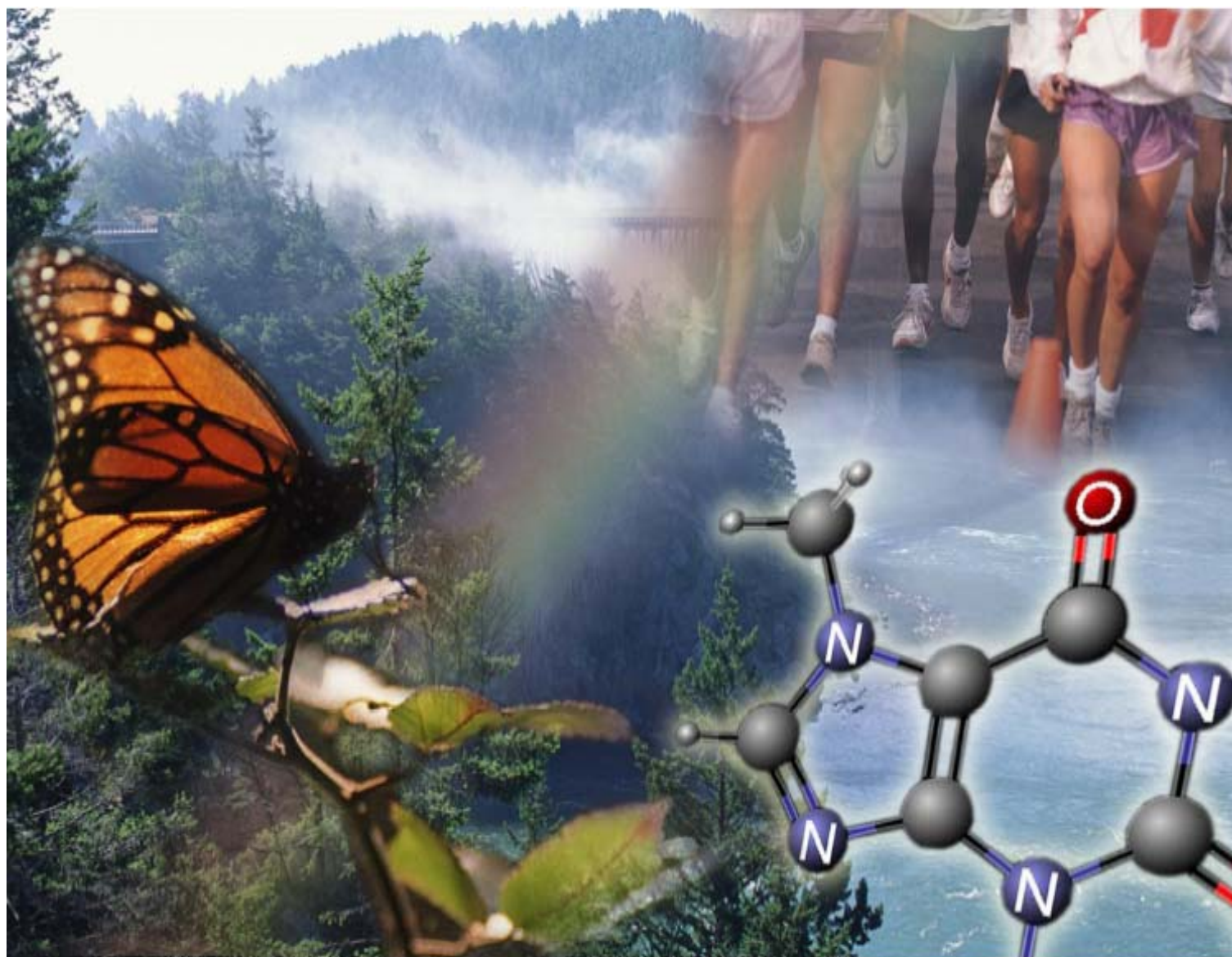


**Document GUIDE sur l'identification et la désignation des substances dans
le cadre de REACH**



Juin 2007

Guide pour la mise en œuvre de REACH

AVERTISSEMENT LEGAL

Le présent document d'orientation sur REACH expose les obligations liées à REACH et la marche à suivre pour y satisfaire. Il est toutefois rappelé aux utilisateurs que le règlement REACH demeure la seule référence légale et que les informations contenues dans le présent document ne constituent pas un avis juridique. La responsabilité de l'Agence européenne des produits chimiques ne saurait être engagée du fait du contenu du présent document.

Cette traduction est une traduction de courtoisie, élaborée par le Service National d'Assistance Réglementaire et mis en place par le Bureau d'Evaluation des Risques des Produits et agents Chimiques (BERPC) du document mis en ligne par l'Agence européenne des produits chimiques (ECHA), et disponible en version anglaise sur : http://reach.jrc.it/docs/guidance_document/substance_id_en.htm

Il ne s'agit pas de la position officielle des autorités françaises.

Tout comme la version anglaise, il s'agit d'un document d'orientation qui ne constitue en aucun cas une interprétation légale des textes du règlement 1907/2006.

Vos remarques afin d'améliorer la qualité de la traduction sont les bienvenues

PREFACE

Le présent document indique comment désigner et identifier une substance dans le cadre de REACH. Il fait partie d'une série de documents d'orientation visant à aider toutes les parties intéressées à se préparer à remplir leurs obligations liées à l'application du règlement REACH. Ces documents fournissent des indications précises sur un ensemble de processus essentiels de REACH, ainsi que sur des méthodes spécifiques, d'ordre scientifique et/ou technique, que l'industrie ou les autorités sont appelées à utiliser dans la mise en œuvre de REACH.

Ces documents d'orientation ont été élaborés et discutés dans le cadre des Projets pour la mise en œuvre de REACH (REACH Implementation Projects, RIP), conduits par les services de la Commission européenne avec la participation de toutes les parties concernées : Etats membres, industriels et organisations non gouvernementales. Ces documents sont disponibles sur le site Internet de l'Agence européenne des produits chimiques (http://echa.europa.eu/reach_en.html). D'autres documents d'orientation seront publiés sur ce site lorsqu'ils seront finalisés ou actualisés.

SOMMAIRE

1	GENERALITES	6
1.1	OBJECTIFS	7
1.2	CHAMP D'APPLICATION	7
1.3	STRUCTURE DU GT	9
2	DEFINITIONS ET ABREVIATIONS	10
2.1	ABREVIATIONS	10
2.2	DEFINITIONS.....	11
3	CADRE INSTITUTE PAR REACH POUR L'IDENTIFICATION DES SUBSTANCES.....	14
3.1	DEFINITION D'UNE SUBSTANCE	14
3.2	INVENTAIRE CE	14
3.2.1	Rôle de l'inventaire CE lors de l'entrée en vigueur de REACH	15
3.2.2	L'inventaire REACH après l'entrée en vigueur de REACH	16
3.3	EXIGENCES RELATIVES A L'IDENTIFICATION DES SUBSTANCES SELON REACH	16
4	GUIDE POUR L'IDENTIFICATION ET LA DESIGNATION DES SUBSTANCES DANS LE CADRE DE REACH.....	18
4.1	INTRODUCTION	18
4.2	SUBSTANCES DE COMPOSITION BIEN DEFINIE.....	22
4.2.1	Substances monoconstituant.....	23
4.2.2	Substances multiconstituant.....	25
4.2.3	Substances identifiées par leur composition chimique et d'autres identifiants principaux	30
4.3	SUBSTANCES UVCB.....	31
4.3.1	Orientations générales sur les substances UVCB.....	32
4.3.2	Types particuliers de substances UVCB.....	41
5	CRITERES PERMETTANT DE VERIFIER SI DES SUBSTANCES SONT IDENTIQUES	50
6	L'IDENTITE DE LA SUBSTANCE DANS LE CADRE DU PRE-ENREGISTREMENT ET DE LA DEMANDE D'INFORMATION	55
6.1	PRE -ENREGISTREMENT	55
6.2	DEMANDE D'INFORMATION PREALABLE	56
7	EXEMPLES.....	58
7.1	DIETHYL PEROXYDICARBONATE.....	59
7.2	ZOLIMIDINE.....	60
7.3	MELANGE D'ISOMERES	61
7.4	FRAGRANCE AH.....	63
7.5	MINERAUX.....	68
7.6	HUILE ESSENTIELLE DE LAVANDIN GROSSO.....	70

7.7	HUILE DE CHRYSANTHEME ET ISOMERES ISOLEES A PARTIR DE L’HUILE DE CHRYSANTHEME.....	75
7.8	PHENOL, ISOPROPYLE, PHOSPHATE.....	79
7.9	COMPOSES D’AMMONIUM QUATERNAIRE	80
7.10	SUBSTANCES PETROLIERES.....	85
7.10.1	Bases pour carburants (C ₄ -C ₁₂).....	85
7.10.2	Gasouils (pétrole).....	86
7.11	ENZYMES.....	86
7.11.1	Subtilisine	87
7.11.2	Amylase	88
8	DESCRIPTION DES SUBSTANCES SOUS IUCLID 5.....	89
8.1	PRINCIPES GENERAUX.....	89
8.1.1	Inventaires.....	90
8.1.2	Formulaire de données substance (IUCLID sections 1.1, 1.2, 1.3 et 1.4)	93
8.2	COMMENT REMPLIR UN DOSSIER SOUS IUCLID 5 – EXEMPLES	95
8.2.1	Substance monoconstituant.....	95
8.2.2	Substance multiconstituant	98
8.2.3	Substances définies par leur composition chimique plus d’autres identifiants.....	99
8.2.4	Substance UVCB.....	101
8.3	COMMUNICATION DES DONNEES ANALYTIQUES	102
9	BIBLIOGRAPHIE.....	104

TABLEAUX

Tableau 1.1	Documents d’orientation sur REACH élaborés dans le cadre du RIP 3.....	6
Tableau 2.1	Abréviations.....	11
Tableau 2.2	Définitions.....	12
Tableau 3.1	Paramètres d’identification des substances selon REACH, annexe VI, section 2.....	19
Tableau 4.1	Combinaisons d’identifiants principaux pour des exemples représentatifs de différents types de substances bien définies.....	22
Tableau 4.2	Combinaisons d’identifiants principaux pour des exemples représentatifs de différents types de substances UVCB.....	23

1 GENERALITES

Après la publication par la Commission européenne de la proposition de règlement REACH le 29 octobre 2003 [CE, 2003-A à CE, 2003- F], les Services de la Commission ont mis en place, en lien avec les Etats membres, une « stratégie de transition » visant à préparer tous les acteurs à l'application pratique de REACH.

Dans le cadre de la préparation technique à REACH, la Commission européenne coordonne l'élaboration de méthodologies, outils et aides techniques à travers une série de Projets pour la mise en œuvre de REACH (REACH Implementation Projects, RIP).

Le présent Guide Technique (GT), issu du RIP 3.10, ne présente pas un caractère légal mais fournit des orientations sur la méthodologie applicable en matière d'identification, de désignation et de déclaration d'une substance chimique dans le cadre de REACH.

Le règlement REACH porte exclusivement sur les « substances ». Pour assurer le bon fonctionnement du système REACH, il est essentiel que les substances soient identifiées sans ambiguïté. Le présent GT sur l'identification des substances est conçu comme un outil d'assistance à l'industrie, aux Etats membres et à l'Agence Européenne des Produits Chimiques.

Basé sur l'expérience acquise en matière d'identification des substances dans le cadre de la précédente législation relative aux produits chimiques (Directive Substances dangereuses 67/548/CEE, en particulier) et des autres actes législatifs communautaires, le présent document intègre les pratiques communautaires qui sont applicables dans le cadre du règlement REACH. Lorsqu'il y a lieu, des approches relevant de systèmes extérieurs à la Communauté européenne en matière de produits chimiques sont également prises en compte.

Les orientations du présent document sont déclinées par types de substances.

Ce Guide technique peut être utilisé seul, mais il s'inscrit dans un ensemble de GT disponibles sur le site de l'Agence européenne des produits chimiques, à l'adresse http://echa.europa.eu/reach_eu.html. Le tableau 1.1 donne la liste des documents d'orientation pour l'industrie. Pour plus d'information, consulter le site <http://ecb.jrc.it/REACH>.

Tableau 1.1 Documents d'orientation sur REACH élaborés dans le cadre du RIP 3

RIP	Sujet
3.1	Guide Technique sur l'enregistrement Guide Technique relatif aux intermédiaires Guide Technique relatif aux polymères Guide Technique relatif aux PPORD
3.2	Guide Technique sur le Rapport sur la sécurité chimique
3.3	Guide Technique sur les exigences en matière d'information
3.4	Guide Technique sur le partage des données
3.5	Guide Technique pour les utilisateurs en aval
3.6	Guide Technique sur la classification, l'étiquetage et l'emballage
3.7	Guide Technique sur la demande d'autorisation
3.8	Guide Technique relatif aux articles
3.9	Guide Technique sur l'analyse socio-économique
3.10	Guide Technique sur l'identification des substances

1.1 OBJECTIFS

Le présent Guide Technique (GT) a pour objet de fournir aux fabricants et aux importateurs des orientations claires sur la caractérisation et l'identification d'une substance dans le contexte de REACH. Il traite notamment de la désignation des substances, qui constitue un élément clé dans leur identification. Il indique également comment établir si des substances sont identiques au regard de REACH. L'identification de substances identiques est importante pour la procédure d'enregistrement préalable (ou pré-enregistrement) des substances bénéficiant d'un régime transitoire, pour les demandes d'information relatives aux substances ne bénéficiant pas d'un régime transitoire, pour le partage des données et en cas de soumission conjointe.

L'identification des substances devrait être conduite par des experts de l'industrie. Pour les représentants de l'industrie ayant peu d'expérience en matière d'identification des substances, des informations complémentaires sur les paramètres d'identification sont fournies en annexe du présent GT.

On trouvera également en annexe une liste de liens vers des outils d'aide à la caractérisation et à la vérification de l'identité des substances.

1.2 CHAMP D'APPLICATION

Aux termes de l'article 1 de REACH, le Règlement concerne la fabrication, l'importation, la mise sur le marché et l'utilisation des substances telles qu'elles ou dans des préparations et articles. Les préparations et articles en tant que tels ne sont pas visés par REACH.

Selon l'article 10 de REACH, l'enregistrement d'une substance nécessite que son identité soit caractérisée à l'aide des paramètres spécifiés à la section 2 de l'annexe VI de REACH (voir tableau 3.1). Le présent GT, consacré à l'identification correcte des substances visées par la définition des substances selon REACH, fournit des orientations sur les paramètres d'identification des substances énoncés à la section 2 de l'annexe VI. Les informations fournies doivent être suffisantes pour permettre d'identifier chaque substance. L'un ou

plusieurs des paramètres d'identification prévus peuvent être omis s'il n'est techniquement pas possible ou s'il ne semble pas nécessaire, du point de vue scientifique, de fournir les informations demandées. Il y a lieu d'indiquer clairement les raisons de telles omissions.

La démarche d'identification d'une substance dépend du type de substance considéré. C'est pourquoi l'utilisateur de ce GT est invité à se référer à des chapitres spécifiques par types de substances.

Les Inventaires CE utilisés dans le cadre de la directive 67/548/CEE (EINECS, ELINCS et liste NLP) sont des outils importants pour l'identification des substances. Le chapitre 3.2 précise le rôle de ces inventaires dans le cadre de REACH.

Les substances entrant dans le champ d'application de REACH (et du présent GT) sont, classiquement, le produit d'une réaction chimique obtenue au cours d'un procédé de fabrication, et peuvent contenir plusieurs constituants distincts. Les substances, selon la définition de REACH, incluent également des substances chimiquement dérivées ou isolées de matériaux présents dans la nature, qui peuvent comporter un seul élément ou molécule (métaux purs, par exemple, ou certains minéraux) ou plusieurs constituants (huiles essentielles, matras métalliques, par exemple). Cependant, certaines substances qui relèvent d'autres réglementations communautaires sont exemptées, dans certains cas, de l'enregistrement selon REACH (voir article 2 du règlement REACH). De même, les substances dont la liste est fournie à l'annexe IV de REACH et les substances remplissant les critères spécifiés à l'annexe V de REACH sont exemptées d'enregistrement. Il convient de noter que l'exemption d'enregistrement pour une substance n'implique pas nécessairement une exemption des autres titres du règlement (Titre XI Inventaire des classifications et des étiquetages, par exemple).

Les déclarants doivent donc prendre connaissance des définitions et des règles d'exemption auxquelles il est fait référence dans REACH, afin de déterminer s'ils sont soumis à l'obligation d'enregistrement ou à d'autres obligations.

L'enregistrement selon REACH vise exclusivement les substances. Toutefois, les dispositions du règlement s'appliquent à la fabrication, à la mise sur le marché et à l'utilisation des substances en tant que telles, dans des préparations ou des articles.

Le présent GT ne comporte pas d'informations sur le regroupement de substances selon leur structure. Ce point est traité dans le RIP 3.3, Guide technique sur les obligations relatives à la production d'information sur les propriétés intrinsèques des substances.

Concernant les points non traités dans le présent GT, le lecteur est invité à se reporter aux autres Documents guides (voir la liste du tableau 1.1) ou à s'adresser aux services d'assistance national (Helpdesk) mis en place par les Autorités compétentes concernées (le service français est accessible à l'adresse www.reach-info.fr).

1.3 STRUCTURE DU GT

Le chapitre 1 précise les objectifs et le champ d'application du présent GT. On trouvera au chapitre 2 les abréviations et définitions utilisées. Le chapitre 3 fournit des informations sur le cadre institué par REACH pour identifier une substance, par exemple la définition des substances et les exigences du règlement en matière d'information.

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

Le point 4.1 est consacré à la différenciation entre substances « bien définies » et substances « mal définies » ; au sein de ces deux grands groupes, on peut distinguer différents types de substances, avec des indications spécifiques pour leur identification. Un diagramme oriente l'utilisateur vers le chapitre adapté pour l'identification de chaque type de substances.

Les points suivants du chapitre 4 fournissent des orientations par types de substances, sous forme de règles assorties d'explications et d'exemples.

Le chapitre 5 indique comment vérifier si des substances peuvent ou non être considérées comme identiques. Le chapitre 6 apporte des précisions sur l'identité des substances dans le cadre du pré-enregistrement et de la demande d'information préalable.

Au chapitre 7, des exemples réels sont traités en détails sur la base des orientations pratiques du chapitre 4, pour illustrer la façon dont l'industrie peut utiliser le présent GT.

Enfin, le chapitre 8 donne des indications sur la description des substances sous IUCLID 5.

L'annexe I fournit une liste de sites proposant des outils d'aide à la caractérisation et à la vérification de l'identité chimique des substances.

L'annexe II apporte des informations complémentaires sur chacun des paramètres intervenant dans le processus d'identification des substances, en particulier sur les règles de nomenclature, les numéros CE et CAS, la notation de la formule brute et de la formule développée, ainsi que sur les méthodes d'analyse.

2 DEFINITIONS ET ABREVIATIONS

2.1 ABREVIATIONS

On trouvera au tableau 2.1 la liste et la signification des principales abréviations utilisées dans le présent GT.

Tableau 2.1 Abréviations

Abréviation	Signification
AISE	International Association of Soaps, Detergents and Maintenance Products
CAS	Chemical Abstracts Service
CE	Commission Européenne
CG	Chromatographie en phase gazeuse
CLHP	Chromatographie en phase liquide haute performance
DRX	Diffraction des rayons X
EINECS	European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances
ELINCS	European List of Notified Chemical Substances
ENCS	Existing and New Chemical Substances (Japan)
ESIS	European Substances Information System
FEIS	Forum d'échange d'informations sur les substances
FX	Fluorescence X
GT	Guide Technique
InChI	IUPAC International Chemical Identifier
INCI	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients
IR	Infrarouge
ISO	International Organization for Standardization
IUBMB	International Union of Biochemistry and Molecular Biology
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database
MS	Spectroscopie de masse
NLP	No Longer Polymer
ppm	Parties par million
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals
RIP	REACH Implementation Project
RMN	Résonance magnétique nucléaire
SGH	Système général harmonisé
SIEF	Substance Information Exchange Forum
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification
TSCA	Toxic Substances Control Act (Etats-Unis)
UE	Union européenne
IUPAC	Union internationale de chimie pure et appliquée (IUPAC en anglais)
UV/VIS	Ultraviolet / visible
UVCB	Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials
w/w	pourcentage pondéral, pourcentage en masse

2.2 DEFINITIONS

On trouvera au tableau 2.2 la définition d'un certain nombre de termes clés utilisés dans le présent Guide technique.

Ces définitions tiennent compte de celles du règlement REACH et du SGH. C'est pourquoi la définition de certains termes diffère de celle qui était utilisée dans le cadre de l'application de la directive 67/548/CEE.

Tableau 2.2 Définitions

Terme	Définition
Additif	Une substance ajoutée intentionnellement pour stabiliser la substance ¹ .
Alliage*	Une matière métallique, homogène à un niveau macroscopique, constituée de deux éléments ou plus combinés de telle manière qu'ils ne peuvent pas être facilement séparés par des moyens mécaniques.
Article*	Un objet auquel sont donnés, au cours du processus de fabrication, une forme, une surface ou un dessin particuliers qui sont plus déterminants pour sa fonction que sa composition chimique.
Empreinte chromatographique	Représentation de la composition d'une substance à partir de la distribution caractéristique de ses constituants sur un chromatogramme.
Composant	Substance ajoutée intentionnellement pour obtenir une préparation.
Constituant	Tout composant distinct présent dans une substance et qui peut être caractérisé par son identité chimique propre.
Inventaire CE	La combinaison des trois listes européennes de substances, dans le cadre du précédent dispositif réglementaire de l'UE en matière de produits chimiques – listes EINECS, ELINCS et NLP – est désignée par le terme d'Inventaire CE. L'Inventaire CE est la source des Numéros CE utilisés comme identifiants des substances.
Impureté	Tout constituant non souhaité présent dans une substance à l'issue du procédé de fabrication. Il peut provenir des matières premières ou résulter de réactions secondaires ou incomplètes au cours du procédé de fabrication. Bien que présent dans la substance finale, il n'a pas été ajouté intentionnellement.

Suite du tableau en page suivante

¹ Dans un contexte différent, un additif peut aussi avoir d'autres fonctions (régulateur de pH, agent colorant, par exemple). Dans le règlement REACH, cependant, ainsi que dans le présent GT, on entend par « additif », un agent stabilisant.

Définition	Description
Intermédiaire*	<p>Une substance fabriquée en vue d'une transformation chimique et consommée ou utilisée dans le cadre de cette transformation en vue de faire l'objet d'une opération de transformation en une autre substance (ci-après dénommée « synthèse ») :</p> <p>a) « intermédiaire non isolé » : un intermédiaire qui, pendant la synthèse, n'est pas retiré intentionnellement (sauf à des fins d'échantillonnage) des dispositifs dans lesquels a lieu la synthèse. Ces dispositifs comprennent la cuve de réaction, le matériel annexe et tout matériel par lequel la ou les substances passent au cours d'un processus à flux continu ou d'un processus discontinu, ainsi que les tuyauteries permettant le transfert d'une cuve à l'autre en vue de la prochaine étape de la réaction. Ils ne comprennent pas les réservoirs et autres récipients dans lesquels la ou les substances sont conservées après la fabrication ;</p> <p>b) « intermédiaire isolé restant sur le site » : un intermédiaire ne répondant pas aux critères définissant un intermédiaire non isolé, dans les cas où la fabrication de l'intermédiaire et la synthèse d'une ou de plusieurs autres substances à partir de cet intermédiaire ont lieu sur le même site, exploité par une ou plusieurs personnes morales ;</p> <p>c) « intermédiaire isolé transporté » : un intermédiaire ne répondant pas aux critères définissant un intermédiaire non isolé, transporté entre différents sites ou fourni à d'autres sites ;</p>
IUCLID	IUCLID est une base de données et un système de gestion destiné à l'administration des données sur les substances chimiques.
Constituant principal	Constituant qui représente une part importante de cette substance, qui intervient dans la désignation et l'identification précise de la substance, mais qui n'est pas considéré comme un additif ou une impureté.
Fabrication*	La production ou l'extraction de substances à l'état naturel.
Monomère*	Une substance qui est capable de former des liens covalents avec une séquence d'autres molécules semblables ou non dans les conditions de la réaction de formation du polymère pertinente pour le processus particulier.
Substance monoconstituant	En règle générale, une substance, définie par sa composition, dans laquelle un constituant principal est présent à au moins 80 % en masse/masse.
Substance multiconstituant	En règle générale, une substance, définie par sa composition, dans laquelle plus d'un constituant principal est présent à une concentration > 10 % (en masse/masse) et < 80 % (en masse/masse).
Substance ne bénéficiant pas d'un régime transitoire	Une substance soumise à l'obligation d'enregistrement, qui ne bénéficie pas du régime transitoire prévu par REACH.
Substance non modifiée chimiquement*	Une substance dont la structure chimique demeure inchangée, même si elle a été soumise à un processus ou à un traitement chimique ou à un processus physique de transformation minéralogique, par exemple, pour éliminer les impuretés.

Suite du tableau en page suivante

Définition	Description
Substance bénéficiant d'un régime transitoire*	<p>Une substance qui satisfait au moins à l'un des critères suivants :</p> <p>a) être mentionnée dans l'inventaire des substances chimiques commercialisées sur le marché communautaire (EINECS) ;</p> <p>b) avoir été fabriquée dans la Communauté ou l'un des pays ayant adhéré à l'Union européenne le 1^{er} janvier 1995 ou le 1^{er} mai 2004, mais ne pas avoir été mise sur le marché par le fabricant ou l'importateur au moins une fois au cours des quinze années précédant l'entrée en vigueur du présent règlement, à condition que le fabricant ou l'importateur dispose d'une preuve écrite ;</p> <p>c) avoir été mise sur le marché dans la Communauté ou l'un des pays ayant adhéré à l'Union européenne le 1^{er} janvier 1995 ou le 1^{er} mai 2004 avant l'entrée en vigueur du présent règlement par le fabricant ou l'importateur et avoir été considérée comme notifiée conformément à l'article 8, paragraphe 1, premier tiret, de la directive 67/548/CEE, sans cependant répondre à la définition d'un polymère, telle qu'elle est énoncée dans le présent règlement, à condition que le fabricant ou l'importateur dispose d'une preuve écrite ;</p>
Préparation*	Un mélange ou une solution composés de deux substances ou plus, qui ne réagissent pas entre elles. Une préparation est synonyme de mélange dans le SGH
Polymère*	<p>Une substance constituée de molécules se caractérisant par la séquence d'un ou de plusieurs types d'unités monomères. Ces molécules doivent être réparties sur un éventail de masse moléculaires, les écarts de masse moléculaires étant dus essentiellement aux différences de nombres d'unités monomères. Un polymère comprend :</p> <p>a) une simple majorité pondérale de molécules contenant au moins trois unités monomères liées par covalence à au moins une autre unité monomère ou à une autre substance réactive ;</p> <p>b) une quantité inférieure à une simple majorité pondérale de molécules présentant le même masse moléculaire.</p> <p>Au sens de la présente définition, on entend par « unité monomère » la forme réagie d'une substance monomère dans un polymère.</p>
Substance*	Un élément chimique et ses composés à l'état naturel ou obtenus par un procédé de fabrication, y compris tout additif nécessaire pour en préserver la stabilité et toute impureté résultant du procédé mis en œuvre, mais à l'exclusion de tout solvant qui peut être séparé sans affecter la stabilité de la substance ou modifier sa composition.
Substances présentes dans la nature*	Une substance naturelle, telle quelle, non traitée ou traitée uniquement par des moyens manuels, mécaniques ou gravitationnels, par dissolution dans l'eau, par flottation, par extraction par l'eau, par distillation à la vapeur ou par chauffage uniquement pour éliminer l'eau ou qui est extraite de l'air par un quelconque moyen.

* Définitions selon l'article 3 du règlement REACH

3 CADRE INSTITUE PAR REACH POUR L'IDENTIFICATION DES SUBSTANCES

REACH donne une définition du mot substance (article 3) et indique les paramètres à fournir pour l'identification d'une substance aux fins d'enregistrement (annexe VI, section 2).

Le présent chapitre explicite la définition d'une substance selon REACH (chapitre 3.1), donne des orientations générales sur la façon d'utiliser l'inventaire CE issu de la réglementation produits chimiques antérieure (chapitre 3.2) et apporte des précisions sur les exigences découlant de REACH en matière d'identification des substances (chapitre 3.3).

3.1 DEFINITION D'UNE SUBSTANCE

Une substance est définie comme suit dans REACH (article 3, définition 1) :

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

La définition d'une substance selon REACH est identique à celle utilisée dans la 7^e modification de la directive Substances dangereuses (Directive 92/32/CEE modifiant la Directive 67/548/CEE). Dans les deux cas, cette définition va au-delà d'un composé chimique pur correspondant à une structure moléculaire unique. Elle inclut différents constituants tels que des impuretés.

3.2 INVENTAIRE CE

Il existait trois inventaires distincts dans le cadre de l'ancienne réglementation produits chimiques : l'Inventaire des substances chimiques commercialisées sur le marché européen (European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (EINECS)), la Liste européenne des substances chimiques nouvelles (European List of New Chemical Substances (ELINCS)) et la liste NLP (pour « No-Longer Polymers », substances qui ne peuvent être inscrites comme polymères).

L'inventaire EINECS établit la liste des substances présentes sur le marché européen entre le 1^{er} janvier 1971 et le 18 septembre 1981². Les substances nouvelles et mises sur le marché après le 18 septembre 1981 sont répertoriées dans la liste ELINCS.

Les polymères étaient exclus d'inscription à l'inventaire EINECS et faisaient l'objet de règles spécifiques dans le cadre de la directive 67/548/CEE. Le terme de « polymère » a été défini plus précisément dans la 7^e modification de la Directive 67/548/CEE (Directive 92/32/CEE). Du fait de l'application de cette définition, certaines substances initialement considérées comme des polymères selon les règles d'inscription à l'inventaire EINECS ne l'étaient plus

² EINECS est basé sur le European COre INventory (ECOIN), inventaire basé sur la déclaration des substances par les industriels (conformément aux critères de déclaration des substances prévus dans le cadre d'EINECS). ECOIN a été constitué en fusionnant différentes listes de produits chimiques présumés présents sur le marché européen (inventaire du TSCA, par exemple).

selon la 7^e modification de la Directive. Comme toutes les substances qui ne figurent pas sur la liste EINECS sont notifiables, tous les « No-Longer Polymers » (NLP) devraient, en principe, être notifiés. Cependant, le Conseil des Ministres a bien précisé que ces substances ne devraient pas, rétroactivement, tomber sous le coup de l'obligation de notification. Il a été demandé à la Commission d'établir une liste des No-Longer Polymers (liste NLP). Les substances devant être incluses dans cette liste ont été mises sur le marché de l'UE entre le 18 septembre 1981 et le 31 octobre 1993 et remplissent les conditions nécessaires pour être considérées comme des polymères selon les règles d'inscription à l'inventaire EINECS, mais ne sont plus considérées comme des polymères aux termes de la 7^e modification. La liste NLP est une liste non exhaustive.

Ces trois listes de substances – EINECS, ELINCS et la liste NLP – constituent « l'Inventaire CE ». Chaque substance de cet inventaire a un numéro CE attribué par la Commission Européenne (pour plus d'informations sur le numéro CE, voir l'annexe II).

Des informations sur ces substances sont disponibles sur le site du Bureau européen des produits chimiques (<http://ecb.jrc.it>), sous-section « ESIS ». Il incombera désormais à l'Agence européenne des produits chimiques de tenir à jour et de publier un inventaire des substances enregistrées.

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

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

Si une substance figure dans l'inventaire EINECS ou la liste NLP, celle-ci est considérée comme bénéficiant d'un régime transitoire pour tout fabricant ou importateur. Sous certaines conditions, des substances ne figurant pas dans l'inventaire EINECS ou la liste NLP peuvent également être considérées comme bénéficiant d'un régime transitoire : (1) Une substance remplissant les critères NLP mais ne figurant pas dans la liste NLP ; (2) Une substance fabriquée dans la Communauté ou dans les pays entrés dans l'Union Européenne en mai 2004, mais non mise sur le marché par le fabricant ou l'importateur au moins une fois au cours des 15 années précédant l'entrée en vigueur du règlement REACH.

Si une substance a été précédemment notifiée selon la Directive 67/548/CEE et figure donc sur la liste ELINCS, cette notification sera considérée comme un enregistrement aux termes de REACH (article 24). Ces substances sont considérées comme déjà enregistrées par le fabricant ou l'importateur concerné et ne requièrent donc pas d'enregistrement initial de la part de ce fabricant/importateur. Le fabricant/l'importateur a néanmoins l'obligation d'effectuer les mises à jour de l'enregistrement. Les nouveaux fabricants/importateurs d'une substance figurant sur la liste ELINCS (non couverts par la/les précédente(s) notification(s)) sont soumis à enregistrement (comme pour une substance ne bénéficiant pas d'un régime transitoire), et un partage des données avec le précédent déclarant sera établi. Pour plus d'informations sur ce point, voir le Guide technique sur l'enregistrement.

3.2.2 L'inventaire REACH après l'entrée en vigueur de REACH

Après l'entrée en vigueur de REACH, l'Agence européenne des produits chimiques établira un inventaire des substances enregistrées. Chaque déclarant recevra un numéro d'enregistrement pour tout enregistrement d'une substance. Pour les substances non identifiées par un numéro CE (numéro EINECS, ELINCS ou NLP), l'Agence européenne des produits chimiques attribuera un numéro CE.

L'Agence européenne des produits chimiques actualisera l'inventaire régulièrement. Les substances nouvelles selon REACH (substances ne bénéficiant pas d'un régime transitoire aux termes de REACH) seront ajoutées. Le processus d'enregistrement permet au nouvel inventaire des substances enregistrées d'apporter des « corrections » à l'inventaire EINECS actuel, lorsque des « erreurs » ont été commises³. Le système d'attribution de numéros CE aux substances nouvelles selon REACH suivra selon toute vraisemblance la méthode utilisée pour EINECS, ELINCS et la liste NLP.

La description d'une substance est parfois peu précise dans l'inventaire EINECS. En pareil cas, le déclarant potentiel est invité à décrire davantage la substance (en faisant appel à la désignation IUPAC, par exemple, ou à d'autres identifiants). Pour bénéficier des dispositions du régime transitoire, il y a lieu, néanmoins, d'indiquer à quelle entrée de l'inventaire EINECS correspond la substance. L'Agence européenne des produits chimiques pourra alors décider s'il convient ou non d'attribuer un nouveau numéro CE à la substance.

Plus d'informations, sur le pré-enregistrement, la formation des FEIS et la soumission conjointe des données en lien avec l'identification des substances, sont disponibles dans le RIP 3.4 concernant le partage des données.

3.3 EXIGENCES RELATIVES A L'IDENTIFICATION DES SUBSTANCES SELON REACH

Aux termes des dispositions de REACH, lorsqu'un enregistrement est exigé, il devra inclure les informations relatives à l'identification de la substance prévues à la section 2 de l'annexe VI. Ces informations devront être de nature à permettre une identification satisfaisante de chaque substance. S'il n'est pas possible techniquement ou s'il ne paraît pas justifié, du point de vue scientifique, de fournir des informations sur l'un ou plusieurs des paramètres d'identification spécifiés, il y aura lieu d'indiquer clairement les raisons de ces omissions [voir les notes de l'annexe VI].

Aux termes de l'article 28 de REACH, un enregistrement préalable est requis pour les substances bénéficiant d'un régime transitoire, afin que les fabricants et importateurs puissent bénéficier du régime transitoire et continuer à fabriquer ou importer la substance tout en préparant l'enregistrement. En ce qui concerne l'identification de la substance, REACH n'exige pas, à ce stade, un dossier d'identification complet conforme à la section 2 de l'annexe VI, mais seulement que le déclarant potentiel indique le nom de la substance ou, le cas échéant, le groupe de substances, ainsi que le numéro CE et le numéro CAS, s'ils sont disponibles.

³ EINECS, publié le 15 juin 1990, comporte plus de 100 000 substances. L'utilisation de l'inventaire a mis en évidence un certain nombre d'erreurs (erreurs d'impression portant sur le nom chimique, la formule ou le numéro CAS, par exemple). C'est pourquoi un corrigendum a été publié le 1^{er} mars 2002. Cependant, on y trouve encore certaines incohérences.

Le tableau 3.1 récapitule les paramètres d'identification des substances selon l'annexe VI de REACH.

Tableau 3.1 Paramètres d'identification des substances selon REACH, annexe VI, section 2

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

4 ORIENTATIONS POUR L'IDENTIFICATION ET LA DESIGNATION DES SUBSTANCES DANS LE CADRE DE REACH

4.1 INTRODUCTION

Les règles d'identification et de désignation diffèrent selon le type de substances. A des fins pratiques, le présent document est structuré de telle sorte que, pour chaque type de substance, les utilisateurs soient renvoyés directement au chapitre où figurent les orientations pertinentes. À cet effet, des explications sur les différents types de substances sont fournies ci-après, suivies d'un schéma pour identifier le chapitre approprié.

L'identification d'une substance nécessite au minimum d'utiliser les paramètres d'identification énumérés à l'annexe VI, section 2 du Règlement REACH (voir tableau 3.1). Toute substance doit donc être identifiée à l'aide d'une combinaison des paramètres appropriés :

- Le nom IUPAC et/ou d'autres noms ou identifiants : numéro CAS, numéro CE, par exemple (annexe VI, section 2.1) ;
- Les formules brute et développée (annexe VI, section 2.2) ;
- La composition chimique (annexe VI, section 2.3).

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

On peut donc distinguer deux grands groupes de substances :

1. « Substances bien définies » : substances dont la composition qualitative et quantitative est connue, et qui peuvent être identifiées de façon satisfaisante sur la base des paramètres d'identification prévus par REACH, annexe VI, section 2.
2. « Substances UVCB » : substances de composition inconnue ou variable, produits de réactions complexes ou matériels biologiques. Ces substances ne peuvent pas être identifiées de façon satisfaisante au moyen des paramètres mentionnés ci-dessus.

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

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

Les règles d'identification et de description diffèrent pour les « substances bien définies » comportant un seul constituant principal et pour les substances ayant plus d'un constituant principal. De même, des règles d'identification et de description différentes s'appliquent aux divers types de substances couverts par l'acronyme « UVCB ».

On trouvera aux tableaux 4.1 et 4.2 les principaux identifiants applicables pour plusieurs exemples de chaque type de substances. Ces exemples sont groupés de telle sorte que les similitudes et les différences en terme d'identification des substances soient faciles à reconnaître.

Les tableaux 4.1 et 4.2 ne constituent pas une liste complète de tous les types de substances possibles. Ce classement des substances selon les règles d'identification et de désignation ne doit pas être considéré comme un système officiel de classification des substances, mais comme une aide pratique permettant de déterminer les règles applicables et à quelle partie du présent GT se reporter.

Tableau 4.1 Combinaisons d'identifiants principaux pour des exemples représentatifs de différents types de substances bien définies

Caractéristiques communes	Exemples ou produits représentatifs	Principaux identifiants
Substances bien définies par leur composition chimique [Chapitre 4.2]	Substances monoconstituant, exemples : - benzène (95 %) - nickel (99 %) [chapitre 4.2.1]	Composition chimique : un constituant principal $\geq 80\%$: - Identité chimique du constituant principal (nom chimique, numéro CAS, numéro CE, etc.) - Concentration usuelle et limites supérieure et inférieure
	Substances multiconstituant, exemples : produits de réaction définis tels que Mélange réactionnel de 2-, 3- et 4-chlorotoluène (30 % de chaque) [chapitre 4.2.2]	Composition chimique : un mélange réactionnel de plusieurs constituants principaux présents chacun entre $\geq 10\%$ - $\leq 80\%$: - Identité chimique de chaque constituant principal - Concentration usuelle et limites supérieure et inférieure pour chaque constituant et pour le mélange réactionnel lui-même
	Substances définies par leur composition chimique + d'autres caractéristiques, exemples : Graphite et diamant [chapitre 4.2.3]	Composition chimique comme substance mono- ou multiconstituant ET Autres paramètres physiques ou autres caractéristiques, tels que morphologie cristalline, composition minéralogique (géologique), etc.

Tableau 4.2 Combinaisons d'identifiants principaux pour des exemples représentatifs de différents types de substances UVCB					
Caractéristiques communes		Exemples représentatifs	Principaux identifiants		
			Source	Processus	Autres identifiants
Substances UVCB (Substances de composition inconnue ou variable, Produits de réactions complexes ou Matériels biologiques) [Chapitre 4.3]	Matériels biologiques (B)	Extraits de matériel biologique, exemples : fragrances naturelles, huiles naturelles, colorants et pigments naturels Macromolécules biologiques complexes, exemples : enzymes, protéines, fragments d'ADN ou d'ARN, hormones, antibiotiques	Espèce ou famille végétale ou animale Partie de plante/ d'animal	Extraction Fractionnement, concentration, isolation, purification, etc. <u>Dérivation*</u>	Composition connue ou générique Empreintes chromatographique ou autres Référence à des normes Colour Index
		Produits de fermentation Antibiotiques, biopolymères, mélanges d'enzymes, vinasses (produits de fermentation du sucre), etc.	Milieu de culture Microorganismes <u>appropriés</u>	Fermentation séparation de produits Etapes de purification	Indice normalisé (enzymes) Code génétique Stéréochimie Propriétés physiques Fonction/activité Structure Séquence d'acide aminé Types de produits : exemples : antibiotiques, biopolymères, protéines, etc. Composition connue
	Substances chimiques ou minérales de composition mal définie, complexe ou variable (UVC)	Mélanges réactionnels de composition difficilement prédictible et/ou variable	Matières premières	<u>type de réaction chimique</u> , exemples : estérification, alkylation, hydrogénation	Composition connue Empreintes chromatographique ou autres Référence à des normes
		Fractions ou distillats, exemple : produits pétroliers Argile, bentonite, par exemple Goudrons	Huiles brutes Charbon/tourbe Gaz minéral Minéraux	Fractionnement, distillation <u>Conversion de fractions</u> Traitement physique Résidus	Intervalles de coupe Gamme de longueurs de chaîne Ratio aromatique/aliphatique Composition connue Indice normalisé
		Concentrats ou produits de fusion, exemples : minerais métalliques ou résidus de divers procédés de fonderie ou de métallurgie, par exemple laitiers	Minerais	Fusion Traitement thermique Divers procédés métallurgiques	Composition connue ou générique Concentration de métaux

Les processus soulignés signalent la synthèse de nouvelles molécules

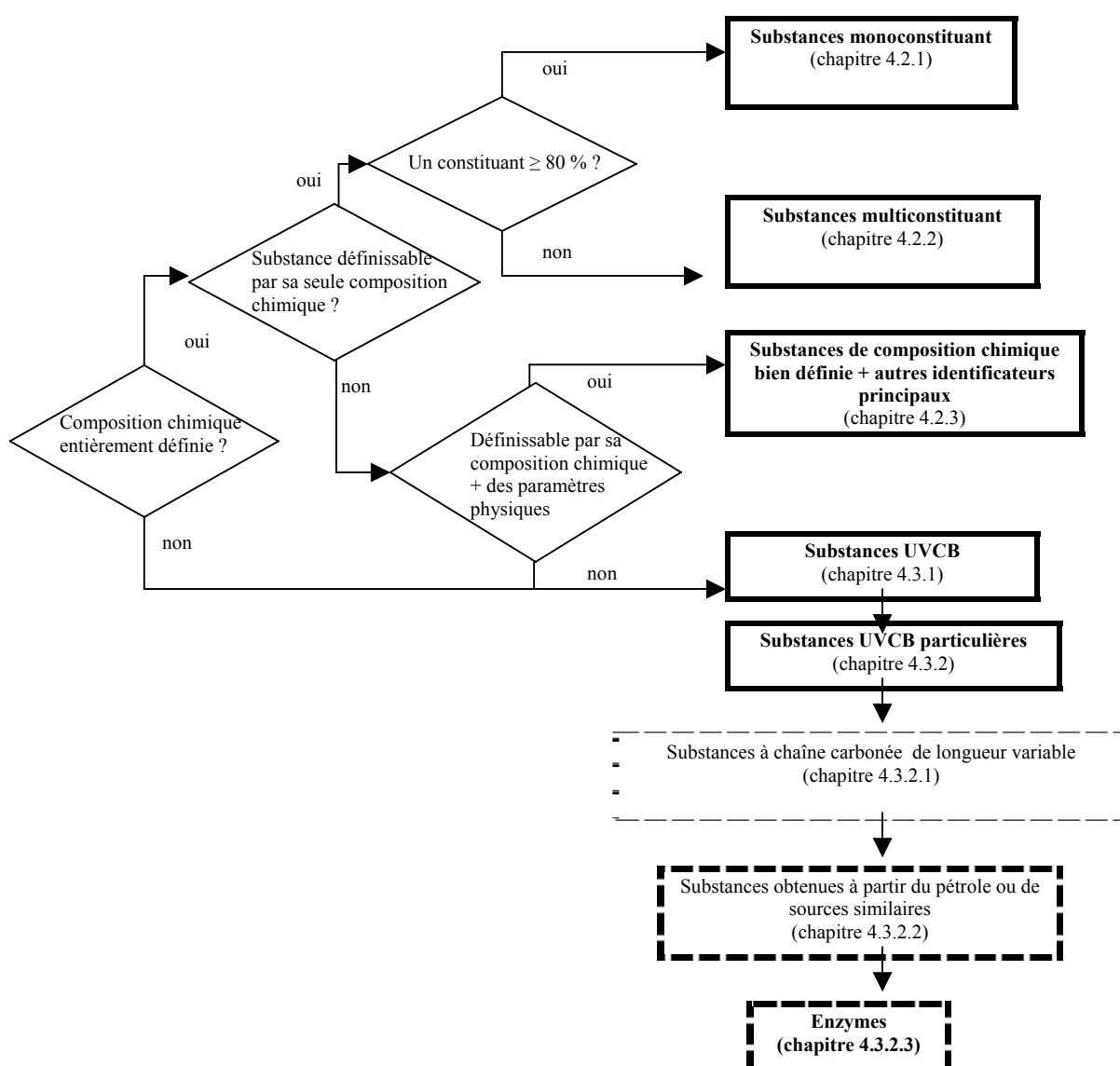
Le présent chapitre est divisé en sous-chapitres contenant des orientations spécifiques par types de substances. Le diagramme de la figure 4.1 permet de se reporter aux chapitres appropriés.

Ce guide est fondé sur des critères empiriques. Il incombe au déclarant de choisir le chapitre le plus adapté et d'enregistrer l'identité de la substance selon les règles et critères correspondants.

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

Si le déclarant s'écarte des règles et critères d'identification des substances énoncés dans le présent GT, il y a lieu de fournir des justifications. L'identification des substances devrait être assurée de façon transparente et responsable, et offrir des garanties de cohérence.

Figure 4.1 Diagramme renvoyant aux chapitres et annexes applicables selon le type de substances



Chapitres applicables selon les paramètres d'identification des substances

Un aperçu des méthodes d'analyse et/ou des références bibliographiques appropriées pour l'identification des substances et, le cas échéant, pour l'identification des impuretés et additifs doit être fourni (REACH annexe VI, sections 2.3.5, 2.3.6 et 2.3.7). Ces informations devraient être suffisantes pour que les méthodes puissent être reproduites.

4.2 SUBSTANCES DE COMPOSITION BIEN DEFINIE

Les substances de composition chimique bien définie sont désignées d'après leur(s) constituant(s) principal (principaux). Pour certains types de substances, la seule composition chimique ne suffit pas à les caractériser. En pareil cas, l'information doit être complétée par des paramètres physiques relatifs aux structures chimiques.

En règle générale, il y a lieu de viser l'établissement de la composition à 100 %, et la spécification chimique complète de chaque constituant, incluant les informations sur la structure. Pour les substances qui sont définies par leur composition chimique, une distinction est établie entre les éléments suivants :

Constituant principal : Constituant d'une substance qui n'est ni un additif, ni une impureté, qui représente une part importante de cette substance et qui intervient donc dans la désignation et l'identification précise de la substance.

Impureté : Tout constituant non souhaité présent dans une substance à l'issue du processus de fabrication. Il peut provenir des matières premières ou résulter de réactions secondaires ou incomplètes au cours du processus de fabrication. Bien que présent dans la substance finale, il n'a pas été ajouté intentionnellement.

Additif : Une substance ajoutée intentionnellement pour stabiliser la substance.

Tous les constituants (à l'exception des additifs) qui ne sont pas le(s) constituant(s) principal (principaux) d'une substance monoconstituant ou multiconstituant sont considérés comme des impuretés. Bien que dans certains secteurs, il soit d'usage d'utiliser le terme de « traces », seul le terme d'« impuretés » est utilisé dans le présent GT.

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

Les constituants principaux interviennent dans la désignation de la substance, et chacun d'eux doit être complètement spécifié, en utilisant tous les identifiants pertinents ;

Les impuretés n'interviennent pas dans la désignation de la substance, et doivent être spécifiées seulement par leur nom, numéro CAS et numéro CE et/ou formule brute;

Les additifs contribuent à la composition de la substance (mais non à sa désignation) et devraient toujours être complètement identifiés.

Certaines conventions sont utilisées pour distinguer les substances mono- des substances multiconstituant :

Une substance monoconstituant est une substance dans laquelle un constituant est présent à 80 % au moins (en masse/masse) et qui contient au maximum 20 % (en masse/masse) d'impuretés.

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

Une substance multiconstituant est une substance qui présente plusieurs constituants principaux à des concentrations généralement $\geq 10\%$ et $< 80\%$ (en masse/masse).

Une substance multiconstituant est désignée comme un mélange réactionnel d'au moins deux constituants principaux.

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

En principe, les impuretés présentes à une concentration $\geq 1\%$ devraient être spécifiées. Cependant, les impuretés importantes pour la classification et/ou l'évaluation PBT⁴ doivent être spécifiées dans tous les cas. En règle générale, les informations devraient être complètes pour 100 % de la composition.

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

Les préparations, selon la définition de REACH, sont des mélanges intentionnels de substances et ne doivent donc pas être considérées comme des substances multiconstituant⁵.

Des orientations spécifiques sont fournies au chapitre 4.2.1 sur les substances monoconstituant, et au chapitre 4.2.2 sur les substances multiconstituant. Le chapitre 4.2.3 apporte des précisions sur les substances pour lesquelles des informations complémentaires sont requises (certains minéraux, par exemple).

4.2.1 Substances monoconstituant

Une substance monoconstituant est une substance définie par sa composition quantitative dans laquelle un constituant principal est présent à 80 % au moins (en masse/masse).

⁴ Pour plus de précisions sur l'évaluation PBT et les limites de concentration correspondantes, on se reportera au GT RIP 3.2 « Évaluation de la sécurité chimique », section Evaluation PBT.

⁵ Dans le cadre du futur Système général harmonisé de classification et d'étiquetage, les « préparations » seront désignées par le terme de « mélanges ».

4.2.1.1 Convention de désignation

Une substance monoconstituant est désignée par le nom de son constituant principal. En principe, ce nom devrait être donné en anglais conformément aux règles de la nomenclature IUPAC (voir l'annexe 1). D'autres descriptions faisant l'objet d'un consensus international peuvent être données en complément.

4.2.1.2 Identifiants

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

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

Le constituant principal est normalement présent à 80 % au moins et devrait être complètement spécifié par tous les paramètres mentionnés ci-dessus. Les impuretés présentes à une concentration ≥ 1 % devraient être spécifiées par l'un au moins des identifiants suivants : nom chimique (IUPAC et/ou nom CAS), numéro CAS et numéro CE et/ou formule moléculaire. Les impuretés importantes pour la classification et/ou l'évaluation PBT⁶ doivent toujours être spécifiées par ces mêmes identifiants, indépendamment de leur concentration.

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

La « règle des 80 % » s'appliquait à la notification de substances nouvelles (Directive 67/548/CEE). On peut considérer qu'il s'agit d'une règle établie de manière empirique. Cependant, tout écart par rapport à cette règle des 80 % doit être justifié. Exemples d'écarts justifiés :

Le constituant principal est < 80 % mais il peut être démontré que la substance a des propriétés physico-chimiques similaires et le même profil de risque que d'autres substances monoconstituant ayant la même identité et satisfaisant à la règle des 80 %.

L'intervalle des concentrations du constituant principal et des impuretés ne respecte pas la règle des 80 %, mais le constituant principal n'est qu'occasionnellement ≤ 80 %.

⁶ Pour plus de précisions sur l'évaluation PBT et les limites de concentration correspondantes, on se reportera au GT RIP 3.2 « Evaluation de la sécurité chimique », section Evaluation PBT.

Exemples									
Substance	Constituant principal	Teneur maximale (%)	Teneur habituelle (%)	Teneur minimale (%)	Impureté	Teneur maximale (%)	Teneur habituelle (%)	Teneur minimale (%)	Identité de la substance
1	o-xylène	98	85	65	m-xylène	35	15	10	o-xylène
2	o-xylène m-xylène	90 35	85 15	65 10	p-xylène	5	4	1	o-xylène

Compte tenu des domaines de concentration du constituant principal et de l'impureté, les substances 1 et 2 peuvent être considérées comme des substances multiconstituant comprenant deux constituants principaux, le o-xylène et le m-xylène, ou comme des substances monoconstituant. La décision en pareil cas est de considérer l'une et l'autre comme substance monoconstituant, et ce d'autant plus que le o-xylène est habituellement présent à plus de 80 %.

On trouvera au chapitre 8.2.1 des indications sur la description des substances monoconstituant selon IUCLID 5.

4.2.1.3 Données analytiques

Des données spectrales suffisantes sont nécessaires pour confirmer la structure d'une substance monoconstituant. Plusieurs méthodes de spectroscopie peuvent convenir, en particulier la spectroscopie d'absorption ultraviolet et visible (UV/VIS), la spectroscopie infrarouge (IR), la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire (RMN) et la spectroscopie de masse (SM). Pour les substances inorganiques, l'utilisation de la diffraction des rayons X (DRX), de la fluorescence X (FX) ou de la spectroscopie d'absorption atomique (SAA) peut être plus adaptée.

Des méthodes chromatographiques, comme la chromatographie en phase gazeuse (CG) ou la chromatographie liquide haute performance (CLHP), sont nécessaires pour confirmer la composition de la substance. S'il y a lieu, d'autres techniques validées de séparation des constituants peuvent être appliquées.

Les méthodes spectroscopiques et analytiques sont en constante évolution. Il est donc de la responsabilité du déclarant de présenter des données spectrales et analytiques appropriées.

4.2.2 Substances multiconstituant

Une substance multiconstituant est une substance, définie par sa composition quantitative, qui comporte plus d'un constituant principal à une concentration $\geq 10\%$ (en masse/masse) et $< 80\%$. Une substance multiconstituant est le résultat d'un processus de fabrication⁷.

REACH exige l'enregistrement d'une substance telle qu'elle est produite. Si une substance multiconstituant est fabriquée, c'est cette substance multiconstituant qui doit être enregistrée^{8 9}. Il convient d'établir au cas par cas dans quelle mesure les différentes étapes de production de la substance sont couvertes par la définition du terme « fabrication ». Toutes les

⁷ La différence entre une préparation et une substance multiconstituant est qu'une préparation est obtenue par mélange d'au moins deux substances, sans réaction chimique, alors qu'une substance multiconstituant est le résultat d'une réaction chimique.

⁸ Un certain nombre de substances sont exemptées d'enregistrement (substances listées à l'annexe IV, par exemple).

⁹ Ce principe ne s'applique pas à certaines substances comme les minéraux (voir le chapitre 7.5 pour plus de précisions)

substances précédemment couvertes par EINECS (les substances multiconstituant, en particulier, étaient couvertes si chacun de leurs constituants figurait à l'inventaire EINECS) peuvent en principe bénéficier d'un régime transitoire. Il n'est pas nécessaire de tester la substance en tant que telle si le profil de risque de la substance peut être décrit de façon satisfaisante à partir des informations sur ses différents constituants.

4.2.2.1 Convention de désignation

Une substance multiconstituant est désignée comme un mélange réactionnel de ses principaux constituants en tant que tels ; il ne s'agit donc pas des matières premières nécessaires pour produire la substance. Le format générique est « Mélange réactionnel de [noms des constituants principaux] ». Les noms des constituants sont énumérés selon l'ordre décroissant de leurs concentrations habituelles. Seuls les constituants principaux habituellement $\geq 10\%$ interviennent dans le nom. Les noms sont en principe donnés en anglais, conformément aux règles de la nomenclature IUPAC. D'autres désignations faisant l'objet d'un consensus international peuvent être ajoutées.

4.2.2.2 Identifiants

Une substance multiconstituant est identifiée par le nom chimique et les identifiants de la substance en tant que telle, ainsi que par la composition chimique quantitative et qualitative (identité chimique, y compris formule brute et développée) de ses constituants, ces informations étant attestées par des données analytiques.

Exemple				
Constituants principaux	Teneur (%)	Impureté	Teneur (%)	Identité de la substance
m-xylène	50	p-xylène	5	Mélange réactionnel de m-xylène et o-xylène
o-xylène	45			

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

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

Les impuretés présentes à une concentration $\geq 1\%$ devraient être spécifiées par l'un au moins des identifiants suivants : nom chimique, numéro CAS et numéro CE et/ou formule moléculaire. Les impuretés importantes pour la classification et/ou l'évaluation PBT doivent être spécifiées dans tous les cas par ces mêmes identifiants, quelle que soit leur concentration.

Exemple								
Constituant principal	Teneur maximale (%)	Teneur habituelle (%)	Teneur minimale (%)	Impureté (%)	Teneur maximale (%)	Teneur habituelle (%)	Teneur minimale (%)	Identité de la substance
Aniline	90	75	65	Phenanthrène	5	4	1	Mélange Réactionnel d'aniline et de naphthalène
Naphthalène	35	20	10					

Selon les règles du présent GT, cette substance est une substance multiconstituant. Bien que l'intervalle de concentration d'un constituant excède 80 %, cela ne survient qu'occasionnellement et la teneur habituelle est < 80 %.

Il peut être opportun de considérer une substance comme une substance multiconstituant, même lorsque l'un de ses constituants est présent à ≥ 80 %, par exemple lorsqu'une substance comporte deux constituants, l'un à 85 % et l'autre à 10 %, le reste étant constitué d'impuretés, et que les deux constituants sont essentiels pour obtenir l'effet technique recherché. Dans ce cas, bien que l'un des constituants représente plus de 80 % de la substance, celle-ci peut être décrite comme une substance à deux constituants.

On trouvera au chapitre 8.2.2 des indications sur la description d'une substance multiconstituant sous IUCLID 5.

4.2.2.3 Données analytiques

Dans les cas où les données spectrales apportent des informations sur la composition d'une substance multiconstituant, ces informations devraient être fournies. Plusieurs méthodes spectroscopiques peuvent être adaptées, en particulier la spectroscopie d'absorption ultraviolet et visible (UV/VIS), la spectroscopie infrarouge (IR), la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire (RMN) et la spectroscopie de masse (SM). Pour les substances inorganiques, il peut être préférable d'utiliser la diffraction des rayons X (DRX), la fluorescence X (FX) ou la spectroscopie d'absorption atomique (SAA).

L'utilisation de méthodes chromatographiques comme la chromatographie en phase gazeuse (CG) et/ou la chromatographie liquide haute performance (CLHP) est nécessaire pour confirmer la composition de la substance. D'autres techniques validées de séparation des constituants peuvent être utilisées, s'il y a lieu.

Les méthodes de spectroscopie et d'analyse sont en constante évolution. Il est donc de la responsabilité du déclarant de présenter des données spectrales et analytiques appropriées.

4.2.2.4 Enregistrement de chacun des constituants d'une substance multiconstituant

En général, la description de l'identité de la substance pour les besoins de l'enregistrement (préalable) devrait suivre l'approche prévue pour les substances multiconstituant (à savoir l'enregistrement en tant que substance multiconstituant). Par dérogation à cette approche, les constituants peuvent être enregistrés séparément si cela est justifié. Cette possibilité de déroger au cas standard et de procéder séparément à l'identification (et, potentiellement, à l'enregistrement) des constituants de la substance existe lorsque :

- il n'en résulte pas une baisse des exigences relatives aux informations à fournir ;
- il y a suffisamment de données existantes pour justifier la démarche d'enregistrement de la substance par ses différents constituants, c'est-à-dire que cette démarche ne devrait pas, normalement, induire des essais supplémentaires (sur des animaux vertébrés) par rapport à la démarche standard ;
- l'enregistrement séparé de chacun des constituants conduit à une solution plus pertinente (en évitant les enregistrements multiples de substances composées des mêmes constituants) ;
- les informations requises sur la composition de chaque mélange réactionnel sont fournies.

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

Substance C

- Tonnage 600
- Exigences relatives aux informations à fournir pour > 1000 tonnes (annexe X)

Substance D

- Tonnage 600
- Exigences relatives aux informations à fournir pour > 1000 tonnes (annexe X)

Il faut en effet tenir compte, dans cette démarche, de l'exigence fixée par REACH d'additionner les volumes d'une même substance par entité légale. Il est proposé de fixer les exigences relatives aux données à fournir comme suit :

- additionner tous les volumes des différents constituants (selon les quantités contenues dans la substance)
- se référer au volume maximal de substance qui contient ce constituant

Pour déterminer les exigences en matière d'information, on retiendra le plus élevé des deux résultats. En matière de tonnages, il convient de prendre la somme des tonnages de chacun des différents constituants. Des exemples simplifiés sont donnés ci-après pour illustrer l'application pratique de cette démarche :

Exemple 1 :

La substance multiconstituant « C+D+E » résulte d'un processus au sein d'une même entité légale, qui a pour résultat différentes substances :

Substance 1 : 50 % C, 25 % D et 25 % E, 1100 tonnes par an (tpa)

Substance 2 : 50 % C et 50 % D, 500 tonnes par an

Le point de départ est, encore une fois, le produit de réaction : les deux substances devraient être enregistrées comme substances multiconstituant. Si l'on retient la démarche d'enregistrement de chacun des constituants¹⁰, il convient d'appliquer les règles suivantes :

Déclaration relative à la substance D :

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

La détermination des exigences en matière d'information se fonde sur l'exigence la plus sévère, en l'occurrence : > 1000 tonnes par an, car le tonnage total de la substance multiconstituant « C+D+E » est supérieur à 1000 tonnes par an.

N.B. : dans cet exemple, les substances C et E seraient enregistrées selon le même principe.

Exemple 2 :

La substance multiconstituant « G+H+I » résulte d'un processus au sein d'une même entité légale, qui a pour résultat différentes substances :

Substance 3 : 65 % G, 15 % H et 20 % I, 90 tonnes par an

Substance 4 : 60 % G et 40 % H, 90 tpa

Déclaration de la substance G :

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

La détermination des informations à fournir est basée sur l'exigence la plus sévère, ici > 100 tonnes par an, car le tonnage total du constituant G est supérieur à 100 tonnes par an.

N.B. : dans cet exemple, les substances H et I seraient enregistrées selon le même principe.

Il faut non seulement déterminer, comme on l'a vu, les informations à fournir, mais également tenir compte du nombre d'études nouvelles à réaliser sur des animaux vertébrés. Avant d'opter pour une stratégie, les déclarants potentiels doivent se demander s'il y a suffisamment d'études existantes (sur vertébrés) et si la flexibilité proposée se traduira par une augmentation ou une diminution du nombre de nouveaux tests (sur vertébrés). Il y a lieu de retenir la stratégie qui évite de nouveaux tests (sur des animaux vertébrés).

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

¹⁰ Il s'agit uniquement, par cet exemple, d'illustrer comment déterminer les exigences en matière d'information et comment déclarer les volumes, et non pas d'examiner si la démarche est justifiable dans ce cas.

4.2.3 Substances identifiées par leur composition chimique et d'autres identifiants principaux

Certaines substances (minéraux inorganiques, par exemple) dont la composition chimique est connue requièrent en outre une spécification par d'autres identifiants, pour être parfaitement identifiées. Ces substances, qu'elles soient mono- ou multiconstituant, nécessitent, en plus des paramètres d'identification décrits dans les chapitres précédents, d'autres identifiants principaux permettant de rendre compte de leur identité de façon non équivoque.

Exemples
Certains minéraux non métalliques (qu'ils soient d'origine naturelle ou artificielle) présentant des structures uniques ne peuvent être identifiés sans équivoque que si l'on dispose aussi de leur morphologie et de leur composition minéralogique. Exemple : le kaolin (CAS 1332-58-7), composé de kaolinite, de silicate de potassium et d'aluminium, de feldspath et de quartz.

Avec le développement des nanotechnologies et l'évolution des connaissances sur les risques liés à ces technologies, il pourrait en outre être nécessaire à l'avenir, de fournir des informations sur la taille et les surfaces de ces substances. Il est encore trop tôt, cependant, pour que soient incluses dans le présent GT des indications sur l'identification des substances nanostructurées.

4.2.3.1 Convention de désignation

La même convention s'applique, pour l'essentiel, pour les substances monoconstituant (chapitre 4.2.1) ou multiconstituant (chapitre 4.2.2).

Dans le cas des minéraux inorganiques, les noms minéralogiques peuvent être utilisés pour les constituants. L'apatite, par exemple, est une substance multiconstituant qui comprend un groupe de minéraux phosphate habituellement désignés par les termes d'hydroxylapatite, fluorapatite et chlorapatite, ainsi nommés en raison de leurs concentrations élevées en ions OH^- , F^- ou Cl^- , respectivement, dans le réseau cristallin. La formule du mélange des trois espèces les plus communes est $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$. Un autre exemple est l'aragonite, l'une des structures cristallines particulières du carbonate de calcium.

4.2.3.2 Identifiants

Ces substances sont identifiées et désignées conformément aux règles applicables aux substances monoconstituant (chapitre 4.2.1) ou multiconstituant (chapitre 4.2.2). Les autres paramètres d'identification spécifiques dépendent de la substance. Il peut s'agir de la composition élémentaire complétée par les données spectrales, de la structure cristalline analysée par diffraction des rayons X (DRX), des pics d'absorption infrarouge, de l'indice d'expansion, de la capacité d'échange cationique ou d'autres propriétés physico-chimiques.

Pour les minéraux en effet, il est important de combiner les résultats de la composition élémentaire et les données spectrales pour identifier la composition minéralogique et la structure cristalline, qui est ensuite confirmée par des propriétés physico-chimiques caractéristiques comme la structure cristalline (établie par diffraction des rayons X), la forme, la dureté, la capacité d'expansion, la densité et/ou la surface spécifique.

On peut citer des exemples d'identifiants principaux complémentaires spécifiques pour les minéraux, car ceux-ci présentent des propriétés physico-chimiques caractéristiques permettant

de compléter leur identification : très faible indice de dureté pour le talc, capacité d'expansion pour la bentonite, formes de la diatomite, densité très élevée pour la baryte ou surface spécifique (adsorption d'azote).

On trouvera au chapitre 8.2.3 des indications sur la description, sous IUCLID 5, des substances possédant une composition chimique définie et d'autres identifiants principaux.

4.2.3.3 Données analytiques

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

4.3 SUBSTANCES UVCB

Les substances de composition inconnue ou variable, produits de réactions complexes ou matériels biologiques, appelées encore « substances UVCB », ne peuvent pas être identifiées de façon satisfaisante par leur composition chimique, car :

- Le nombre de leurs constituants est relativement élevé, et/ou
- Leur composition est, pour une part significative, inconnue, et/ou
- La variabilité de leur composition est relativement grande et difficilement prédictible.

L'identification des substances UVCB requiert donc d'autres types d'informations, en complément des données dont on dispose sur leur composition chimique.

Comme on le voit au tableau 4.2, les identifiants principaux applicables aux différents types de substances UVCB ont trait à la source de la substance et au processus mis en œuvre ; ils peuvent également relever d'autres identifiants principaux comme les empreintes chromatographiques ou autres par exemple. Le nombre et la nature des identifiants indiqués au tableau 4.2 illustrent la variabilité des types ; l'objet n'est pas d'en donner un aperçu complet. Lorsque la composition chimique d'un produit de réaction complexe, par exemple, ou d'une substance d'origine biologique est connue, la substance devrait selon les cas être identifiée soit comme mono-, soit comme multiconstituant. Le fait de définir une substance comme UVCB implique que tout changement significatif de source ou d'origine ou de procédé conduira probablement à une substance différente, qui devra à son tour faire l'objet d'un enregistrement. Dans le cas d'un mélange réactionnel identifié comme « substance multiconstituant », en revanche, la source et/ou le processus d'où dérive la substance peuvent changer sans que cela impose un nouvel enregistrement, tant que la composition de la substance finale reste dans les limites de l'intervalle spécifié.

On trouvera au chapitre 4.3.1 des orientations générales sur les substances UVCB et au chapitre 4.3.2 des indications spécifiques sur des types particuliers de substances UVCB :

substances à longueurs de chaîne carbonée variables, substances dérivées du pétrole ou de sources similaires et enzymes.

4.3.1 Orientations générales sur les substances UVCB

Le présent chapitre du GT donne des indications générales sur la façon d'utiliser certains identifiants principaux, en complément des paramètres d'identification prévus à l'annexe VI (section 2) de REACH, pour identifier les substances UVCB.

4.3.1.1 Informations sur la composition chimique

Les substances UVCB, si elles ne peuvent pas être spécifiées de façon univoque à l'aide du nom IUPAC des constituants du fait de l'impossibilité d'identifier tous les constituants, peuvent alors être spécifiés de façon générique, mais avec un manque de spécificité lié à la variabilité de la composition exacte. Du fait du manque de différenciation entre constituants et impuretés, les termes « constituants principaux » et « impuretés » ne devraient pas être considérés comme pertinents pour les substances UVCB.

Cependant, la composition chimique et l'identité des constituants doivent là encore être indiquées, dans la mesure où elles sont connues. Il est souvent possible de décrire la composition de façon générique, dans des termes tels que « acides gras linéaires C8-C16 » ou « éthoxylates d'alcool avec alcools C10-C14 et unités éthoxylates 4-10 ». Des informations sur la composition chimique peuvent en outre être fournies sur la base d'échantillons de référence ou de normes ; dans de nombreux cas, des index et des codes existants peuvent également être utilisés. Les « empreintes », à savoir les images chromatographiques ou spectrales montrant une distribution caractéristique des pics constituent également des informations génériques sur la composition.

Pour une substance UVCB, tous les constituants connus présents à des concentrations $\geq 10\%$ devraient être spécifiés au minimum par le nom (IUPAC en anglais) et, si possible, un numéro CAS ; les concentrations et intervalles de concentration types des constituants connus devraient également être indiqués. Les constituants importants pour la classification et/ou l'évaluation PBT¹¹ de la substance devront toujours être identifiés par ces mêmes identifiants, indépendamment de leur concentration.

Les constituants inconnus sont, si possible, caractérisés par une description générique de leur nature chimique. Les additifs devraient être complètement spécifiés, d'une façon similaire à celle décrite pour les substances bien définies.

4.3.1.2 Paramètres d'identification principaux : nom, source et processus

La composition chimique ne suffisant pas à elle seule pour l'identification de la substance, celle-ci sera en général identifiée par son nom, son origine ou sa source et les étapes les plus pertinentes du procédé. D'autres propriétés des substances peuvent intervenir dans l'identification, soit comme identificateur générique (point d'ébullition, par exemple), soit,

¹¹ Pour plus d'information sur l'évaluation PBT et les limites de concentration applicables, voir le GT RIP 3.2 Evaluation de la sécurité chimique, section relative à l'évaluation PBT.

pour certains groupes de substances, comme élément crucial de l'identification (activité catalytique pour les enzymes, par exemple).

1. Convention de désignation

En général, le nom d'une substance UVCB est une combinaison de la source et du procédé, dont le format général est le suivant : d'abord la source, puis le(s) procédé.

- Une substance dérivée de sources biologiques est identifiée par le nom de l'espèce.
- Une substance dérivée de sources non biologiques est identifiée par les matières premières.
- Les processus sont identifiés soit par le type de réaction chimique en cas de synthèse de nouvelles molécules, soit par le type de procédé de purification (extraction, fractionnement, concentration, par exemple), soit en tant que résidu.

Exemples	
Numéro CE	Nom CE
296-358-2	Lavande, <i>Lavandula hybrida</i> , ext., acetylée
307-507-9	Lavande, <i>Lavandula latifolia</i> , ext., sulfurée, sel de palladium

Dans le cas des produits de réactions, différents formats ont été utilisés dans l'inventaire CE ; exemples :

EINECS : matière première principale, produit(s) de réaction avec d'autre(s) matière(s) première(s)

ELINCS : produit(s) de réactions de(s) matière(s) première(s)

Exemples	
Numéro CE	Nom CE
232-341-8	Acide nitreux, produit de réaction avec le 4-méthyl-1,3 benzènediamine chlorhydrate
263-151-3	Acides gras, coco, produits de réaction avec la diéthylènetriamine
400-160-5	Produits de réaction d'acides gras de tall oil, de diéthanolamine et d'acide borique
428-190-4	Produit de réaction de : 2,4-diamino-6[2-(2-méthyl-1H-imidazol-1-yl) éthyl]-1,3,5-triazine et d'acide cyanurique

Dans le présent GT, le format générique pour le nom des produits de réaction est « Produit de réaction de [noms des matières premières] ». En principe, les noms devraient être indiqués en anglais selon les règles de la nomenclature IUPAC. D'autres désignations faisant l'objet d'un consensus international peuvent être ajoutées. Il est recommandé de remplacer le mot « réaction », dans la dénomination, par le type spécifique de réaction, décrit de façon générique par des termes tels qu'estérification, par exemple, ou formation de sel, etc. (voir les précisions ci-après pour les quatre sous-classes d'UVCB).

2. Source

La source peut être subdivisée en deux groupes :

2.1 Sources de nature biologique

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

Exemples	
Numéro CE	Nom CE
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ext.
	Description CE
	Produits d'extraction et leurs dérivés physiquement modifiés tels que teintures, concrètes, essences absolues, huile essentielle, oléorésines, terpènes, fractions sans terpènes, distillats, résidus, etc., obtenus à partir de Saccharomyces cerevisiae, Saccharomycelaceae.
296-350-9	Arnica mexicana, ext.
	Description CE
	Produits d'extraction et leurs dérivés physiquement modifiés tels que teintures, concrètes, essences absolues, huiles essentielles, oléorésines, terpènes, fractions sans terpène, distillats, résidus, etc., obtenus à partir de Arnica mexicana, Compositae

2.2 Sources chimiques ou minérales

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

3. Procédés

Les procédés sont identifiés soit par le type de réaction chimique, en cas de synthèse de nouvelles molécules, soit par l'étape de séparation (extraction, fractionnement, concentration, par exemple), soit en tant que résidu d'un procédé de séparation.

Pour certaines substances comme les dérivés chimiques, le procédé devra être décrit comme une combinaison de purification et de synthèse.

Synthèse

Une réaction chimique ou biochimique donnée a lieu entre les matières premières, ayant la substance pour résultat. Exemple : la réaction de Grignard, avec sulfonation, clivage enzymatique par protéase ou lipase, etc. De nombreuses réactions de dérivation appartiennent également à ce type.

Pour les substances nouvellement synthétisées dont la composition chimique ne peut pas être indiquée, les matières premières constituent l'identifiant principal, avec une

spécification de la réaction, c'est-à-dire du type de réaction chimique. Le type de réaction chimique fournit une indication sur les molécules prédictibles dans la substance. Il existe plusieurs types de réactions chimiques finales : hydrolyse, estérification, alkylation, chloration, etc. Dans la mesure où cela ne fournit qu'une information générique sur les substances susceptibles d'être produites, une empreinte chromatographique sera également nécessaire dans bien des cas pour une caractérisation et une identification complètes de la substance.

Exemples	
Numéro CE	Nom CE
294-801-4	Huile de lin, époxydée, produit de réaction avec la tétraéthylènepentamine
401-530-9	Produit de réaction de (2-hydroxy-4-(3-propénoxy)benzophénone et triéthoxysilane) avec (produit d'hydrolyse de silice et méthyltriméthoxysilane)

Séparation

La séparation peut être appliquée sous de nombreuses formes à des substances d'origine naturelle ou minérale, sans modifier l'identité chimique des constituants, mais en modifiant leur concentration : traitement à froid d'un tissu végétal, par exemple, suivi d'extraction par un alcool.

La technique de séparation peut être définie plus précisément par des procédés comme l'extraction. L'identification de la substance dépend du type de procédé :

Pour les substances dérivées par des méthodes physiques, comme la séparation ou le fractionnement, il convient de spécifier les valeurs limites de l'intervalle et le paramètre de la fraction (en indiquant par exemple la taille moléculaire, la longueur de chaîne, le point d'ébullition, l'intervalle de volatilité, etc.) ;

Pour les substances dérivées par concentration, comme les produits issus de procédés métallurgiques, les précipités de centrifugation, les résidus de filtration, etc., le procédé de concentration devra être spécifié, ainsi que la composition générique de la substance en résultant, par comparaison avec la matière première ;

Exemples	
Numéro CE	Nom CE
408-250-6	Concentrat de composé organique du tungstène (produits de réaction de l'hexachlorure de tungstène avec le 2-méthylpropane-2-ol, nonylphénol et le pentane-2,4-dione)

Pour les résidus d'une réaction spécifique (scories, goudrons, fractions lourdes, par exemple), le processus doit être décrit, ainsi que la composition générique de la substance en résultant ;

Exemples	
Numéro CE	Nom CE
283-659-9	Etain, résidus de fonderie
	Description CE
	Substance résultant de l'utilisation et de la production de l'étain et de ses alliages, obtenue à partir de sources primaires et secondaires incluant des intermédiaires de fabrication recyclés. Constituée principalement de composés de l'étain, peut contenir d'autres métaux non ferreux ou composés de métaux non ferreux résiduels.
293-693-6	Farine de soja, extraction de protéines. Résidu
	Description CE
	Sous-produit constitué principalement de glucides, résultant d'une extraction éthanolique de graines de soja dégraissées

Pour les extraits, il y a lieu d'indiquer la méthode d'extraction, le solvant utilisé pour l'extraction et d'autres paramètres pertinents comme la température/intervalle de température, par exemple.

En cas de combinaison de processus, chaque étape sera spécifiée (de façon générique) en complément des informations lié à la source. La combinaison des processus a une importance particulière en cas de dérivation chimique.

Exemples :

- Une plante subit d'abord une extraction, l'extrait est distillé et la fraction distillée de l'extrait de plante est utilisée pour une dérivation chimique. La substance en résultant peut encore être purifiée. Le produit purifié peut éventuellement être bien défini par sa composition chimique et il n'est alors pas nécessaire d'identifier la substance comme substance UVCB. Si le produit doit toujours être considéré comme une substance UVCB, le processus combiné peut être décrit par les termes « dérivé chimique purifié d'une fraction distillée d'un extrait de plante ».

Si le traitement d'un extrait comporte seulement une modification physique, la composition va changer mais sans synthèse intentionnelle de nouvelles molécules. Le changement de composition aboutit néanmoins à une substance différente, un distillat ou un précipité d'extrait de plante, par exemple.

- Pour la production de produits pétroliers, la dérivation chimique et le fractionnement sont souvent utilisés en combinaison. Ainsi, la distillation du pétrole suivie du craquage génère une fraction de la matière première mais aussi de nouvelles molécules. Dans ce cas, les deux types de procédés devraient donc être identifiés, ou le distillat devrait être spécifié comme matière première du craquage. Cela s'applique particulièrement aux dérivés du pétrole, qui résultent souvent d'une combinaison de procédés. Cependant, une démarche spécifique peut être utilisée pour l'identification des substances dérivées du pétrole (voir le chapitre 4.3.2.2).

Dans la mesure où un dérivé chimique d'un extrait ne contient pas les mêmes constituants que l'extrait d'origine, il sera considéré comme une substance différente. Cette règle peut entraîner une identification par le nom et une description différente de celle retenues dans le cadre d'EINECS. Lors de la mise en place de l'inventaire EINECS, les extraits obtenus par des procédés ou des solvants différents, voire les dérivés physiques ou chimiques, étaient souvent couverts par une même entrée. Ces substances peuvent être enregistrées comme une même substance, dans le cadre de REACH, à condition que les propriétés dangereuses ne diffèrent pas et conduisent à la même classification. Cependant, il peut être justifié (en cas de description large des substances dans l'inventaire EINECS, par exemple) d'identifier plusieurs substances différentes sous un même numéro EINECS.

4. Autres paramètres d'identification des substances

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

Pour certains types de substances, des paramètres d'identification complémentaires peuvent être particulièrement pertinents. Ces paramètres sont notamment les suivants :

- Description générique de la composition chimique ;
- Empreinte chromatographique ou autre ;
- Documents de référence (ISO, par exemple) ;
- Paramètres physico-chimiques (point d'ébullition, par exemple) ;
- Numéro de Colour Index ;
- Numéro AISE.

On trouvera ci-dessous des indications sur la façon d'utiliser les informations liées au nom, à l'origine et au procédé pour l'identification des substances UVCB, selon le type de sources et de procédés. Quatre sous-types de substances UVCB sont décrits selon les diverses combinaisons de sources (biologique ou chimique/minérale) et de procédés (synthèse ou séparation).

Le chapitre 8.2.4 précise comment décrire les substances UVCB selon IUCLID 5.

Sous-type 1 d'UVCB, source : biologique, procédé : synthèse

Les substances d'origine biologique peuvent être modifiées par des procédés (bio)chimiques pour produire des constituants qui n'étaient pas présents dans la matière première, tels que des dérivés chimiques d'extraits de plantes par exemple, ou des produits générés par traitement enzymatique des extraits. Ainsi, les protéines peuvent être hydrolysées par des protéases pour générer des oligopeptides, ou la cellulose provenant du bois peut être carboxylée pour obtenir de la carboxyméthylcellulose (CMC).

Les produits de fermentation peuvent également relever de ce sous-type d'UVCB. La vinasse, par exemple, est un produit de fermentation du sucre qui, comparée au sucre, contient de nombreux constituants différents. Lorsque des produits de fermentation sont purifiés, les substances peuvent finalement devenir complètement identifiables par leur composition chimique et ne devraient plus être identifiées comme substances UVCB.

Les enzymes constituent un groupe de substances particulières, qui peuvent être dérivées par extraction puis purification à partir d'une source d'origine biologique. Bien que la source et le procédé puissent être spécifiés avec précision, cela ne fournit pas d'information spécifique sur l'enzyme. Pour ces substances, un système de classification, de désignation et d'identification spécifique devront être utilisés (voir le chapitre 4.3.2.3).

Pour l'identification des substances, il convient d'indiquer l'étape finale du processus et/ou toute autre étape pertinente pour l'identité de la substance.

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

Une description du processus biochimique peut être une description générique de la réaction catalysée, avec le nom des enzymes catalysant la réaction.

Pour les substances produites par fermentation ou les cultures (tissulaires) d'espèces, il convient d'indiquer les espèces fermentaires, le type et les conditions générales de fermentation (par lot, en continu, aérobie, anaérobie, anoxique, température, pH, etc.), ainsi que toutes les étapes ultérieures du processus appliquées pour isoler les produits de fermentation, telles que centrifugation, précipitation, extraction, etc. Une purification plus poussée peut générer une fraction, un concentrat ou un résidu. Les substances issues de ces étapes de purification supplémentaires sont identifiées par une spécification des dites étapes.

Sous-type 2 d'UVCB, source : chimique ou minérale, processus : synthèse

Les substances UVCB obtenues à partir de sources chimiques ou minérales, dérivées via un processus au cours duquel sont synthétisées de nouvelles molécules, sont des « produits de réaction ». Il s'agit par exemple des produits obtenus par estérification, alkylation ou chloration. Les réactions biochimiques par voie enzymatique constituent un type particulier de réactions chimiques. Cependant, si une méthode complexe de synthèse biochimique est appliquée en mettant en œuvre des microorganismes complets, il est préférable de considérer la substance comme un produit de fermentation et de l'identifier par le processus de fermentation et l'espèce fermentaire utilisée plutôt que par les matières premières (voir sous-type 4 d'UVCB).

Tout produit de réaction n'est pas nécessairement spécifié comme un UVCB. Si un produit de réaction peut être défini de façon satisfaisante par sa composition chimique (avec un certain degré de variabilité), il est préférable de l'identifier comme une substance multiconstituant (voir chapitre 4.2.2). Ce n'est que lorsque la composition du produit de réaction est insuffisamment connue ou difficilement prévisible que la substance devrait être identifiée comme une substance UVCB (« produit de réaction »). L'identification d'un produit de réaction est basée sur les matières premières mises en œuvre pour la réaction et sur le processus de réaction (bio)chimique au cours duquel la substance est générée.

Exemples		
Numéro CE	Nom EINECS	Numéro CAS
294-006-2	Acide nonanedioïque, produits de réaction avec le 2-amino-2-méthyle-1-propanol	91672-02-5
294-148-5	Formaldéhyde, produits de réaction avec le diéthylène glycol et le phénol	91673-32-4

Un paramètre d'identification principal, pour les produits de réaction, est la description du procédé de fabrication. Pour l'identification des substances, il y a lieu d'indiquer l'étape finale ou l'étape la plus pertinente du processus. La description du processus chimique sera une description générique du type de processus (estérification, hydrolyse alcaline, alkylation, chloration, substitution, etc.) ainsi que des circonstances pertinentes du processus. Un processus biochimique sera décrit par le type de réaction, ainsi que par le nom de l'enzyme catalysant la réaction.

Sous-type 3 d'UVCB, source : biologique, processus : séparation [ou alors raffinement]

Les substances UVCB d'origine biologique, résultant d'un processus de séparation/raffinement dans lequel il n'est pas généré intentionnellement de nouvelles molécules, peuvent être par exemple des extraits, fractions d'extraits, concentrats d'extraits, extraits purifiés ou résidus de traitement de substances d'origine biologique.

Dès lors qu'un extrait est soumis à un nouveau processus, la substance n'est plus identique à l'extrait, mais devient une autre substance appartenant à un autre sous-type d'UVCB (fraction, par exemple, ou résidu d'extrait). Ces substances seront spécifiées à l'aide des paramètres des processus additionnels mis en œuvre. Si l'extrait est modifié au cours de réactions chimiques ou biochimiques générant de nouvelles molécules (dérivés), on suivra, pour l'identification de la substance, les orientations applicables au sous-type 2 d'UVCB ou les indications du chapitre 4.2 pour une substance bien définie.

Cette différenciation liée aux processus appliqués à des extraits peut avoir pour conséquence que le nom et la description diffèrent, dans le nouveau système, de ceux de l'inventaire EINECS. Lors de la mise en place de l'inventaire, cette différenciation n'a pas été faite et tous les types d'extraits, quels que soient les solvants ou les étapes de processus mis en œuvre, peuvent avoir été couverts par une seule et même entrée.

Le premier paramètre d'identification principal, pour ce sous-type d'UVCB, est la famille, le genre et l'espèce de l'organisme à partir duquel est obtenue la substance. Il convient également d'indiquer s'il y a lieu le tissu ou la partie d'organisme utilisé pour l'extraction de la substance, moelle épinière, pancréas, par exemple, ou tige, graines ou racines. Pour les substances d'origine microbiologique, la souche et le type génétique de l'espèce seront spécifiés.

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

Exemples	
Numéro CE	Nom EINECS
290-977-1	Extrait de bois de campêche (<i>Haematoxylon campechianum</i>) oxydé
	Description CE
	Cette substance est identifiée dans le Colour index par le n° C.I. 75290 oxydée
282-014-9	Extrait de pancréas, déprotéiné

Le paramètre d'identification principal de la substance est le processus, extraction, par exemple, ou processus de fractionnement, purification ou concentration, ou processus influant sur la composition du résidu. Le raffinement d'extraits par des processus différents (utilisant des solvants différents ou des étapes de purification différentes, par exemple) donnera donc des substances différentes.

Plus le nombre d'étapes appliquées pour la purification est élevé, plus il devient possible de définir la substance par sa composition chimique. Dans ce cas, l'utilisation d'espèces d'origines différentes ou de variantes du procédé ne conduisent pas forcément à des substances différentes.

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

Lorsque des étapes de processus supplémentaires sont utilisées pour fabriquer la substance, comme le fractionnement ou la concentration, la combinaison des étapes pertinentes du processus devra être décrite – combinaison extraction–fractionnement, par exemple – avec indication des intervalles-limites des coupes.

Sous-type 4 d'UVCB, source : chimique ou minérale, processus : raffinage

Les substances d'origine non biologique, donc obtenues à partir de minéraux, minerais, charbon, gaz naturel, pétrole brut ou d'autres matières premières utilisées dans l'industrie chimique, et résultant de processus ne comportant pas de réaction chimique intentionnelle, peuvent être des fractions (purifiées), concentrats ou résidus de ces processus.

Le charbon et le pétrole brut sont utilisés dans des procédés de distillation ou de gazéification pour obtenir une large gamme de substances telles que des produits pétroliers et gaz combustibles, etc., mais aussi des résidus comme les goudrons et scories. Très souvent, un produit distillé (ou fractionné par une autre méthode) subit immédiatement d'autres processus, y compris des réactions chimiques. En pareil cas, l'identification de la substance se fera selon les indications relatives au sous-type 2 d'UVCB, car le processus est alors plus pertinent que la source.

Pour les substances dérivées du pétrole, un système d'identification spécifique est utilisé (voir le chapitre 4.3.2.2). Les substances couvertes par ce système incluent les fractions et les produits de réactions chimiques.

D'autres substances relevant du sous-type 4 d'UVCB peuvent être des minerais, concentrats de minerais ou scories contenant des quantités variables de métaux qui peuvent être extraits par des processus métallurgiques.

Les minéraux comme la bentonite ou le carbonate de calcium peuvent être traités, par exemple par dissolution acide et/ou par précipitation chimique ou sur colonne échangeuse d'ions. Lorsque la composition chimique est complètement définie, les minéraux devraient être identifiés selon les orientations données à la partie correspondante du chapitre 4.2. Si les minéraux sont traités uniquement par des procédés mécaniques (broyage, tamisage, centrifugation, flottation, etc.), ils sont considérés comme la même substance que les minéraux extraits. Les minéraux produits par un processus de fabrication peuvent, pour les besoins de l'identification¹², être considérés comme identiques à leur équivalent présent dans la nature, à condition que leur composition soit similaire et leur profil de toxicité identique.

Un paramètre principal d'identification, pour les substances d'origine non biologique, est la description de l'étape (des étapes) pertinente(s) du processus.

¹² Le fait que la démarche d'identification soit identique pour les minéraux présents dans la nature et ceux produits par voie chimique ne signifie pas nécessairement que les exigences légales (exemptions d'enregistrement, par exemple) soient identiques

Pour les fractions, le procédé de fractionnement sera décrit à partir des paramètres et intervalle de coupe de la fraction isolée, avec une description des étapes précédentes du processus, s'il y a lieu.

Pour l'étape de concentration, le type de processus (évaporation, précipitation, etc.) sera indiqué, ainsi que le ratio entre la concentration initiale et la concentration finale des principaux constituants, ces données venant en complément des informations sur l'étape(les étapes) précédente(s) du processus.

Un paramètre d'identification principal, pour les résidus d'origine non biologique, est la description du processus à l'origine du résidu. Ce processus peut être toute réaction physique générant des résidus, purification, fractionnement ou concentration, par exemple.

4.3.1.3 Données analytiques

Dans les cas où les données spectrales apportent des informations sur la composition de la substance UVCB, ces informations devraient être fournies. Diverses méthodes de spectroscopie sont utilisées (UV/VIS, infrarouge, résonance magnétique nucléaire ou spectre de masse). Les méthodes et les avis sur la façon d'utiliser ces méthodes étant en constante évolution, il est de la responsabilité du déclarant de présenter des données spectrales appropriées.

Un chromatogramme pouvant être utilisé comme une empreinte sera fourni pour caractériser la composition de la substance. D'autres méthodes validées de séparation des constituants peuvent être appliquées s'il y a lieu.

4.3.2 Types particuliers de substances UVCB

Cette section fournit des orientations sur des groupes particuliers de substances UVCB : substances à chaîne carbonée de longueur variable (4.3.2.1) ; substances obtenues à partir de pétrole ou de sources similaires (4.3.2.2) ; enzymes (4.3.2.3).

4.3.2.1 Substances à chaînes carbonées de longueur variable

Ce groupe de substances UVCB concerne des substances comportant un groupe alkyl à longue chaîne dont la chaîne carbonée a une longueur variable, paraffines par exemple, ou oléfines. Ces substances sont soit dérivées d'huiles naturelles ou corps gras, soit produites par synthèse. Les corps gras naturels sont d'origine végétale ou animale. Les substances à longue chaîne carbonée dérivées de plantes ne comportent normalement que des chaînes à nombre pair d'atomes de carbone, alors que les substances à longue chaîne carbonée obtenues à partir de sources animales contiennent également des chaînes à nombre impair d'atomes de carbone. Les substances à longue chaîne carbonée produites par synthèse peuvent comporter tous les types de chaînes carbonées, à nombre pair ou impair.

Identifiants et convention de désignation

Ce groupe comprend des substances dont les différents constituants ont une caractéristique structurale commune : un ou plusieurs groupe(s) alkyle à longue chaîne auquel est attaché un groupe fonctionnel. Les constituants diffèrent les uns des autres par l'une ou plusieurs des caractéristiques suivantes de la chaîne alkyle :

- Longueur de la chaîne carbonée (nombre d'atomes de carbone) ;
- Saturation ;
- Structure (linéaire ou ramifiée) ;
- Position du groupe fonctionnel.

L'identité chimique des constituants peut être décrite de façon satisfaisante et désignée de façon systématique grâce aux trois descripteurs suivants :

- Le descripteur alkyle, qui indique le nombre d'atomes de carbone de la (des) chaîne(s) carbonée(s) du(des) groupe(s) alkyle.
- Le descripteur de fonctionnalité, qui identifie le groupe fonctionnel de la substance (amine, ammonium, acide carboxylique, par exemple)
- Le descripteur sel, le cation / anion caractérisant tout sel, sodium (Na^+), par exemple, ou carbonate (CO_3^{2-}), chlorure (Cl^-).

Descripteur alkyle

En général, le descripteur alkyle C_{x-y} désigne une chaîne alkyle linéaire saturée comprenant toutes les longueurs de chaîne de x à y : ainsi, C_{8-12} correspond à C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} et C_{12} .

Il faut indiquer si le descripteur alkyle fait référence uniquement aux chaînes alkyle à nombre pair ou impair, par exemple C_{8-12} (nombre pair).

Il faut indiquer si le descripteur alkyle fait référence (aussi) à des chaînes alkyle ramifiées, par exemple C_{8-12} (branchées) ou C_{8-12} (linéaires et branchées).

Il faut indiquer si le descripteur alkyle fait référence (aussi) à des chaînes alkyle insaturées, par exemple C_{12-22} (C_{18} insaturée).

Une distribution étroite des longueurs de chaînes alkyle ne couvre pas une distribution plus large, et inversement, par exemple C_{10-14} ne correspond pas à C_{8-18} .

Le descripteur alkyle peut aussi faire référence à la source des chaînes alkyle, par exemple coco ou suif. Cependant, la distribution des longueurs de chaîne doit correspondre à celle de la source.

Le système décrit ci-dessus devrait être utilisé pour décrire des substances à chaînes carbonées de longueurs variables. Il ne convient pas pour les substances bien définies, identifiables par une structure chimique précise.

Les informations sur le descripteur alkyle, le descripteur de fonctionnalité et le descripteur sel sont à la base de la désignation de ce type de substances UVCB. Des informations complémentaires sur la source et le processus peuvent également être utiles pour identifier plus précisément ces substances.

Exemples		
Descripteurs		Nom
Descripteur alkyle Descripteur de fonctionnalité Descripteur sel	Longueurs de chaîne alkyle C ₁₀₋₁₈ acides gras (acide carboxylique) sels de cadmium	acides gras (C10-18), sels de cadmium
Descripteur alkyle Descripteur de fonctionnalité Descripteur sel	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyle-diméthyle ammonium chlorure	di-C10-18-alkyle-diméthylammonium chlorure
Descripteur alkyle Descripteur de fonctionnalité Descripteur sel	Triméthyl-alkyle de suif Ammonium Chlorure	triméthyl-alkyle de suif – ammonium chlorure

4.3.2.2 Substances obtenues à partir de pétrole ou de sources similaires

Les substances obtenues à partir de pétrole (substances pétrolières) ou de sources similaires (charbon, par exemple) sont des substances de composition très complexe et variable, ou partiellement indéfinie. Dans ce chapitre, l'exemple des substances pétrolières est utilisé pour illustrer comment identifier ce type particulier de substance UVCB. Cependant, la même démarche pourrait être appliquée à des substances obtenues à partir de sources similaires, comme le charbon.

Les matières premières utilisées dans le raffinage du pétrole peuvent être du pétrole brut ou toute fraction de raffinerie obtenu par un ou plusieurs procédés. La composition des produits finaux dépend du pétrole brut utilisé pour la fabrication (la composition du pétrole brut variant selon son origine géographique) et des processus de raffinerie subséquents. Il y a donc une variation naturelle, indépendante des procédés, de la composition des produits pétroliers [Rasmussen et al., 1999].

1. Convention de désignation

Pour l'identification des substances pétrolières, il est recommandé de les désigner conformément à un système de nomenclature établi [également utilisé par l'EPA, aux Etats-Unis]. Ce nom est habituellement constitué du processus de raffinage, de la source de la fraction et de sa composition ou de ses caractéristiques générales. Si la substance contient plus de 5 % en masse d'hydrocarbures aromatiques polycycliques condensés de 4 à 6 cycles, ces informations doivent être incluses dans la description. Pour les produits pétroliers possédant un numéro EINECS, on utilisera le nom donné dans l'inventaire CE.

2. Identifiants

Les termes et définitions utilisés pour l'identification des substances pétrolières comprennent généralement la source de la fraction, le procédé de raffinage, la composition générale, le nombre d'atomes de carbone, l' ou d'autres caractéristiques physiques appropriées, ainsi que le type d'hydrocarbure prédominant [EPA, Etats-Unis].

Les paramètres d'identification prévus par REACH, annexe VI, section 2, devraient être spécifiés. Il est admis que les substances pétrolières sont fabriquées selon des spécifications de performance plutôt que des spécifications relatives à leur composition. De ce fait, des caractéristiques comme le nom, le domaine de variation de la longueur de chaîne carbonée, le point d'ébullition, la viscosité, la fraction de coupe et d'autres propriétés physiques sont généralement plus utiles que des informations sur la composition, pour identifier le produit pétrolier aussi clairement que possible.

Bien que la composition chimique ne soit pas le paramètre d'identification principal, pour les substances UVCB, les constituants principaux ($\geq 10\%$) connus doivent être indiqués et la composition doit être décrite en termes génériques (domaine de masse moléculaire, hydrocarbures aliphatiques ou aromatiques, degré d'hydrogénation, par exemple, et autres informations essentielles). De plus, tout autre constituant à concentration plus basse ayant un impact sur la classification des dangers doit être identifié par son nom et sa concentration usuelle.

4.3.2.3 Enzymes

Le plus souvent produites lors de fermentations par des microorganismes, les enzymes sont aussi parfois d'origine végétale ou animale. Le concentrat liquide d'enzymes résultant de la fermentation ou de l'extraction et des étapes de purification subséquentes contient, outre de l'eau, la protéine enzymatique active et d'autres constituants tels que des résidus de fermentation, à savoir des protéines, peptides, acides aminés, glucides, lipides et sels inorganiques.

La protéine enzymatique, ainsi que les autres constituants dérivés du processus de fermentation ou d'extraction, à l'exclusion de l'eau, qui peut être séparée sans que cela n'affecte la stabilité de l'enzyme ou n'en modifie la composition, sont à considérer comme la substance, aux fins d'identification.

La substance contient habituellement de 10 à 80 % en masse de protéine enzymatique. Les autres constituants varient en pourcentage et dépendent de l'organisme producteur utilisé, du milieu de fermentation et des paramètres opérationnels du processus de fermentation, ainsi que des procédés de purification utilisés en aval, mais la composition se situe classiquement dans les limites indiquées au tableau ci-après.

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

La substance enzymatique devrait être considérée comme une « substance UVCB », en raison de sa variabilité et du fait de sa composition partiellement inconnue. La protéine devrait être considérée comme un constituant de la substance UVCB. Les enzymes hautement purifiées sont parfois des substances de composition bien définie (mono- ou multiconstituant) et devraient alors être identifiées comme telles.

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

Exemples		
Numéro CE	Nom EINECS	Numéro CAS
278-547-1	Protéinase, Bacillus neutre	76774-43-1
278-588-5	Protéinase, Aspergillus neutre	77000-13-6
254-453-6	Elastase (pancréas de porc)	39445-21-1
262-402-4	Mannanase	60748-69-8

Une étude sur les enzymes, commanditée par la Commission européenne [UBA, 2000], suggérait d'identifier les enzymes selon le système international de nomenclature des enzymes de l'IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology ; www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/). Cette approche, qui a été retenue dans le présent GT, permettra une identification plus systématique, plus précise et plus complète que dans l'inventaire EINECS.

1. Convention de désignation

Les enzymes sont désignées conformément aux conventions de la nomenclature IUBMB [<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>].

Le système de classification IUBMB comporte un code à quatre chiffres unique pour chaque type d'enzyme et de fonction catalytique (3.2.1.1 pour α -amylase, par exemple)¹³. Chaque nombre peut correspondre à des enzymes de séquence aminoacide et d'origine variable, mais la fonctionnalité enzymatique est identique. Le nom et le numéro IUBMB devraient être utilisés pour l'identification des substances. La nomenclature IUBMB classe les enzymes en six grands groupes :

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

L'exemple suivant illustre une entrée selon la nomenclature IUBMB :

EC 3.4.22.33

Nom d'usage: bromélaïne de fruit

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

¹³ Les termes « EC number » (= Enzyme Commission number) et « numéro IUBMB » sont souvent utilisés comme synonymes. Pour éviter toute confusion, il est recommandé d'utiliser le terme « numéro IUBMB » pour le code à quatre chiffres de l'IUBMB.

Autres noms : broméline de jus ; ananase ; bromélastase ; broméline ; extranase ; pinase ; enzyme d'ananas ; traumanase ; broméline de fruit FA2.

Commentaires : provient de l'ananas, *Ananas comosus*. Très peu inhibée par la cystatine de poulet. Autre cystéine endopeptidase présentant une action similaire sur les substrats à petites molécules : la pinguinone (anciennement EC 3.4.99.18), obtenue à partir de la plante *Bromelia pinguin*, mais qui diffère de la broméline de fruit car elle est inhibée par la cystatine de poulet [4]. De la famille des peptidases C1 (famille de la papaïne). Anciennement EC 3.4.22.5 et incluse dans EC 3.4.22.4

Liens vers d'autres banques de données : BRENDA, EXPASY, MEROPS, numéro CAS : 9001-00-7

Références :

1. Sasaki, M., Kato, T. and Iida, S. Antigenic determinant common to four kinds of thiol proteases of plant origin. *J. Biochem. (Tokyo)* 74 (1973) 635-637. [Medline UI : 74041600]
2. 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. [Medline UI : 76260156]
3. Ota, S., Muta, E., Katanita, Y. and Okamoto, Y. Reinvestigation of fractionation and some properties of the proteolytically active components of stem and fruit bromelain. *J. Biochem. (Tokyo)* 98 (1985) 219-228. [Medline UI : 86008148]
4. Rowan, A.D., Buttle, D.J. and Barrett, A.J. The cysteine proteinases of the pineapple plant. *Biochem. J.* 226 (1990) 869-875. [Medline UI : 90226288]

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

Les protéases sont numérotées selon les critères suivants :

- 3. hydrolases
- 3.4 agissant sur les liaisons peptide (peptidases), avec les sous-classes :
 - 3.4.1 α -amino-acyle-peptide hydrolases (désormais sous EC 3.4.11)
 - 3.4.2 peptidyle-aminoacide hydrolases (désormais sous EC 3.4.17)
 - 3.4.3 dipeptide hydrolases (désormais sous EC 3.4.13)
 - 3.4.4 peptidyle peptide hydrolases (désormais reclassées sous EC 3.4)
 - 3.4.11 aminopeptidases
 - 3.4.12 peptidylaminoacide hydrolases ou acylamino-acide hydrolases (reclassées sous 3.4)
 - 3.4.13 dipeptidases
 - 3.4.14 dipeptidyle-peptidases et tripeptidyle-peptidases
 - 3.4.15 peptidyle-dipeptidases
 - 3.4.16 carboxypeptidases de type sérine
 - 3.4.17 métallocarboxypeptidases
 - 3.4.18 carboxypeptidases de type cystéine
 - 3.4.19 oméga peptidases
 - 3.4.21 sérine endopeptidases
- Et d'autres enzymes spécifiques identifiées comme suit :
 - 3.4.21.1 chymotrypsine
 - 3.4.21.2 chymotrypsine C
 - 3.4.21.3 métridine
 - 3.4.21.4 trypsine
 - 3.4.21.5 thrombine
 - 3.4.21.6 facteur de coagulation Xa
 - 3.4.21.7 plasmine
 - 3.4.21.8 désormais sous EC 3.4.21.34 et EC 3.4.21.35
 - 3.4.21.9 entéropeptidase
 - 3.4.21.10 acrosine
 - 3.4.21.11 désormais sous EC 3.4.21.36 et EC 3.4.21.37
 - 3.4.21.12 12a-lytique endopeptidase
 - ...
 - 3.4.21.105
- 3.4.99 endopeptidases de mécanisme catalytique inconnu

Exemples tirés de EINECS, complétés par le numéro IUBMB

Numéro CE	Nom EINECS	Numéro CAS	Numéro IUBMB
278-547-1	Protéinase, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisine	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cellulase	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identifiants

Les enzymes sont identifiées par la protéine enzymatique qui les contient (nomenclature IUBMB) et par les autres constituants issus de la fermentation. Hormis la protéine enzymatique, chaque constituant spécifique est généralement présent à des concentrations ne dépassant pas 1 %. Si l'identité de ces constituants spécifiques n'est pas connue, ils peuvent être indiqués sous forme de groupes chimiques (protéines, peptides, aminoacides, glucides, lipides et sels inorganiques). Cependant, les constituants doivent être indiqués si leur identité est connue, et ils doivent être identifiés si leur concentration dépasse 10 % ou s'ils sont importants pour la classification et l'étiquetage ou pour l'évaluation PBT¹⁴.

Protéines enzymatiques

Les protéines enzymatiques présentes dans le concentrat devraient être identifiées par :

- Leur numéro IUBMB ;
- Leurs noms dans le système IUBMB (nom systématique, noms de l'enzyme, synonymes) ;
- Les commentaires de l'IUBMB ;
- La réaction et le type de réaction ;
- Le numéro et le nom CE s'il y a lieu ;
- Le numéro et le nom CAS s'ils sont disponibles.

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

Exemple
.alpha.amylase : polysaccharide contenant des unités glucose reliées par des liaisons alpha-(1-4) + H ₂ O = maltooligosaccharides ; endohydrolyse des liaisons 1,4-alpha.-d-glucosidiques dans des polysaccharides contenant au moins trois unités d-glucose reliées par des liaisons 1,4-.alpha

Un type de réaction sera affecté selon la classe d'enzyme : oxydation, réduction, élimination, addition, ou nom de la réaction.

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

Constituants autres que les protéines enzymatiques

Tous les constituants ≥ 10 % en masse ou importants pour la classification et l'étiquetage et/ou l'évaluation PBT¹⁵ devraient être identifiés. L'identité des constituants présents à moins de 10 % peut être indiquée sous forme de groupe chimique. Leur(s) concentration(s) usuelle(s) ou domaines de concentration doivent être précisés :

¹⁴ Pour plus d'informations sur l'évaluation PBT et les limites de concentration applicables, voir le GT RIP 3.2 Evaluation de la sécurité chimique, section sur l'évaluation PBT

¹⁵ Pour plus d'informations sur l'évaluation PBT et les limites de concentration applicables, voir le GT RIP 3.2 Evaluation de la sécurité chimique, section sur l'évaluation PBT

- (Glyco)protéines
- Peptides et aminoacides
- Glucides
- Lipides
- Matériels inorganiques (chlorure de sodium ou autres sels inorganiques, par exemple)

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

S'ils sont disponibles, des paramètres supplémentaires peuvent être fournis, comme les paramètres fonctionnels (pH ou température : valeurs optimales ou domaines), les paramètres cinétiques (activité spécifique ou nombre de réactions catalysées par unité de temps), ligands, substrats et produits, cofacteurs.

5 CRITERES PERMETTANT DE VERIFIER SI DES SUBSTANCES SONT IDENTIQUES

Pour vérifier si des substances provenant de différents fabricants/importateurs peuvent être considérées comme identiques, il convient de respecter certaines règles. Ces règles, qui ont été appliquées pour établir l'inventaire EINECS [Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, site de l'ECB ; Geiss et al., 1992, Vollmer et al., 1998, Rasmussen et al., 1999], devraient être considérées comme une base commune pour identifier et désigner une substance et donc pour trouver un co-déclarant potentiel de cette même substance. Ce chapitre porte sur les aspects liés à l'identification et à la désignation des substances. Les substances qui ne sont pas considérées comme identiques peuvent parfois être considérées comme structurellement proches, sur la base d'un avis d'expert. Un partage des données peut alors être envisagé, si cela est justifié du point de vue scientifique. Toutefois, ce n'est pas l'objet du présent GT, et l'on se reportera au RIP 3.4 concernant le partage des données.

La règle des « $\geq 80\%$ » pour les substances monoconstituant, de même que la règle des « $< 80\%/\geq 10\%$ » pour les substances multiconstituant devrait être appliquée.

Il n'est pas établi de différence entre les qualités technique, pure ou analytique d'une substance. Une « même » substance peut présenter toutes les qualités, résultant de n'importe quel procédé de production, avec différentes quantités de différentes impuretés, dès lors que ces différences ne changent ni la classification ni le profil de dangerosité de la substance. Néanmoins, les substances bien définies devraient en principe contenir le(s) constituant(s) principal(principaux), les seules impuretés autorisées étant celles dérivées du procédé de fabrication (voir le chapitre 4.2 pour plus de précisions) et les additifs nécessaires pour stabiliser la substance.

Lorsque le profil d'impuretés d'une substance bien définie provenant de différentes sources de fabrication diffère notablement, un avis d'expert sera nécessaire pour déterminer si ces différences affectent la possibilité de partager les données des tests réalisés sur une substance avec les membres d'un FEIS.

Les hydrates et les formes anhydres seront considérés comme identiques.

Exemples			
Nom et formule	Numéro CAS	Numéro CE	Règle
Sulfate de cuivre (Cu H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Sel (1:1) de cuivre (2+) de l'acide sulfurique, pentahydraté (CuH ₂ O ₄ S 5 H ₂ O)	7758-99-8		Cette substance est couverte par la forme anhydre (numéro CE : 231-847-6)

Bien que les formes hydratées et anhydres aient des noms chimiques différents et des numéros CAS différents, un seul dossier d'enregistrement doit être soumis. C'est la forme anhydre qui devrait être enregistrée. Les formes hydratées sont couvertes par cet enregistrement.

Les acides ou les bases et leurs sels seront considérés comme des substances différentes.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
201-186-8	Acide peracétique C ₂ H ₄ O ₃	Cette substance ne sera pas considérée comme identique à son sel sodique (EINECS 220-624-9), par exemple
220-624-9	Glycolate de sodium C ₂ H ₄ O ₃ .Na	Cette substance ne sera pas considérée comme identique à l'acide qui lui correspond (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-Chloraniline C ₆ H ₆ ClN	Cette substance ne sera pas considérée comme identique au benzèneamine, 2-chloro-, hydrobromure (C ₆ H ₆ ClN.HBr), par exemple

Les différents sels (sodique, potassique, par exemple) seront considérés comme des substances différentes.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
208-534-8	Benzoate de sodium C ₇ H ₅ O ₂ .Na	Cette substance ne sera pas considérée comme identique au sel potassique (EINECS 209-481-3), par exemple
209-481-3	Benzoate de potassium C ₇ H ₅ O ₂ .K	Cette substance ne sera pas considérée comme identique au sel sodique (EINECS 208-534-8), par exemple

Les chaînes alkyles linéaires et ramifiées seront considérées comme des substances différentes.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
295-083-5	Acide phosphorique, ester de dipentyle, ramifié et linéaire	Cette substance ne sera pas considérée comme identique aux substances acide phosphorique, ester de dipentyle, ramifié, ou acide phosphorique, ester de n-dipentyle

Les groupes ramifiés seront mentionnés comme tels sous leur nom IUPAC. Les substances comportant des groupes alkyle sans autre précision couvrent uniquement les chaînes linéaires non ramifiées, sauf spécification contraire.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
306-791-1	Acides gras, C12-16	Seules les substances présentant des groupes alkyle linéaires et non ramifiés sont considérées comme identiques
279-420-3	Alcools, C12-14	
288-454-8	Amines, C12-18-alkylméthyles	

Les substances dont les groupes alkyle comportent des termes supplémentaires comme iso, néo, ramifié, etc., ne seront pas considérées comme identiques aux substances exemptes de ces spécifications.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
266-944-2	Glycérides, C12-18 Cette substance est répertoriée sous le SDA Substance Name C12-18 trialkyl glyceride et le SDA Reporting Number 16-001-00	Cette substance ne sera pas considérée comme identique à la substance C ₁₂₋₁₈ iso, substance à chaîne alkyle saturée branchée à n'importe quelle position.

Sauf mention particulière, les chaînes alkyle dans les acides, les alcools, etc., seront considérées comme représentant uniquement la chaîne saturée. Les chaînes insaturées seront spécifiées comme telles et seront considérées comme des substances différentes.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
200-314-4	Acide stéarique, pur C ₁₈ H ₃₆ O ₂	Cette substance ne sera pas considérée comme identique à l'acide oléique pur, C ₁₈ H ₃₄ O ₂ (EINECS 204-007-1)

Substances à centre chiral

Une substance présentant un centre chiral peut exister sous sa forme dextrogyre ou lévogyre (énantiomères). En l'absence d'indication contraire, il est admis que la substance est un mélange racémique (à parts égales) des deux formes.

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

Lorsqu'une substance a été enrichie en un seul énantiomère, les règles des substances multiconstituant s'appliquent.

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

Catalyseurs inorganiques

Les catalyseurs inorganiques sont considérés comme des préparations. Pour les besoins de l'identification, les métaux ou composés métalliques entrant dans leur composition devraient être considérés comme des substances distinctes (sans spécification de leur usage).

Nom	Règle
Catalyseur à base d'oxyde de cobalt et d'oxyde d'aluminium	Devrait faire l'objet d'identifications distinctes sous : <ul style="list-style-type: none"> - oxyde de cobalt II - oxyde de cobalt III - oxyde d'aluminium - oxyde de cobalt et d'aluminium

Les concentrats d'enzymes ayant le même numéro IUBMB peuvent être considérés comme une même substance, y compris si des organismes de production différents sont utilisés, à condition que les propriétés dangereuses ne diffèrent pas de façon significative et correspondent à la même classification.

Substances multiconstituant

La directive 67/548/CEE fixait les règles de mise sur le marché des substances. La façon dont les substances étaient produites n'intervenait pas. Une substance multiconstituant mise sur le marché était donc couverte par l'inventaire EINECS si tous ses constituants étaient répertoriés sous EINECS ; ainsi, un mélange isomérique de difluorobenzènes était couvert par les entrées EINECS 1,2-difluorobenzène (206-680-7), 1,3-difluorobenzène (206-746-5) et 1,4-difluorobenzène (208-742-9), bien que le mélange isomérique lui-même ne soit pas inscrit à l'inventaire EINECS.

REACH exige quant à lui l'enregistrement de la substance fabriquée. Il convient d'établir au cas par cas dans quelle mesure les différentes étapes de production de la substance sont couvertes par la définition du terme « fabrication » (différentes étapes de purification ou de distillation, par exemple). Si une substance multiconstituant est produite, elle doit être enregistrée (et elle n'est pas couverte par l'enregistrement de ses différents constituants) ; ainsi, le mélange isomérique de difluorobenzène est produit, donc le « difluorobenzène » sous forme de mélange isomérique doit être enregistré comme tel. Cependant, pour les substances multiconstituant, il n'est pas nécessaire de tester la substance en tant que telle si son profil de risque peut être décrit de façon satisfaisante à partir des informations disponibles sur ses différents constituants. Si les isomères 1,2-difluorobenzène, 1,3-difluorobenzène et 1,4-difluorobenzène sont produits puis mélangés, chacun des isomères doit être enregistré, et le mélange isomérique sera alors considéré comme une préparation.

Une substance multiconstituant ayant pour constituants principaux A, B et C ne sera pas considérée comme identique à une substance multiconstituant ayant pour constituants principaux A et B, ou un mélange réactionnel de A, B, C et D.

Une substance multiconstituant n'est pas considérée comme identique à une autre substance qui ne contiendrait qu'une partie des constituants de la première.

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
207-205-6	2,5-difluorotoluène	Ces deux substances ne sont pas considérées comme identiques à un mélange isomérique de difluorotoluènes, car chacune d'elle ne comporte que quelques-uns de tous les isomères possibles.
207-211-9	2,4-difluorotoluène	

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

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
208-747-6	1,2-dibromoéthylène	Cette substance correspond à un mélange d'isomères cis- et trans. Les substances (IZ)-1,2-dibromoéthène » et (IE)-1,2-dibromoéthène ne sont pas couvertes par l'enregistrement du mélange isomérique.

Substances UVCB

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

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
288-450-6	Amines, C ₁₂₋₁₈ alkyle, acétates	Les substances « amines, C12-14 alkyle, acétates » ou « amines, C12-20 alkyle, acétates » ou « amines, dodécyle (C12-alkyle), acétates » ou les substances n'ayant que des chaînes alkyle à nombre pair ne sont pas considérées comme identiques à cette substance.

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

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
296-286-1	Glycérides, huile de tournesol di-	Cette substance n'est pas considérée comme identique aux glycérides, soja di- (EINECS 271-386-8), ni aux glycérides, suif di- (EINECS 271-388-9)
232-401-3	Huile de lin, époxydée	Cette substance n'est pas considérée comme identique à l'huile de lin, oxydée (EINECS 272-038-8), ni à l'huile de lin, maléatée (EINECS 268-897-3), ni à l'huile de castor, époxydée (non répertoriée sous EINECS).

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

Exemples		
Numéro CE	Nom	Règle
232-299-0	Huile de colza Extraits et leurs dérivés physiquement modifiés. Constituée principalement des glycérides des acides gras érucique, linoléique et oléique (Brassica napus, Cruciferae)	La substance « (Z)-Docos-13 acide énoïque (acide érucique) » est un constituant de la substance « huile de colza ». L'acide érucique n'est pas considéré comme identique à l'huile de colza car il est isolé comme substance pure de l'huile de colza ; l'acide érucique a sa propre entrée EINECS (204-011-3). Un mélange isolé d'acide palmitique, d'acide oléique, d'acide linoléique, d'acide érucique et d'acide éicosénoïque n'est pas considéré comme identique à l'huile de colza, car ces constituants ne représentent qu'une partie de ceux de l'huile.

6 L'IDENTITE DE LA SUBSTANCE DANS LE CADRE DU PRE-ENREGISTREMENT ET DE LA SOUMISSION D'UNE DEMANDE D'INFORMATION

Le chapitre 4 du présent GT expose comment identifier et désigner une substance. Il convient d'en suivre les indications pour déterminer si des substances peuvent être considérées comme identiques aux termes de REACH. Le présent chapitre apporte des précisions supplémentaires en ce qui concerne le pré-enregistrement des substances bénéficiant d'un régime transitoire et la demande d'information préalable pour les substances ne bénéficiant pas d'un régime transitoire.

Conformément à l'article 4, tout fabricant ou importateur peut, tout en conservant l'entière responsabilité du respect de ses obligations aux termes du Règlement REACH, charger un représentant tiers de toutes les démarches prévues au titre III en matière de consultations avec d'autres fabricants ou importateurs. Le titre III incluant tant les règles applicables aux substances ne bénéficiant pas d'un régime transitoire et aux substances bénéficiant d'un régime transitoire qui n'ont pas fait l'objet d'un pré-enregistrement, que les règles applicables aux substances bénéficiant d'un régime transitoire qui ont été pré-enregistrées, le terme « déclarant potentiel » doit être interprété, dans le présent chapitre, comme « fabricant potentiel », « importateur potentiel » ou « représentant tiers du fabricant ou de l'importateur potentiel ».

6.1 PRE-ENREGISTREMENT

Le pré-enregistrement a pour objet de mettre en relation les déclarants potentiels d'une même substance, afin d'éviter la duplication des études, en particulier des tests sur les animaux vertébrés. Le pré-enregistrement ne s'applique qu'aux substances bénéficiant d'un régime transitoire.

L'enregistrement préalable comporte les étapes suivantes :

1. Un ensemble limité de paramètres d'identification doit être soumis à l'Agence européenne des produits chimiques par les déclarants potentiels ;
2. Sur la base de cet ensemble limité de paramètres d'identification, l'Agence produit une liste de substances qu'elle publie sur son site Internet ;
3. Sur la base de cette liste, d'autres détenteurs de données peuvent soumettre à l'Agence des informations pertinentes ;
4. L'Agence met en contact les déclarants potentiels de substances dont les paramètres se correspondent, et facilite le contact avec les détenteurs de données. Il appartient aux déclarants potentiels de vérifier si leur substance peut être considérée comme identique à une autre substance de la liste. Pour cela, il convient d'appliquer les règles décrites au chapitre 5 du présent GT ;

5. Les déclarants potentiels qui ont soumis à l'Agence des informations sur la même substance seront membres d'un FEIS (Forum d'Echange d'Information sur les substances), une fois établi qu'il s'agit bien de la même substance.

La première étape comporte la soumission par les déclarants potentiels d'un ensemble limité d'identifiants de la substance (article 28) :

- numéro CE ;
- numéro et nom CAS ;
- nom chimique selon la nomenclature IUPAC ou autre nom chimique international ;
- autres noms.

La soumission de ces informations sera assurée via un système informatique. Sur le site REACH-IT, le déclarant potentiel est guidé au fil des étapes, pour la soumission des informations précitées sur l'identité de la substance.

Il n'est pas prévu, à ce stade, d'informations plus détaillées sur l'identité de la substance (identification des impuretés, par exemple). Le déclarant potentiel peut fournir en complément un ensemble limité de paramètres d'identification d'autres substances, lorsque ces informations sont pertinentes pour, une approche par catégorie de substances (regroupement de substances par familles chimiques), l'utilisation de QSAR (« quantitative structure activity relationship) ou du principe de « read-across » (lecture croisée de sources bibliographiques).

Pour plus de précisions sur l'enregistrement préalable, la constitution des FEIS et la soumission conjointe en relation avec l'identification des substances, on se reportera au RIP 3.4 concernant le partage de données.

6.2 DEMANDE D'INFORMATION

Pour les substances ne bénéficiant pas d'un régime transitoire, ou les substances bénéficiant d'un régime transitoire qui n'ont pas été pré-enregistrées, le déclarant potentiel est tenu de s'informer auprès de l'Agence, avant l'enregistrement, afin d'établir si une demande d'enregistrement a déjà été soumise pour la même substance (article 24). Cette demande d'information doit comporter les indications suivantes :

- Identité du déclarant potentiel, comme spécifié à la section 1 de l'annexe VI, à l'exception des sites d'utilisation ;
- Identité de la substance, comme spécifié à la section 2 de l'annexe VI ;
- Informations à fournir qui imposeraient que le déclarant potentiel réalise de nouvelles études sur des animaux vertébrés ;
- Informations à fournir qui imposeraient que le déclarant potentiel réalise de nouvelles études d'un autre type.

La soumission de ces données s'appuiera sur un système informatique et sur IUCLID 5. Il est souhaitable que le déclarant potentiel indique l'identité et le nom de la substance conformément aux règles exposées au chapitre 4 du présent GT.

L'Agence établira si la même substance a déjà été enregistrée, en appliquant également les règles exposées au chapitre 4 du présent GT. Le résultat sera communiqué au déclarant potentiel et au déclarant précédent (s'il y a lieu).

7 EXEMPLES

Les exemples des pages suivantes ont pour seul objet d'illustrer comment appliquer les orientations du présent GT. Ils ne constituent en aucun cas des références pour l'interprétation des obligations liées à REACH.

On trouvera ci-après les exemples suivants :

« Diéthyl peroxydicarbonate » est un exemple de substance monoconstituant avec un solvant ayant également la fonction d'agent stabilisant (chapitre 7.1) ;

« Zolimidine » est un exemple de substance qui pourrait être identifiée comme mono- ou multiconstituant (chapitre 7.2) ;

Un « mélange d'isomères » formé au cours de la réaction de fabrication est proposé comme exemple de substance multiconstituant (chapitre 7.3). Cette substance était précédemment couverte par les entrées EINECS des différents isomères ;

« Fragrance AH » est un exemple de substance produite dans des qualités différentes, qui peut être décrite comme un mélange réactionnel de cinq constituants avec leurs intervalles de concentration (chapitre 7.4). C'est également un exemple d'écart justifié par rapport à la règle des 80 % et à la règle des 10 % ;

On trouvera au chapitre 7.5 des « minéraux » non métalliques, en particulier la montmorillonite comme exemple de substance bien définie requérant une caractérisation physique complémentaire ;

Une « huile essentielle de lavendula » est un exemple de substance UVCB obtenue à partir de plantes (chapitre 7.6) ;

« Huile de chrysanthème et isomères isolés à partir de ce produit » est un exemple de substance UVCB d'origine biologique qui est soumise à des processus complémentaires (chapitre 7.7) ;

« Phénol, isopropylé, phosphate » est un exemple de substance UVCB variable qui ne peut pas être complètement définie (chapitre 7.8) ;

Des « composés d'ammonium quaternaire » fournissent des exemples de substances présentant des variations de la longueur de chaîne carbonée (chapitre 7.9) ;

Deux exemples de « substances pétrolières », des bases pour carburants et des gasoils, sont examinés au chapitre 7.10 ;

Deux exemples illustrant l'identification d'enzymes, la laccase et l'amylase, sont donnés au chapitre 7.11.

7.1 DIETHYL PEROXYDICARBONATE

La substance « diéthyl peroxydicarbonate » (CE 238-707-3, CAS 14666-788-5, $C_6H_{10}O_6$) est produite sous forme de solution à 18 % dans l'isododécane (CE 250-816-8, CAS 31807-55-3). L'isododécane a également une fonction d'agent stabilisant contre les propriétés explosives de la substance. La concentration la plus élevée à laquelle la substance peut être utilisée sans risque correspond à une solution à 27 %.

Comment identifier et désigner cette substance aux fins d'enregistrement ?

Selon la définition des substances dans REACH, les solvants qui peuvent être séparés sans que cela affecte la stabilité de la substance ou en modifie la composition devraient être exclus. Dans le cas ci-dessus, l'isododécane a également une fonction d'agent stabilisant et ne peut pas être totalement séparé de la substance, en raison des propriétés explosives de celle-ci ; l'isododécane doit donc être considéré comme un additif, et pas seulement comme un solvant. La substance devrait néanmoins être considérée comme un monoconstituant.

Par conséquent, elle devrait être enregistrée comme la solution à la concentration la plus élevée pour laquelle la sécurité d'emploi est assurée :

Diéthyl peroxydicarbonate (limite supérieure : 27 %, concentration usuelle : 22 %).

7.2 ZOLIMIDINE

La solution méthanolique fabriquée est constituée de « zolimidine » (CE 214-947-4 ; CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) et d'« imidazole » (CE 206-019-2 ; CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Après retrait du solvant (méthanol) et optimisation du processus de fabrication, la substance conserve un large degré de pureté avec 74-86 % de zolimidine et 4-12 % d'imidazole.

Comment identifier et désigner cette substance aux fins d'enregistrement ?

Selon la définition des substances dans REACH, les solvants qui peuvent être séparés sans que la stabilité de la substance en soit affectée et sans que sa composition en soit modifiée devraient être exclus. Comme dans le cas précédent, le méthanol peut être séparé sans aucune difficulté ; c'est la substance sans solvant qui doit être enregistrée.

En règle générale, une substance est considérée comme substance monoconstituant si un constituant principal est présent à $\geq 80\%$. Une substance est considérée comme multiconstituant si plus d'un constituant principal est présent à $\geq 10\%$ et à $< 80\%$. L'exemple ci-dessus est un cas limite, car les valeurs extrêmes se situent de part et d'autre des valeurs seuils. En conséquence, la substance pourrait être considérée comme une substance monoconstituant (« zolimidine ») ou une substance multiconstituant (Mélange Réactionnel de « zolimidine » et d'« imidazole »).

Dans les cas limites de ce type, la concentration usuelle des principaux constituants peut être utilisée comme critère de décision :

- (1) Si la concentration usuelle de zolimidine = 77 % et d'imidazole = 11 %, il est recommandé de considérer la substance comme un mélange réactionnel de zolimidine et d'imidazole ;
- (2) Si la concentration usuelle de zolimidine = 85 % et d'imidazole = 5 %, il est recommandé de considérer la substance comme une substance monoconstituant (« zolimidine ») ;
- (3) Si les concentrations usuelles ne peuvent pas être déterminées parce que le processus de fabrication se traduit par des domaines très étendus et incontrôlés, il est recommandé de considérer la substance comme une substance multiconstituant.

7.3 MELANGE D'ISOMERES

La substance considérée est un mélange réactionnel de deux isomères formés au cours de la fabrication. Chacun des isomères est répertorié à l'inventaire EINECS. La directive 67/548/CEE s'appliquait à la mise sur le marché des substances. Le mode de production de la substance n'était pas pris en compte, et le mélange était couvert par les deux entrées EINECS correspondant aux isomères. REACH exige l'enregistrement des substances fabriquées. Il convient d'établir au cas par cas dans quelle mesure les différentes étapes de la fabrication sont couvertes par la définition du terme « fabrication ». Si le mélange d'isomères est enregistré comme substance multiconstituant (selon les indications du chapitre 4.2.2), il n'est pas nécessaire de tester les substances en tant que telles, à condition que le profil de dangerosité de la substance puisse être décrit de façon satisfaisante par les informations sur ses différents constituants. Il devrait néanmoins être fait référence aux entrées EINECS des deux isomères, pour signaler que la substance bénéficie d'un régime transitoire.

1. Nom et autres identifiants

Nom IUPAC ou autre nom chimique international de la substance	Mélange réactionnel de 2,2'-[[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bisethanol et 2,2'-[[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bisethanol
Autres noms de la substance	2,2'-[[[méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bisethanol Mélange réactionnel de Ethanol, 2,2'-[[[méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis- et eau Ethanol, 2,2'-[[[méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis- (9CI) isomeric compound
Numéro CE de la substance Nom CE Description CE	Il n'existe pas de numéro CE pour le mélange, qui n'a pas été répertorié sous EINECS. Cependant, la substance était couverte par les entrées EINECS des constituants (279-502-9 ; 279-501-3). Par conséquent, le mélange devrait être considéré comme bénéficiant d'un régime transitoire.
Numéro CAS de la substance Nom CAS	Non disponible Non disponible
Numéro CE (constituant A) Nom CE Description CE	279-502-9 2,2'-[[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bisethanol /
Numéro CE (constituant B) Nom CE Description CE	279-501-3 2,2'-[[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bisethanol /
Numéro CAS (constituant A) Nom CAS	80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[[4-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis-
Numéro CAS (constituant B) Nom CAS	80584-88-9 Ethanol, 2,2'-[[[5-méthyl-1H-benzotriazol-1-yl)méthyl]imino]bis-
Autre code d'identité Référence	Numéro ENCS 5-5917

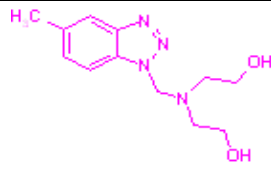
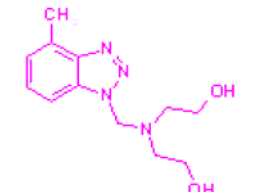
2. Information sur la composition –constituants principaux

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

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

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

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

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

Constituants principaux		
	Masse moléculaire (g.mol ⁻¹)	Domaine de masse moléculaire
A	250	/
B	250	/

7.4 FRAGRANCE AH

Fragrance AH se compose de gamma (iso-alpha) méthyl ionone et de ses isomères. La substance est produite en trois qualités différentes (qualités A, B et C), qui diffèrent par le pourcentage des différents isomères.

Le tableau ci-après donne un aperçu de la composition des différentes qualités :

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

Plusieurs options sont possibles pour l'identification de la substance :

La qualité A contient au moins 80 % de l'isomère gamma (iso-alpha) méthyl ionone (ionone ??) et pourrait de ce fait être considérée comme une substance monoconstituant basée sur l'isomère gamma (iso-alpha) méthyl ionone, avec les autres isomères comme impuretés.

Les qualités B et C contiennent moins de 80 % de l'isomère gamma (iso-alpha) méthyl ionone et ≥ 10 % de certains autres isomères. Elles pourraient donc être considérées comme des substances multiconstituant :

La qualité B comme un mélange réactionnel de gamma(iso-alpha) méthyl ionone (65-75 %) et d'alpha-n méthyl ionone (10-20 %), avec les autres isomères comme impuretés

La qualité C comme un mélange réactionnel de gamma (iso-alpha) méthyl ionone (50-60 %) et d'alpha-n méthyl ionone (20-30 %) [et peut-être de bêta n-méthyl ionone (5-15 %)], avec les autres isomères comme impuretés.

La composition est variable, et un isomère est parfois présent à ≥ 10 % (donc normalement à le qualifier de constituant principal), parfois à ≤ 10 % (ce qui devrait conduire à le qualifier d'impureté).

Il serait possible d'enregistrer les différentes qualités séparément. Cela supposerait trois enregistrements. Cependant, l'approche par lecture croisée des données (« read-across ») pourrait être justifiée.

D'autres solutions sont possibles :

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

Un enregistrement comme mélange réactionnel définie de 5 isomères (substance multiconstituant). Dans ce cas, certains isomères (constituants principaux) s'écartent du critère des 10 % qui distingue les constituants principaux des impuretés (voir chapitre 4.2.2).

Un enregistrement comme mélange réactionnel définie, dont la variabilité de composition est couverte par les domaines de concentration des différents isomères.

Il peut être important de bien prendre en considération que :

- Les trois qualités ont des propriétés physico-chimiques identiques ou très similaires.
- Les trois qualités ont un usage et des scénarios d'exposition similaires.
- Toutes les qualités ont les mêmes classification et étiquetage de risques, et les fiches de données de sécurité et rapports sur la sécurité sont identiques.
- Les résultats de tests disponibles (et les tests futurs) couvrent la variabilité des trois qualités.

Dans cet exemple, l'identification de la substance comme une mélange réactionnel définie de 5 isomères (substance multiconstituant) est décrite. Une justification est nécessaire du fait de l'écart par rapport à la règle des 80 % (chapitre 4.2.1) et à la règle des 10 % (chapitre 4.2.2). Chaque qualité étant produite en tant que telle, la composition de chacune des trois qualités devrait être spécifiée dans le dossier d'enregistrement. Formellement pourtant, deux enregistrements au moins pourraient être nécessaires : (1) Gamma (iso-alpha) méthyl ionone et (2) mélange réactionnel de gamma (iso-alpha) méthyl ionone et alpha-n-méthyl-ionone.

Identification de la substance

La fragrance AH est produite en trois qualités différentes (A, B et C), avec la même composition qualitative mais des différences quantitatives . Les trois qualités sont décrites dans un même dossier d'enregistrement d'une substance multiconstituant. Bien que cela implique que la règle des 80 % et la règle des 10 % ne soient pas strictement respectées, l'enregistrement comme substance multiconstituant est justifié car (1) les données de tests disponibles couvrent la variabilité des trois qualités, (2) les trois qualités ont des propriétés physico-chimiques très proches, (3) toutes les qualités ont les mêmes classification et étiquetage de dangers (par conséquent les fiches de données de sécurité sont identiques) et (4) les trois qualités ont un usage et des scénarios d'exposition similaires (par conséquent les rapports sur la sécurité sont similaires).

1. Nom et autres identifiants

Nom IUPAC et autre nom chimique international	mélange réactionnel de 3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; 3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; [R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(6,6-méthyl-2-méthylencyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on
Autres noms	Méthyl Ionone Gamma Quality A Méthyl Ionone Gamma Quality B Méthyl Ionone Gamma Quality C
Numéro CE Nom CE Description CE	Non disponible / /
Numéro CAS Nom CAS	Non disponible /

2. Informations sur la composition –constituants principaux

En théorie, d'autres entiomères sont possibles. En tout état de cause, les isomères suivants ont été analysés :

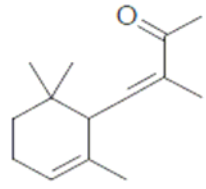
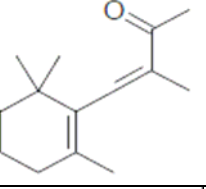
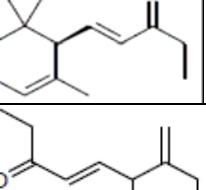
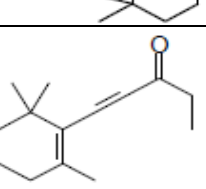
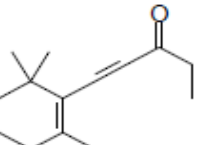
Constituants principaux						
	Nom IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Formule moléculaire selon Hill	Concentration minimale (% pondéral)	Concentration maximale (% pondéral)
A	3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
B	3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	30
D	1-(6,6-méthyl-2-méthylencyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one	Non disponible	Non disponible	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	4
E	1-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	15

Constituants principaux	
	Autres noms
A	alpha-iso-méthyl ionone; gamma méthyl ionone
B	beta-iso-méthyl ionone; delta méthyl ionone
C	alpha-n-méthyl ionone
D	gamma-n-méthyl ionone
E	beta-n-méthyl ionone

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

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

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

Constituants principaux			
	Formule moléculaire Méthode CAS	Formule structurelle	Code SMILES
A	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
B	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
C	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>
D	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem>
E	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>

Constituants principaux		
	Masse moléculaire / gmol ⁻¹	Domaine de masse moléculaire
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Informations sur la composition – impuretés et additifs

Impuretés						
	Nom IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Form. brute.	Conc. habit. (% pondéral)	Intervalle de conc. (% pondéral)
F						
Nombre d'impuretés non spécifiées :				11 (pseudo méthyl ionones)		
Concentration totale d'impuretés non spécifiées :				0,5-3 % en masse		
Additifs						
	Nom IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Form.brute.	Conc. habit. (% pondéral)	Intervalle de conc. (% pondéral)
G	hydroxytoluène butylé (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0,1	0,05-0,15

4. Informations sur les différentes qualités

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

Domaine de concentration (%)	Qualité A	Qualité B	Qualité C
gamma (iso-alpha) méthyl ionone	80-85	65-75	50-60
delta (iso-beta) méthyl ionone	6-10	3-7	3-7
alpha n-méthyl ionone	3-11	10-20	20-30
gamma n-méthyl ionone	0,5-1,5	2-4	2-4
beta n-méthyl ionone	0,5-1,5	4-6	5-15
pseudo méthyl ionones	0,5-1,5	1-3	1-3

7.5 MINÉRAUX

Un minéral est défini comme une combinaison de constituants inorganiques tels qu'ils se présentent dans la croûte terrestre, avec un ensemble caractéristique de compositions chimiques, de formes cristallines (de hautement cristallin à amorphe) et de propriétés physico-chimiques.

Les minéraux sont exemptés d'enregistrement, s'ils ne sont pas chimiquement modifiés. Cela s'applique aux minéraux dont la structure chimique demeure inchangée, même s'ils ont subi un processus ou un traitement chimique ou une transformation minéralogique d'ordre physique visant par exemple à les débarrasser de leurs impuretés.

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

Pour de nombreux minéraux, à la différence d'autres substances mono- ou multiconstituant, l'identification doit s'appuyer sur leur composition chimique et sur leur structure interne (mise en évidence par diffraction des rayons X, par exemple), qui représentent ensemble l'essence du minéral et en déterminent les propriétés physico-chimiques.

Comme pour d'autres substances multiconstituant, le numéro CAS fera partie de l'identification du minéral (en tant que combinaison de constituants inorganiques). Les numéros CAS des constituants inorganiques (tels que définis par la minéralogie) sont utilisés pour décrire les différents constituants. Si l'un des constituants inorganiques est produit (comme substance monoconstituant), le numéro CAS de cette substance est utilisé pour l'identifier. Ainsi :

Le kaolin (EINECS : 310-194-1, CAS : 1332-58-7) est composé pour l'essentiel de kaolinites primaires et secondaires (EINECS : 215-286-4 ; CAS : 1318-74-7), qui sont de l'argile aluminosilicate hydratée.

Si un processus de séparation est appliqué au kaolin pour obtenir un seul constituant des kaolinites, par exemple, le numéro CAS/EINECS de la substance sera EINECS 215-286-4, CAS 1318-74-7.

La bentonite (EINECS 215-108-5, CAS 1302-78-9), décrite dans l'inventaire EINECS comme « une argile colloïdale composée principalement de montmorillonite », contient une forte proportion de ce constituant inorganique qu'est la montmorillonite (EINECS 215-288-5, CAS 1318-93-0), mais pas uniquement.

En cas de production de montmorillonite pure (EINECS 215-288-5, CAS 1318-93-0), le numéro CAS à utiliser pour identifier la substance sera celui de la montmorillonite.

Il faut souligner que la bentonite (EINECS 215-108-5, CAS 1302-78-9) et la montmorillonite (EINECS 215-288-5, CAS 1318-93-0) ne sont pas considérées comme la même substance.

En conclusion, un minéral est généralement désigné selon le(s) constituant(s) inorganique(s) qui le compose(nt). Il peut être considéré comme une substance mono- ou multiconstituant (pour des orientations générales sur ce point, voir les chapitres 4.2.1 et 4.2.2). Certains minéraux ne peuvent pas être décrits uniquement à partir de leur composition chimique ; leur identification requiert en outre une caractérisation physique ou des paramètres de processus (voir le chapitre 4.2.3). On en trouvera quelques exemples au tableau suivant.

Exemples de minéraux

Nom	CAS	EINECS	Eléments de description supplémentaires ¹⁶
Cristobalite	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (structure cristalline : symétrie cubique)
Quartz	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (structure cristalline : symétrie rhomboédrique)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Egalement connue sous le nom de Diatomite, Kieselgur et Celite Description : Solide siliceux mou composé de squelettes de petites plantes aquatiques préhistoriques. Contient principalement de la silice.
Dolomite	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Minéraux du groupe feldspath	68476-25-5	270-666-7	Substance inorganique, produit de réaction d'une calcination à haute température au cours de laquelle des quantités variables d'oxyde d'aluminium, d'oxyde de baryum, d'oxyde de calcium, d'oxyde de magnésium, d'oxyde de silicium et d'oxyde de strontium subissent une interdiffusion ionique homogène pour former une matrice cristalline.
Talc	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Vermiculite	1318-00-9	-	(Mg _{0.33} [Mg _{2.3} (Al ₀₋₁ Fe ₀₋₁) ₀₋₁](Si _{2.33-3.33} Al _{0.67-1.67})(OH) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O)

Données analytiques requises pour les minéraux

Composition élémentaire	La composition chimique donne un aperçu général de la composition du minéral, quel que soit le nombre de constituants qu'il contient et leurs proportions. Par convention, la composition chimique est exprimée en oxydes.
Données spectrales (DRX ou équivalent)	La DRX ou d'autres techniques permettent d'identifier les minéraux d'après leur structure cristallographique. Les pics de DRX ou d'IR caractéristiques du minéral devraient être indiqués, avec une brève description de la méthode d'analyse, ou des références bibliographiques.
Propriétés physico-chimiques	Les minéraux ont des propriétés physico-chimiques caractéristiques qui permettent de compléter leur identification, telles que : <ul style="list-style-type: none"> - Très faible degré de dureté - Capacité de gonflement - Formes de la diatomite (microscope optique) - Très haute densité - Surface spécifique (adsorption d'azote)

¹⁶ Définition selon la Directive 2001/30/CE de la Commission (JO L 146, 31/05/2001, p. 1)

7.6 HUILE ESSENTIELLE DE LAVANDIN GROSSO

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

En général, les substances d'origine végétale sont des substances naturelles complexes obtenues en appliquant à la plante ou à certaines de ses parties un traitement du type extraction, distillation, pressage, fractionnement, purification, concentration ou fermentation. La composition de ces substances varie selon le genre, l'espèce, les conditions de croissance et la période de récolte de la source, et selon les techniques de traitement mis en œuvre.

Les huiles essentielles pourraient être définies par leurs principaux constituants, comme il est de règle pour les substances multiconstituant. Cependant, les huiles essentielles peuvent comporter jusqu'à plusieurs centaines de constituants, qui peuvent varier considérablement selon un grand nombre de facteurs (genre, espèce, conditions de croissance, période de récolte, procédés mis en œuvre, par exemple). C'est pourquoi la description des constituants principaux ne suffit pas, bien souvent, à décrire ces substances UVCB. Les huiles essentielles devraient être décrites d'après la plante d'origine et le processus mis en œuvre pour le traitement, comme indiqué au chapitre 4.3.1 (sous-type 3 d'UVCB).

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

L'exemple ci-après décrit « l'huile essentielle de Lavandin grosso », pour laquelle on dispose d'une norme ISO (ISO 8902-1999).

1. Noms et autres identifiants

Source

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

Processus

Description des processus de réaction (bio)chimiques utilisés pour la fabrication de la substance
Distillation à la vapeur d'eau des sommités florales de <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) suivie de la séparation de l'eau et de l'huile essentielle ;
La séparation est un processus physique spontané qui se déroule normalement dans un séparateur (appelé « vase florentin ») et permet d'isoler facilement l'huile extraite. La température à ce stade du processus de distillation est de l'ordre de 40 °C.

Nom

Nom IUPAC ou autre nom chimique international	Huile essentielle de <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
Numéro CE Nom CE Description CE	297-385-2 Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext. Extraits et leurs dérivés physiquement modifiés tels que teintures, concrètes[terme correct], essences absolues, huiles essentielles, oléorésines, terpènes, fractions sans terpènes, distillats, résidus, etc., obtenus à partir de <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ¹⁷ .
Numéro CAS Nom CAS	93455-97-1 Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext.

¹⁷ « Labiatae » et « Lamiaceae » sont synonymes

2. Informations sur la composition – constituants connus

Constituants connus					
	Nom chimique CE CAS IUPAC autre	Numéro CE CAS	Formule moléculaire selon Hill	Concentration usuelle (% pondéral)	Domaine de concentration (% pondéral)
A	CE linalyl acetate CAS 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-diméthyl-, acetate IUPAC 3,7-Diméthyl octa-1,6-dien-3-yl acetate	CE 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28-38
B	CE linalool CAS 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-diméthyl- IUPAC 3,7-Diméthyl octa-1,6-diene-3-ol	CE 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24-35
C	CE Bornan-2-one CAS Bicyclo[2.2.1] heptan-2-one, 1,7,7- triméthyl- IUPAC 1,7,7-Triméthylbicyclo[2.2.1]-2- heptanone Autre Camphor	CE 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6-8
D	CE Cineole CAS 2-oxabicyclo [2.2.2]octane, 1,3,3- triméthyl- IUPAC 1,3,3-Triméthyl-2- oxabicyclo[2.2.2]octane Autre 1,8-cineole	CE 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4-7
E	CE P-menth-1-en-4-ol CAS 3-Cyclohexen-1-ol, 4-méthyl-1-(1- méthylethyl)- IUPAC 1-(1-Méthylethyl)-4-méthyl-3- cyclohexen-1-ol Autre terpinene-4-ol	CE 209-235-5 CAS 562-74-3	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5-5

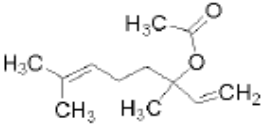
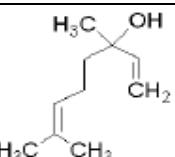
F	<p>CE 2-Isopropenyl-5-méthylhex-4-enyl acetate</p> <p>CAS 4-Hexen-1-ol, 5-méthyl-2-(1-méthylethenyl)-, acetate</p> <p>IUPAC 2-(1-Méthylethenyl)-5-méthylhex-4-en-1-ol</p> <p>Autre (±)-Lavandulol acetate</p>	<p>CE 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5-3
G	<p>CE DL-borneol</p> <p>CAS Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-triméthyl-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-triméthyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol</p> <p>Autre borneol</p>	<p>EC 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5-3
H	<p>CE Caryophyllene</p> <p>CAS Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-triméthyl-8-méthylène-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-triméthyl-8-méthylène bicyclo[7.2.0]undec-4-ene</p> <p>Autre trans-beta-caryophyllene</p>	<p>CE 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1-2,5
I	<p>CE (E)-7,11-diméthyl-3-méthylènedodeca-1,6,10-triene</p> <p>CAS 1,6,10-Dodecatriene, 7,11-diméthyl-3-méthylène-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-Diméthyl-3-méthylène-1,6,10-dodecatriene</p> <p>Autre trans-beta-farnesene</p>	<p>CE 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2-2

J	<p>CE (R)-p-mentha-1,8-diene</p> <p>CAS cyclohexen, 1-méthyl-4-(1-méthylethenyl)-, (4R)-</p> <p>IUPAC (4R)-1-Méthyl-4(1-méthylethenyl)cyclohexene</p> <p>Autre limonene</p>	<p>CE 227-813-5</p> <p>CAS 5989-27-5</p>	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5-1,5
K	<p>CE 3,7-diméthyl-1,3,6-triene</p> <p>CAS 1,3,6-Octatriene, 3,7-diméthyl-</p> <p>IUPAC 3,7-Diméthyl-1,3,6-triene</p> <p>Autre cis-beta-ocimene</p>	<p>CE 237-641-2</p> <p>CAS 13877-91-3</p>	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5-1,5

Constituants connus ≥ 10 %

Constituants connus		
	Nom CE	Description CE
A	linalyl acetate C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O	

Constituants connus		
	Nom CAS	Numéros CAS correspondants
A	linalyl acetate C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

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

Constituants connus		
	Masse moléculaire	Domaine de masse moléculaire
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7 HUILE DE CHRYSANTHEME ET ISOMERES ISOLEES A PARTIR DE L'HUILE DE CHRYSANTHEME

Une entreprise produit une huile de chrysanthème, extraite après broyage de fleurs et de feuilles de *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, par un solvant contenant un mélange eau/éthanol (1:10). Après l'extraction, le solvant est retiré et l'extrait « pur » est raffiné par des étapes supplémentaires conduisant au produit final.

De plus, deux isomères sont isolés de l'extrait, constituant un mélange réactionnel de :

Jasmolin I

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

Jasmolin II

(Cyclopropanecarboxylic acid, 3-[(1E)-3-methoxy-2-méthyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-diméthyl-, (1S)-2-méthyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-ylester, (1R,3R)-; numéro CAS 1172-63-0

En outre, l'entreprise a décidé de synthétiser également le mélange réactionnel isomérique de Jasmolin I et II.

L'entreprise pose les questions suivantes :

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

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

L'huile de chrysanthème est considérée comme une substance UVCB qui ne peut pas être identifiée de façon satisfaisante par sa composition chimique (pour plus de précisions, voir le chapitre 4.3). D'autres paramètres d'identification, comme l'origine et le procédé, sont essentiels. L'huile de chrysanthème est de nature biologique et devrait être identifiée par l'espèce et la partie de l'organisme d'où elle est extraite, ainsi que par le procédé de purification (extraction par un solvant). Néanmoins, la composition chimique et l'identité des constituants devraient être indiquées dans la mesure où elles sont connues.

Les informations suivantes sont considérées comme nécessaires pour une identification satisfaisante de la substance :

Nom de la substance	Chrysanthemum cinerariaefolium, Compositae ; huile obtenue à partir de fleurs et de feuilles par extraction au moyen d'un mélange eau:éthanol (1:10)			
Source				
Genre, espèce, sous-espèce	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae			
Partie de la plante utilisée pour l'huile	Fleurs et feuilles			
Processus				
Méthode de fabrication	Broyage suivi d'extraction			
Solvant utilisé pour l'extraction	Eau:éthanol (1:10)			
Informations sur la composition – constituants connus, en % pondéral				
Nom du constituant	N° CE	N° CAS	Min %	Max %
Pyrethrin I : 2-méthyl-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-méthyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl) cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-3-(3-methoxy-2-méthyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-diméthylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerin I : 3-(but-2-enyl)-2-méthyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-diméthyl-3-(2-méthylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerin II : 3-(but-2-enyl)-2-méthyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-diméthyl-3-(3-methoxy-2-méthyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropane carboxylate	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolin I : 2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di méthyl-3-(2-méthylprop-1-enyl)cyclo propanecarboxylate	néant	4466-14-2	4	10
Jasmolin II : 2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclo pent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-diméthyl-3-(3-methoxy-2-méthyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	néant	1172-63-0	4	10
La substance contient en outre jusqu'à 40 constituants présents à moins de 1 %.				

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

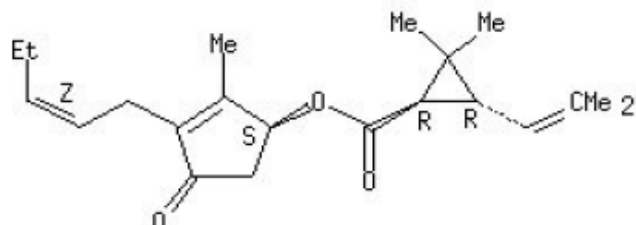
La substance serait considérée comme une « substance présente dans la nature » si le procédé de fabrication ne comportait que le broyage et serait ainsi exempté de l'obligation d'enregistrement, sauf si elle répond aux critères de classification comme substance dangereuse aux sens de la Directive 67/548/CEE.

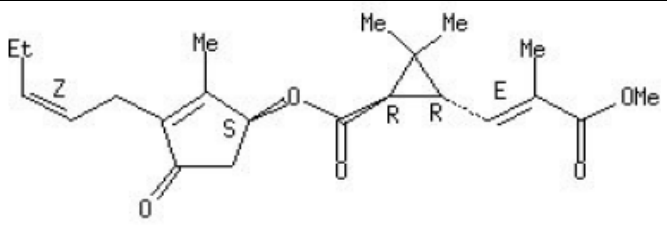
2. Le mélange réactionnel des isomères isolés Jasmolin I et Jasmolin II est-il couvert par l'enregistrement de l'huile ?

Le mélange réactionnel des isomères isolés Jasmolin I et Jasmolin II n'est pas couvert par l'enregistrement de l'huile de *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, car le(s) constituant(s) n'est (ne sont) pas couvert(s) par la substance UVCB dans son entier, et inversement. Le mélange réactionnel de Jasmolin I et II est considéré comme une substance différente.

Le mélange réactionnel de Jasmolin I et Jasmolin II peut être considéré comme une substance multiconstituant (pour plus de précisions, voir le chapitre 4.2.3) comportant deux constituants principaux.

Les informations suivantes sont jugées nécessaires pour une identification satisfaisante de la substance :

Nom IUPAC de la substance	MÉLANGE RÉACTIONNEL de (2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-diméthyl-3-(2-méthylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) et (2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-diméthyl-3-(3-méthoxy-2-méthyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)			
Autre nom	mélange réactionnel de Jasmolin I et Jasmolin II			
Pureté de la substance	95-98 % (en masse)			
Informations sur la composition –constituants principaux en % pondéral				
Nom du constituant	N° CE	N° CAS	Min *	Max %
Jasmolin I : 2-méthyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-diméthyl-3-(2-méthylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	Néant	4466-14-2	40	60
Formule moléculaire		C ₂₂ H ₃₀ O ₅		
Formule structurale				
Masse moléculaire		M = 374 g/mol		
Jasmolin II :	Néant	1172-63-0	35	65
Formule moléculaire		C ₂₁ H ₃₀ O ₃		

Formule structurelle			
Masse moléculaire		M = 330 g/mol	

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

Pour des substances chimiquement bien définies, qui sont décrites de façon satisfaisante par leurs constituants, peu importe que la substance soit isolée d'un extrait ou synthétisée par un processus chimique. Par conséquent, le mélange réactionnel de Jasmolin I et Jasmolin II obtenu par synthèse peut être considéré comme identique au mélange d'isomères isolés de *Chrysanthemum*, même si les procédés de fabrication diffèrent, sous réserve que la pureté du mélange et l'intervalle de concentration des principaux constituants soient identiques.

4. Conclusion

Deux substances sont identifiées :

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae ; huile obtenue à partir de fleurs et de feuilles broyées, par extraction au moyen d'un solvant eau:éthanol (1:10)
2. Mélange réactionnel des isomères Jasmolin I et Jasmolin II, indépendamment du procédé de fabrication de la substance.

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

7.8 PHENOL, ISOPROPYLE, PHOSPHATE

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

1. Nom et autres identifiants

Nom IUPAC ou autre nom chimique international	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)
Autres noms	Phénol, isopropylylé, phosphate Phénol, isopropylylé, phosphate (3:1) (basé sur un ratio 1:1 mol propylène / phénol)
Numéro CE Nom CE Description CE	273-066-3 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) /
Numéro CAS Nom CAS	68937-41-7 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)

2. Informations sur la composition –constituants principaux

Constituants principaux					
Nom IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Formule moléculaire selon Hill	Concentration usuelle (% pondéral)	Intervalle de concentration (% pondéral)
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Non spécifiée		

Constituants principaux	
Nom CE	Description CE
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	/
Nom CAS	Numéro CAS
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7

7.9 COMPOSES D'AMMONIUM QUATERNAIRE

Une entreprise synthétise les substances suivantes :

Substance A

Composés d'ammonium quaternaire, di-C₁₀₋₁₈-alkyldiméthyl, chlorides

Numéro CE 294-392-2
Numéro CAS 91721-91-4

Distribution des longueurs de chaîne carbonée :

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 %

Substance B

Composés d'ammonium quaternaire, dicoco alkyldiméthyl, chlorides

Numéro CE 263-087-6
Numéro CAS 61789-77-3

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

Substance C

Didodecyldiméthylammonium bromide

Substance D

Didodecyldiméthylammonium chloride

Substance E

La substance E est obtenue comme mélange réactionnel de Didodecyldiméthylammonium bromide et Didodecyldiméthylammonium chloride (mélange réactionnel des substances C et D).

Substance F

Composés d'ammonium quaternaire, di-C₁₄₋₁₈-alkyldiméthylammonium, chlorides

Numéro CE 268-072-8
Numéro CAS 68002-59-5

Distribution des longueurs de chaîne carbonée :

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

Substance G

Composés d'ammonium quaternaire, di-C₄₋₂₂-alkyldiméthyl, chlorides

Distribution des longueurs de chaîne carbonée (« prime » indique une double liaison, « seconde » une triple liaison) :

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

Pour l'instant, l'entreprise utilise uniquement la substance B (composés d'ammonium quaternaire, dicoco alkyldiméthyl chlorides, numéro CE 263-087-6, numéro CAS 61789-77-3) pour la désignation, car c'est le nom qui convient le mieux pour toutes les substances (A à G). L'entreprise souhaiterait savoir s'il est possible de couvrir toutes les substances (A à G) par le seul enregistrement de la substance B.

1. Remarques d'ordre général

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

- saturé
- linéaire (non ramifié)
- incluant tous les nombres de carbone entre 8 et 18, sachant qu'une distribution étroite ne couvre pas une distribution plus large, et inversement

S'il en est autrement, on précise :

- insaturé (C₁₆ insaturé)
- ramifié (C₁₀ ramifié)
- à nombre pair (C₁₂₋₁₈ nombre pair)

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

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

C ₁₂	1 %
C ₁₄	3 %
C _{14'}	1 %
C ₁₅	0,5 %
C ₁₆	29 %
C _{16'}	3 %
C ₁₇	1 %
C ₁₈	23 %
C _{18'}	37 %
C _{18''}	1,5 %

2. Comment identifier les substances aux fins d'enregistrement ?

Dans ce qui suit, chacune des substances est comparée à la substance B (utilisée jusqu'à présent pour désigner l'ensemble des substances), afin de déterminer si les deux substances peuvent être considérées comme identiques.

Comparaison des substances A et B

La distribution des longueurs de chaîne carbonée est la suivante pour le « coco » de la substance B (Ullmann, 1985) [« prime » indique une double liaison, « seconde » une triple liaison] :

C ₆	0,5 %
C ₈	8 %
C ₁₀	7 %
C ₁₂	50 %
C ₁₄	18 %
C ₁₆	8 %
C ₁₈	1,5 %
C _{18'}	6 %
C _{18''}	1 %

La distribution des longueurs de chaîne de la substance A est donc différente de celle de la substance B (« coco »). La composition qualitative et quantitative des deux substances présentant des différences significatives, elles ne peuvent pas être considérées comme identiques.

Comparaison des substances B et C

La substance B « composés d'ammonium quaternaire, dicoco alkylméthyl, chlorures » correspond à un mélange de constituants présentant des longueurs de chaîne carbonée différentes (C_6 à C_{18} , à nombre pair, linéaires, saturées et insaturées) alors que la substance C est décrite par un seul constituant avec une longueur de chaîne définie et saturée (C_{12}) et un anion différent (bromure). La substance C ne peut donc pas être considérée comme identique à la substance B.

Comparaison des substances B et D

La substance B « composés d'ammonium quaternaire, dicoco alkylméthyl, chlorures » correspond à un mélange de constituants présentant des longueurs de chaîne carbonée différentes (C_6 à C_{18} , à nombre pair, linéaires, saturées et insaturées) alors que la substance D est décrite par un seul constituant avec une longueur de chaîne définie et saturée (C_{12}) et le même anion (chlorure). Les substances B et D ont des noms différents et ne peuvent pas être considérées comme identiques, car un constituant unique n'est pas couvert par un mélange comportant ce même constituant, et inversement.

Comparaison des substances B et E

La substance E est un mélange des substances C et D. L'une et l'autre ont la même longueur de chaîne saturée C_{12} , mais des anions différents (bromure et chlorure). La substance B « composés d'ammonium quaternaire, dicoco alkylméthyl, chlorures » correspond à un mélange de constituants présentant des longueurs de chaîne carbonée différentes (C_6 à C_{18} , à nombre pair, linéaires, saturées et insaturées) et l'anion chlorure. Or la substance E est décrite uniquement par la longueur de chaîne carbonée C_{12} avec un anion bromure supplémentaire. Les substances B et E ne peuvent donc pas être considérées comme identiques et la substance E doit être enregistrée à part.

Comparaison des substances B et F

La substance F « composées d'ammonium quaternaire, di- C_{14-18} -alkylméthylammonium, chlorures » est un mélange de constituants présentant des longueurs de chaîne carbonée différentes (C_{14} à C_{18} à nombre pair et impair, linéaires et saturées). La substance F diffère de la substance B par sa composition et par la distribution des chaînes carbonées. La substance F a une distribution étroite de longueurs de chaîne et comporte en outre les chaînes carbonées C_{15} et C_{17} . Les substances B et F ne peuvent donc pas être considérées comme identiques.

Comparaison des substances B et G

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

3. Conclusion

Les hydrocarbures (paraffines, oléfines) ne peuvent être considérés comme identiques que lorsque les trois descripteurs (alkyles, fonctions chimiques [?]) et les sels sont identiques.

Dans l'exemple ci-dessus, les descripteurs présentent toujours des différences. Les substances ne peuvent donc pas être couvertes par le seul enregistrement de la substance B.

7.10 SUBSTANCES PETROLIERES

Deux exemples sont présentés ci-après selon les indications du chapitre 4.3.3.2 pour des substances UVCB particulières.

7.10.1 Bases pour carburants (C₄-C₁₂)

1. Nom et autres identifiants

Nom

Nom IUPAC ou autre nom chimique international	Naphtha (petroleum), catalytic reformed
---	---

Source

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

Processus

Description du processus de raffinage	Processus de reformage catalytique
Intervalle de coupe	C4-C12
Domaine ou température d'ébullition (CUT OFF)	30 °C à 220 °C
Autres propriétés physiques, viscosité, par exemple	inférieure à 7 mm ² /s à 40 °C (viscosité)
Numéro CE Numéro CAS Nom CE/nom CAS Description CE/description CAS	273-271-8 68955-35-1 Naphtha (petroleum), catalytic reformed Combinaison complexe d'hydrocarbures produite par distillation de produits provenant d'un processus de reformage catalytique. Composée d'hydrocarbures ayant des nombres de carbone principalement dans la gamme de C4 à C12 et un domaine d'ébullition de l'ordre de 30 à 220 °C (90 à 430 °F). Contient une proportion relativement élevée d'hydrocarbures aromatiques et à chaîne ramifiée. Cette coupe peut contenir 10 % ou plus de benzène en volume.

2. Informations sur la composition

Constituants connus			
Nom IUPAC	Numéro CAS	Numéro CE	Intervalle de concentration (% pondéral)
Benzene	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluene	108-88-3	203-625-9	20-25
Xylène	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2 Gasoils (pétrole)

1. Nom et autres identifiants

Nom

Nom IUPAC ou autre nom chimique international	Gas oils (petroleum), heavy atmospheric
---	---

Source

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

Processus

Description du processus de raffinage	Distillation atmosphérique
Intervalle de coupe	C7-C35
Intervalle des températures d'ébullition	121°C à 510°C
Autres propriétés physiques, viscosité, par exemple	20 mm ² /s à 40 °C (viscosité)
Numéro CE Numéro CAS Nom CE/nom CAS Description CE/description CAS	272-184-2 68783-08-4 Gas oils (petroleum), heavy atmospheric Combinaison complexe d'hydrocarbures obtenus par distillation de pétrole brut. Composée d'hydrocarbures ayant des nombres de carbone principalement dans la gamme de C7 à C35 et un domaine d'ébullition de l'ordre de 121 à 510°C (250 à 950°F).

2. Composition chimique

Pas d'informations disponibles.

7.11 ENZYMES

Deux exemples de concentrats d'enzymes sont présentés ci-après selon les indications du chapitre 4.3.2.3 pour des substances UVCB particulières : la subtilisine (identifiée par la nomenclature IUBMB + autres constituants) et l' α -l'amylase (identifiée par la nomenclature IUBMB + organisme producteur).

7.11.1 Subtilisine

<u>Protéine enzymatique</u>	Subtilisine
Numéro IUBMB	3.4.21.62
Noms donnés par l'IUBMB (nom systématique, nom de l'enzyme, synonymes)	Subtilisine Alcalase ; alcalase 0.6L ; alcalase 2.5L ; ALK-enzyme ; bacillopeptidase A ; bacillopeptidase B ; Bacillus subtilis alkaline proteinase biopraxe ; biopraxe AL 15 ; biopraxe APL 30 ; colistinase ; (cf. commentaires) ; subtilisin J ; subtilisin S41 ; subtilisin Sendai ; subtilisin GX ; subtilisin E ; etc.
Commentaires de l'IUBMB	La subtilisine est une sérine endopeptidase, exemple-type de la famille des peptidases S8. Elle ne contient pas de résidus de cystéine (bien que l'on en trouve dans des enzymes homologues). Les variants de l'espèce sont notamment la subtilisine BPN' (également subtilisine B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse, Nagarse proteinase, subtilisine Novo, bacterial protéinase Novo) et la subtilisine Carlsberg (subtilisine A, subtilopeptidase A, alcalase Novo). Anciennement EC 3.4.4.16 et incluse dans EC 3.4.21.14. Des enzymes similaires sont produites par différentes souches de <i>Bacillus subtilis</i> et d'autres espèces de <i>Bacillus</i> [1, 3]
Réaction	Hydrolyse des protéines avec large spécificité pour les liaisons peptidiques, et une préférence pour un important résidu non chargé en P1. Hydrolyse les amides peptidiques
Type de réaction	Hydrolases ; Agit sur les liaisons peptidiques (peptidases) ; Sérine endopeptidases
Numéro CE	232-752-2
Nom CE	Subtilisin
Numéro CAS	9014-01-1
Nom CAS	Subtilisin
Concentration de protéine enzymatique	26 %
<u>Autres constituants</u>	
Autres protéines, peptides et aminoacides	39 %
Glucides	11 %
Lipides	1 %
Sels inorganiques	23 %
<u>Paramètres complémentaires</u>	
Substrats et produits	Protéines et oligopeptides, eau, peptides

7.11.2 α -amylase

<u>Protéine enzymatique</u>	α -amylase
Numéro IUBMB	3.2.1.1
Noms donnés par l'IUBMB (nom systématique, nom de l'enzyme, synonymes)	1,4- α -D-glucan glucanohydrolase ; glycogénase ; α -amylase ; alpha-amylase ; endoamylase ; Taka-amylase A
Commentaires de l'IUBMB	Agit sur l'amidon, le glycogène et les polysaccharides et oligosaccharides apparentés de façon aléatoire ; les groupes réducteurs sont libérés dans la configuration α . Le terme « α » s'applique à la configuration anomérique initiale du groupe sucre libre relargué et non à la configuration de la liaison hydrolysée.
Réaction	Endohydrolyse de liaisons 1,4- α -D-glucosidiques dans des polysaccharides contenant au moins trois unités de D glucose à liaison 1,4- α
Type de réaction	Hydrolases ; Glycosidases ; Glycosidases, à savoir enzymes hydrolysant les composés O- et S-glycosyl
Numéro CE	232-565-6
Nom CE	Amylase, α
Numéro CAS	9000-90-2
Numéros CAS autre(s)	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (tous supprimés)
Nom CAS	Amylase, α -
Concentration de protéine enzymatique	37 %
<u>Autres constituants</u>	
Autres protéines, peptides et aminoacides	30 %
Glucides	19 %
Sels inorganiques	14 %
<u>Paramètres complémentaires</u>	
Substrats et produits	Amidon, glycogène, eau, polysaccharide, oligosaccharide

8 DESCRIPTION DES SUBSTANCES SOUS IUCLID 5

Cette section illustre comment les différents types de substances – monoconstituant, multiconstituant, substances définies par leur composition chimique plus d'autres identifiants et substances UVCB – peuvent être décrites selon IUCLID 5.

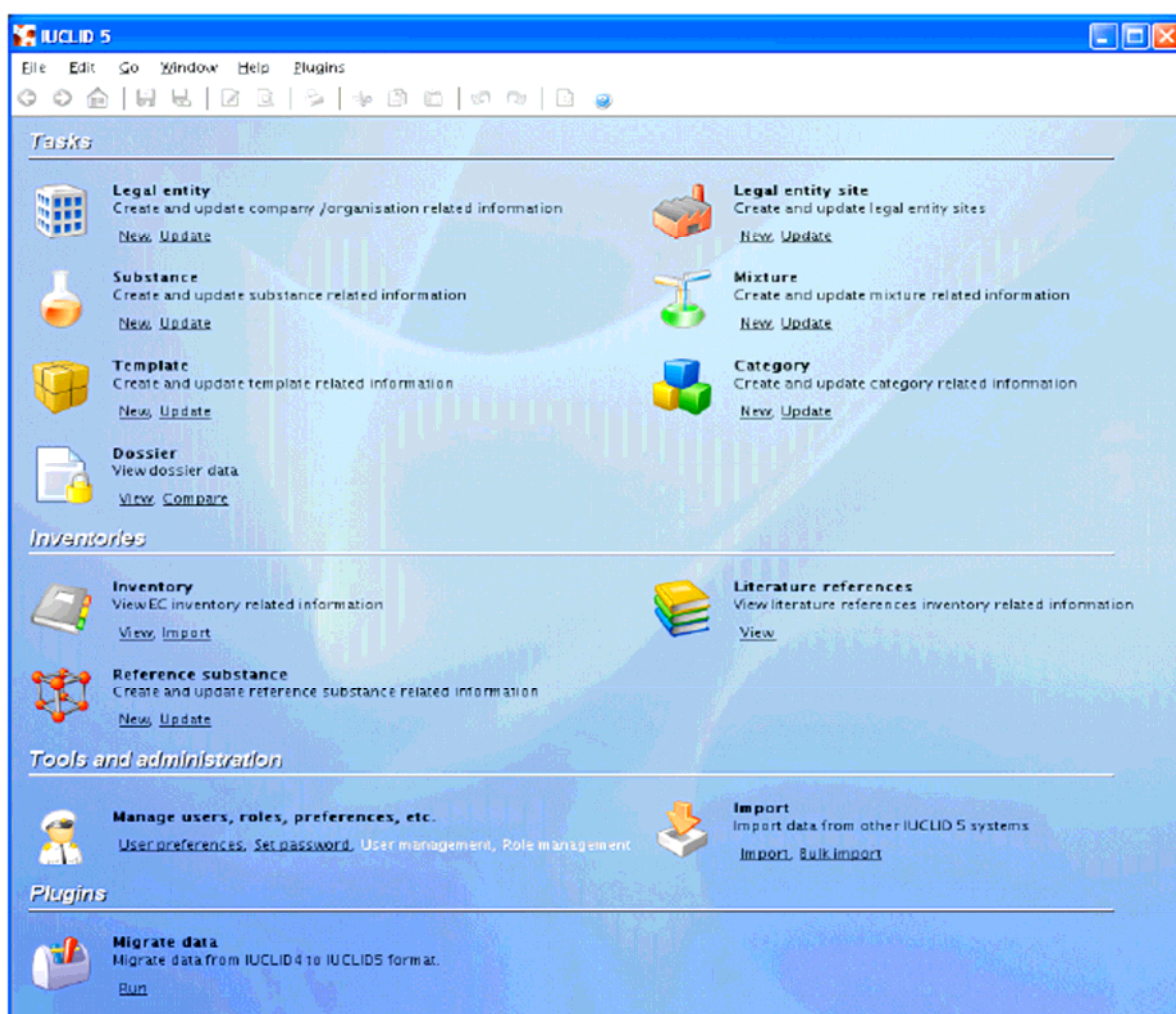
8.1 PRINCIPES GENERAUX

IUCLID 5 comporte trois parties importantes pour l'identification des substances :

« EC Inventory¹⁸ » (inventaire CE) sous « Inventories » ;

l'inventaire « Reference Substance » (substance de référence) sous « Inventories » ;

les sections 1.1 et 1.2 de la fiche de données relatives à une « Substance ».



¹⁸ Seul l'inventaire CE est actuellement intégré. D'autres inventaires (TSCA, par exemple) pourraient être ajoutés ultérieurement à cette section.

8.1.1 Inventaires

La section Inventaires comporte l'inventaire CE (voir le chapitre 3.3 pour plus de précisions), géré et alimenté de manière centralisée par la Commission européenne / l'Agence européenne des produits chimiques, et le Reference Substance inventory, un inventaire local géré et mis à jour en tant que de besoin par les utilisateurs sur leur propre système.

Lorsque l'onglet « EC inventory » est sélectionné, l'utilisateur peut rechercher et afficher les données de l'inventaire CE (à savoir numéro CE, numéro CAS, noms CE, etc.). Ces informations sont en lecture seule.

L'onglet « Reference Substance » permet à l'utilisateur d'accéder à son inventaire local de constituants, qu'il va utiliser pour donner l'identification de sa substance telle qu'elle est fabriquée, c'est-à-dire en incluant les impuretés et additifs.

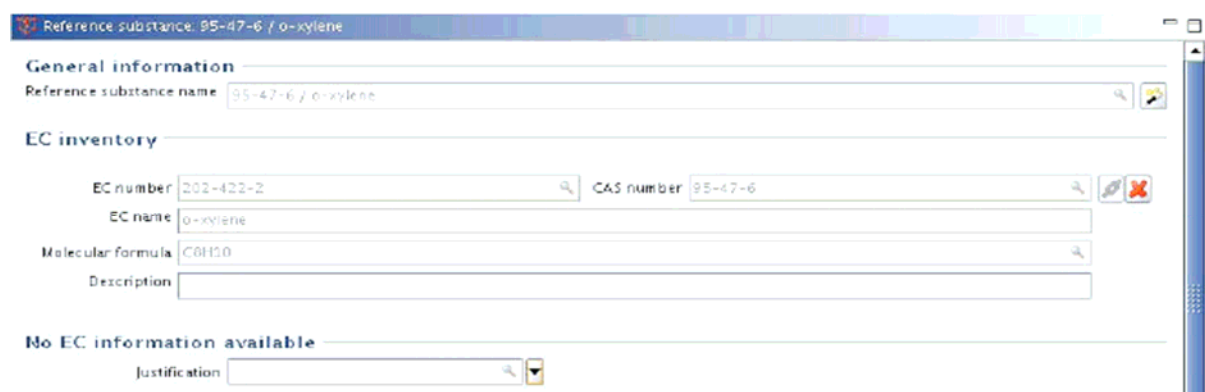
En d'autres termes, les modules d'une substance sont créés et gérés centralement dans l'inventaire Reference Substance. Les Reference Substances peuvent être réutilisées au fur et à mesure des besoins pour diverses substances.

Exemple

Si une substance est composée de 91 % de 1,2-diméthylbenzene avec 5 % de 1,3-diméthylbenzene comme impureté, ces deux constituants, le 1,2-diméthylbenzene et le 1,3-diméthylbenzene doivent être définis dans l'inventaire Reference Substance. Les informations sont enregistrées et tenues à jour dans cet inventaire. Au cas où ces mêmes constituants apparaissent dans une autre substance à des pourcentages différents, ils figureront déjà dans l'inventaire local et seront faciles à réutiliser.

Les figures ci-après sont des copies d'écran de la section Reference Substance de IUCLID 5. Cette section est présentée en trois parties, mais sous IUCLID, elle s'affiche sur un seul écran.

Reference substance – 1^{re} partie



The screenshot shows a web-based form for entering reference substance information. The title bar reads "Reference substance: 95-47-6 / o-xylene". The form is divided into several sections:

- General information:** A text field for "Reference substance name" containing "95-47-6 / o-xylene".
- EC inventory:** This section contains several input fields:
 - "EC number" with the value "202-422-2".
 - "CAS number" with the value "95-47-6".
 - "EC name" with the value "o-xylene".
 - "Molecular formula" with the value "C8H10".
 - "Description" (empty field).
- No EC information available:** A section with a "Justification" text field.

La figure « Reference substance – 1^{re} partie » comporte :

Nom de la substance de référence

Le nom de la substance, qui peut être choisi librement (ici 95-47-6 / 1,2-diméthylbenzene).

EC inventory

Le lien vers l'inventaire CE (en lecture seule), avec les informations reprises automatiquement, comme le numéro CE.

No EC information available

Menu déroulant où peuvent être précisées les raisons (« justification ») pour lesquelles il n'existe pas de données à l'inventaire CE (non applicable, par exemple, ou pas encore attribué).

Reference substance – 2^e partie

CAS information

CAS number: 95-47-6
CAS name: o-Xylene

IUPAC name
1,2-dimethylbenzene

Description

Synonyms

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

Buttons: Add..., Edit..., Delete

Related CAS information

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

Buttons: Add..., Edit..., Delete

La figure « Reference substance – 2° partie » comporte :

« CAS information » (numéro et nom CAS), avec les informations CAS correspondantes ;
En règle générale, le numéro CAS correspondant au numéro CE devrait être fourni. S'il existe plus d'un numéro CAS (numéros CAS supprimés, par exemple, ou numéros CAS d'une même substance utilisés dans différents systèmes législatifs pour décrire la substance selon les exigences de ces systèmes), indiquer l'autre(les autres) numéro(s) CAS (related CAS numbers) ;

Il faut noter que le nom (chimique) des substances devrait être spécifié en langue anglaise dans le champ « IUPAC name ». Ce champ devrait également être utilisé pour les substances UVCB, qui sont décrites par la source et le processus ;

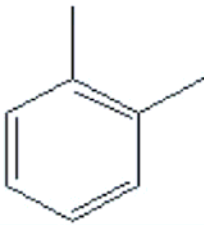
Champ « Description », pour des informations complémentaires :

Toute information complémentaire pertinente pour la description de la substance devrait être donnée dans ce champ (pour les substances UVCB et les minéraux, par exemple) ;

Synonymes

Peuvent notamment être mentionnés ici les noms IUPAC dans d'autres langues.

Référence substance – 3° partie

Molecular formula	<input type="text" value="C8H10"/>
Molecular weight range	<input type="text" value="106.165"/>
SMILES notation	<input type="text" value="Cc1ccccc1C"/>
InChI	<input type="text" value="InChI=1/C8H10/c1-7-5-3-4-6-8(7)2/h3-6H,1-2H3"/>
Structural formula	
Remarks	<input type="text"/>

Buttons: Load... Zoom... Delete

La figure « Référence substance – 3° partie » comporte :

La formule brute;
elle doit être donnée selon la méthode de Hill

La masse moléculaire, y compris le domaine de masse moléculaire ;

La notation SMILES ;

Le code InChI

La formule développée, sous forme de schéma.

8.1.2 Formulaire de données substance (IUCLID sections 1.1, 1.2, 1.3 et 1.4)

Le Formulaire de données de IUCLID 5 comprend toutes les données sur une substance, comme les résultats d'études sur les propriétés intrinsèques de la substance (« endpoints »), les informations sur la classification et l'étiquetage, et l'identité chimique avec notamment la composition de la substance. Les données sont regroupées en 11 sections.

La fiche de données de la substance peut être créée, consultée, affichée et mise à jour sous l'onglet « Substance ».

Dans cette fiche de données, l'identification et la composition de la substance font l'objet des sections 1.1 et 1.2.

Identification de la substance – 1^{re} partie

The screenshot displays the IUCLID 5 Substance Data Form for 'Substance: O-XYLENE / EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / ECHA'. The left sidebar shows a navigation tree with 13 sections, with '1.1 Identification' selected. The main form area contains the following sections:

- Third party flags:** Includes a flag icon and a text field for 'Third party'.
- Role in the supply chain:** Includes a flag icon and radio buttons for 'Manufacturer', 'Importer', 'Only representative', and 'Downstream'.
- Reference substance:** Includes a search icon and a text field with 'o-xylene / o-xylene / 95-47-6'. Below are fields for 'EC number' (202-422-2), 'EC name' (o-xylene), 'CAS number' (95-47-6), and 'CAS name'.
- IUPAC name:** o-xylene
- Type of substance:** Includes dropdown menus for 'Composition' and 'Origin'.
- Trade names:** Includes a flag icon and a table with the following entries:

	Name
<input type="checkbox"/>	TG OX
<input type="checkbox"/>	Ortho-X
<input checked="" type="checkbox"/>	TG OX2

At the bottom of the form are buttons for 'Add...', 'Edit...', and 'Delete'.

La section 1.1 (Identification) comporte :

Référence substance

Le lien avec la substance de référence à laquelle se rapporte la substance devrait être créée ici. La substance est désignée en conséquence.

Type of substance

Un menu déroulant permet de choisir le type de substance (monoconstituant, par exemple).

Trade names

Tous les noms commerciaux internes ou externes à l'entreprise peuvent être indiqués ici.

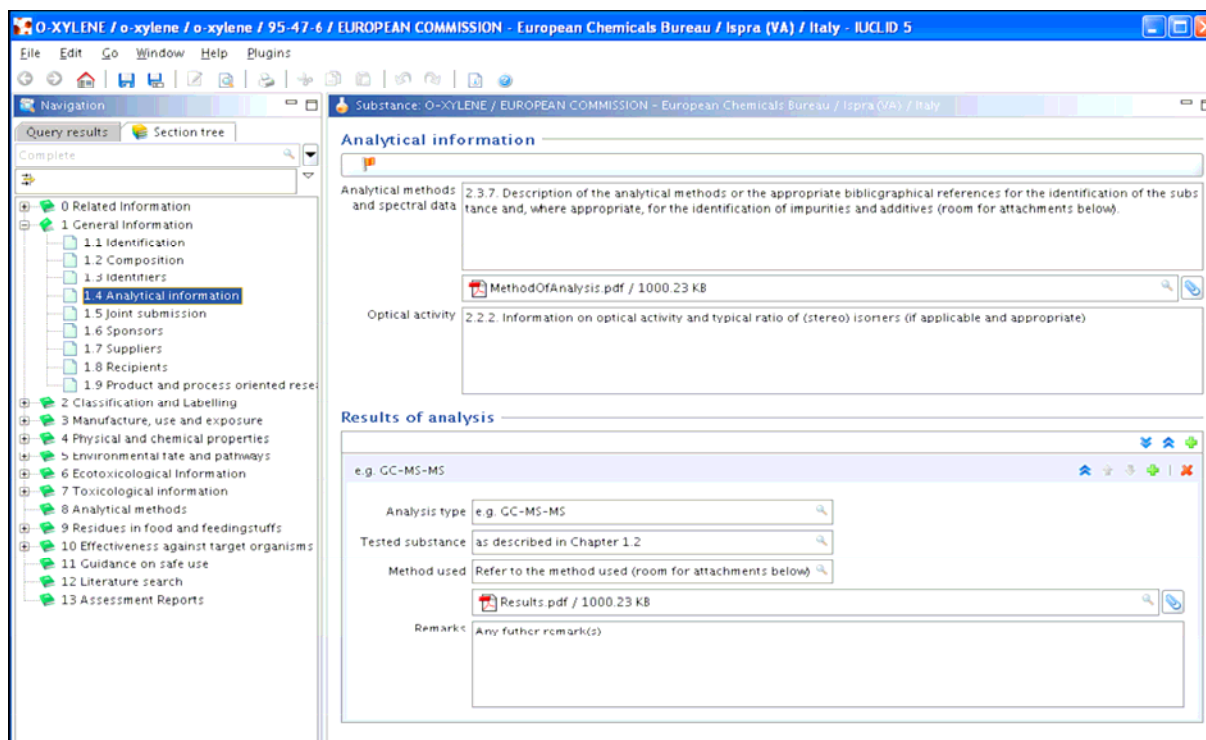
La section 1.2 (Composition) comporte une description de la composition de la substance, avec des liens vers les modules correspondants de « Reference substances ». Tous les constituants (constituants principaux et impuretés, notamment) des substances telles qu'elles sont fabriquées et les additifs sont indiqués ici.

Des exemples avec des indications précises sur la façon de remplir la section 1.2 de IUCLID 5 sont donnés au chapitre 8.2.

La section 1.3 (« Identifiers ») comporte des données permettant d'identifier les substances du point de vue informatique ; l'utilisateur peut notamment préciser l'identificateur utilisé pour la même substance dans un autre système informatique (consacré aux fiches de données de sécurité, par exemple). Cela permet d'améliorer les échanges de données entre IUCLID 5 et d'autres systèmes, mais ne relève pas de l'identification des substances telle que décrite dans le présent GT.

La section 1.3 offre en outre la possibilité d'enregistrer les numéros d'identification attribués par différents systèmes réglementaires (numéro d'enregistrement REACH, par exemple). Ces données ne relèvent pas non plus de l'identification des substances aux termes du présent GT.

Identification de la substance – 2^e partie



La section 1.4 (Analytical information) est réservée aux données analytiques sur la substance¹⁹, activité optique comprise.

8.2 COMMENT REMPLIR UN DOSSIER SOUS IUCLID 5 – EXEMPLES

On trouvera ci-après les exemples suivants : substance monoconstituant au chapitre 8.2.1, substance multiconstituant au chapitre 8.2.2, substance définie par sa composition chimique plus d'autres identifiants au chapitre 8.2.3 et substance UVCB au chapitre 8.2.4.

8.2.1 Substance monoconstituant

Exemple : substance monoconstituant			
Nom	1,2-diméthylbenzène		
Constituant principal	Teneur habituelle % pondéral	Teneur minimale % pondéral	Teneur maximale % pondéral
1,2-diméthylbenzène	91	88	93
Impuretés			
1,3-diméthylbenzène	5	2	7
1,4-diméthylbenzène	2	0,5	3
Eau	2	0,5	3

Le nom de la substance est indiqué à la section 1.1. Selon le présent GT, cette substance est une substance monoconstituant dont la désignation est « 1,2-diméthylbenzène ». Sous IUCLID 5, cela implique qu'il devrait y avoir un lien entre les données sur la substance et la Reference substance 1,2-diméthylbenzène à la section 1.1.

¹⁹ Cette partie pourrait être modifiée après les tests bêta de IUCLID 5.

Navigation

Substance: o-Xylene / o-xylene / o-xyelene / o-xyelene / 95-47-6 / European Chemicals Bureau

Query results Section tree

Complete

- 0 Related Information
- 1 General Substance Information
 - 1.1 Substance identification
 - 1.2 Substance composition
 - 1.3 Identifiers
 - 1.4 Analytical information
 - 1.5 Classification and Labelling
 - 1.6 Joint submission
 - 1.7 Sponsors
 - 1.8 Suppliers
 - 1.9 Recipients
 - 1.10 Product and process oriented re
- 2 Manufacture, use and exposure
- 3 Physical and chemical properties
- 4 Environmental fate and pathways
- 5 Ecotoxicological Information

Substance identification

Chemical name: o-Xylene

Legal entity flags:

Legal entity: European Chemicals Bureau / Ispra / Italy

Role in the supply chain

Role flags:

Role: Manufacturer Importer Sole representative Downstream user

Reference substance

o-xylene / 1,2-methylberzene / o-xyelene / 95-47-6

Type of substance

Composition: mono constituent substance

Origin:

Au chapitre 1.2, la composition de la substance est définie comme suit :

Degré de pureté

Pour une substance monoconstituant, le degré de pureté du constituant principal (normalement $\geq 80\%$) devrait être indiqué ici (limites inférieure et supérieure).

Constituants

Pour une substance monoconstituant, les identifiants chimiques (numéro et nom CE, numéro et nom CAS, nom IUPAC) sont indiqués ici. L'identité chimique est définie par le lien avec la « Reference substance ».

Le champ « remarks » peut être utilisé pour tout type d'information. Il devrait notamment être utilisé pour justifier un écart éventuel par rapport à la règle des 80 % (voir le chapitre 4.2.2).

The screenshot displays a software interface for substance management. On the left is a navigation tree with categories like 'General Substance Information' and 'Physical and chemical properties'. The main window is titled 'Degree of purity' and 'Constituents'. Under 'Degree of purity', there are input fields for values 85 and 95, with a dropdown for '% (w/w)'. The 'Constituents' section features a table for 'Reference substance' with columns for EC number, EC name, CAS number, CAS name, and IUPAC name. The table lists 'o-xylene / 1,2-methylbenzene / o-xylene / 95-47-6'. Below the table are input fields for 'Proportion (typical)' (91) and 'Proportion (real)' (88-93), both with '% (w/w)' units, and a 'Remarks' field.

Impuretés

Les impuretés présentes à une concentration $\geq 1\%$ (ou à une limite plus basse si l'information est importante pour la classification de la substance) devraient être spécifiées par l'un au moins des identifiants chimiques (numéro et nom CE, numéro et nom CAS, nom IUPAC). L'identité chimique est définie par le lien avec la « Reference substance ». Pour chaque impureté, la concentration (concentration usuelle et intervalle de concentration) sera indiquée en pourcentage pondéral.

Le nombre et la concentration totale des impuretés non spécifiées devront être indiqués, s'ils sont connus, de telle sorte que la concentration totale soit égale à 100 %.

Additifs

Tous les additifs présents devront être spécifiés par les identifiants chimiques (numéro et nom CE, numéro et nom CAS, nom IUPAC). L'identité chimique est définie par le lien avec la « Reference substance ». Pour chaque additif, la concentration (concentration usuelle et intervalle de concentration) sera indiquée en pourcentage pondéral.

8.2.2 Substance multiconstituant

Exemple : substance multiconstituant			
Nom	mélange réactionnel de 1,4-diméthylbenzene, 1,2-diméthylbenzene et 1,3-diméthylbenzene		
Constituants principaux	Teneur habituelle % pondéral	Teneur minimale % pondéral	Teneur maximale % pondéral
1,4-diméthylbenzene	35	30	40
1,2-diméthylbenzene	30	25	35
1,3-diméthylbenzene	25	20	30
Impuretés			
Eau	10	5	12

Selon le présent GT, cette substance est une substance multiconstituant comportant trois constituants principaux, dont la désignation est « mélange réactionnel de 1,4-diméthylbenzene, 1,2-diméthylbenzene et 1,3-diméthylbenzene ». L'eau est un solvant résiduel qui ne peut pas faire l'objet d'une séparation plus poussée de la substance et devrait être considéré comme une impureté, et non pas comme un constituant principal.

Sous IUCLID 5, cela implique qu'il devrait y avoir un lien entre les données sur la substance et la substance Référence « mélange réactionnel de 1,4-diméthylbenzene, 1,2-diméthylbenzene et 1,3-diméthylbenzene » (voir la section 1.1).

The screenshot displays the IUCLID 5 software interface. The main window title is "Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene / Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and...". The interface is divided into several panes:

- Navigation pane (left):** Shows a tree view with categories like "0 Related Information", "1 General Information", "2 Classification and Labelling", etc. "1.1 Identification" is selected.
- Substance identification pane (right):**
 - Chemical name:** Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene
 - Legal entity flags:** [Flag]
 - Legal entity:** EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Ispra (VA) / Italy
 - Third party flags:** [Flag]
 - Third party:** [Empty field]
 - Role in the supply chain:**
 - Role flags:** [Flag]
 - Role:** Manufacturer Importer Only representative Downstream user
 - Reference substance:** Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene / 1330-20-7
 - EC number:** 215-535-7 **EC name:** xylene
 - CAS number:** 1330-20-7 **CAS name:** [Empty field]

Pour chaque constituant, additif ou impureté, l'identité chimique, la concentration usuelle et l'intervalle de concentration sont spécifiés au chapitre 1.2. L'identité chimique est définie par le lien avec la substance Référence.

The screenshot displays a software interface with a 'Section tree' on the left and a 'Constituents' panel on the right. The 'Section tree' lists various categories, with '1.2 Composition' highlighted. The 'Constituents' panel shows two entries:

- 30% (w/w) o-xylene / o-xylene / 95-47-6**: Reference substance 'o-xylene / o-xylene / 95-47-6'. Table: EC number (202-422-2), EC name (o-xylene), CAS number (95-47-6), CAS name. Typical concentration: 30 % (w/w). Concentration range: 25 to 35 % (w/w).
- p-xylene / p-xylene / 106-42-3**: Reference substance 'p-xylene / p-xylene / 106-42-3'. Table: EC number (203-396-5), EC name (p-xylene), CAS number.

8.2.3 Substances définies par leur composition chimique plus d'autres identifiants

Dans certains cas, d'autres identifiants principaux sont nécessaires pour permettre une identification sans équivoque de la substance (voir le chapitre 4.2.4). Ces paramètres additionnels diffèrent selon le type de substance. En tout état de cause, ils sont essentiels pour l'identification de la substance. Pour les minéraux, par exemple, il importe de compléter les données relatives à la composition élémentaire par les données spectrales identifiant la composition minéralogique et la structure cristalline, qui est confirmée par les propriétés physico-chimiques (voir aussi l'exemple du chapitre 7.3).

Les propriétés physico-chimiques sont par exemple les suivantes :

- Structure cristalline (mise en évidence par diffraction des rayons X)
- Forme
- Dureté
- Capacité d'expansion
- Densité
- Surface spécifique
- Etc.

Exemple : substance définie par sa composition chimique plus d'autres identifiants
Des identifiants supplémentaires peuvent être fournis pour certains minéraux, dont les propriétés physico-chimiques permettent de compléter l'identification ; exemples :
<ul style="list-style-type: none">Très faible degré de dureté pour le talcCapacité d'expansion de la bentoniteFormes de la diatomite (microscope optique)Densité très élevée de la baryteSurface externe (adsorption d'azote)

Ce type d'information devrait être fourni dans le champ description de la substance Référence à laquelle sont liées les données (section 1.1 de IUCLID 5).

IUPAC name	IUPAC name of the mono or multiple constituent substance
Description	<ul style="list-style-type: none">• very low hardness for talc• swelling capacity of bentonite• shapes of diatomite (optical microscope)• very high density of barite• surface area (nitrogen adsorption)

8.2.4 Substance UVCB

Les substances UVCB ne peuvent pas être spécifiées de façon univoque par le nom IUPAC de leurs constituants (car les constituants ne peuvent être tous identifiés), ou peuvent être spécifiées en termes génériques mais avec un manque de spécificité due à la variabilité de leur composition. Les identifiants principaux des substances UVCB ont trait à la source de la substance et au processus mis en œuvre. En raison de l'absence de différenciation entre constituants et impuretés, les termes « constituants principaux » et « impuretés » ne devraient pas être utilisés pour les substances UVCB.

Néanmoins, la composition chimique et l'identité des constituants devraient être indiquées dans la mesure où elles sont connues. La composition peut souvent être décrite de façon générique : « acide gras linéaires C8-C16 », par exemple, ou « éthoxylates d'alcools C10-C14 avec de 4-10 groupes éthoxylate ».

Pour spécifier une substance UVCB, le même système s'applique pour les substances mono- et multiconstituant. La substance elle-même est spécifiée par une substance Reference ainsi que par les constituants connus.

Il est important de noter que, lorsque l'on définit la substance comme substance Reference, le nom (chimique) de la substance UVCB devrait être spécifié dans le champ « IUPAC name » (bien que les substances UVCB aient rarement un nom IUPAC « classique »). Le champ « description » devrait être utilisé pour des informations complémentaires (conditions de réaction, par exemple).

Exemple : substance UVCB	
Nom	Distillats (charbon), haute température, fraction benzol
Description	Distillat obtenu par distillation de houille à haute température ayant un intervalle de distillation de l'ordre de 30 à 180 °C (86 à 356 °F). Composé principalement d'hydrocarbures aliphatiques et aromatiques C4 - C6 avec bisulfure de carbone, cyclopentadiène et un peu de sulfure d'hydrogène.

EC inventory

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

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


Molecular formula:

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

No EC information available

Justification:

Reference substance information



CAS information

CAS number: 185323-42-6

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

IUPAC name

The name of the UVCB should be reported in this field. In this case "distillates (coal), high-temperature, benzole fraction".

Also when no IUPAC name can be derived, the name of the substance should be reported in this field

Description

The description of any additional information should go into this field, in this case.:

The distillate from the fractional distillation of high-temperature coal having an approximate distillation range of 30°C to 138°C (86°F to 356°F). Composed primarily of C4 to C6 alifatic and aromatic hydrocarbons with carbon disulfide, cyclopentadiene and some hydrogen sulfide.

Pour les données relatives à la substance, les mêmes règles s'appliquent que pour les substances mono- ou multiconstituant. Un lien est établi entre les données et la substance Référence définissant la substance en section 1.1.

1 General Substance Information

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

Legal entity: European Chemicals Bureau / Ispra / Italy

Role in the supply chain

Role flags: 

Role: Manufacturer Importer Sole representative

Reference substance

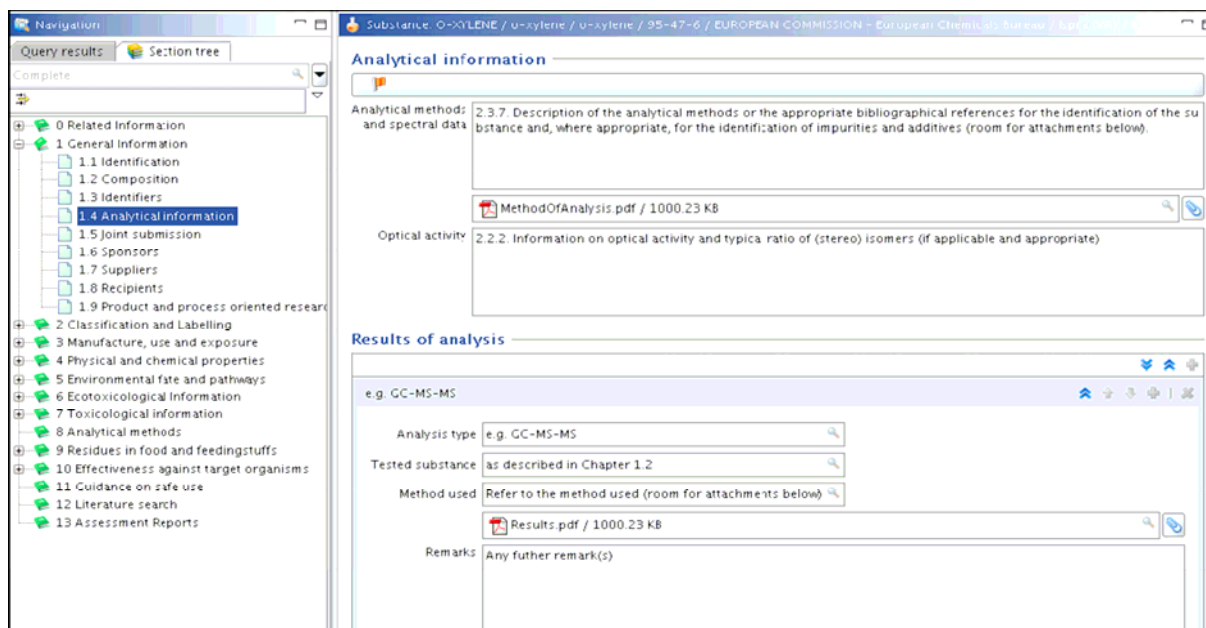
Example for UVCB / The name of the UVCB should be reported in this field

Les constituants connus sont définis par la substance Référence correspondante, comme indiqué pour les substances mono- et multiconstituant.

8.3 COMMUNICATION DES DONNEES ANALYTIQUES

Les données analytiques sont reportées au chapitre 1.4. Ce chapitre comprend deux parties :

- Analytical information (Données analytiques)
- Results of analysis (Résultats d'analyse)



Cette subdivision découle en droite ligne des exigences de REACH (annexe VI) :

Données analytiques :

- Analytical methods : les méthodes d'analyse devraient être décrites dans ce champ (REACH, annexe VI, 2.3.7). Si la place disponible est insuffisante, il est possible d'inclure des pièces jointes
- Optical activity : des informations sur l'activité optique et le ratio habituel des (stéréo) isomères devraient être fournies dans ce champ, si elles sont disponibles et pertinentes (REACH, annexe VI, 2.2.2).

Results of analysis :

Le bloc « résultats d'analyse » offre à l'utilisateur la possibilité de donner des informations sur les résultats d'analyse pertinents pour l'identification, et de joindre des documents (chromatogrammes, par exemple). Ce bloc peut être utilisé pour fournir des données spectrales (REACH, annexe VI, 2.3.5) ou chromatographiques (REACH, annexe VI, 2.3.6).

9 BIBLIOGRAPHIE

Parlement européen et Conseil de l'Union européenne (2006) Règlement (CE) n° 1907/2006 du Parlement européen et du Conseil concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), instituant une agence européenne des produits chimiques, modifiant la Directive 1999/45/CE et abrogeant le règlement (CEE) n° 793 du Conseil et le règlement (CE) n° 1488/94 de la Commission ainsi que la directive 76/769/CEE du Conseil et les directives 91/155/CEE, 93/76/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE et 2000/21/CE de la Commission. 18 décembre (2006)

Conseil de l'Union européenne (2006) Proposition de Règlement du Parlement européen et du Conseil concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), établissant une agence européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE ainsi que le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 12 juin (2006) 7524/06

Conseil de l'Union européenne (2005) Proposition de Règlement du Parlement européen et du Conseil concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), établissant une agence européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE ainsi que le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 19 décembre (2005) 15921/05

CE (2003-A) Proposition pour l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances, instituant une agence européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE ainsi que le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 29 octobre 2003COM (2003) 644 final : volume I

CE (2003-B) Proposition pour l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances, instituant une agence européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE ainsi que le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 29 octobre 2003COM (2003) 644 final : volume II – Annexes 1 à IX à la proposition de règlement

CE (2003-C) Proposition pour l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances, instituant une agence européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE ainsi que le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 29 octobre 2003COM (2003) 644 version provisoire: volume III – Annexe X partie A à la proposition de règlement

CE (2003-D) Proposition pour l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances, instituant une agence européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE ainsi que le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 29 octobre 2003COM (2003) 644 version provisoire: volume IV – Annexe X partie B à la proposition de règlement

CE (2003-E) Proposition pour l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances, instituant une agence

européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE ainsi que le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 29 octobre 2003COM (2003) 644 version provisoire: volume V – Annexe X partie C à la proposition de règlement

CE (2003-F) Proposition pour l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances, instituant une agence européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE ainsi que le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 29 octobre 2003COM (2003) 644 final : volume VI – Annexes XI à XVII à la proposition de règlement (incluant l'analyse socio-économique en pages 247 et suivantes).

ECB (2003) Notification of new chemical substances in accordance with Directive 67/548/CEE on the classification, packaging and labelling of dangerous substances. No Longer Polymer List. EUR 20853 EN (disponible sur le site Internet de l'ECB).

ECB (2005) Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/CEE (Directives 79/831/CEE et 92/32/CEE) Non confidential version. EUR 20519 EN. Updated version of June 2005, Mise à jour de juin 2005.

Parlement européen (2005) Résolution législative du Parlement européen sur la Proposition du parlement européen et du conseil concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), instituant une agence européenne des produits chimiques et modifiant la directive 1999/45/CE et le règlement (CE) sur les polluants organiques persistants. 17 novembre (2005) P6 TA-PROV(2005)11-17

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

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

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

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

US EPA (2005-A) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Products containing two or more substances ; formulated and statutory mixtures.
<http://www.epa.gov/opptintr/newchems/mixtures.txt>

US EPA (2005-B) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Combinations of two or more substances ; complex reaction products.
<http://www.epa.gov/opptintr/newchems/rxnprods.txt>

US EPA (2005-C) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Certain Chemical Substances containing varying Carbon Chain Lengths (alkyl ranges using the CX-Y notation)
<http://www.epa.gov/opptintr/newchems/mixtures.txt>

US EPA (2005-D) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Chemical Substances of Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Materials : UVCB Substances. <http://www.epa.gov/opptintr/newchems/uvcb.txt>

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

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

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.

ANNEXE I OUTILS D'AIDE A L'APPLICATION DE REACH

La présente annexe fournit des listes de sites Internet, banques de données et manuels qui peuvent constituer une aide pour, trouver les noms IUPAC, CAS et CE appropriés, les numéros CAS et CE, les formules moléculaire et structurale, mais aussi sur la notation SMILES, ainsi que d'autres paramètres exigés pour l'identification des substances. Les banques de données et outils commerciaux ne sont pas mentionnés ici.

Aspects généraux		
Paramètre d'identité de la substance	Source	Description de la source
Aspects généraux	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	Famille de banques de données et d'outils destinés à aider les utilisateurs dans la recherche d'informations chimiques
	http://chemfinder.cambrindgesoft.com/	Banque de données en accès libre fournissant les structures chimiques, les propriétés physiques et des hyperliens vers les informations pertinentes
	http://www.accelrys.com/accord/productlisting.html	Logiciel de chimie ; Accord Alphabetical Product Listing
	http://www.syrres.com/esc/free_demos.htm	Recherche en ligne gratuite sur les banques de données suivantes : Environmental fate database ; KOW (online Log P) ; PHYSPRO (Physical properties)

Nom et autres identifiants		
Paramètre d'identité de la substance	Source	Description de la source
Nom IUPAC	http://www.iupac.org ou plus spécifique : http://www.iupac.org/publications/books/serie_styles/nomenclature.htm#inorganic (substances inorganiques) http://www.iupac.org/publications/books/serie_styles/nomenclature.html (général)	Site officiel de l'IUPAC
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	Nomenclature chimique et recommandations IUPAC (sous l'autorité de l'IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	L'une des principales publications de l'IUPAC sur la nomenclature, mise à jour attendue en 2006
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	L'une des principales publications de l'IUPAC sur la nomenclature, mise à jour attendue en 2006
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	L'une des principales publications de l'IUPAC sur la nomenclature, mise à jour attendue en juillet 2005

Nom et autres identifiants		
Paramètre d'identité de la substance	Source	Description de la source
Nom IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	L'une des principales publications de l'IUPAC sur la nomenclature
	Principles of Chemical Nomenclature : a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Volume introductif couvrant tous types de composés
Nom IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/name_lab	Programme commercial informatisé qui peut aider dans la désignation des structures de complexité modérée. Logiciel libre disponible pour les petites molécules (recommandé par l'IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Nomenclature IUPAC de chimie organique (recommandé par l'IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Liste complète de noms triviaux et semi-systématiques retenus pour les composés organiques
	http://www.chemexper.com/	L'objectif du ChemExper Chemical Directory est de créer une banque de données produits chimiques commune et libre de droits sur Internet. Cette banque contient des produits chimiques avec leurs caractéristiques physiques. Chacun peut soumettre et rechercher des informations via un système de navigation Internet
Nomenclature IUBMB	http://www.chem.qumul.ac.uk/iubmb/ ou http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb	Banque de données fournissant la nomenclature biochimique de l'IUBMB (sous l'autorité de l'IUBMB)
Autres noms	http://www.colour-index.org	Colour index Generic Names, Colour Index International, Fourth Edition Online (noms génériques Colour Index, 4 ^e édition en ligne)
	http://pharmacos.eudra.org/F3/cosmetic/cosm_inci_index.htm	Site officiel de l'INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients)
Autres identifiants	http://www.cenorm.be	Normes CE, site officiel de la commission européenne
Numéro CE	http://ecb.jrc.it/	Site officiel du European Chemicals Bureau : ESIS : recherche sur EINECS, ELINCS, NLP et l'annexe I de la directive 67/548/CEE
Numéro CAS	http://www.cas.org	Site officiel du CAS registry service
	http://www.chemistry.org	Site officiel de l'American chemical Society

Formule brute et structurelle		
Paramètre d'identité de la substance	Source	Description de la source
SMILES	http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/	Générateur de codes SMILES (gratuit)
	http://www.daylight.com/smiles/f_smiles.html	Générateur de données et de codes SMILES (gratuit)
Masse moléculaire et SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, logiciel libre (également disponible dans le commerce)
Divers paramètres physico-chimiques	http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm	La Suite™ EPI (Estimation Programs Interface) est une suite pour Windows® de modèles d'estimation des propriétés physico-chimiques et du devenir environnemental, développée par l'Office of Pollution Prevention and Toxics de l'EPA et Syracuse Research Corporation (SRC)

ANNEXE II ORIENTATIONS TECHNIQUES RELATIVES AUX PARAMETRES D'IDENTIFICATION DES SUBSTANCES

Les informations de la présente annexe sont destinées aux utilisateurs du GT qui ne sont pas familiarisés avec les règles techniques applicables à la nomenclature, l'utilisation des divers répertoires de substances et des numéros correspondants, la notation des formules moléculaire et développée, les données spectrales, etc.

Il s'agit de fournir des informations générales, en résumant les grands principes, et de guider l'utilisateur vers les sources originales où il trouvera des informations plus complètes.

Cet aperçu est une présentation simplifiée qui ne prétend nullement à l'exhaustivité et n'est pas suffisamment détaillée pour les professionnels. Il ne doit en aucun cas être considéré comme équivalent à la source officielle.

1 Nom(s) des substances selon la nomenclature IUPAC ou d'autres nomenclatures internationales

Pour l'enregistrement, il convient de donner le nom IUPAC de la substance en anglais, ou un autre nom bien défini, faisant l'objet d'un consensus international.

Un nom IUPAC est fondé sur la nomenclature chimique établie par l'organisation internationale IUPAC (en anglais IUPAC, pour International Union of Pure and Applied Chemistry, voir les références de l'annexe I). La nomenclature IUPAC, qui constitue une référence internationale, fait appel à une démarche systématique de désignation des substances chimiques, tant organiques qu'inorganiques. Dans cette nomenclature, les préfixes, les suffixes et les infixes sont utilisés pour décrire le type et la position des groupes fonctionnels d'une substance.

Exemple : penta-1,3-dien-1-ol ; dans ce nom chimique
le préfixe est penta-1,3-
l'infixe est -di
le suffixe est -ol
en- est le radical du nom.

Les règles élaborées au fil du temps sont constamment adaptées pour couvrir la diversité moléculaire des nouveaux composés et éliminer les sources de contradiction ou de confusion. Les règles établies par l'IUPAC ne peuvent être appliquées qu'à des substances bien définies.

On trouvera dans ce qui suit quelques informations générales sur la structure d'un nom IUPAC. Pour des orientations précises, on est prié de se reporter au chapitre 4 du GT.

1.1 Substance organique

1^{re} étape Identifier le nombre d'atomes de carbone de la plus longue chaîne continue d'atomes de carbone ; c'est ce nombre qui détermine le préfixe (la première partie) du radical:

Nombre d'atomes de carbone	Radical
1	meth-
2	eth-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	oct-
N	...

2^e étape Déterminer la saturation de la chaîne ; c'est la saturation qui détermine le suffixe (la seconde partie) du radical :

Saturation	Liaisons	Suffixe
Insaturé	Double	-ene
	Triple	-yne
Saturé	-	-ane

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

Pentene avec 2 doubles liaisons : pentadiene

3^e étape Combiner préfixe, suffixe et ajouts divers au radical

N.B. : pour le radical, les noms triviaux et semi-systématiques approuvés par l'IUPAC peuvent également être utilisés :

Benzene, toluene, etc.

4^e étape Utiliser le tableau ci-après :

Identifier les groupes substituants et/ou fonctionnels : groupes carbone ou non-carbone attachés à la chaîne d'atomes de carbone identifiée en 1 ;

Déterminer l'ordre de priorité des groupes substituants et/ou fonctionnels ;

Ajouter le suffixe correspondant au premier groupe substituant/fonctionnel, puis tous les autres suffixes en suivant l'ordre de priorité ;

Ajouter le préfixe des autres groupes substituants et fonctionnels par ordre alphabétique.

Priorité	Groupe	Formule	Suffixe	Préfixe
1	Acide carboxylique	R-COOH	-oic acid	Carboxy
2	Ester	R-CO-O-R	-oate	-
3	Amide	R-CONH ₂	-amide	Carbamoyl
4	Cyanure ??	R-CN	-nitrile	Cyano
5	Aldéhyde	R-CHO	-al	Oxo
6	Cétone	R-CO-R	-one	Oxo
7	Alcool	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Thiol	R-SH	-thiol	Sulfanyl
9	Amine	R-NH ₂	-amine	Amino

1.2 Substance inorganique

1.2.1 Désignation des substances inorganiques simples

La désignation des substances inorganiques est fondée sur un ensemble de règles (« Red Book » de l'IUPAC, voir la bibliographie, 7.1) dont les plus élémentaires sont présentées ici :

- 1 Les anions monoatomiques sont désignés par un suffixe -ide :
O²⁻ = oxide (oxyde)
- 2 Les composés ioniques simples sont désignés par le cation suivi de l'anion. Pour les cations dont la charge est supérieure à 1, les charges sont notées entre parenthèses en chiffres romains immédiatement après le nom de l'élément :
Cu²⁺ = copper(II) (cuivre II)
- 3 Les hydrates sont désignés par le composé ionique suivi d'un préfixe numérique et du terme -hydrate. Les préfixes numériques sont mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, déca- :
CuSO₄.5H₂O = « copper(II) sulphate pentahydrate »

N.B. Les hydrates et, le cas échéant, la forme anhydre d'un sel métallique donné sont considérés comme « identiques ».

- 4 Les composés moléculaires inorganiques sont désignés par un préfixe (cf. hydrates) avant chaque élément. L'élément le plus électronégatif est noté en dernier, avec un suffixe -ide :
CO₂ = carbon dioxide (dioxyde de carbone)
CCl₄ = carbon tetrachloride (tétrachlorure de carbone)
- 5 Les acides sont nommés d'après l'anion formé lorsque l'acide est dissous dans l'eau. Il y a plusieurs possibilités :
 - a Si, lorsqu'il est dissout dans l'eau, l'acide forme un anion « x »-ide, l'acide est nommé hydro-« x »-ic acid :
« hydrochloric acid » (l'acide chlorhydrique) forme un anion chlorure
 - b Si, lorsqu'il est dissout dans l'eau, l'acide forme un anion « x »-ate, l'acide est nommé « x »-ic acid :
« chloric acid » (l'acide chlorique) forme des anions chlorate dans l'eau

- c Si, lorsqu'il est dissout dans l'eau, l'acide forme un anion « x »-ite, l'acide est nommé « x »-ous acid :
« chlorous acid » (l'acide chloreux) forme des anions chlorites.

1.2.2 Désignation des phases minéralogiques

Les phases minéralogiques complexes comportent généralement trois éléments au moins en combinaison. La plupart des éléments présents sont combinés à l'oxygène et, pour simplifier l'identification, les composés complexes sont habituellement considérés par les minéralogistes comme constitués d'oxydes, les uns de type basique et les autres de type acide. Ainsi, dans le cas des silicates, il a été de règle de les représenter soit comme la somme d'un certain nombre d'oxydes, soit comme des sels de l'acide silicique, soit comme des acides aluminosiliciques. Dans cette logique, l'orthosilicate de calcium peut être représenté comme $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$, une combinaison d'oxydes distincts, soit comme Ca_2SiO_4 , c'est-à-dire le sel calcique de l'acide orthosilicique H_4SiO_4 . Il en va de même d'autres oxydes minéraux complexes, qui sont désignés par un préfixe devant chaque oxyde (exemple : Ca_3SiO_5 = tricalcium silicate = $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$). Dans certains secteurs d'activité, on simplifie encore pour abrégé la formule du composé. Ainsi, le clinker de ciment Portland, $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ (calcium orthosilicate ou dicalcium silicate) est simplifié en C_2S , où C = CaO et S = SiO₂. Il est conseillé de se référer aux normes minéralogiques ou industrielles pour désigner et identifier des phases minéralogiques complexes.

1.3 Produits naturels et leurs composants

Pour les produits naturels, l'IUPAC a élaboré plusieurs règles de désignation systématique. Pour résumer, l'idée est que pour les substances extraites d'une source naturelle, le nom est basé, dans toute la mesure du possible, sur le nom de la famille, du genre ou de l'espèce de l'organisme dont la substance est extraite.

Pour une protéine hypothétique, *Hypothecalia Exemplare*,
le nom est basé sur hypothecalia et/ou
exemplare, par exemple Horse Exemplare

Le nom doit refléter si possible la distribution, connue ou probable, du produit naturel. S'il y a lieu, la classe ou l'ordre peuvent aussi être utilisés comme base pour le nom d'une substance existant dans plusieurs familles proches. Le nom de produits naturels de structure inconnue ne devrait contenir aucun des préfixes, suffixes et ou infixes utilisés dans la nomenclature des produits organiques :

Produit de condensation de Horse exemplare, Valarine
ajoutée à la terminaison N

De nombreuses substances présentes dans la nature appartiennent à des classes structurales bien définies, dont chacune peut être caractérisée par un ensemble de structures parentes proches les unes des autres, c'est-à-dire que chacune peut être dérivée d'une structure fondamentale. Le nom systématique de ces substances présentes à l'état naturel et de leurs dérivés peut être basé sur le nom d'une structure parente fondamentale correspondante :

Parmi les structures parentes connues figurent les alcaloïdes, les stéroïdes, les terpénoïdes ou encore les vitamines

Une structure parente fondamentale devrait refléter le squelette de base commun à la plupart des substances de la classe. Les substances présentes à l'état naturel ou leurs dérivés sont désignés d'après la structure parente, à laquelle on ajoute des préfixes, suffixes ou infixes indiquant :

- des modifications de la structure du squelette
- la substitution d'atomes du squelette
- des changements par rapport à l'état d'hydrogénation exprimé par le nom de la structure parente
- des atomes ou groupes substitués aux atomes d'hydrogène de la structure parente
- des configurations non indiquées par le nom de la structure parente, ou modifiées par rapport à celle qu'exprime ce nom

Thiamin chloride est également connu sous le nom de vitamine B₁

Pour plus de précisions sur la désignation systématique des produits naturels et des substances liées à ces produits, il est conseillé de s'adresser à l'IUPAC (voir l'annexe 1).

1.4 Impossibilité de définir un nom IUPAC

S'il n'est pas possible, pour certaines substances, de définir un nom IUPAC, il est possible de faire appel à des nomenclatures spécifiques faisant l'objet d'un consensus international, telles que :

Minéraux et minerais ; noms minéralogiques

Substances pétrolières

Colour Index Generic Names³ ;

Additifs pétroliers ;

INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients)⁴ ;

Noms SDA (Soap and Detergent Association) pour les tensio-actifs⁵ ;

Etc.

2 Autres noms

Tous les noms pertinents et/ou dénominations communes dans toutes les langues dans lesquelles une substance est ou sera mise sur le marché de l'UE (noms commerciaux, par exemple) peuvent être utilement communiqués en vue de l'enregistrement dans le cadre de REACH. Cela inclut les noms commerciaux, synonymes, abréviations, etc.

3. <http://www.colour-index.org>, Colour Index International, 4^e édition en ligne
4. <http://dg3.eudra.org/F3/inci/index.htm>, site officiel de l'INCI
5. <http://www.cleaning101.com>, site officiel de la SDA

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

Le numéro CE, c'est-à-dire le numéro EINECS, ELINCS ou NLP, est le numéro officiel de la substance au sein de l'Union européenne. Le numéro CE s'obtient en consultant les publications officielles d'EINECS, ELINCS et NLP, ainsi que de l'Agence européenne des produits chimiques.

Le numéro CE comporte 7 chiffres du type $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$. Le premier chiffre indique la liste dans laquelle figure la substance :

Liste	Premier chiffre du numéro CE
EINECS	2 ou 3
ELINCS	4
NLP	5

4 Nom CAS et numéro CAS

Le Chemical Abstracts Service (CAS), un département de l'American Chemical Society (ACS), attribue un nom et un numéro CAS à tout produit chimique entré dans la banque de données CAS. Les noms et numéros sont attribués en ordre séquentiel aux substances individualisées par les chercheurs du CAS. Chaque substance enregistrée au Chemical Abstracts Service a un nom conforme à la nomenclature CAS, adopté par l'ACS sur recommandations du comité ACS pour la nomenclature (voir la bibliographie, annexe 1).

4.1 Nom CAS

Le nom CAS est un nom donné par le Chemical Abstracts Service ; il diffère du nom IUPAC. La nomenclature CAS est basée sur un nombre limité de critères qui ne sont pas toujours suffisants pour dériver le nom d'une substance. Il est donc recommandé, d'une manière générale, de contacter le Chemical Abstracts Service pour obtenir le nom CAS correct.

En substance, les principales règles de la nomenclature sont les suivantes :

Une partie « essentielle » de la substance est choisie comme « chef de file » ou parent

Les substituants sont listés après le « chef de file »/le parent, auquel il est fait référence en ordre inversé .

Lorsqu'il y a un grand nombre de substituants , ils sont listés par ordre alphabétique (préfixes inclus) :

o-Xylen-3-ol est le Benzene, 1,2-diméthyl, 3-hydroxy

4.2 Numéro CAS

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

Le numéro CAS comporte un minimum de 5 chiffres subdivisés en trois parties par des tirets. La seconde partie comporte toujours 2 chiffres, la troisième partie 1 chiffre pour la « somme de contrôle » :

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

La « somme de contrôle » permet de vérifier numéro CAS :

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

Si le numéro CAS est correct, la somme de contrôle doit être juste.

4.3 Enregistrement CAS d'une substance

Le service d'enregistrement CAS attribue des numéros CAS aux types de substances suivants :

Substances mono-constituant, représentées par :

Les substances dont la structure moléculaire est complètement définie (c'est-à-dire dont tous les atomes sont connus, ainsi que toutes les liaisons chimiques entre ces atomes). Les différents isomères positionnels, les stéréo-isomères et les sels sont également pris en considération ;

Les noms correspondant clairement à la composition chimique des substances ;

Ratios spécifiques pour les sels ou les produits de condensation ;

Minéraux présents à l'état naturel ;

Alliages, ions, isotopes et particules élémentaires spécifiques ;

Substances complexes telles que :

Matériels biologiques chimiquement modifiés ;

Produits de réaction complexes ;

Fractions de procédés industriels.

Pour l'enregistrement CAS, il faut utiliser un formulaire spécifique, qui peut être téléchargé sur le site www.cas.org. Comme le précise ce formulaire, les informations suivantes sont nécessaires, dans l'ordre de priorité indiqué :

Composés chimiques bien définis

Représentation de la structure chimique ;

Nom chimique systématique ;

Nom(s) commun(s)

Formule brute;

Produits de réaction complexes

Liste des réactants et nature de la réaction ;

Schéma de la réaction ;

Composition type du produit ;

Produits d'origine végétale ou animale

Genre/espèce et autres noms non ambigus de la source ;

Méthode d'extraction ;

Description des autres procédés chimiques mis en œuvre ;

Produits de process industriels

Précurseurs et méthodes de préparation ;

Diagramme schématique représentant le process industriel et le point où la substance est isolée ;

Description du process :

Craquage catalytique, déparaffiné

Coupe carbone (alkyle) : chaînes carbonées

C4 à C12

Propriétés physiques :

Domaine d'ébullition, viscosité, solide, scories

Composition chimique principale ;

Source :

Pétrole, charbon

Produits biotechnologiques

Données sur le séquençage ;

Informations sur la source biologique, incluant le genre/l'espèce ;

Activité enzymatique.

5 Autres codes d'identité

D'autres codes d'identité internationalement reconnus peuvent également être indiqués, par exemple :

Numéro UN ;

Numéro du Colour Index ;

Dye Number ;

Etc.

6 Formule moléculaire, formule développée et code SMILES

6.1 Formule brute

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

La formule brute devrait être donnée selon le système (classique) de Hill, ainsi que selon le système CAS, lorsque les deux formules diffèrent.

Pour appliquer la méthode de Hill, on peut suivre la démarche suivante :

1. Identifier les éléments et faire la liste des symboles chimiques ;
2. Arranger les éléments dans le bon ordre :
 - a. Substances contenant du carbone :
Chaque élément est mentionné par son symbole chimique dans l'ordre suivant :
 - (1) Carbone ;
 - (2) Hydrogène ;

(3) Autres symboles d'éléments par ordre alphabétique :

Pentane : C_5H_{12}
Pentène : C_5H_{10}
Pentanol : $C_5H_{12}O$

- b. Substances ne contenant pas de carbone :
Chacun des éléments est mentionné par ordre alphabétique :
Acide chlorhydrique : ClH

3. Pour chaque élément, lorsque le nombre d'atomes est supérieur à 1, indiquer ce nombre par un indice accolé au symbole chimique ;
4. Ajouter les informations qui n'ont pas trait à la structure principale à la fin de la formule moléculaire, en les séparant par un point ou une virgule :

Benzoate de sodium : $C_7H_6O_2$, sel de sodium
Sulfate de cuivre, dihydrate : $CuO_4S.2H_2O$

Dans les cas où la méthode de Hill ne peut pas être appliquée à une substance, il convient d'indiquer la formule d'une façon différente, en utilisant par exemple une formule empirique, avec une simple description des atomes et des proportions stœchiométriques, ou la formule du Chemical Abstracts Service (voir le chapitre 4 du GT).

6.2 Formule développée

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

La formule développée peut être donnée dans différents formats : soit sous forme de formule brute, soit sous forme de schéma structurel.

Formule développée sous forme de formule brute

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

n-pentane : $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$

2. Noter chaque substituant entre parenthèses, directement après l'atome auquel il est relié :

2-méthylbutane : $CH_3CH(CH_2)CH_2CH_3$

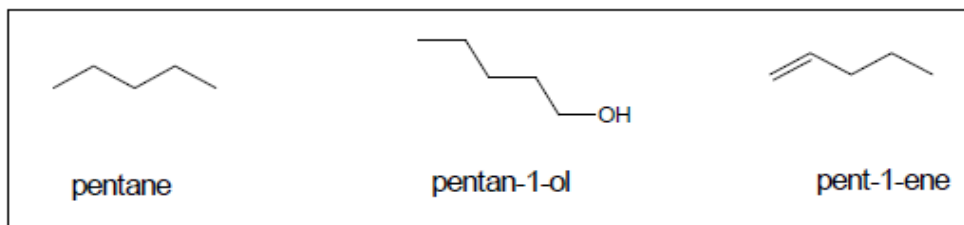
3. Indiquer les doubles ou triples liaisons entre les groupes d'éléments concernés :

pent-1-ène : $CH_2=CHCH_2CH_2CH_3$

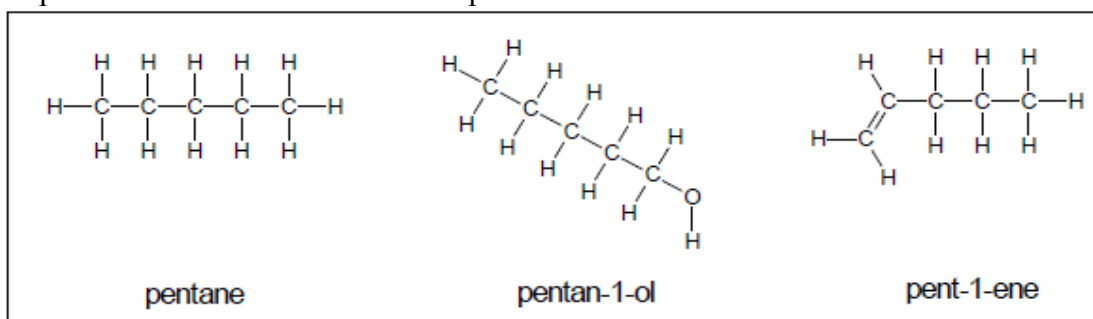
Formule développée sous forme de schéma structurel :

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

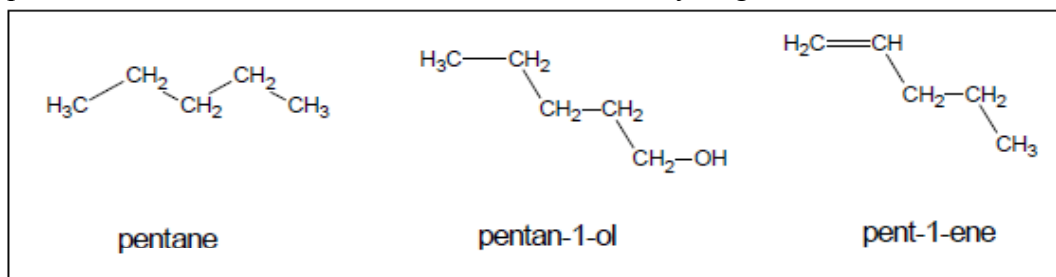
1. Représentations de tous les éléments non-carbone et de l'hydrogène attaché aux éléments non-carbone



2. Représentation de tous les éléments par leur nom



3. Représentation des carbones et des hydrogènes par groupes (CH₃, par exemple), ainsi que de tous les éléments non-carbone et de tous les hydrogènes non liés à des carbones



6.3 Notation SMILES

SMILES est l'acronyme de Simplified Molecular Input Line Entry Specification (Weininger, 1988). C'est un système de notation chimique utilisé pour représenter une structure moléculaire par une suite linéaire de symboles. Selon la norme SMILES, le nom d'une molécule est synonyme de sa structure : il représente indirectement un schéma en deux dimensions de la structure moléculaire. La structure bidimensionnelle d'une substance chimique pouvant être représentée de différentes façons, il y a plusieurs codes SMILES corrects pour une même molécule. SMILES est basé sur la représentation des valences d'une molécule ; il ne permet donc pas de décrire des molécules qui ne peuvent pas être représentées par leurs valences.

Les notations SMILES comportent des atomes, désignés par les symboles des éléments, des liaisons, des parenthèses utilisées pour indiquer les ramifications, et des nombres utilisés pour les structures cycliques. Une notation SMILES traduit une structure moléculaire sous forme graphique avec des indications chirales en option. Une notation SMILES décrivant la structure uniquement en termes de liaisons et d'atomes est dite « générique » ; une notation SMILES comportant des indications isotopiques et chirales est dite « isomérique ».

En substance, la notation SMILES fait appel aux règles suivantes :

1. Les atomes sont représentés par leur symbole atomique ;
2. Chaque atome, à l'exception de l'hydrogène, est spécifié indépendamment ;
 - a. Les éléments du « sous-ensemble organique » B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br et I sont écrits sans parenthèses et sans H attaché lorsque le nombre de H est conforme à la (aux) valence(s) normale(s) la(les) plus faible(s) compte tenu des liaisons spécifiques:

Eléments du « sous-ensemble » organique	« Plus faible(s) valence(s) normale(s) »
B	3
C	4
N	3 et 5
O	2
P	3 et 5
S	2, 4 et 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Les éléments du « sous-ensemble organique » sont écrits entre parenthèses lorsque le nombre de H n'est pas conforme à la valence normale la plus faible :

le cation ammonium est noté NH₄⁺

- c. Les éléments n'appartenant pas au « sous-ensemble organique » sont écrits entre parenthèses, chaque hydrogène attaché étant indiqué.

3. Les atomes aliphatiques sont notés en majuscules, les atomes aromatiques en minuscules :

benzène : c1ccccc1 ; cyclohexane : C1CCCCC1

4. L'hydrogène n'est inclus que dans les cas suivants :

- Hydrogène chargé, c'est-à-dire proton, [H+] ;
- Hydrogènes reliés à d'autres hydrogènes, c'est-à-dire hydrogène moléculaire, [H][H] ;
- Hydrogènes reliés à autre chose qu'un autre atome, par exemple ponts hydrogènes ;
- Spécifications isotopiques de l'hydrogène, par exemple deutérium ([2H]) ;
- Hydrogène relié à un atome chiral.

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

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

6. Les groupes substituants sont placés entre parenthèses derrière les atomes auxquels ils se rattachent :

2-méthylbutane : CC(C)CC

- Les substituants sont toujours notés derrière l'atome correspondant ; ils ne peuvent pas suivre un symbole de double ou triple liaison :

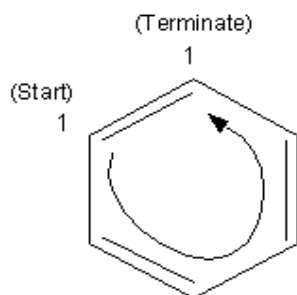
acide pentanoïque : CCCC(=O)O

- Les substituants à l'intérieur d'un substituant sont autorisés :

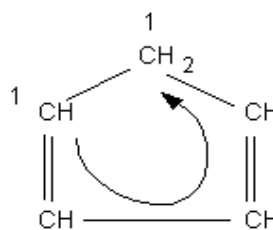
2-(1-méthyléthyl)butane : CC(C(C)C)CC

7. Pour les structures cycliques, les nombres 1 à 9 sont utilisés pour indiquer les atomes initiaux et terminaux du cycle :

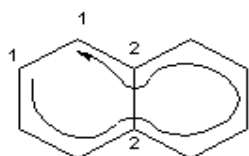
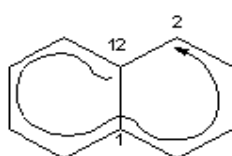
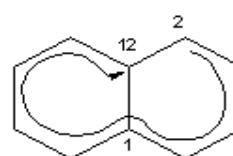
- Le même nombre est utilisé pour indiquer l'atome initial et l'atome terminal de chaque cycle. Ces deux atomes doivent être liés entre eux.
- Les nombres sont placés directement derrière les atomes utilisés pour indiquer les positions initiale et terminale.
- Un atome initial ou terminal peut être associé à deux nombres consécutifs.



Benzene

c1ccccc1

1,3-Cyclopentadiene

C1=CC=CC1Examples for Naphthalene:c1ccc2ccccc2c1c12ccccc1cccc2c2cccc1ccccc12

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

aminopropene hydrochloride : C=CC(N).HCl

9. Les configurations isomériques sont indiquées par un antislash « \ » ou un slash « / ». Ces symboles indiquent la direction relative entre deux liaisons isomères : cis = « / », trans = « \ ». SMILES utilise la chiralité locale, ce qui signifie que la chiralité doit être entièrement spécifiée :

cis-1,2-dibromoéthène : Br/C=C\Br

trans-1,2-dibromoéthène : Br/C=C/Br

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

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

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

Divers outils (générateurs SMILES) permettent de déterminer la notation SMILES d'une substance (voir annexe 1).

7 Informations sur l'activité optique

L'activité optique est une propriété des substances asymétriques de provoquer une rotation du plan de polarisation de la lumière. Ces substances et leur image dans un miroir sont appelées énantiomères ; elles possèdent un ou plusieurs centres chiraux. Bien que différents par leur disposition géométrique, les énantiomères ont des propriétés physico-chimiques identiques. Chaque type d'énantiomères affectant la lumière polarisée de façon spécifique, l'activité optique peut être utilisée pour déterminer quel énantiomère est présent dans un échantillon, ainsi que la pureté de la substance. L'amplitude de rotation est une propriété intrinsèque de la molécule.

Des énantiomères provoquent toujours une rotation de même amplitude, mais en sens opposé. L'activité optique d'un mélange d'énantiomères est donc un indice du ratio entre les deux énantiomères. Un mélange à parts égales d'énantiomères a une activité optique nulle.

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

L'activité optique est donc le paramètre de choix pour identifier une substance asymétrique ; en outre, c'est le seul paramètre qui permette de distinguer la substance de son image en miroir. L'activité optique des substances devrait donc être indiquée lorsqu'il y a lieu.

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

L'activité optique peut être mesurée par différentes méthodes. Les plus courantes sont les suivantes :

Rotation optique, dans laquelle on mesure la rotation du plan de polarisation d'un faisceau de lumière traversant l'échantillon ;

Dichroïsme circulaire, dans laquelle on mesure l'absorption par l'échantillon d'une lumière polarisée à droite et à gauche.

Si la substance provoque une rotation de la lumière à droite (sens des aiguilles d'une montre), on dit qu'elle est dextrogyre, et elle est désignée par le signe +. Si elle provoque une rotation à gauche (sens contraire à celui des aiguilles d'une montre), elle est dite lévogyre et désignée par le signe -.

8 Masse moléculaire et domaine de masse moléculaire

La masse moléculaire est la masse d'une molécule de la substance, exprimé en unités de masse atomique (uma) ou sous la forme de masse molaire (g/mol). La masse moléculaire peut être calculé à partir de la formule brute de la substance : c'est la somme des masses atomiques des atomes qui composent la molécule. Pour des molécules particulières (certaines protéines ou des mélanges réactionnels indéfinis), pour lesquelles il n'est pas possible de déterminer une masse moléculaire précise, un domaine de masse moléculaire peut être indiqué.

Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour déterminer la masse moléculaire des substances :

Pour déterminer la masse moléculaire des substances gazeuses, la loi d'Avogadro peut être utilisée ; d'après cette loi, dans certaines conditions de température et de pression, un volume donné de gaz contient toujours un nombre spécifique de molécules de ce gaz

$$PV = nRT = NkT$$

n = nombre de moles

R = constante universelle des gaz parfaits = $8,3145 \text{ J/mol K}^{-1}$

N = nombre de molécules

k = constante de Boltzmann = $1,38066 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 8,617385 \times 10^{-5} \text{ V/K}$

$k = R/NA$

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

La masse moléculaire des liquides et des solides peut être établie par détermination de leurs effets sur le point de fusion, le point d'ébullition, la pression de vapeur ou la pression osmotique d'un solvant ;

La spectrométrie de masse est une méthode de mesure extrêmement précise ;

Pour les molécules de substances complexes à haute masse moléculaire comme les protéines ou les virus, la masse moléculaire peut être déterminée par mesure de la vitesse de sédimentation dans une ultracentrifugeuse, par exemple, ou par photométrie de diffusion de la lumière ;

Divers outils permettent de calculer la masse moléculaire à partir du schéma structurel ou de la formule brute d'une substance (voir l'annexe 1).

9 Composition de la substance

Pour toute substance, la composition sera indiquée sous la forme d'une combinaison de ses principaux constituants, additifs et impuretés, conformément aux règles et critères décrits au chapitre 4 du GT.

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

- Nom (nom IUPAC ou autre nom faisant l'objet d'un consensus international) ;
- Numéro CAS (s'il est disponible) ;
- Numéro CE (s'il est disponible) ;

Pour chaque constituant, additif ou impureté, il convient d'indiquer son pourcentage (en masse de préférence, ou en volume), en précisant si possible le domaine de concentration dans la substance commercialisée.

Pour le(s) constituant(s), le degré de pureté habituel devrait être indiqué, avec si possible les limites inférieure et supérieure habituelles dans les lots commercialisés ; pour les additifs et les impuretés, le degré de pureté habituel ou les limites supérieure et inférieure devraient être indiqués. Les valeurs fournies devraient en principe correspondre à un total de 100 %.

10 Données spectrales

Des données spectrales sont nécessaires pour confirmer la structure indiquée pour une substance monoconstituant, ou pour confirmer qu'un mélange réactionnel n'est pas une préparation. Plusieurs méthodes peuvent être appliquées pour la détermination du spectre (ultraviolet, infrarouge, résonance magnétique nucléaire ou spectre de masse). Toutes ne sont pas adaptées à tous les types de substances. Lorsque c'est possible, le GT donnera des orientations sur le spectre à fournir selon le type de substance (ECB, 2004 ; ECB, 2005).

Pour les méthodes classiques, les informations suivantes devraient être portées sur le spectre lui-même ou en annexe :

Spectre ultraviolet-visible (UV-VIS)

- Identité de la substance ;
- Solvant et concentration ;
- Domaine ;
- Position (et valeurs epsilon) des principaux pics ;
- Effet des acides ;
- Effet des bases.

Spectre infrarouge (IR)

- Identité de la substance ;
- Milieu ;
- Domaine ;
- Résultats (principaux pics importants pour l'identification, interprétation de la région de l'empreinte digitale, par exemple).

Spectre obtenu par résonance magnétique nucléaire (RMN)

Identité de la substance ;
Noyau et fréquence ;
Solvant ;
Référence interne ou externe s'il y a lieu ;
Résultats (signaux importants pour l'identification et signaux correspondant au solvant et aux impuretés) ;
Pour les spectres obtenus par RMN 1H, la courbe d'intégration devrait être fournie ;
En cas de pics de faible intensité, l'échelle verticale devrait être amplifiée, et pour les spectres d'allure complexe, l'échelle horizontale.

Spectre obtenu par spectroscopie de masse (SM)

Identité de la substance ;
Voltage d'accélération ;
Méthode de chargement (insertion directe, couplage CG-MS, etc.) ;
Mode d'ionisation (impact d'électrons, ionisation chimique, désorption de champ, etc.) ;
Ion moléculaire (M) ;
Fragments significatifs pour l'identification de la substance ;
Valeurs m/z ou valeurs affectées aux pics importants pour l'identification de la structure ;
L'échelle horizontale des spectres d'allure complexe devrait être amplifiée.

D'autres méthodes faisant l'objet d'un consensus international peuvent également être appliquées, si les données spectrales ainsi obtenues confirment l'identification de la substance, sa structure interne, par exemple. Citons la DRX pour l'identification des constituants d'oxydes minéraux complexes, ou la FRX pour l'analyse de leur composition chimique.

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

Noter les longueurs d'onde significatives ou les autres données appropriées ;
Fournir des informations complémentaires, comme le spectre des matières premières ;
Indiquer le solvant utilisé et/ou d'autres facteurs importants, comme indiqué ci-dessus pour certaines méthodes ;
Fournir des copies claires (plutôt que des originaux) en indiquant bien les échelles ;
Préciser les concentrations de substance utilisées ;
Veiller à ce que la hauteur du pic (relatif à la substance) dont l'intensité est la plus élevée soit proche du haut de l'échelle.

11 Chromatographie liquide haute performance, chromatographie en phase gazeuse

Lorsqu'il y a lieu compte tenu du type de substance, un chromatogramme doit être fourni pour confirmer la composition de celle-ci. Un chromatogramme adapté permet par exemple de confirmer la présence des impuretés, des additifs et des constituants d'un mélange réactionnel. Les deux méthodes les plus connues pour la séparation et l'identification des mélanges sont la chromatographie en phase gazeuse (CG) et la chromatographie liquide haute performance (CLHP). Ces deux méthodes sont basées sur l'interaction d'une phase mobile avec une phase stationnaire, conduisant à la séparation des constituants d'un mélange.

Pour les chromatogrammes CG/CLHP, les données suivantes devraient être fournies, sur le chromatogramme lui-même ou en annexe (ECB, 2004 ; ECB, 2005) :

CLHP

- Identité de la substance ;
- Propriétés de la colonne (diamètre, chargement, longueur) ;
- Température et gamme de température le cas échéant ;
- Composition de la phase mobile, et domaine de variation le cas échéant ;
- Domaine de concentration de la substance ;
- Méthode de visualisation, UV-VIS, par exemple ;
- Résultats (indiquer les principaux pics importants pour l'identification de la substance).

CG

- Identité de la substance ;
- Propriétés de la colonne (diamètre, chargement, longueur) ;
- Température et gamme ou échelle de température le cas échéant ;
- Température d'injection ;
- Nature et pression du gaz porteur ;
- Domaine de concentration de la substance ;
- Méthode de visualisation, SM, par exemple ;
- Identification des pics ;
- Résultats (indiquer les principaux pics importants pour l'identification de la substance).

12 Description des méthodes d'analyse

L'annexe VI de REACH exige que les déclarants décrivent les méthodes d'analyse et/ou fournissent des références bibliographiques relatives aux méthodes utilisées pour l'identification des substances et, le cas échéant, des impuretés et additifs. Les informations fournies devraient être suffisantes pour que les méthodes puissent être reproduites.