordnung wird in der Tat die „Gemeinsame Einreichung von Daten durch mehrere Registranten“ gefordert. Konkret heißt es dort: „Soll ein Stoff von einem oder mehreren Herstellern in der Gemeinschaft hergestellt und/oder von einem oder mehreren Importeuren in die Gemeinschaft eingeführt werden“, werden die Informationen zu den Eigenschaften des Stoffs und seine Einstufung „zunächst von einem Registranten mit dem Einverständnis des/der anderen beteiligten Registranten eingereicht (nachstehend „federführender Registrant“ genannt)“.
In der Durchführungsverordnung (EU) 2016/9 der Kommission über die gemeinsame Vorlage und Nutzung von Daten wird bestätigt und bekräftigt, dass mehrere Registranten derselben Stoffidentität verpflichtet sind, bestimmte Angaben gemeinsam einzureichen. Mit der gemeinsamen Einreichung von Angaben ist konkret die Notwendigkeit verbunden, dass die beteiligten Parteien die Grenzen und den Umfang der Stoffidentität vereinbaren. Hieraus resultiert das so genannte Stoffidentitätsprofil (SIP). Im SIP sollen die Grenzen des Stoffs beschrieben werden, die die Registranten im Hinblick auf die gemeinsame Einreichung der zugehörigen Daten vereinbart haben. Dies betrifft auch die Registranten, die unter Umständen von bestimmten gemeinsam eingereichten Daten ausgeschert sind.

Die Vereinbarung über den Umfang der Stoffidentität im Hinblick auf die Registrierung ist somit eine Voraussetzung für die gemeinsame Einreichung. Bei der Umsetzung kommt es entscheidend auf die Transparenz des Umfangs dieser gemeinsamen Stoffidentität und der zugehörigen Daten an. Dementsprechend muss der Stoffumfang bzw. das SIP im Dossier des federführenden Registranten, das dieser im Namen aller übrigen Registranten vorlegt, klar angegeben sein, während die Angaben zur Zusammensetzung jeweils von allen Registranten individuell gemeldet werden.

In der nachstehenden Abbildung 1 ist an einem einfachen anschaulichen Beispiel schematisch dargestellt, wie einzelne Registranten das Stoffidentitätsprofil für Chemikalien erstellen können, die in der EU hergestellt werden bzw. in die EU eingeführt werden. In dieser Abbildung ist die Identifizierung des zu registrierenden Stoffs, die Zusammenfassung der verschiedenen Zusammensetzungen, die Erarbeitung von Daten und schließlich die Einreichung im IUCLID-Format in einem Registrierungsdossier verdeutlicht. Das Beispiel bezieht sich auf einen einfachen einkomponentigen Phase-in-Stoff mit genau definierter Zusammensetzung. Zur Festlegung des SIP kann es bei komplexeren Stoffen erforderlich sein, die Schritte 3 und 5 der Abbildung zu

wiederholen.

Während der Diskussionen der potenziellen Registranten kann die SIP-Dokumentation z. B. als Word-Dokument oder als Excel-Arbeitsblatt angelegt werden, um die relevanten vereinbarten Informationen zu erfassen und allen Beteiligten sowie potenziellen Beteiligten zugänglich zu machen. Einige Industrieverbände haben Vorlagen für die Dokumentation des SIP erarbeitet, die von zahlreichen Registranten verwendet wurden (z. B. Vorlage des CEFIC[33]). Andere haben lediglich die relevanten Informationen in einem Word-Dokument oder auf der Webseite eines Konsortiums zusammengestellt, das für den Zweck der Zusammenarbeit für die Registrierung des jeweiligen Stoffes gebildet wurde.

2. Festlegung der Identität und des Umfangs eines Stoffs, zu dem Daten zur Registrierung eingereicht werden sollen

In der Abbildung 1 (Schritte 1 bis 4) sind die Schritte, die mehrere potenzielle Registranten bei der Festlegung der Stoffidentität, d. h. der von ihnen gemeinsam eingereichten Daten, ausführen können, am Beispiel einfacher Stoffe mit genau definierter Zusammensetzung schematisch dargestellt.

Jeder einzelne potenzielle Registrant bestimmt seine Pflichten für die von ihm hergestellten/eingeführten Stoffe auf der Grundlage der Begriffsbestimmung für „Stoff“ in Artikel 3 Absatz 1 und wendet dabei die im Kernteil dieser Leitlinien beschriebenen Grundsätze für die Stoffidentifizierung an (Schritte 1 und 2 der Abbildung 1). Jeder potenzielle Registrant kann anschließend prüfen, ob andere potenzielle Registranten zu denselben Angaben für „Bezeichnung und andere Identifikatoren“ gelangt sind (Schritt 3). Nun können die potenziellen Registranten entsprechend den im Kernteil dieser Leitlinien beschriebenen Grundsätzen gemeinsam vorgehen, um die Grenzen der Stoffidentität festzulegen, zu der die gemeinsam einzureichenden Daten gehören, d. h. das Stoffidentitätsprofil (Schritt 4).

In diesem SIP wird der Umfang des Stoffs mithilfe von Angaben zu seiner Zusammensetzung (einschließlich etwaiger sonstiger Parameter unter anderem Morphologie z. B. physikalische Form, Gestalt), seiner Bezeichnung und anderen Identifikatoren, für die die Einstufung und die gemeinsam eingereichten Daten über die Gefahren relevant sein werden. Bei der Festlegung des SIP sollte kein übermäßig konservativer Ansatz zugrunde gelegt werden, um zu vermeiden, dass Wettbewerber von der gemeinsamen Einreichung ausgeschlossen sind.

Dieses SIP bildet die inhärente Verbindung zwischen der Stoffidentität und den gemeinsam einzureichenden Daten über die Gefahren. Bei frühzeitiger Festlegung kann das SIP die Phase der Erarbeitung/Sammlung von Informationen im Rahmen des Prozesses zur Erfüllung der Registrierungspflichten (siehe „Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung“; Schritt 5 der nachstehenden Abbildung 1) erleichtern, damit sichergestellt wird, dass die erarbeiteten oder zusammengestellten Daten die Stoffidentität vollständig abdecken.

Aus den Kernkapiteln 4.2.3 und 4.3 der Leitlinien geht hervor, dass potenzielle

[33] Das SIP wurde ursprünglich in den Leitlinein für federführende Registranten des Verbands Cefic „Guidance for Lead Registrants“ beschrieben, die unter folgender Internetadresse abgerufen werden können: http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/. Beispiele für SIP, die von Registranten unter Verwendung dieser Vorlage erstellt wurden, können z. B. auf der Website des REACHCENTRUM unter folgender Internetadresse abgerufen werden: http://www.reachcentrum.eu/consortium.html.

Registranten bei komplexeren Stoffen in der Regel in den Schritten 1 bis 3 zusätzliche Parameter und/oder Deskriptoren für die Angaben zur Zusammensetzung (z. B. Beschreibung der Quelle/des Prozesses) heranziehen und dass die vereinbarten Daten anschließend in das SIP aufgenommen werden können (Schritt 4). In einigen Fällen wird die Verbindung zwischen der Stoffidentität und den gemeinsam einzureichenden Daten über die Gefahren erst dann vollständig klar, wenn ein Teil oder alle verfügbaren Gefahrendaten zusammengetragen worden sind. Je nach der Komplexität der Stoffidentität und den in Schritt 5 zusammengestellten Daten kann es gegebenenfalls notwendig werden, die Schritte 3 bis 5 zu wiederholen, z. B. wenn bestimmte Zusammensetzungen Bestandteile enthalten, die die Einstufung und Kennzeichnung und/oder die PBT-Beurteilung erforderlich machen. Das SIP kann mehrere Zusammensetzungsprofile beinhalten, um die Grenzen der Stoffidentität angemessen zu beschreiben.

Im SIP müssen allgemeine Angaben enthalten sein, die die Festlegung der Grenzen der Stoffidentität bzw. der gemeinsam eingereichten Daten ermöglichen:

- Bezeichnung des Stoffs
- andere Identifikatoren (z. B. CAS, EK, Molekular- und Strukturangaben, ggf. Beschreibung), die von allen Registranten der betreffenden Stoffidentität abgedeckt werden;
- Angaben zur Zusammensetzung:
    - Identität der Bestandteile, die für die Stoffidentifizierung relevant sind, und die zugehörigen Konzentrationsbereiche,
    - allgemeine Liste der Identitäten von Stabilisatoren, die für die Stoffidentifizierung relevant sind (und ggf. die zugehörigen Konzentrationsbereiche),
    - allgemeine Liste der zusätzlichen Parameter, die ggf. für die Stoffart relevant sein können (z. B. Quellen-/Prozessdeskriptoren für einige UVCB-Stoffe)

Wichtig ist, dass die Parameter zur Bestimmung der Grenzen der Stoffidentität im Hinblick auf die gemeinsame Einreichung von allen beteiligten Registranten vereinbart werden und im SIP klar dokumentiert sind. Auf Ersuchen eines neuen potenziellen Registranten kann es daher erforderlich werden, das SIP zu ändern oder zu erweitern, wenn die Registranten vereinbaren, dass ein Teil oder alle gemeinsam eingereichten Daten auch für den von diesem Registranten hergestellten oder eingeführten Stoff relevant ist/sind.

Die Festlegung des SIP darf nicht zum Austausch vertraulicher Geschäftsinformationen zwischen Registranten oder die Offenlegung solcher Informationen gegenüber Dritten, die nicht an der gemeinsamen Einreichung beteiligt sind, führen. Wenn es erforderlich ist, möglicherweise vertrauliche Geschäftsinformationen offenzulegen, um eine klare Abgrenzung des SIP vornehmen zu können, können die Registranten die Einschaltung eines Treuhänders in Erwägung ziehen (siehe Leitlinien für die gemeinsame Nutzung von Daten).

3. Praktische Hinweise für die Dokumentation des Stoffidentitätsprofils

Die allgemeinen Grundsätze für die Identifizierung von Stoffen mit genau definierter Zusammensetzung und von UVCB-Stoffen sind im Kernteil der Leitlinien dargelegt. Im Folgenden werden praktische Hinweise für die gemeinsame Umsetzung dieser Grundsätze gegeben. Im Kernteil der Leitlinien wird darauf hingewiesen, dass Ausnahmen von diesen allgemeinen Grundsätzen möglich sind. Voraussetzung für solche Ausnahmen ist es, dass die Registranten in der Lage sind, die inhärente Verbindung zwischen der Stoffidentität und den gemeinsamen eingereichten Gefahrendaten zu belegen.

3.1 Stoffe mit genau definierter Zusammensetzung

Bei einem Stoff mit genau definierter Zusammensetzung ist der Grundsatz „>=80 % (w/w)“ für die Identifizierung einkomponentiger Stoffe und der Grundsatz „<80 %, >= 10 %“ für die Identifizierung mehrkomponentiger Stoffe bei der Bestimmung des Hauptbestandteils bzw. der Hauptbestandteile und ihrer Konzentrationsbereiche und Verunreinigungen anzuwenden. Dies gilt für jeden einzelnen Registranten und für alle gemeinsamen Registranten zusammen bei der Festlegung des SIP. Insbesondere die im SIP vereinbarten Verunreinigungsprofile müssen gemeldet werden. Wenn das SIP bestimmte Verunreinigungen beinhaltet, die sich auf die Einstufung und Kennzeichnung und/oder die PBT-Beurteilung auswirken, müssen die Registranten, für die diese Verunreinigungen gelten, dies in der Phase der Datensammlung (Schritt 5) berücksichtigen. Dabei können die entsprechenden Angaben nach Anhang VII-XI gemeinsam oder gemäß Artikel 11 Absatz 3 der REACH-Verordnung (den so genannten Opt-out-Möglichkeiten) gesondert eingereicht werden. Bei den zu meldenden Konzentrationswerten sollte der Konzentrationsbereich für die gesamte gemeinsame Einreichung berücksichtigt werden.

Bei Stoffen, zu denen zusätzliche Parameter angegeben werden müssen, um eine eindeutige Stoffidentifizierung zu ermöglichen, müsste jeder Registrant die in Kapitel 4.2.3 des Kernteils dieser Leitlinien dargelegten Grundsätze anwenden. Hierbei müsste berücksichtigt werden, ob die Variabilität dieser Parameter ggf. eine Anpassung der Einstufung oder der gemeinsam eingereichten Gefahrendaten nach sich zieht. Zum Zwecke der Festlegung des SIP im Hinblick auf eine gemeinsame Einreichung können ähnliche Erwägungen in Betracht gezogen werden. Es kann z. B. erforderlich sein, diejenigen Parameter (z. B. physikalische Form und/oder morphologische Parameter wie Porosität, Teilchengröße, Teilchenform) in das Stoffidentitätsprofil aufzunehmen, die die für die Bestimmung des Gefahrenprofils (z. B. Löslichkeit, Reaktivität, Inhalationstoxität) wichtigen Eigenschaften beeinflussen können. In diesem Fall müssen die vom SIP abgedeckten allgemeinen Bereiche dieser Parameter transparent angegeben werden (z. B. Bereiche der Teilchengröße, die für alle Registranten gelten; Liste ihrer Form/en und Liste zur Oberflächenchemie). Auf diese Weise wird sichergestellt, dass die gemeinsam eingereichten Gefahrendaten zum SIP umfassend sind.

Auch Unterschiede in der kristallinen Phase von anorganischen Chemikalien können zum Anlass genommen werden, um verschiedene speziell diese Phasen (z. B. Quarz, Cristobalit, amorphe Kieselsäure) betreffende Gefahrenprofile in Erwägung zu ziehen. Unter Berücksichtigung der möglichen Unterschiede der Eigenschaften der verschiedenen Phasen ist es Sache der potenziellen Registranten dieser Stoffe, die Einreichung einer gemeinsamen Registrierung, die alle Phasen abdeckt, einschließlich der für die verschiedenen Phasen spezifischen Gefahrendaten oder die Einreichung verschiedener gemeinsamer Registrierungen für verschiedene Phasen (d. h. verschiedene Stoffidentitäten) in Betracht zu ziehen. In jedem Fall müssten die abgedeckten Phasen im SIP aufgeführt werden, und die relevanten Daten nach Anhang VII-XI müssten alle von der Registrierung abgedeckten Phasen berücksichtigen, damit sichergestellt ist, dass die Daten den gesamten Umfang des SIP abdecken.

Festzuhalten ist, dass die Zusammensetzungen unterschiedliche Verunreinigungs- und/oder Gefahrenprofile haben können und dass diese Unterschiede nicht zwangsläufig bedeuten, dass diese Zusammensetzungen nicht in derselben Registrierung enthalten sein können.

3.2 UVCB-Stoffe

Bei UVCB-Stoffen kann die Identifizierung problematischer sein; aus diesem Grund ist eine transparente Dokumentation für die Vereinbarung über die Stoffidentität im Hinblick auf die gemeinsame Registrierung äußerst hilfreich. Jeder potenzielle Registrant müsste die Anleitungen im Kernteil dieser Leitlinien individuell anwenden und sie anschließend auch mit allen zusammen anwenden. Hinweis: Die Aggregation von Konzentrationsbereichen im SIP könnte dazu führen, dass ein Profil mit äußerst großen Konzentrationsbereichen entsteht und dass möglicherweise ein Punkt erreicht wird, ab dem nicht mehr von einem Stoff die Rede sein kann.

Gemäß den Darlegungen im Kernteil dieser Leitlinien sind Quelle und Prozess, die zur Herstellung verwendet werden, die Grundlage für die Identifizierung einiger UVCB-Stoffe und nicht direkt die Identitäten und Konzentrationsbereiche ihrer Bestandteile. In diesen Fällen dienen andere Deskriptoren als Ersatzwerte für die Identitäten der Bestandteile und ihre jeweiligen Konzentrationsbereiche. Potenzielle Registranten können das Herstellungsverfahren hinsichtlich Quelle und Prozess so weit beschreiben, wie es für die Identifizierung des Stoffs erforderlich ist. Die Beschreibung kann zusätzliche Parameter/Merkmale beinhalten, die die Registranten für ihre Stoffidentität als relevant erachten (siehe Beispiel in **Tabelle 5** des Kernteils der Leitlinien). Für die Zwecke der gemeinsamen Registrierung werden die Beschreibungen nur so weit gemeinsam genutzt, wie dies für die Vereinbarung über den Umfang der Identität des UVCB-Stoffs zur Registrierung erforderlich ist. Potenzielle Registranten können die im Kernteil der Leitlinien dargelegten Grundsätze einzeln und anschließend gemeinsam anwenden. Das SIP dient dann zur allgemeinen Berichterstattung über die Quell- und Prozessparameter und deckt insofern die Zusammensetzungen der einzelnen Registranten in vollem Umfang ab. Dies ist in **Abbildung 2** schematisch dargestellt.

Bei Stoffen, die auf der Grundlage von Quelle und Prozess identifiziert werden, dürften gemäß den Darlegungen im Kernteil der Leitlinien signifikante Veränderungen der Quelle oder des Prozesses vermutlich eine andere Stoffidentität zur Folge haben, die gesondert registriert werden sollte. Abweichungen von diesem Grundsatz würden bedeuten, dass die Registranten nachweisen können, dass die einzelnen Prozess-/Quellkombinationen Zusammensetzungen ergeben, die unter dieselbe gemeinsame Registrierung fallen können. Geringfügige Änderungen der Quellmaterialien und des Prozesses bzw. der Prozessbedingungen können im SIP berücksichtigt werden. Registranten sollten sich darauf einigen, dass die einzelnen Prozess-/Quellkombinationen Zusammensetzungen ergeben, die so weit ähnlich sind, dass es noch sinnvoll ist, sie zu einer Stoffidentität zusammenzufassen; zudem sollten sie sicherstellen, dass die Gefahrendaten dem gesamten Variationsbereich des SIP entsprechen. Konkret bedeutet dies, dass die Registranten in der Lage sein müssen, den Nachweis dafür zu erbringen, dass der gemeinsam eingereichte Gefahrendatensatz für alle diese Zusammensetzungen relevant ist oder ggf. anhand von Angaben angepasst werden, die gemäß Artikel 11 Absatz 3 der REACH-Verordnung (Opt out-Möglichkeit) für spezielle Zusammensetzungen gesondert eingereicht werden.

Zum Nachweis der Relevanz des Datensatzes für die einzelnen Prozess-/Quellkombinationen müssen diese Zusammensetzungen im SIP transparent dokumentiert werden und Einschluss-/Ausschlusskriterien aufgeführt werden, die bei aktuellen und künftigen gemeinsamen Registranten zur Anwendung kommen.

Bei anderen Arten von UVCB-Stoffen (siehe Kapitel 4.3.2 des Kernteils der Leitlinien) können die potenziellen Registranten ggf. eine Kombination von Deskriptoren für die Zusammensetzung und von zusätzlichen Deskriptoren heranziehen. Bei einigen oleochemischen Erzeugnissen beispielsweise variiert die Zusammensetzung aufgrund der

Variabilität der Verteilung der Alkylkettenlänge der Bestandteile, und die Verteilung der Alkylkettenlänge kann als zusätzlicher Deskriptor bei der Identifizierung verwendet werden. Das SIEF müsste den von ihm gewählten Ansatz in seinem SIP transparent dokumentieren.

3.3 Stoffidentitätsprofil

Es liegt in der Verantwortung aller Registranten, die gemeinsam Angaben einreichen, die für ihre Stoffidentifizierung erforderlichen Parameter zu vereinbaren und sie in ihrem entsprechenden SIP transparent zu dokumentieren. Abweichungen oder Ausnahmen von den üblichen Grundsätzen für die Stoffidentität, die gemeinsam vereinbart wurden, müssten transparent dokumentiert werden. Da die Einschluss-/Ausschlusskriterien im SIP dokumentiert sind, müsste das SIEF sicherstellen, dass die Kriterien transparent angewandt werden und dass die zusammengetragenen/erarbeiteten relevanten Daten nach Anhang VII-XI nachweislich das vereinbarte Zusammensetzungsprofil bzw. alle vereinbarten Zusammensetzungsprofile abdecken.

Wenn einzelne potenzielle Registranten auf der Grundlage von Artikel 3 Absatz 1 Stabilisatoren in ihr Identitätsprofil aufnehmen, sind die zugehörigen Identitäten und Konzentrationsbereiche zu vereinbaren und im SIP transparent zu erfassen.

In der Phase der Datensammlung ist die Relevanz des Testmaterials bzw. der Testmaterialien zu berücksichtigen, die für die Erarbeitung/Sammlung von Daten im Hinblick auf die Erfüllung der Informationsanforderungen nach Anhang VII-XI verwendet werden. Die Gründe für Schlussfolgerungen zu ihrer Repräsentativität für die vom SIP abgedeckten Zusammensetzungen müssten dokumentiert und in das technische Dossier aufgenommen werden. Dies wäre insbesondere wichtig für komplexe Stoffidentitäten, die ein breites Spektrum von Zusammensetzungsprofilen abdecken.

Während der Datensammlung können die potenziellen Registranten feststellen, dass ihr SIP zu breit angelegt ist und für den Zweck der gemeinsamen Einreichung von Informationen über die Gefahren, die repräsentativ für die betreffende Stoffidentität sind, nicht geeignet ist. In diesem Fall können die potenziellen Registranten eine Aufteilung des SIEF beschließen, um zwei oder mehr Stoffe getrennt zu bearbeiten.[34] Zu jedem Stoff würde es dann ein eigenes SIP und eine gesonderte gemeinsame Einreichung von Gefahreninformationen geben, die speziell für diese Stoffidentität repräsentativ sein müssen. Die Gründe, weshalb bestimmte Gefahreninformationen für bestimmte Parameter nicht repräsentativ sind, müssten dann im SIP für jede gesonderte Registrierung transparent dokumentiert werden. Die betreffenden potenziellen Registranten können zu diesem Zeitpunkt auch feststellen, dass die Zusammensetzungsprofile auf der Grundlage von Bestandteilen und/oder Verunreinigungen, die sich auf die Einstufung und Kennzeichnung, die PBT-Beurteilung usw. auswirken, weiter verfeinert werden müssten.

Wenn sich potenzielle Registranten anderen potenziellen Registranten, die bereits ein SIP vereinbart haben, deren Registrierung jedoch noch nicht eingereicht wurde, anschließen möchten, müssten sie prüfen, ob ihre Stoffidentitätsinformationen in die Grenzen des SIP fallen. Wenn dies nicht der Fall ist, müssten sie mit den potenziellen Registranten erörtern, ob es erforderlich ist, den Umfang des Profils zu erweitern, um das neue Mitglied aufzunehmen, und mit den potenziellen Registranten eine solche Erweiterung

[34] Überlegungen zur Rolle des EINECS bei der Festlegung der Stoffidentität gemäß der REACH-Verordnung können dem CARACAL-Papier entnommen werden, das in der 4. Sitzung der für die REACH-Verordnung und die CLP-Verordnung zuständigen Behörden vereinbart wurde: CA/74/2009 rev.2 „Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)“.

vereinbaren oder sie müssten sich dahingehend abstimmen, dass diese Informationen vom Umfang des SIP nicht abgedeckt sind.
Das SIP müsste entsprechend angepasst werden, wenn der von dem potenziellen Registranten zu registrierende Stoff spezifische Stoffidentitätsparameter aufweist, die die Repräsentativität der gemeinsam eingereichten Gefahreninformationen verändern kann und deshalb eine besondere Begründung angegeben werden müsste (z. B. eine spezielle Verunreinigung, ein anderes Verhältnis der Zusammensetzung, eine andere Phase, eine andere Teilchengröße). Aus Gründen der Transparenz ist dieser Parameter im SIP aufzuführen.
In einzelnen Fällen können die potenziellen und bestehenden Registranten vereinbaren, dass die gemeinsam eingereichten Gefahrendaten für den Stoff des potenziellen Registranten aufgrund von abweichenden Stoffidentitätsparametern, die nicht in die vereinbarten Grenzen des SIP fallen, grundsätzlich nicht repräsentativ sind. In diesem Fall hat der potenzielle Registrant eine gesonderte Registrierung einzureichen, entweder zusammen mit anderen Registranten mit einer Stoffidentität, die diesen Parameter abdeckt, oder allein, wenn es keine anderen Registranten für dieselbe Stoffidentität geben sollte.

4. Meldung des Stoffidentitätsprofils im Registrierungsdossier

Wenn die potenziellen Registranten alle nach Anhang VII-XI erforderlichen Daten zu ihrem Stoff zusammengetragen/erarbeitet haben, (Schritt 5 in **Abbildung 1**) ist das Datenpaket fertig und kann im IUCLID-Format in Dossiers bei der Agentur eingereicht werden (Schritt 6 in **Abbildung 1**). Zur Meldung des SIP im IUCLID-Format sind die Bezeichnung und andere Identifikatoren, die Angaben zur Zusammensetzung und ggf. weitere Parameter im IUCLID in den Abschnitten 1.1 und 1.2 anzugeben.

Stoffidentitätsprofil	Meldung in IUCLID
Bezeichnung und andere Identifikatoren	Abschnitt 1.1 aller Dossiers
Angaben zur Zusammensetzung und ggf. weitere Parameter	Abschnitt 1.2 des Dossiers des federführenden Registranten

Die Bezeichnung und andere Identifikatoren zum SIP sind in Abschnitt 1.1 aller Dossiers anzugeben. Der federführende Registrant meldet die Angaben zur Zusammensetzung und ggf. weitere Parameter in Abschnitt 1.2 seines Dossiers in Form einer „Grenzzusammensetzung des Stoffs“[35]. Der federführende Registrant hat im Namen aller Registranten auch alle relevanten Daten nach Anhang VII-XI in den Abschnitten 4-14 einreichen (wenn keine begründete Ausscherung von einer oder mehreren Informationsanforderungen vorliegt).

Die einzelnen Registranten (einschließlich des federführenden Registranten) melden jeweils für ihre eigene Rechtsperson die Angaben zur Zusammensetzung des Stoffs, den sie speziell herstellen oder einführen, in Abschnitt 1.2 ihres eigenen Dossiers.

[35] Anleitungen für die Eintragung der „Grenzzusammensetzung des Stoffs“ enthält das Handbuch „Erstellung von Registrierungs- und PPORD-Dossiers“, das unter folgender Internetadresse abgerufen werden kann: http://echa.europa.eu/manuals.

Dementsprechend gibt der federführende Registrant sowohl die Angaben zur Zusammensetzung für das SIP als auch die Angaben zur Zusammensetzung für seine eigene Rechtsperson in Abschnitt 1.2 seines Dossiers an, während alle übrigen Registranten ihre eigenen spezifischen Angaben zur Zusammensetzung melden. Bei allen Standard-Registrierungen sind in Abschnitt 1.4 des IUCLID auch die relevanten analytischen Informationen mitzuteilen.

Jeder Registrant sollte nachweisen, dass die Angaben zur Zusammensetzung des Stoffs, den er speziell herstellt oder einführt, vom SIP entsprechend den Angaben in der „Grenzzusammensetzung“ sowie von den im Dossier des federführenden Registranten eingereichten Daten nach Anhang VII-XI abgedeckt sind (wenn keine begründete Ausscherung vorliegt).

Technische Anweisungen für die Meldung der Angaben zur Zusammensetzung im IUCLID-Format können den IUCLID-Handbüchern entnommen werden (http://echa.europa.eu/manuals).

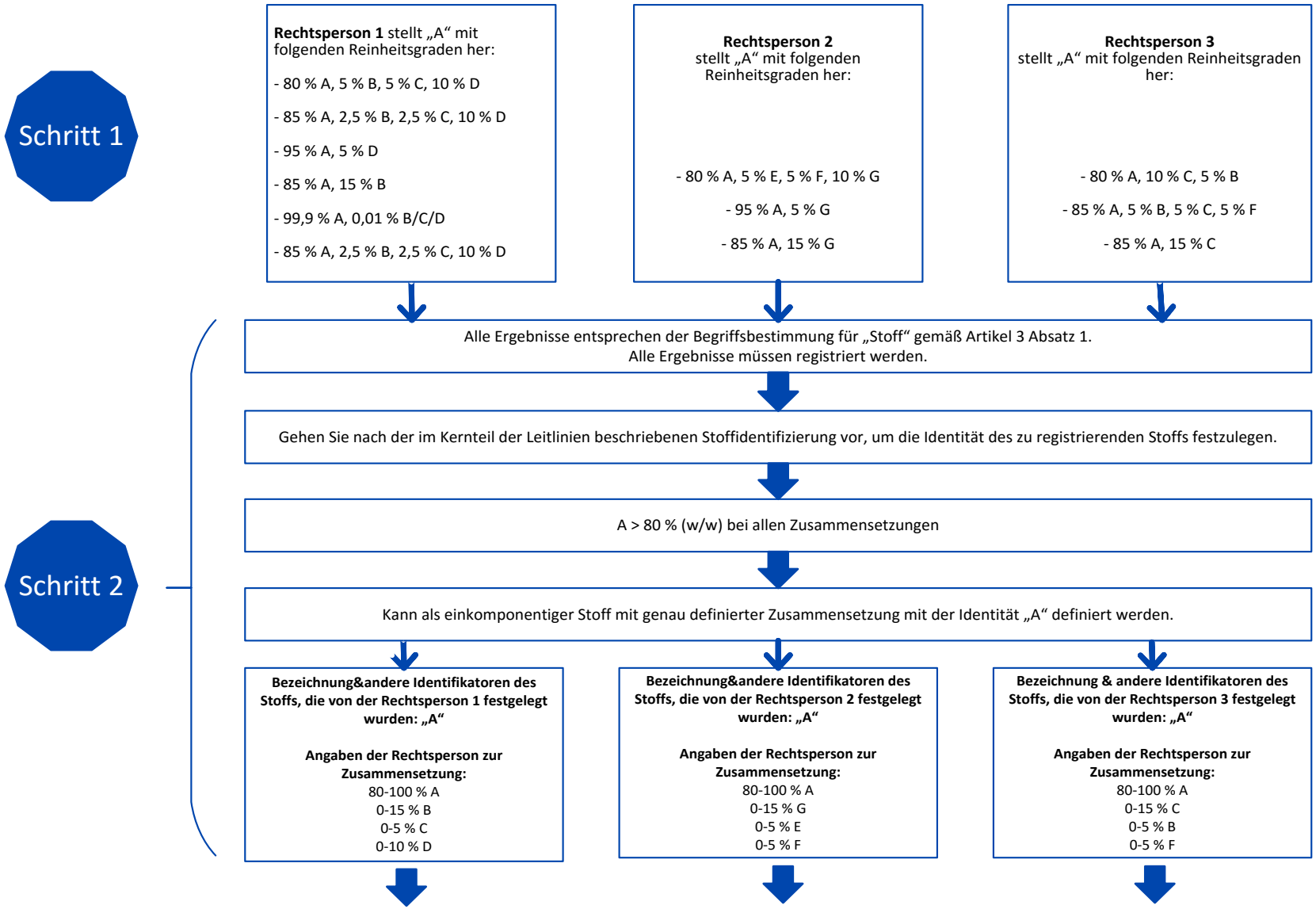
5. Maßnahmen zum Übergang von IUCLID 5 nach IUCLID 6

Das System IUCLID 5 sah keine Felder für die transparente Übermittlung von Angaben zur Zusammensetzung zum SIP in Abschnitt 1.2 des Dossiers des federführenden Registranten vor. Einige federführende Registranten hatten diese Angaben mitgeteilt, indem sie mithilfe von Labels darauf hinwiesen, dass sich die Angaben auf das SIP beziehen.

Das System IUCLID 6 bietet die Möglichkeit, diese Angaben systematisch und transparent zu melden. Technische Einzelheiten können dem entsprechenden IUCLID-Handbuch entnommen werden.

Die Veröffentlichung „Transition to the new IT tools – how to prepare“ (abrufbar unter folgender Internetadresse: http://echa.europa.eu/manuals) mit ausführlichen Informationen über die Maßnahmen, die ergriffen werden müssen, um aktualisierte Fassungen von federführenden Registrierungsdossiers, die im System IUCLID 5 eingereicht worden waren, im System IUCLID 6 einzureichen, wobei die Angaben zur Zusammensetzung für die Stoffidentität in Abschnitt 1.2 eingetragen werden müssen, steht auf der ECHA-Website zur Verfügung.

Abbildung 2 (nächste Seite): Schematische Darstellung der Schritte, die potenzielle Registranten von der Bestimmung ihrer Registrierungspflichten (1) über die Festlegung ihres Stoffidentitätsprofils für ihre gemeinsame Stoffidentität (4) bis schließlich zur Einreichung ihrer Registrierungen zur formellen Erfüllung der Pflichten zur Registrierung ihrer Stoffe (8) ausführen



Note to the figure: The substance identity is a simple mono-constituent to make it simpler to visualise. For more complex substances, the steps are the same but additional elements and/or proxies for compositional information may be used to define substance identity. The process of defining the SIP may also involve iterations between steps 3 and 5.

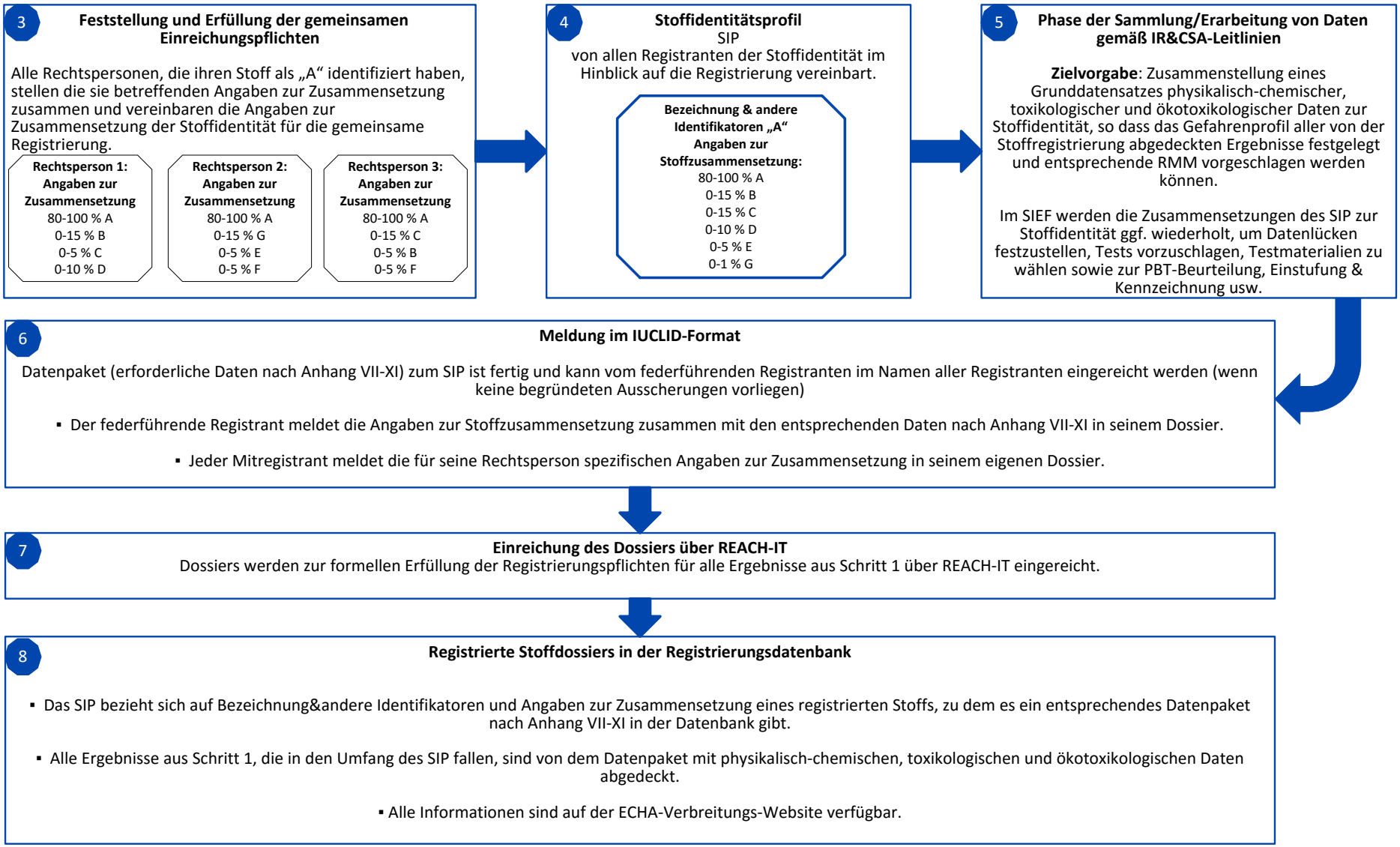
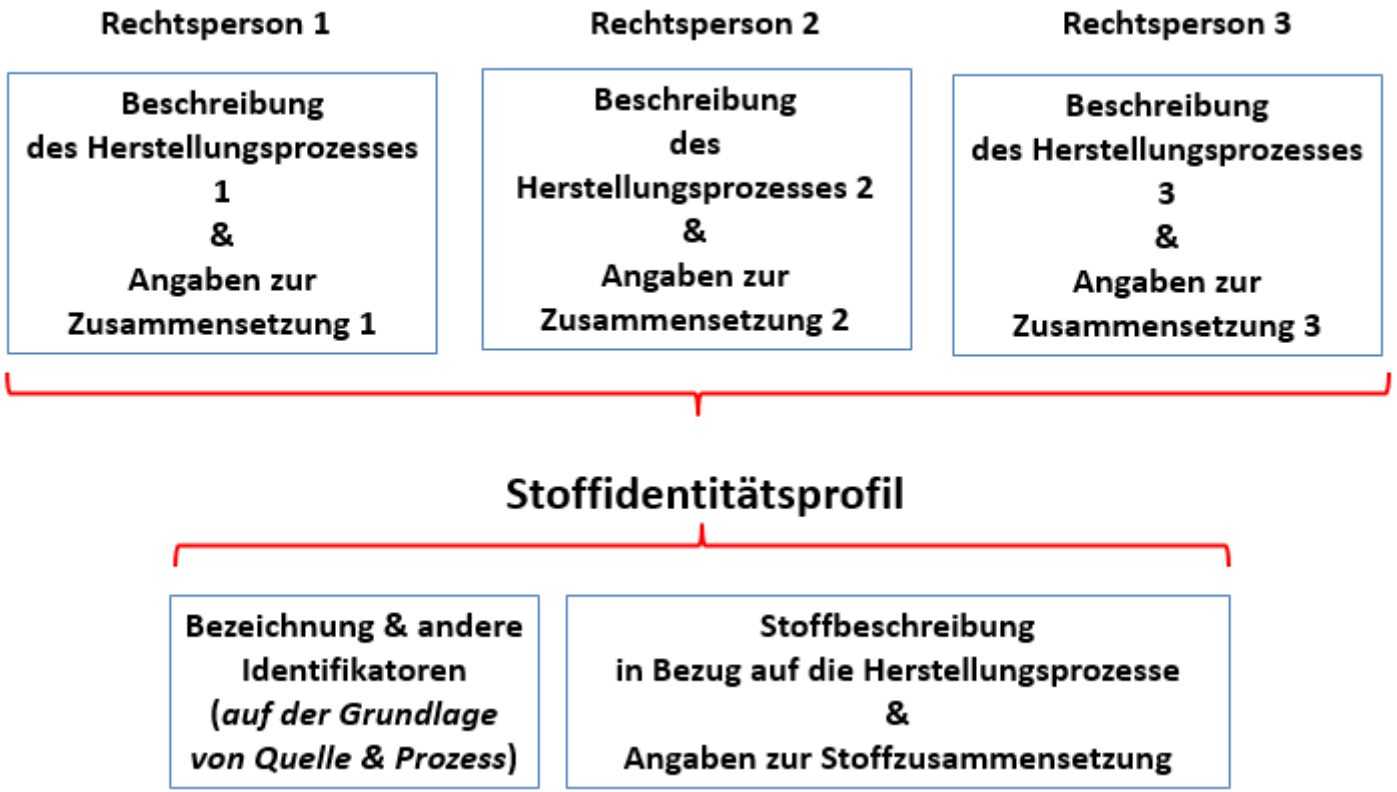

3
Feststellung und Erfüllung der gemeinsamen Einreichungspflichten
Alle Rechtspersonen, die ihren Stoff als „A“ identifiziert haben, stellen die sie betreffenden Angaben zur Zusammensetzung zusammen und vereinbaren die Angaben zur Zusammensetzung der Stoffidentität für die gemeinsame Registrierung.
Rechtsperson 1: Angaben zur Zusammensetzung
80-100 % A
0-15 % B
0-5 % C
0-10 % D
Rechtsperson 2: Angaben zur Zusammensetzung
80-100 % A
0-15 % G
0-5 % E
0-5 % F
Rechtsperson 3: Angaben zur Zusammensetzung
80-100 % A
0-15 % C
0-5 % B
0-5 % F
4
Stoffidentitätsprofil
SIP
von allen Registranten der Stoffidentität im Hinblick auf die Registrierung vereinbart.
Bezeichnung & andere Identifikatoren „A“
Angaben zur Stoffzusammensetzung:
80-100 % A
0-15 % B
0-15 % C
0-10 % D
0-5 % E
0-1 % G
5
Phase der Sammlung/Erarbeitung von Daten gemäß IR&CSA-Leitlinien
Zielvorgabe: Zusammenstellung eines Grunddatensatzes physikalisch-chemischer, toxikologischer und ökotoxikologischer Daten zur Stoffidentität, so dass das Gefahrenprofil aller von der Stoffregistrierung abgedeckten Ergebnisse festgelegt und entsprechende RMM vorgeschlagen werden können.
Im SIEF werden die Zusammensetzungen des SIP zur Stoffidentität ggf. wiederholt, um Datenlücken festzustellen, Tests vorzuschlagen, Testmaterialien zu wählen sowie zur PBT-Beurteilung, Einstufung & Kennzeichnung usw.
6
Meldung im IUCLID-Format
Datenpaket (erforderliche Daten nach Anhang VII-XI) zum SIP ist fertig und kann vom federführenden Registranten im Namen aller Registranten eingereicht werden (wenn keine begründeten Ausscherungen vorliegen)
▪ Der federführende Registrant meldet die Angaben zur Stoffzusammensetzung zusammen mit den entsprechenden Daten nach Anhang VII-XI in seinem Dossier.
▪ Jeder Mitregistrant meldet die für seine Rechtsperson spezifischen Angaben zur Zusammensetzung in seinem eigenen Dossier.
7
Einreichung des Dossiers über REACH-IT
Dossiers werden zur formellen Erfüllung der Registrierungspflichten für alle Ergebnisse aus Schritt 1 über REACH-IT eingereicht.
8
Registrierte Stoffdossiers in der Registrierungsdatenbank
▪ Das SIP bezieht sich auf Bezeichnung&andere Identifikatoren und Angaben zur Zusammensetzung eines registrierten Stoffs, zu dem es ein entsprechendes Datenpaket nach Anhang VII-XI in der Datenbank gibt.
▪ Alle Ergebnisse aus Schritt 1, die in den Umfang des SIP fallen, sind von dem Datenpaket mit physikalisch-chemischen, toxikologischen und ökotoxikologischen Daten abgedeckt.
▪ Alle Informationen sind auf der ECHA-Verbreitungs-Website verfügbar.

Abbildung 3: Veranschaulichende schematische Darstellung der Festlegung eines Stoffidentitätsprofils (Schritt 4 in Abbildung 1) für einen UVCB-Stoff, der auf der Grundlage von Quellen- und Prozessdeskriptoren aus Quellen- und Prozessbeschreibungen einzelner Rechtspersonen identifiziert wurde



Europäische Chemikalienagentur
P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finnland
http://echa.europa.eu