

# REACH 물질명 및 물질확인을 위한 기술 지침서(TGD)

[전문 번역서]

2007. 9

환경부 REACH 대응 추진기획단

# 목 차

제1장 일반사항 .....	1
1.1 지침서 목적 .....	2
1.2 범위 .....	2
1.3 본 지침서의 구성 .....	4
제2장 정의 및 약어들 .....	5
2.1 약어 .....	5
2.2 정의 .....	6
제3장 REACH에서 물질확인을 위한 구조 .....	9
3.1 물질의 정의 .....	9
3.2 EC INVENTORY .....	9
3.2.1 REACH 발효 시 EC Inventory의 역할 .....	10
3.2.2 REACH 발효 후 EC Inventory .....	11
3.3 REACH에서 물질확인을 위한 요건들 .....	11
제4장 REACH의 물질확인 과 명명에 관한 지침서 .....	12
4.1 도입 .....	12
4.2 명확히 정의된 화학적 조성의 물질들 .....	16
4.2.1 단일구성물질 .....	17
4.2.2 복합구성물질 .....	19
4.2.3 명확히 정의된 화학적 조성의 물질들 및 기타 주요 확인요소 .....	23
4.3 UVCB 물질들 .....	24
4.3.1 UVCB 물질들에 관한 일반 지침 .....	25
4.3.2 UVCB 물질들의 특수 유형 .....	35
제5장 물질의 동일성 확인을 위한 기준 .....	43
제6장 사전등록 상의 물질확인 및 문의 .....	49

6.1 사전등록 .....	49
6.2 문의 .....	50

## 제7장 실례(Examples) ..... 51

7.1 DIETHYL PEROXYDICARBONATE .....	51
7.2 ZOLIMIDINE .....	52
7.3 이성질체의 혼합물 .....	53
7.4 방향족 AH .....	55
7.5 광물(minerals) .....	59
7.6 LAVANDIN GROSSO의 ESSENTIAL OIL .....	61
7.7 CHRYSANTHEMUM OIL 및 그것으로부터 분리된 이성질체 .....	66
7.8 PHENOL, ISOPROPYLATED, PHOSPHATE .....	70
7.9 QUATERNARY AMMONIUM COMPOUNDS .....	70
7.10 석유계 물질들 .....	75
7.10.1 Gasoline blending stream(C <sub>4</sub> -C <sub>12</sub> ) .....	75
7.10.2 Gasoline oils .....	76
7.11 효소 .....	76
7.11.1 Subtilisin .....	76
7.11.2 α-Amylase .....	78

## 제8장 IUCLID5에서 물질의 기술(記述)설명 ..... 79

8.1 일반 원칙 .....	79
8.1.1 목록들 .....	80
8.1.2 물질 데이터 세트(IUCLID섹션 1.1, 1.2, 1.3, 1.3) .....	83
8.2 IUCLID5에 작성하는 방법 실례 .....	85
8.2.1 단일구성물질 .....	85
8.2.2 복합구성물질 .....	86
8.2.3 화학적 조성과 기타 확인요소에 의해 정의되는 물질 .....	88
8.2.4 UVCB물질 .....	89
8.3 분석적 정보의 보고 .....	90

## 제9장 참고자료 ..... 92

(이하 부록은 원문 참조)

## 1. 일반사항

2003년 10월 29일에 REACH에 대한 EU집행위원회의 제안서 [EC, 2003-A to EC, 2003-F] 발간 이후, 회원국들과 함께 집행위원회 서비스는 REACH의 실제적인 적용을 위해 모든 주체들을 대비시킬 목적으로 “중간전략(interim strategy)”에 착수했다.

EU집행위원회는 REACH를 위한 기술적 준비 안에서 다수의 RIPs(REACH Implementation Projects)를 통해서 REACH를 위해 필요한 방법론, 툴, 기술적인 지침의 개발을 조정하고 있다.

본 RIP3.10 기술적 지침서(TGD, Technical, Guidance Document)는 비록 법적인 구속력을 지닌 문서는 아닐지라도 REACH의 구조 내에서 화학물질의 확인, 명명 및 보고에 관한 방법론을 다루고 있다.

REACH규정은 "물질들(substances)"에만 초점을 맞춘다. 적절하게 REACH 시스템을 운영하는 것을 보장하기 위해서, 명확한 물질확인이 필수적이다. 본 물질에 관한 기술적 지침서(TGD)는 산업계, 회원국들 및 ECHA(European Chemicals Agency)를 지원하기 위한 의도로 개발되었다.

본 지침은 이전의 화학물질법령(특히 위험물질지침(Directive 67/548/EEC))과 기타 EU법령 하에서 물질의 확인에 대한 경험을 토대로 하고 있다. REACH 내에 적합한 일반 사례들이 포함되어 있다. 적절한 경우, EU역외의 다른 화학물질규제로부터의 접근방법들 또한 고려되었다.

다른 유형들의 물질들을 위한 지침들이 포함되었다.

본 TGD는 그것 자체로 이용될 수 있지만, ECHA의 웹사이트 ([http://echa.europa.eu/reach\\_eu.html](http://echa.europa.eu/reach_eu.html))를 통해 이용 가능한 일련의 TGDs의 일부이다. 산업계를 위한 지침 서류들의 목록은 표1.1에 제시되어 있다. 더 자세한 사항은 <http://ECHA.jrc.it/REACH>에서 찾아볼 수 있다.

표1.1 REACH를 위한 RIP3

RIP	프로젝트 제목
3.1	등록에 관한 지침서
	중간체를 위한 지침서
	폴리머를 위한 지침서
	PPORD를 위한 지침서
3.2	CSR에 관한 지침서
3.3	정보요건들에 관한 지침서
3.4	자료공유에 관한 지침서
3.5	하위사용자를 위한 지침서
3.6	분류, 표시 및 포장에 관한 지침서
3.7	허가적용에 관한 지침서
3.8	완제품을 위한 지침서
3.9	사회경제성분석에 관한 지침서
3.10	물질확인에 관한 지침서

### 1.1 지침서 목적

본 지침서의 목적은 REACH와 관련하여 물질 실체(identity)의 기록에 관하여 제조자 및 수입업자에게 명확한 지침을 제공하는 것이다. 물질확인의 중요한 주요 요소로써 TGD는 물질을 명명하는 방법에 관한 지침을 제공한다. 또한 물질이 REACH 목적을 위해 동일한 물질로 간주되는지에 대한 지침을 제공한다. 동일한 물질확인은 기존물질들의 등록 과정, 신규물질과 관련된 문의 조회, 정보공유, 그리고 공동 제출을 위해 중요하다.

물질의 확인은 산업계 내의 전문가들에 의해 수행되어야만 한다. 물질확인에 전문성을 거의 지니지 못한 그러한 산업계의 당사자들을 위해 물질확인을 위한 물질확인 요소들에 관한 추가 지침이 본 TGD에 부록으로 포함되어 있다.

또한, 본 TGD 목록들은 물질의 화학적인 실체의 결정 및 확인을 지원하는 관련 틀들에 연계된다.

### 1.2 범위

REACH의 제1조에 따라, REACH규정은 물질자체 혼합물 및 완제품 내 물질들의 사용 및 시장출시를 하는 제조자, 수입업자와 관련된다. 혼합물 및 완제품 자체는 REACH에 규정되어 있지 않다.

REACH 제10조에 따라, 등록은 물질 실체가 REACH Annex VI의 2항목에 명시된 요소들을 이용하여 기록되도록 요청한다(표3.1참조). 본 TGD는 REACH에서 물질의 법적 정의에 해당하는 물질의 적절한 확인에 초점이 맞추어져 있으며, Annex VI의 2항목의 물질확인 요소들에 관한 지침을 제공한다. 주어진 정보가 각 물질을 확인

하기에 충분해야만 할 것이다. 물질의 하나 혹은 그 이상의 확인요소들은 만약 그것이 기술적으로 불가능하거나 혹은 요구되는 정보를 제공하는 것이 과학적으로 불필요해 보일 경우 생략될 수 있다. 그러한 생략들에 대한 이유들은 명확하게 나타내야 한다.

물질을 확인하는 접근 방법은 물질의 유형들(types)에 의존한다. 따라서 본 TGD의 이용자는 다른 유형들의 물질들을 위한 특정 장들(chapters)로 안내받는다.

Directive 67/548/EEC의 구조 내에서 사용되는 EC Inventories(EINECS, ELINCS, NLP목록)는 물질확인 of 중요한 툴들이다. REACH상의 이들 Inventories의 역할에 관한 지침은 3.2장에서 제공된다.

REACH(그리고 본 지침)범위 내의 물질들은 전형적으로 제조시 화학물질의 반응물들이며 다수의 구별되는 구성성분들을 포함할 수도 있다. 물질은 REACH에서 정의된 대로 자연적으로 발생하는 물질들로부터 화학적으로 분리 혹은 추출되는 물질들 또한 포함하며, 그것은 단일 요소 혹은 분자(예: 순수 금속들 혹은 몇몇 광물) 혹은 여러 구성성분들(예: essential oils, metal mattes)로 구성될 수도 있다. 하지만, 다른 EU 법령에 의해 규정된 물질들은 REACH하의 등록으로부터 면제(REACH 제2조 참조)되는 많은 경우들이 있다. 또한, REACH Annex IV에 열거된 물질들은 REACH의 Annex V에 명시된 몇몇 기준을 충족시켜 물질등록으로부터 면제된다. 비록 물질이 등록으로부터 면제될지라도 그 물질이 REACH 규정의 다른 Titles(예: Title XI 분류 및 표시 목록)로부터 면제되는 것을 반드시 의미하는 것이 아니라는 것에 주의해야만 한다.

등록자들은 따라서 그들이 REACH의 등록 범위 혹은 다른 의무들 내에 해당하는지를 결정하기 위해 REACH에 언급된 정의들 및 면제 룰들을 잘 알아야만 한다.

REACH하에서 등록대상은 물질들뿐이다. 하지만, REACH 규정의 조항들은 물질 자체 혹은 혼합물나 완제품 내에 물질들의 사용, 시장출시를 하는 제조자에게 적용된다.

또한, 본 TGD는 구조적으로 관련된 물질들의 그룹화에 대한 어떤 지침도 포함하지 않는다. 그룹화는 RIP3.3(정보요건들에 관한 기술지침서)에서 다룬다.

본 TGD에서 커버되지 않는 문제들에 대해서는 독자가 (표1.1에서 언급된) 다른 지침서들을 참조하거나 주무당국 도움말센터(Helpdesk)에 문의 한다.

### 1.3 본 지침서의 구성

본 지침의 목적 및 범위와 같은 배경정보는 1장에 제공되며, 사용된 약어 및 정의들은 2장에서 찾아볼 수 있다. REACH에서 물질확인을 위한 구조에 관한 관련 정보(예를 들면, 법문에서 물질의 정의 및 정보의 요건들)가 3장에서 제공된다.

물질확인 및 명명을 위한 실질적인 지침은 4장에서 제공된다.

- 4.1장은 “명확히 정의된(well defined)”과 “불충분하게 정의된(poorly defined)” 물질들; 그리고 이들 2개의 주요 그룹들 내에서 다른 물질 타입들이 물질확인을 위한 그것들 자체의 특정 지침을 통해 식별될 수 있다. 사용자가 특정 형태의 물질을 위한 확인 지침이 있는 적합한 장으로 안내해 주기 위해서 다이어그램이 제시되어 있다.
- 이후의 장들에는 설명과 예들이 주어진 일련의 규칙들로서 특정 지침이 각 물질 타입을 위해 제공된다.

5장은 물질이 동일한 것으로 간주되는지의 여부를 확인하기 위한 지침을 제공한다. 사전등록 및 조회과정 내에서의 물질 ID에 관한 지침이 6장에서 제공된다.

더구나, 7장에서 산업계가 본 TGD의 지침을 가지고 수행하는 방법을 보여주는 4장의 실질적인 안내를 이용하여 몇몇의 상세한 예들이 제공된다.

마지막으로 8장은 IUCLID5에 물질들의 설명에 관한 지침이 제공된다.

Appendix I 목록들은 물질의 화학ID 검토와 결정을 지원하기 위한 관련 틀들과 연계된다.

Appendix II는 명명규칙들(nomenclature rules), EC번호 및 CAS번호, 분자식 및 구조식의 표시, 분석방법들과 같은 물질확인 과정에서 이용되는 개별 물질확인 요소들에 대한 더 많은 배경 정보를 공급한다.

## 2. 정의와 약어들

### 2.1 약어

본 지침에서 표2.1에서 사용된 주요 약어들이 열거되고 설명되어 있다.

표2.1 약어들

Abbreviation	Meaning
AISE	International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products
CAS	Chemical Abstracts Service
EC	European Commission
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
EU	European Union
GC	Gas chromatography
GHS	Globally Harmonised System
HPLC	High performance liquid chromatography
InChI	IUPAC International Chemical Identifier
INCI	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients
IR	Infrared
ISO	International Organization for Standardization
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database
IUBMB	International Union of Biochemistry and Molecular Biology
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
MS	Mass spectroscopy
NLP	No Longer Polymer
NMR	Nuclear Magnetic Resonance
ppm	Parts per million
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals
RIP	REACH Implementation Project
SIEF	Substance Information Exchange Forum
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification
TGD	Technical Guidance Document
TSCA	Toxic Substances Control Act (USA)
UVCB	Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials
UV/VIS	Ultra violet /visible
w/w	Weight by weight
XRD	X-Ray Diffraction
XRF	X-Ray Fluorescence

## 2.2 정의

본 지침에 사용된 주요 정의들은 표2.2에 열거되고 설명되어 있다.

이 정의들은 REACH와 물질과 혼합물의 분류 및 표시, 포장에 관한 향후 규정에서 이용된 정의들을 고려했다. 따라서 몇몇 용어들은 Directive 67/548/EEC하에서 사용된 정의들과 다르게 정의된다.

표2.2 정의들

정 의	설 명
첨가제 (additive)*	물질을 안정화시키기 위해 의도적으로 첨가되는 물질 <sup>1)</sup>
합금(alloy)*	두 가지 이상의 요소로 구성되어 기계적인 수단으로 쉽게 분리되기 어려운 거시적 스케일에 동질 금속재료
완제품 (article)	완제품이란 제조 기간 중 화학물질의 조성(chemical composition)보다도 특정 형태(shape), 표면(surface), 또는 디자인(design)이 그것의 기능을 결정하는 물체(Object)를 의미한다.
크로마토그래피 지문 (chromatographic fingerprint)	분석적인 크로마토그램에서 성분들이 특징적인 분포로부터 물질조성을 나타내는 것
구 성 성 분 (component)	혼합물을 만들기 위해서 의도적으로 더해지는 물질
성분(constituent)	그것의 독특한 화학적인 ID에 의해서 특징화될 수 있는 물질 내에 존재하는 어떤 단일 종류
E C 목 록 ( E C Inventory)	이전의 EU 화학물질 규정 틀로부터 물질에 대한 3개의 EC목록 즉, EINECS, ELINCS 및 NLP목록을 조합해서 EC목록이라 불린다. EC 목록은 물질 식별자로서 EC번호를 위한 바탕이 된다.
불순물(impurity)	물질 생산 중에 물질에 존재하는 비의도적인 성분. 그것은 출발물질(starting materials)로부터 생겨날 수도 있고, 생산 중에 2차 또는 불완전한 반응의 결과물일 수도 있다. 최종 물질에 그것이 존재할 경우 그것은 의도적으로 첨가된 것이 아니다.

1) 다른 분야에서 첨가제는 다른 기능들(예를 들면, pH조절제 혹은 착색제) 또한 수행할 수 있다. 하지만, REACH와 본 지침에서 첨가제는 안정제이다.

표4.2 정의들

정 의	설 명
중간체(intermediate*)	<p>다른 물질로 변형되기 위해서 화학적인 공정을 위해 사용 또는 제조 및 소비되는 물질(이하 합성(synthesis)이라 부른다):</p> <p>(a) 비분리 중간체(non-isolated intermediate)란 합성과정에서 합성이 이루어지는 설비로부터 의도적으로 제거되지 않는(추출 건본 제외)중간체를 의미한다. 이러한 설비로는 반응용기, 그 부속 장비 및 다음 반응단계를 위한 용기 간 이동을 위하여 행해지는 배관작업뿐 아니라, 연속공정 또는 회분식 공정에서 물질이 통과하는 모든 설비를 포함한다. 단, 제조공정 이후에 물질이 저장되는 탱크 또는 기타 용기는 제외된다.</p> <p>(b) 현장분리 중간체(on-site isolated intermediate)란 비분리 중간체의 기준에 해당하지 않는 중간체를 의미하며, 하나 이상의 법인에 의해 중간체의 제조와 그 중간체로부터 다른 물질의 합성이 동일한 장소에서 이루어지는 것을 의미한다.</p> <p>(c) 수송분리 중간체(transported isolated intermediate)란 비분리 중간체의 기준에 해당하지 않는 중간체로 서로 다른 장소 간에 이송되거나 다른 장소로 공급되는 중간체를 의미한다.</p>
IUCLID	IUCLID는 화학물질들에 관한 행정업무를 위한 데이터베이스 및 관리시스템이다.
주요 구성성분 (main constituent)	그 물질의 중요부분을 이루고 있는 첨가제 또는 불순물이 아닌 물질 내의 성분이며, 따라서 상세한 물질확인 및 물질 명명에 이용된다.
제조(manufacturing*)	자연상태에서 물질의 생산 및 추출
단량체(monomer*)	특정 공정에 사용되는 적절한 고분자 형성 반응 조건 하에서 추가적으로 일련의 같거나 다른 분자로 공유결합을 형성할 수 있는 물질
단일구성 물질 (mono-constituent)	일반적인 규칙으로서 물질 내에 하나의 주된 구성성분이 적어도 중량기준 80%이상으로 존재하는 (그것의 조성에 의해 정의된) 물질
복합구성 물질 (multi-constituent substance)	일반적인 규칙으로서 물질 내에 하나 이상의 구성성분이 중량기준 10%이상 80%미만의 농도로 존재하는 (그것의 조성에 의해 정의된) 물질
신규 물질 (non-phase-in substance)	REACH하에서 기존 물질을 위해 주어지는 경과적인 기간(transitional regime)으로부터 혜택을 받지 못하는 등록을 요구하는 물질
화학적으로 변형되지 않은 물질 (Not chemically modified substance*)	비록 그 물질이 예를 들면 불순물을 제거하기 위해서 물리적인 광물학적 변형 또는 화학적인 공정 또는 처리를 할지라도 화학적 조성이 변하지 않은 물질

정 의	설 명
기 존 물 질 (phase-in substance)	적어도 다음의 기준의 하나에 해당하는 물질 (a) EINECS 목록에 있는 경우 (b) 만약 제조자 혹은 수입업자가 이것을 서류로 증명할 수 있다면, EU역내 또는 1995년 1월 1일 혹은 2004년 5월 1일에 유럽연합에 가입한 국가들에서 REACH 발효 전 15년 내에 적어도 한번은 제조는 되었으나 시장출시가 되지 않았음. (c) 만약 제조자 혹은 수입업자가 이것을 서류로 증명할 수 있다면, 제조자 또는 수입업자에 의해서 1995년 1월 1일 또는 2004년 5월 1일 유럽연합에 가입한 국가 혹은 EU역내의 시장에 출시되었으며, Directive 67/548/EEC의 제8조 1항의 첫 단락에 따라 신고된 것으로 간주되지만 본 규정에서 정한 고분자의 정의를 만족시키지 않는 물질
혼합물(preparation)	두개 이상의 물질들로 구성된 혼합물(mixture) 또는 용액(solution) <sup>2)</sup>
폴리머(polymer)	한 가지 이상의 단량체 단위(monomer units)의 배열(sequence)로 특징지어진 분자들(molecules)로 구성되는 물질을 의미한다. 이러한 분자들은 분자량이 어떤 범위로 분포되어야 하며, 이 분자량의 차이는 주로 단량체 단위의 수가 다른 것에 기인한다. 고분자는 다음사항을 포함한다. (a) 적어도 1개 이상의 다른 단량체 단위나 다른 반응물(reactant)과 공유결합 되어 있는 적어도 3개 이상의 단량체 단위를 포함하는 분자량이 과반수인 경우 (b) 동일한 분자량을 가진 분자량 과반수 미만인 경우
물질(substance)	그 안전성을 유지하기 위해 필요한 첨가물과 사용된 공정으로부터 발생된 불순물을 포함하는 자연 상태 혹은 제조공정에서 얻어진 화학적 원소 및 그 화합물을 의미한다. 단, 물질의 안정성에 영향을 미치지 않거나 조성을 변형시키지 않고 분리될 수 있는 용매는 제외된다.
자연에서 생성되는 물질(substance which occurs in nature*)	자연적으로 발생하는 물질로 가공되지 않았거나 인력, 기계적, 중력적 수단들에 의해 가공, 즉 물에 용해, 부유선별(flotation), 물에서 추출, 열에 의한 수분 제거 또는 어떤 수단에 의해 공기 중으로부터 추출된 물질

\* REACH 규정의 제3조에 따른 정의들

2) GHS에서의 정의: “혼합물(mixture) 반응하지 않는 두 가지 이상의 물질의 혼합물이나 용액을 의미한다(혼합물(mixture)과 혼합물(preparation)는 동의어).

주: 혼합물(mixtures)/혼합물(preparations)는 복합구성 물질(multi-constituents substances)과 동일하지 않다. 복합구성물질들은 화학반응의 결과물이며, 반면에 혼합물(preparation)를 제조할 때는 의도적인 화학반응이 일어나지 않는다.

### 3. REACH에서 물질확인을 위한 구조

REACH은 물질의 정의(제3조)와 등록을 목적으로 물질을 확인하기 위해 포함되어야 할 물질확인 요소들(Annex VI, item2)을 포함하고 있다.

이 장은 REACH에서의 물질 정의를 설명(3.1장)하고, 이전의 화학물질 규정의 구조로부터 "EC Inventory"를 이용하는 방법에 대한 일반적인 지침서를 제공(3.2장)한다. 그리고 REACH법령으로부터 도출되는 물질확인 요건들에 대한 더 많은 배경정보를 제공(3.3장)한다.

#### 3.1 물질의 정의

물질은 REACH에 다음과 같이 정의된다.(제3조, 정의1)

물질(substance)'이라 함은 그 안정성을 보존하기 위하여 사용된 첨가제와 사용된 공정으로부터 파생된 불순물을 포함하며, 자연 상태 혹은 제조 공정에서 생긴 화학적 원소 및 그 화합물을 의미한다. 단, 물질의 안정성에 영향을 미치지 않거나 구성을 변형시키지 않고 분리될 수 있는 용매(solvent)는 제외된다.

REACH에서 물질의 정의는 유해물질 지침 Directive 67/548/EEC(Directive 92/32/EEC) 제7차 개정에서 사용된 정의와 동일하다. 두 경우에 있어 정의는 한개 분자로 정의된 순수 화합물 범위를 넘는다.

#### 3.2 EC INVENTORY

이전의 화학물질 규정 구조상의 3개의 개별 목록이 있다. 이 목록들로는 "European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances(EINECS)<sup>3)</sup>", "European List of New Chemical Substances(ELINCS), No-Longer Polymers(NLP)목록이다.

1971년 1월과 1981년 9월 18일 사이에 유럽시장에 나온 물질들은 EINECS에 등재되어 있으며, 1981년 9월 18일 이후 시장에 나오고 알려진 물질들은 ELINCS에 등재되어 있다.

폴리머들은 EINECS에 신고하는 것에서 제외되었고 Directive 67/548/EEC내에 특별한 규정을 받는다. 폴리머라는 용어는 Directive 67/548/EEC(92/32/EEC)의 제7차 개정에 더 정의되어져 있다. 이 정의의 이행의 결과로써 EINECS를 위한 규정 하에서 폴리머로 여겨지던 몇몇 물질들은 더 이상 제7차 개정상의 폴리머로 여겨지

3) EINECS는 산업계에 의한 추가물질 신고가 가능했던 유럽핵심목록(ECOIN, European Core Inventory)에 토대를 두고 있다. ECOIN은 유럽시장에 출시된 것으로 추정되는 서로 다른 화학물질 목록(예: TSCA)을 섞은 것이었다.

지 않는다. EINECS에 등재되지 않은 모든 물질들은 신고할 수 있으므로 모든 NLP(No-Longer Polymer)는 이론상 신고 되어져야만 한다. 하지만, Council of Ministers에서 이들 NLP는 소급하여 신고 받지 않아야 함을 분명하게 하고 있다. 집행위원회는 NLP의 목록을 작성하도록 요구되었다. 이 목록에 포함될 물질들은 1981년 9월 18일과 1993년 10월 31일 사이에 시장에 출시되고, EINECS를 위한 신고규정 하에서 그것들이 폴리머로 간주되어지지만 제7차 개정 하에서는 더 이상 폴리머로 간주되지 않는 요건을 만족시키는 물질들이다. NLP목록은 계속적으로 추가될 수 있는 목록(non-exhaustive list)이다.

이들 세 물질목록들을 조합하여 EC Inventory라고 불린다. 이 목록의 각 물질은 유럽집행위원회에 의해서 배정된 EC번호를 가지고 있다.(Appendix II에서 EC번호에 대한 상세정보 참조)

이들 물질에 대한 정보는 ECHA(European Chemicals Bureau)의 웹사이트를 통해서 얻어질 수 있다. 앞으로는 등록된 물질들의 목록이 유지되고 ECHA의해서 공표 될 것이다.

### 3.2.1 REACH 시행에 따른 EC INVENTORY의 역할

EC Inventory는 제조자와 수입자에게 물질이 기존 물질인지 신규 물질인지를 결정하기 위한 수단으로써 이용될 수 있다. 따라서 EC Inventory는 제조자와 수입자가 언제 물질 등록이 필요한지, 그리고 사전등록이나 문의가 필요한지를 알 수 있게 도울 것이다.

만약 물질이 EINECS나 NLP목록에 등재되어 있으면 그 물질은 기존 물질로 간주되어진다. 몇몇 조건들 하에서 EINECS나 NLP목록에 등재되어 있지 않은 물질들 또한 기존 물질로 간주될 수 있다. : (1) NLP 기준에 맞는 물질이지만, NLP목록에 올라 있지 않은 것: (2) EU내에서 제조된 물질 혹은 2004년 5월에 EU에 가입한 나라들에서 제조된 물질, 하지만 REACH 시행 전 15년 내에 한번도 제조자나 수입자에 의해서 시장에 시판되지 않은 것.

물질이 Directive 67/548/EEC에 따라 사전에 신고 되고, EINECS에 등재되면 제출된 그 신고는 REACH(22조) 목적을 위해 등록으로 간주되어야만 할 것이다. 이 물질들은 관련 제조자 혹은 수입업자에 의해서 이미 등록된 것으로 간주되며, 이 제조자/수입업자로부터 초기 등록이 요구되지 않는다. 그럼에도 불구하고 제조자/수입업자는 등록의 업데이트를 유지할 의무를 지니고 있다. (사전신고에 의해서 커버되지 않는)EINECS에 등재된 물질의 추가적인 제조자/수입업자는 등록(신규물질)에 대한 책임이 있으며, 사전등록자와의 자료공유가 확립되어야만 할 것이다.

### 3.2.2 REACH 시행 후 REACH INVENTORY

REACH가 시행되면 ECHA(European Chemicals Agency)는 등록된 물질들의 목록을 유지할 것이며, 각 등록자는 물질의 각 등록에 대한 등록 번호를 받을 것이다. 예를 들면, 물질을 확인하는 EC번호(EINECS, ELINCS 혹은 NLP번호)가 없다면, ECHA가 EC번호를 부여할 것이다.

ECHA는 목록을 정기적으로 업데이트 시킬 것이며, 신규 REACH 물질들이 추가 될 것이다. 등록과정은 등록된 물질들의 신규목록이 현 EINECS(오류가 있는 곳)<sup>4)</sup>를 수정하도록 허락해야만 한다. 신규 REACH EC번호를 부여하는 시스템은 EINECS, ELINCS, NLP목록에 대해 사용되는 방법을 따를 가능성이 가장 크다. ELINCS에서 하나의 EC번호를 위해서 다수 등록 번호와 무역거래명이 공표될 수도 있다. (Directive 67/548/EEC의 의미 안의)유해물질을 위해서 IUPAC<sup>5)</sup>명이 마찬가지로 공표될 것이다.

이따금 EINECS에서 물질의 설명은 상대적으로 일반적이다. 이러한 경우들은 잠재적인 등록자가 의문의 물질을 더 정확하게 설명하기 위해 초대된다(예 : IUPAC명 혹은 기타 확인요소를 통해서). 그럼에도 불구하고 기존 룰(rules)로부터 혜택을 얻기 위해서 등록자는 물질이 어느 EINECS 목록에 속하는지를 나타내야만 한다.

### 3.3 REACH에서 물질확인을 위한 요건들

REACH법령 하에서 등록이 필요할 때 Annex VI의 항목2에 명시된 대로 물질의 확인에 대한 정보를 포함해야만 할 것이다. 각 물질에 대해 이 정보는 각 물질이 충분히 확인될 수 있게 하는데 적절해야 할 것이다. 만약 기술적으로 가능하지 않거나 혹은 과학적으로 필요해 보이지 않으면 하나 혹은 그 이상의 물질확인 요소들에 대한 정보를 제공하기 위해서 정당성 증명이 필요하다.

REACH법령 제26조에 부합하여 사전등록이 기존 물질에 대해 요구되며, 그렇게 함으로써 제조자와 수입업자가 과도기적인 제도로부터 혜택을 받고 그들이 등록을 준비하는 동안 제조와 수입을 계속 영위할 수 있다. 이 단계에서 물질확인 요건들에 대해 REACH는 Annex VI의 항목(item)2에 부합되는 모든 확인 서류를 요구하지 않고 잠재적인 등록자가 물질명을 제공하는 것만을 요구하거나 혹은 적용가능 한 곳에서는 EC번호와 CAS번호를 포함하는 물질그룹을 제공하는 것을 요구한다. REACH Annex VI내의 물질확인 요소들의 개요가 표3.1에 제공되어 있다.

4) EINECS는 1990년 6월 15일에 발행되었고, 100000개 이상의 물질을 포함하고 있다. 이 목록을 사용하는 동안 많은 오류가 확인되었다(부정확한 화학물질명, 화학식, CAS RN과 같은 활자 오류). 2002년 3월 1일에 정정표가 발간되었다. 그럼에도 불구하고 추가적인 오류가 계속해서 발견되고 있다.

5) International Union of Pure and Applied Chemistry

표3.1 REACH Annex VI 항목2에 물질확인 요소들(Council Proposal, 2005년 12월 19일)

2.	<b>물질의 확인</b> 각 물질에 대해 주어진 정보가 각 물질이 확인될 수 있도록 하기에 충분해야 할 것이다. 만약 기술적으로 가능하지 않거나 혹은 아래의 한개 혹은 그 이상의 항목에 대한 정보를 제공하는 것이 과학적으로 불필요하다면 그 이유가 명확히 진술 되어져야만 할 것이다.
2.1	<b>각 물질명 혹은 기타 확인요소</b>
2.1.1	IUPAC 명명법에 의한 화학명 혹은 기타 국제적인 화학명
2.1.2	기타 명들(일반적 명, 무역거래명, 약어)
2.1.3	EINECS번호 혹은 ELINECS번호(이용 가능하거나 적합할 경우)
2.1.4	CAS명 혹은 CAS번호(이용 가능하다면)
2.1.5	다른 확인코드(이용 가능하다면)
2.2	<b>분자 및 각 물질의 구조식에 관련된 정보</b>
2.2.1	분자 및 구조식(이용 가능하다면, SMILES 표시법 포함)
2.2.2	광학활성도(optical activity)에 대한 정보 및 이성질체(異性質體)의 전형적인 비율에 관한 정보
2.2.3	분자무게 및 분자무게 범위
2.3	<b>각 물질의 구성</b>
2.3.1	순도(%)
2.3.2	이성질체 및 부산물을 포함한 불순물의 성질
2.3.3	주된 불순물의 퍼센티지
2.3.4	첨가제들의 양(...ppm,...%)의 성질 및 순서
2.3.5	분광 데이터
2.3.6	고 기능 액체 크로마토그램, 가스 크로마토그램
2.3.7	분석 방법들의 설명 혹은 물질확인 및 불순물, 첨가제의 확인을 위한 적절한 문헌적 참고. 이 정보는 방법들이 재현되도록 하는데 충분할 것이다.

## 4 REACH의 물질확인과 명명에 관한 지침서

### 4.1 도입

물질확인규칙은 물질의 종류에 따라 달라진다. 실용적인 목적 상, 이 지침서는 각 물질 종류에 대해 해당 지침이 제시된 장으로 사용자가 직접적으로 안내를 받는 방식으로 구성되어 있다. 서로 다른 물질 종류에 관한 설명은 하기에 제시되어 있으며, 그에 해당하는 장을 찾을 수 있는 열쇠도 제시되어 있다.

물질의 확인을 위해서는, 적어도 REACH 부록 VI, 항목2 (표 3.1 참조)에 나타난 물질확인 요소를 이용해야 한다. 따라서 모든 물질은 다음의 적절한 확인요소를 조합하여 확인해야 한다 :

- IUPAC 또는 기타 명칭 및 기타 확인요소. 예: CAS-번호, EC-번호 (부록 VI, 항목 2.1)
- 분자와 구조적 정보 (부록 VI, 항목 2.2)
- 화학적 구성 (부록 VI, 항목 2.3)

물질은 화학적 구성과 화학적 특성, 물질의 성분에 의해 확인된다. 대부분의 물질이 이러한 간단한 확인법으로 확인이 가능하지만, 몇몇 물질은 REACH의 범위 내에서 부적합하다. 이러한 경우에는 추가적인 물질확인 정보가 필요하다.

따라서 다음과 같이 물질을 크게 두 집단으로 나눌 수 있다:

1. "명확히 정의된 물질": 질적 양적인 구성이 명확하게 정의된 물질은 REACH 부록 VI, 항목 2의 확인 기준에 의거하여 충분히 확인이 가능하다.
2. "불완전하게 정의되거나 혹은 가변적인 물질(UVCB substances)": 위와 같은 요소들로 확인되지 못하는 물질들을 말한다. 이러한 물질들은 UVCB<sup>6)</sup> 물질이라 불리는 이질적인 집단에 속해 있다. UVCB 물질들은 "알려지지 않은 물질이거나 가변적인 구조를 가지고, 복잡한 반응물이거나 생물학적 재료"이다.

정의된 물질의 확인된 구조 변이성은 주요 물질의 집중 범위의 상한선과 하한선이 지정되어 있다. UVCB 물질의 변이성은 상대적으로 크고 예측하기 어렵다.

각각 넓은 범위 내에 있는 물질들의 화학적 구성의 혼합 반응 사이에는 한정된 특징이 있으며 혼합 반응의 다양성은 예측 가능하다. 가장 적절한 방법으로 물질을 확인하는 것은 등록자의 의무이다.

한 가지 주요 구성성분로만 이루어진 명확한 물질과 두 가지 이상의 주요 구성성분로 이루어진 물질의 확인과 명명법은 다르다. "UVCB"의 다양한 물질 종류에 해당하는 서로 다른 확인법과 명명법이 하기에 설명되어 있다.

표4.1과 표4.2에는 다양한 종류의 물질 예에 대한 확인요소들이 제시되어 있다. 이 예들은 물질의 유사점과 차이점으로 쉽게 알아볼 수 있도록 분류하였다.

표4.1과 표4.2는 가능한 모든 물질의 종류를 전체적으로 제시한 것이 아니다. 확인법과 명명법에 따른 물질 분류는 물질에 대한 공식적인 분류 체계로 생각해서는 안 된다. 특정 규칙에 적합한 실질적인 도움을 제공하기 위함이며, 이 TGD에서 적합한 지침을 찾기 위함이다

6) substances of **Unknown of Variable Composition**, **Complex reaction products** or **Biological materials**

표 4.1 유사 물질들의 다양한 종류를 예로 든 주요 확인요소들

일반특징	실례	주요 확인요소
화학적 구성에 의해 명확히 정의된 물질 [4.2.]	단일구성물질, 예 - 벤젠(95%) - 니켈(99%) [4.2.1]	화학적 구성: 단일 구성 ≥80%: - 주요 구성의 화학물질확인 (화학적 명칭, CAS-번호, EC-번호 등) - 전형적인 농도와 상한/하한의 한도
	복합구성물질, 예: 2-, 3-, 및 4-chlortoluene (각 30%)의 혼합과 같이 정의된 반응 생성물 [4.2.2]	화학적 구성: 각각 ≥10 - <80% 사이의 주요 물질의 혼합: - 각 주요 물질의 화학적 특성 - 각 물질구성성분과 혼합물 자체의 전형적인 농도와 상한/하한의 한도
	화학적 구성 이상의 요소에 의해 정의된 물질, 예: 흑연과 다이아몬드 [4.2.3]	단일, 혹은 복합 물질의 화학적 구성 및 기타 물리적, 혹은 특징 요소들: 예. crystallomorphology, (지질학적) 광물 구성 등

표 4.2 UVCB 물질들의 다양한 종류를 예로 든 주요 확인요소들

일반 특징	실례	주요 확인요소		
		원료	공정	기타 확인요소
생물학적 재료들 (B)  화학적 구성에 의해 불충분하게 정의되거나 가변적 물질들	생물학적 요소 추출 예. 천연 방향제, 천연 기름, 천연 염료와 색소	<ul style="list-style-type: none"> <li>식물 혹은 동물 종 및 과</li> <li>식물/동물의 일부</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>추출물</li> <li>세분화, 농축, 분리, 정화 등</li> <li>유도*</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>알려지거나 일반적인 구성</li> <li>크로마토그래피 및 기타 지문(fingerprints)</li> <li>참조 기준</li> </ul>
	복합 생물학적 고분자, 예: 효소, 단백질, DNA 및 RNA, 호르몬, 항생 물질			
	발효 생성물  항생물질, 바이오폴리머, 혼합 효소, vinasse(설탕 발효 생성물) 등.	<ul style="list-style-type: none"> <li>배양기</li> <li>응용 미생물</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>발효</li> <li>생성물의 분리</li> <li>정화 단계</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>표준 효소 색인</li> <li>유전 코드</li> <li>입체 배치</li> <li>물리적 특성</li> <li>기능/활성</li> <li>구조</li> <li>아미노산 순서</li> </ul>
(UVCB 물질들) [4.3장]	정의되지 못하거나, 예측하기 어려운 화합물의 혼합 반응	Starting materia	<ul style="list-style-type: none"> <li>화학적 반응 종류</li> <li>예: 에스테르화, 알킬화, 수소 첨가</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>알려진 조성</li> <li>크로마토그래피 및 기타 지문(fingerprint)</li> <li>참조 기준</li> </ul>
구조를 가진 화학물질과 광물 물질들 (UVC)	<ul style="list-style-type: none"> <li>파편이나 증류액, 예: 석유 물질</li> <li>진흙 예: 벤토나이트</li> <li>타르</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>원유</li> <li>석탄/토탄</li> <li>광물 가스</li> <li>광물</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>분류법, 증류법</li> <li>Conversion of fraction</li> <li>물리적 공정</li> <li>잔여물</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>한계범위(cut-off range)</li> <li>분자 길이의 범위</li> <li>방향족/지방성 비율</li> <li>알려진 구성</li> <li>기준 색인</li> </ul>
	농축이나 용해 예 금속성 광물, 혹은 다양한 야금술 공정의 잔여물 예: 광재(slags)	광석(ores)	<ul style="list-style-type: none"> <li>제련</li> <li>열처리</li> <li>다양한 야금술 공정</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>알려지거나 일반적 구성</li> <li>금속의 농축</li> </ul>

\* 밑줄 친 공정은 새로운 분자의 합성을 가리킨다.

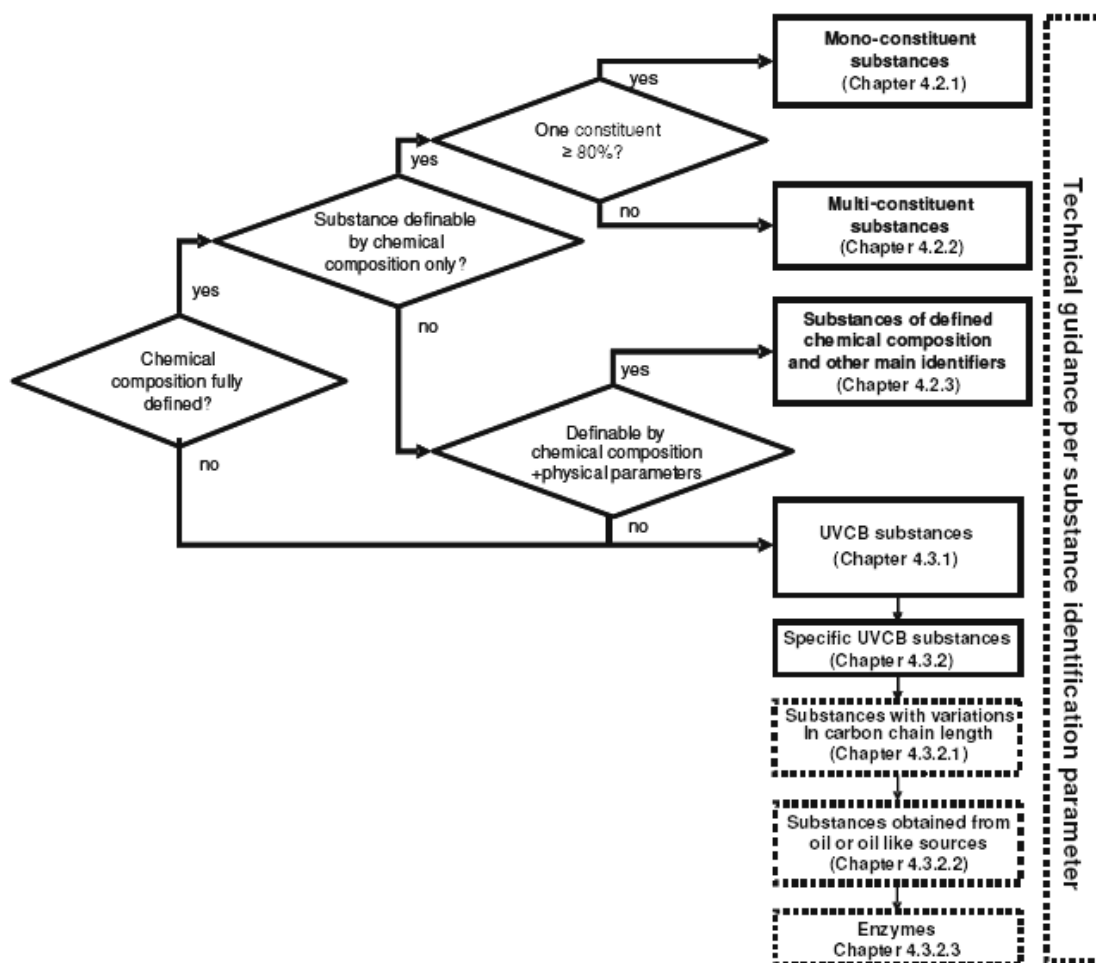
이 장은 다양한 종류의 물질들을 확인하기 위한 특별한 지침을 포함하는 하위 장으로 나누어진다. 적절한 장을 찾아가기 위한 열쇠는 그림 4.1에 제시되어 있다.

그림 4.1은 경험 법칙 기준에 근거한 것이다. 등록자는 가장 적합한 장(chapter)을 선택하고, 물질 종류에 따른 기준 및 규칙과 함께 물질 특징을 기록할 책임이 있다.

기본 규칙은 물질이 화학적 구성과 확인된 구성성분에 의해 정의된다는 것이다. 이것이 기술적으로 불가능할 때에는 다른 주요 확인요소를 사용한다.

등록자가 TGD의 확인 법칙과 기준에서 어긋난다면, 그 이유가 반드시 주어져야 한다. 물질확인 은 명쾌하고, 설명 가능해야 하며, 일관성이 있어야 한다.

그림 4.1 다양한 물질 종류에 대한 해당 지침서가 포함된 TGD 장과 부록을 찾기 위한 키(key)



분석적 방법의 개관 및 물질확인 에 관한 적절한 참조 자료와 적절한 장소의 부가적

인 확인의 필요성은 REACH 부록 VI, 항목 2.3.5, 2.3.6 와 2.3.7에 제시되어 있다. 이 정보는 방법들을 재현하기 위해 충분한 자료가 될 것이다.

#### 4.2 명확히 정의된 조성 물질들

화학적 구성이 명확히 정의된 물질은 주요 구성성분에 따라 명명한다. 일부 종류의 경우, 화학적 구성만으로는 그 특징을 설명하기에 부족하다. 이런 경우, 화학적 조성에 대한 추가적인 물리적 요소가 물질확인 시 필요하다.

대체로 그것은 100%까지 구성을 커버하는 것을 목표로 하며, 각 구성성분은 화학적으로 완전히 설명될 수 있어야 한다. 화학적 구성에 의해 정의된 물질들의 특징은 다음과 같다:

- 주요 구성성분(Main constituent): 구성성분이 혼합되지 않고, 물질의 대부분이 동일한 물질로 이루어져 있기 때문에, 물질 명명과 물질확인에 이용한다.
- 불순물(Impurity): 물질 내에 의도치 않은 구성성분이 나타난다. 물질이 발생할 때 비롯되었을 수도 있고, 생산 과정에서 완전치 못한 반응이나 이차 반응의 결과일 수도 있다. 마지막 물질에 나타난 불순물은 의도된 것이 아니다.

첨가제를 제외한 모든 구성성분은 단일구성물질이나 복합구성물질의 주요 구성물질이 아니며, 불순물로 취급된다. 비록 몇몇 분야에서는 일반적으로 "극소량 (trace)"이라는 용어를 쓰지만, 이 TGD에서는 "불순물(impurities)"이란 용어를 사용한다.

- 첨가제: 물질을 안정화시키기 위해 의도적으로 첨가한 물질.  
이 화학적 구성의 별개 하위 세트는 다른 확인 요건을 가진다.:
- 주요 구성성분은 물질을 명명하는 데 기여하지만, 불순물은 그렇지 않다.
- 주요 구성성분은 반드시 모든 관련 확인요소에 의해 명기되어야 한다. 불순물은 오로지 명칭과 CAS-번호, EC-번호 및 분자식에 의해 명기되어야 한다.
- 물질 구성에 기여한 첨가제는 반드시 명확히 밝혀져야 한다.  
몇몇 사항은 단일구성물질과 복합구성물질(혼합물)을 구별하기 위해 사용된다.:
- 단일구성물질이란, 한 구성성분이 최소 80% (w/w)의 농도를 가지며 20% (w/w)의 불순물을 포함한 물질을 말한다.  
단일구성물질은 주요 구성성분에 의해 명명된다.
- 복합구성물질은 일반적으로  $\geq 10\%$  와  $< 80\%$  (w/w)의 농도를 갖는 몇 가지 주요 구성 물질로 구성된 물질을 가리킨다.

단일구성물질은 두 가지 이상의 주요 구성성분의 *reaction mass*로 명명된다.

위에 언급한 규칙은 지침서에서 의도한 것이다. 편차는 타당한 입증이 주어졌을 경우, 수용 가능하다
--

일반적으로  $\geq 1\%$ 의 농도로 존재하는 불순물은 명시되어야 한다. 그러나 분류와/혹은 PBT<sup>7)</sup>평가와 관련된 불순물은 항상 명시되어야 한다. 일반적인 원칙으로서 구성성분에 관한 정보는 100% 완전해야 한다.

REACH 규정과 TGD에서의 첨가제는 안정제로, 물질의 안정성을 보존하기 위해 필요하다. 그러므로 첨가제는 물질의 필수적인 구성성분이며, 매스 밸런스(mass balance)를 만들 때 고려되어야 한다. 그러나 REACH와 TGD의 정의 밖에서 '첨가제'란 용어는 또 다른 기능(예: pH-조절이나 착색제)을 위해서 의도적으로 첨가된 물질을 위해서 사용된다. 이러한 의도적으로 첨가된 물질들은 그것 자체로는 물질의 일부가 아니며, 따라서 매스밸런스(mass balance)를 만들 때 고려하지 않아도 된다.

REACH에서 정의하는 혼합물(preparation)은 의도적으로 혼합된 물질이고 따라서 복합구성물질로 취급되지 않는다.<sup>8)</sup>

단일구성물질에 대한 지침은 4.2.1에 있으며, 복합구성물질에 관한 지침은 4.2.2에 있다. 특정 광물 같이 추가적인 정보를 필요로 하는 물질들에 대해서는 4.2.3에 있다.

#### 4.2.1 단일구성물질(Mono-constituent substance)

단일구성물질은 양적 구성에 의해 정의된 물질이며, 주요 구성성분이 최소 80% (w/w)로 나타난다.

##### 4.2.1.1 명명 규칙

단일구성물질은 주요 구성 물질의 명칭에 따라 명명한다. 원칙적으로 그 명칭은 IUPAC 명명법에 따라 영어로 작성한다. 그 외에 국제적으로 통용되는 호칭도 있다.

##### 4.2.1.2 확인요소(Identifier)

단일구성물질은 주요 구성성분의 명칭 및 확인요소(분자 및 구조식을 포함)와 불순물 그리고(혹은) 첨가제의 화학적 구성과 농도 및 농도 범위에 의해서 확인되고 분석적 정보에 의해 입증된다.

실례				
주요 구성성분	함량(%)	불순물	함량(%)	등록된 물질
m-xylene	91	o-xylene	5	m-xylene
o-xylene	87	m-xylene	10	o-xylene

7) PBT평가 및 관련 농도 한도에 관한 더 자세한 사항은 RIP3.2지침서(PBT에관한 CSA섹션)에서 찾아볼 수 있다.

8) 분류와 표지에 관해서 앞으로 GHS에서는 "혼합물(preparation)" 는 "혼합물(mixtures)"로 불릴 것이다

1%이상의 농도로 존재하는 불순물(Impurities)은 최소한 다음의 확인요소들 중에 하나로 명시되어야만 한다: 화학명, CAS-번호 와 EC-번호 및 분자식. 분류와/혹은 PBT평가<sup>9)</sup>와 관련된 불순물은 그것들의 농도와는 별개로 동일한 확인요소들에 의해 항상 명시되어야 한다.

80%규칙의 정확한 적용을 위해서, 의도적으로 첨가되는 물질(예: pH 조절제나 착색제) 매스밸런스에 포함되지 않는다.

"80%-규칙" 은 새로운 물질에도 적용된다(Directive 67/548/EEC). 어렵짐작으로 보일 수 있지만, 이 80% 규칙에서 비롯된 편차는 정당화되어야만 한다. 정당화될 수 있는 편차에 관한 예들은 다음과 같다:

- 구성성분이 <80% 이지만 그 물질이 유사한 물리화학적 특징과 80%규칙을 충족하는 동일한 특징을 가진 다른 단일구성물질들과 같은 유해성 프로필을 가지고 있음을 보일 경우
- 주요 구성성분과 불순물의 농도 범위가 80%기준에 일부분이 일치하고, 주요 구성 성분은 때로는 ≤80%이다.

실례									
물질	주요 구성성분	함량 상한선 (%)	일반 함량 (%)	함량 하한선 (%)	불순물	함량 상한선 (%)	일반 함량 (%)	함량 하한선 (%)	등록된 물질
1	o-xylene	90	> 80	65	m-xylene	35	15	10	o-xylene
2	o-xylene m-xylene	90 35	85 15	65 10	p-xylene	5	4	1	o-xylene

주요 구성성분과 불순물에 대한 농도 범위에 기인하여, 물질 1과 2는 o-xylene 와 m-xylene, 두 가지 주요 구성성분의 복합구성물질로 간주되거나 단일구성물질로 여겨진다. 이러한 경우의 결정은 둘 다 단일구성물질로서 간주될 것이며, 이것은 o-xylene이 전형적으로 80% <으로 존재한다는 사실에 의한 것이다.

지침서가 IUCLID 5의 단일구성물질을 어떻게 설명할 것인가에 대한 내용이 8.2.1에 나와 있다.

#### 4.2.1.3 분석적 정보

충분한 분광 분석자료는 단일구성물질의 구조를 확인하기 위해 필요하다. 몇몇의 분광광도법들이 적절하게 이용될 수 있으며, 특히 이것들에는 적외선-가시광선분광법(UV/VIS), 적외선분광법(IR), 핵자기공명분광법(NMR))이나 질량분광법(MS) 등이 있다. 무기물질 분석에는 X선회절(XRD)이나 X선형광(XRF), 또는 원자흡수분광법(AAS)이 더 적합할 수도 있다.

9) PBT평가 및 관련 농도 한도에 관한 더 자세한 사항은 RIP3.2지침서(PBT에 관한 CSA섹션)에서 찾아볼 수 있다.

GC(Gas Chromatography)나 HPLC(High-Performance Liquid Chromatography)와 같은 크로마토그래피 기법들은 물질의 조성을 확인하기 위해서 필요하다. 적절하기만 하다면 다른 효과적인 물질의 구성성분 분리기술(separation technique)도 사용할 수 있다.

분광 및 분석 기법들은 계속적인 변화가 있을 것이며, 따라서 적합한 분광 및 분석 자료를 제시하는 것은 등록자의 책임이다.

#### 4.2.2 복합구성물질(multi-constituent substance)

복합구성물질은 그 양적 구성으로 정의되는 물질이며, 하나 이상의 주요 구성성분의 농도가  $\geq 10\%$  (w/w)와  $< 80\%$  (w/w)을 나타낸다.<sup>10)</sup>

REACH는 생산되는 물질의 등록을 요구한다. 만약 복합구성물질이 제조되면, 그 복합구성물질은 등록될 필요가 있다.<sup>11)</sup> 물질을 생산하는 다른 단계들에서 어느 정도까지 “제조”의 정의에 포함되는지는 사례별 결정이다. 이전에 EINECS에 커버되는 모든 물질들(예를 들면, 복합구성물질들은 만약 모든 개별 구성성분들이 EINECS에 올라가 있다면 포함됨)은 기존물질들로 간주한다. 물질에 대한 유해성 프로필이 충분히 개별 구성성분의 정보에 의해 설명될 수 있다면, 그 물질은 시험할 필요가 없다.

##### 4.2.2.1 명명 규칙

복합구성물질은 그 물질을 생산하기 위해서 필요한 출발물질(starting materials)이 아닌 그 물질 자체의 주요 구성성분의 reaction mass로 명명된다. 일반적인 명명 형식은 “[주요 구성성분의 명칭들]의 반응물질”이다. 그 명명은 가장 높은 농도 비율을 지닌 구성성분의 순이다. 일반적으로 10%이상의 주요 구성성분들만이 그 물질 명명에 이용된다. 원칙적으로 그 명명들은 IUPAC명명규칙에 따라 영어로 제시되어야 한다. 기타 국제적으로 인정되는 명명을 추가적으로 제시할 수 있다.

##### 4.2.2.2 확인요소

복합구성물질은 화학명과 분자 및 구조식을 포함하는 화학적 특징 및 구성성분의 질적/양적 화학 구성과 같은 확인요소에 의해 확인되고, 분석적 정보에 의해 입증한다.

### 실례

10) 혼합물과 복합구성물질의 차이는 혼합물은 2개 이상의 화학물질을 화학적인 반응 없이 혼합하여 얻은 것이고, 복합구성물질은 화학적 반응의 결과물이다.

11) 많은 물질들이 REACH에서 등록면제 된다(예: Annex IV에 열거된 물질들).

주요 구성성분	함량(%)	불순물	함량(%)	등록된 물질
m-xylene	50	p-xylene	5	Reaction mass of m-xylene and o-xylene
o-xylene	45			

복합구성물질에 대해 화학적 조성이 알려져 있고, 하나 이상의 구성성분은 물질의 확인과 관련되어 있다. 게다가 표준값과 범위로써 물질의 화학적 조성이 예측 가능하다. 주요 구성성분은 반드시 관련된 모든 요소에 의해 명시되어야 한다. 주요 구성성분의 농도 ( $\geq 10\%$ )와 불순물 ( $< 10\%$ )의 총합은 반드시 100%가 되어야 한다.

10%와 80%규칙의 정확한 적용을 위해서, 의도적으로 추가되는 물질(예: pH조절제, 착색제) 매스밸런스에 포함되지 않는다.

농도 $\geq 1\%$ 를 나타내는 불순물은 최소한 화학명, CAS-번호 와 EC-번호 및 분자식과 같은 확인요소들 중 하나를 가져야 한다. 분류 및/또는 PBT평가와 관련된 불순물은 그것들의 농도와는 별개로 동일한 확인요소에 의해 항상 명시되어야 한다.

실례								
주요 구성성분	함량 상한선 (%)	일반 함량 (%)	함량 하한선 (%)	불순물	함량 상한선 (%)	일반 함량 (%)	함량 하한선 (%)	등록된 물질
aniline naphthalene	90 35	75 20	65 10	phenanthrene	5	4	1	Reaction mass of aniline and naphthalene

TGD에 따르면, 이 물질은 복합구성물질이다. 한 구성성분의 범위가  $> 80\%$ 이지만, 이것은 때때로 발생하며, 전형적인 구성은  $< 80\%$ 이다.

가끔 하나의 구성성분이  $\geq 80\%$ 일 경우에도 복합구성물질이라고 간주하는 것이 편리하다. 예를 들면, 두 가지 구성성분 즉 그 중 하나가 85%, 다른 하나가 10%를 함유하고 나머지는 불순물이다. 두 구성성분이 물질의 기술적 결과를 위해서 기여하며 필수적이다. 이러한 경우, 한 구성성분이  $> 80\%$ 로 존재하더라도, 그 물질은 두 가지 구성성분을 가진 물질로 기술될 수 있다.

#### 4.2.2.3 분석적 정보

분광자료가 복합구성물질의 조성에 대한 정보를 제공할 경우, 이 정보는 제공되어야만 한다. 몇몇의 분광광도법들이 적절하게 이용될 수 있으며, 특히 이것들에는 적외선-가시광선분광법(UV/VIS), 적외선분광법(IR), 핵자기공명분광법(NMR)이나 질량분광법(MS) 등이 있다. 무기물질 분석에는 X선회절(XRD)이나 X선형광(XRF), 또는 원자흡수분광법(AAS)이 더 적합할 수도 있다.

GC(Gas Chromatography)나 HPLC(High-Performance Liquid Chromatography)와 같은 크로마토그래피 기법들은 물질의 조성을 확인하기 위해서 필요하다. 적절하기만 하다면 다른 효과적인 물질의 구성성분 분리기술(separation technique)도 사용할 수 있다.

분광 및 분석 기법들은 계속적인 변화가 있을 것이며, 따라서 적합한 분광 및 분석 자료를 제시하는 것은 등록자의 책임이다.

#### 4.2.2.4 복합구성물질의 개별 구성성분의 등록

일반적으로 (사전)등록을 목적으로 물질ID 기록은 복합구성물질 접근법(즉, 복합구성물질의 등록)을 따라야만 한다. 정당화할 수 있다면, 그 접근방법으로부터의 벗어나서 개별 구성성분들이 등록될 수 있다. 다음과 같은 경우 물질을 확인하기 위해 물질의 개별 구성성분들이 제시됨으로서 표준 사례로부터 벗어날 수 있다.

- 정보요건들이 줄어들지 않음
- 개별 구성성분들을 등록하는 접근을 정당화하기 위한 충분한 기존자료가 있다. 즉, 이 접근법은 표준 접근법에 비하여 일반적으로 추가적인(척추동물) 시험을 요구하지 않는다.
- 개별 구성성분을 등록하는 것이 더 효율적이다.(즉, 같은 구성성분으로 조성된 물질의 다수 등록들을 피할 수 있음)
- 개별 반응물의 조성에 대한 정보가 제공된다.

이와 같은 접근법의 유연성(flexibility)은 자료 요건들을 피하기 위해서 남용되어서는 안 된다. 예를 들어, 50%의 C와 50%의 D라는 조성을 가진 복합구성물질 "(C+D)"가 연간 1200톤인 경우, 이 접근법은 다음의 정보를 가지고 두 가지 등록이 발생되게 된다.

물질C

- 600톤
- 1000톤 이상에 대해 이행될 자료요건들(Annex X)

물질D

- 600톤
- 1000톤 이상에 대해 이행될 자료요건들(Annex X)

이 접근법은 법인 당 동일한 물질의 양을 합산하는 REACH 요건과 결합되어야만 한다. 이 안(proposal)은 다음과 같은 자료요건들을 확립하는 것이다.

- (물질 내의 양들에 따라) 개별 물질성분들의 양을 합산

- 물질 구성성분을 포함하는 물질의 가장 높은 양을 명시

그 정보요건들은 가장 높은 결과에 기초하여 정해진다. 톤수 보고를 위해 각 개별 물질 구성성분에 대한 톤수의 합의 결과가 채택된다. 이 접근방법의 실질적인 수행을 보여주기 위해서 아래 단순화 시킨 예들이 제공되어 있다.

#### 실례1

복합구성물질 "C+D+E"가 법인 내의 공정 결과물이며, 이것으로부터 다른 물질들의 결과는:

물질1: C50% + D25% + E25%, 연간 1100톤

물질2: C50% + D50%, 연간 500톤

이 경우에 또한 반응물(reaction product)이 시작점(starting point)이다: 두 물질은 복합구성물질로서 등록되어야만 한다. 만약 개별 물질 구성성분의 등록 접근방법을 따른다면<sup>12)</sup>, 다음이 적용될 것이다:

이 경우 물질D의 보고는 다음을 의미한다.

톤수:  $(25\% \times 1100) + (50\% \times 500) = \text{연간 } 525\text{톤}$

정보요건들의 결정은 가장 엄격한 요건에 기초한다. 이 경우: 복합구성물질 "C+D+E"의 총 톤수가 1000을 넘어 연간 1000을 초과하게 된다.

주의: 이 예의 경우 물질C와 E는 따라서 등록되어야만 한다.

#### 실례2

복합구성물질 "G+H+I"가 법인 내의 공정의 결과물이고, 이것으로부터 다른 물질들의 결과물은:

물질3: G65% + H15% + I20%, 연간 90톤

물질4: G60% + H40% , 연간 90톤

물질G의 신고:

톤수:  $(65\% \times 90) + (60\% \times 90) = \text{연간 } 112.5\text{톤}$

정보요건들의 결정은 가장 엄격한 요건에 기초한다.

이 경우: 물질 구성성분 G가 연간 100톤 이상이므로 연간 100톤을 초과한다.

주의: 이 예에서 물질H와 I는 따라서 등록되어야만 한다.

12) 예는 정보의 요건들 및 수량 신고의 확립을 보여주기 위해서 의도된 것뿐이다. 이 접근법 이 경우 정당하지 여부를 다루지 않는다.

언급된 정보요건의 확립 외에 또 하나의 고려사항은 수행될 필요가 있는 다수의 새로운 (척추동물들에 관한) 연구들이다. 전략을 결정하기 전에 잠재적인 등록자 (potential registrant)는 (척추동물에 관한) 충분한 기존자료가 있는지 그리고 그 제안된 유연성이 (척추동물에 관한) 다스간의 새로운 시험을 초래하는지를 고려해야만 한다. (척추동물에 관한) 새로운 시험을 피할 수 있는 전략이 채택되어야만 한다.

의심이 가는 경우, 등록을 목적으로 물질ID를 기록하는 표준 방법은 항상 물질이 제조되는 그 대로의 물질확인이 되어야만 한다.

#### 4.2.3 화학적 조성이 정의된 물질 및 기타 주요 확인요소

화학적 조성으로 확인될 수 있는 일부 물질(예. 무기 광물)은 물질 자체의 고유성을 얻기 위해 특별한 확인요소에 의해 명시될 필요가 있다. 이러한 물질들은 단일구성 물질 또는 복합구성물질일 것이나, 이전 장에서 기술된 물질확인 요소를 포함하여, 물질의 특성을 명확하게 기록하기 위한 기타 주요 확인요소가 필요하다.

실 례
<p>독특한 구조를 가지고 있는 (천연원료 또는 인공원료로부터의) 일부 비금속 광물은 명확히 물질을 확인하기 위해 구조(morphology) 및 광물조성을 필요로 한다. 한 예로 고령토(CAS 1332-58-7)는 카올리나이트, 포타슘 규산알루미늄, 장석, 석영으로 구성되어 있다.</p>

최근 나노기술의 발달과 관련된 유해성 영향들에 대한 통찰은 향후 그 물질에 대한 이해를 위한 추가정보의 필요성을 초래할 수도 있다. 현재의 발달 상황은 본 지침서에 나노 형태의 물질확인에 대한 지침을 포함시킬 만큼 충분치 않다.

##### 4.2.3.1 명명 규칙

원칙적으로, 단일구성물질(4.2.1 참조)이나 복합구성물질(4.2.2 참조)에 대하여 동일한 명명 규칙을 따라야 한다.

무기 광물의 경우 광물학적 명칭을 구성성분에서 사용할 수 있다. 예를 들어, 인회석은 인산염기로 구성되어 있는 복합구성물질로, 보통 수산화인회석, 불소인회석, chlorapatite라고 일컬어지고, 결정격자(crystal lattice)에서 각각 OH-, F-, Cl- 이온의 높은 농도로 명명되었다. 가장 일반적인 세 가지를 혼합한 식은 Ca<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>(OH, F, Cl)이다. 또 다른 예는 선석으로, 탄산칼슘의 특별한 결정 구조 중 하나이다.

##### 4.2.3.2 확인요소

이러한 물질은 단일구성물질(4.2.2 참조)이나 복합구성물질(4.2.3 참조)을 위한 규

칙에 따라 확인되고 명명된다. 부가될 기타 특별한 주요 확인요소는 물질에 따라 달라진다. 기타 주요 확인요소의 예는 스펙트럼 자료, X-선 회절(XRD)에 의해 드러나는 결정 구조, 적외선 흡수 최고점, 팽창 지수, 양이온 치환 능력, 기타 물리적 화학적 특성을 포함한 요소적인 구조 등이다.

광물의 경우, 광물학적 구조 및 결정 구조 등을 확인하기 위해 요소적 구조의 결과를 스펙트럼 자료와 결합하는 것은 중요한 일이다. 그리고 이러한 결합은 (X-선 회절에 의해 드러나는) 결정 구조, 형상(shape), 경도, 팽창 능력, 밀도, 표면적(surface area)과 같은 특유의 물리적 화학적 특성에 의해 확인된다.

부가적인 주요 확인요소의 예는 특수한 광물에 제공될 수 있다. 광물은 완전한 확인이 가능한 그 자체만의 특징적인 물리적 화학적 특성을 가지기 때문이다(예. 저경도(활석), 팽창 능력(벤토나이트), 모양(규조암), 고밀도(중정석), 표면적(질소 흡착)).

화학적 조성이 정의된 물질을 설명하는 방법 및 IUCLID 5의 기타 주요 확인요소에 대한 안내는 8.2.3에서 제공하고 있다.

#### 4.2.3.3 분석적 정보

단일구성물질(4.2.1 참조)이나 복합구성물질(4.2.2 참조)에 대하여 동일한 분석적 정보를 제공해야 한다. 이러한 물질의 확인에 있어 스펙트럼 자료, GC, HPLC 크로마토그램만으로는 충분하지 않고, 기타 분석적 기술에서의 정보가 제공되어야 한다(예. 광물에 대한 X-선 회절, 성분분석 등). 그 기준은 물질의 구조를 확인하기 위한 충분한 정보가 제공되어야만 하는 것이다.

### 4.3 UVCB물질

다음과 같은 이유로 UVCB(Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials)물질들은 그것들의 화학적인 조성에 의해서 충분히 확인될 수 없다.

- 구성성분의 수가 상대적으로 크다.
- 상당 부분의 조성이 알려지지 않았다.
- 조성의 가변성이 상대적으로 크거나 예측하기 어렵다.

결론적으로, UVCB 물질은 물질의 화학적 조성에 대해 알려진 것과 함께 그것들의 확인을 위한 다른 유형의 정보를 필요로 한다. UVCB 물질의 다양한 유형을 위한 주요 확인요소는 물질의 원료(source) 및 사용된 공정과 관련되어 있고, 또한 그것

들이 "기타 주요 확인요소"에 속한다는 것을 표 4.2로부터 알 수 있다(예. "크로마토그래픽 및 기타 지문들(fingerprints)"). 표 4.2에서 제공되는 확인요소의 개수 및 종류는 가변성을 갖는 유형에 대한 실례를 보여준다. 그러나 포괄적인 개관으로 간주되지는 않을 것이다. 예를 들어 복합 반응물이나, 생물학적 기원을 가진 물질의 화학적 조성이 알려져 있는 경우, 물질의 확인은 단일 또는 복합구성물질의 접근을 통해 이루어져야 한다. UVCB로서 정의한 물질의 결론은 원료 및 공정의 중대한 변화가 재등록될 필요가 있는 다른 물질을 발생시킬 수 있다는 것이다. 만약 반응 혼합물이 "복합구성물질"로 확인된다면, 그 물질은 최종 물질의 조성이 명시된 범위 내에 존재하는 한 다른 원료 및 다른 공정에 의해 유도될 것이다. 따라서 새로운 등록이 요구되지 않을 것이다.

UVCB 물질에 관한 포괄적인 안내는 4.3.1에서 찾아볼 수 있고, UVCB 물질의 특수한 형태로서 탄소-사슬 길에 가변성을 가지고 있는 물질, 오일 및 원료와 유사한 오일에서 얻을 수 있는 물질, 효소에 대한 특정한 안내는 4.3.2에서 찾아볼 수 있다.

#### 4.3.1 UVCB 물질들에 대한 일반 지침

본 지침서의 이번 장은 UVCB 물질을 확인하기 위해 REACH 부록 VI(2항목)의 물질확인 요소 외에 몇몇의 주요 확인요소를 사용하는 방법에 관한 일반적인 지침을 제공한다.

##### 4.3.1.1 화학적 조성에 관한 정보

UVCB 물질은 모든 구성성분을 확인할 수 없기 때문에 구성성분의 IUPAC-명칭으로만 기술될 수 없거나 혹은 그것들은 일반적으로 명시될 수도 있지만 구조에 가변성에 기인한 특이성은 부족하다. "주요 구성성분" 및 "불순물"이라는 용어는 구성성분과 불순물 사이에 구별이 부족하기 때문에, UVCB 물질과 관련된 것으로 간주되면 안 된다.

그러나 화학적 조성 및 구성성분의 확인은 여전히 알려진 것처럼 제공되어야 한다. 조성에 대한 설명은 종종 더 일반적인 방법으로 제공된다(예. "선형 지방산 C8-C16"이나 "알코올 C10-C14 및 4-10 에톡실레이트 기(units)를 포함한 알코올 에톡실레이트"). 게다가 화학적 조성에 관한 정보는 명확히 알려진 참조 샘플이나 기준의 기초로 제공될 수 있고 많은 경우에 인덱스와 기존 코드도 부가적으로 사용될 수 있다. 기타 화학적 조성에 대한 일반 정보는 소위 지문들(예. 크로마토그래픽이나 독특한 피크(peak) 패턴을 보여주는 분광 이미지)로 구성될 수 있다.

UVCB 물질에서 10%이상의 농도로 존재하는 모든 알려진 구성물질은 적어도

IUPAC 영문 명칭과 되도록이면 CAS 번호에 의해 명시되어야 한다. 알려진 조성 물질의 전형적인 농도 및 농도 범위 역시 제공되어야 한다. 물질의 분류 및/또는 PBT평가와 관련된 구성성분들은 그것들의 농도와는 별개로 동일 확인요소들에 의해 항상 확인되어야 한다. 알려지지 않은 구성 물질은 가능하다면 화학적 특성의 일반적인 설명에 의해 확인된다. 첨가제는 명확히 정의된 물질을 위해 설명된 유사한 방식으로 완전하게 명시되어야 한다.

#### 4.3.1.2 주요 확인요소들 - 명칭, 원료, 공정

화학적 조성만으로는 물질을 확인하기에 충분하지 않기 때문에, UVCB물질은 물질의 명칭, 기원 및 원료, 공정 절차 중 가장 관련성 있는 절차에 의해 확인될 것이다. 기타 물질의 특성들 또한 관련 있는 일반적 확인요소(예. 끓는점)나, 물질의 특수성에 대한 결정적 확인요소(예. 효소의 촉매 작용)로서 중요한 확인요소가 될 수 있다.

#### 1. 명명 규칙

일반적으로, UVCB 물질의 명명은 일반적인 형식(즉, 먼저 원료를 살펴보고, 그 다음에 공정을 고려한다)을 지닌 원료(source) 및 공정의 조합이다.

- 생물학적 원료는 종의 명칭에 의해 확인된다.
- 비생물학적 원료는 starting materials에 의해 확인된다.
- 새로운 분자의 합성이 정제 절차의 유형(예. 추출, 분류, 농축)이나 잔류물에 포함된다면, 공정은 화학적 반응의 유형에 따라 확인된다.

예	
EC 번호	EC 명칭
296-358-2	라벤더(lavender), 라반둘라 하이브리다(lavandula hybrida), 추출물, 아세틸화
307-507-9	라벤더(lavender), 라반둘라 라티폴리아(lavandula latifolia), 추출물, 황화, 팔라듐 염(palladium salt)

반응물의 경우에 다른 형식들이 EC목록에서 사용되어 왔다. 예를 들면,

- EINECS: 주요 starting material, 기타 starting material의 반응물
- ELINCS: starting material의 반응물

예	
EC 번호	EC 명칭
232-341-8	Nitrous acid, 4-methyl-1,3-benzenediamine hydrochloride를 포함한 반응물
263-151-3	Fatty acids, coco, diethylenetriamine을 포함한 반응물
400-160-5	tall-oil fatty acids, diethanolamine와 boric acid의 반응물
428-190-4	{2,4-diamino-6-[2-(2-methyl-1H-imidazol-1-일)ethyl]-1,3,5-triazine과 cyanuric}의 반응물

이 TGD에서 반응물의 명칭에 대한 일반적인 형식은 "[starting materials 명칭]의 반응생성물"이다. 원칙적으로, 명칭은 IUPAC 명명 규칙에 따라 영문으로 제공되어야 한다. 기타 국제적으로 인정된 명칭 역시 추가로 제공될 수 있다. 일반적인 방법(예. 에스테르화, 염 생성)으로 설명되는 반응의 특수한 형태를 가진 명칭에 있어서 "반응(reaction)"이라는 용어를 대신 사용할 것을 권장한다(아래에서 기술되고 있는 네 개의 일정한 UVCB 하위 유형의 안내 참조).

## 2. 원료(Source)

원료는 두 개의 그룹으로 나눌 수 있다.

### 2.1 생물학적 특성을 가진 원료

생물학적 기원을 가지고 있는 물질은 속(屬), 종(種), 과(科)에 의해 정의된다. 예를 들어, *Pinus cembra*, Pinaceae는 Pinus (속), cembra (종), Pinaceae (과)를 의미하고, 만약 관련이 있다면 혈통적 또는 유전적 형태를 의미하기도 한다. 또한 승인이 이루어진다면 꿀수, 체장 또는 줄기, 씨앗, 뿌리와 같은 물질의 추출을 위해 사용되는 생물(유기체)의 조직 및 일부가 제공되어야 한다.

실례	
EC 번호	EC 명칭
283-294-5	산화된 로그우드 ( <i>Haematoxylon campechianum</i> ) 추출물
	<b>EC 설명</b> 이 물질은 산화 컬러 인덱스 규정 No C.I. 75290에 따라 컬러 인덱스에서 확인할 수 있다.
296-350-9	<i>Arnica mexicana</i> 추출물
	<b>EC 설명</b> <i>Arnica mexicana</i> , 국화과(compositae)로부터 얻어진 추출물과 그것들의 물리적으로 변경된 유도체 (팅크제, 응고물, 자연방향제(absolutes), 정유 (精油 essential oils), 올레오레진, 테르펜, 무-테르펜 분류물(terpene-free fractions), 유출물(溜出物), 잔류물 등

## 2.2 화학적, 광물성 원료

화학 반응의 반응생성물에서, 원료는 IUPAC 명칭(영어)으로 기술되어야 한다. 광물성 원료는 일반적인 용어(예: 인광석(phosphate ores), 보크사이트, 고령토, 광물성 가스, 석탄, 이탄)로 기술되어야 한다.

## 3. 공정

새로운 분자의 합성이 관련된다면, 공정은 화학 반응의 유형에 의해 확인될 수 있다. 또는 추출(extraction), 분류(fractioning), 농축(concentration)과 같은 정제 절차의 유형으로, 혹은 정제의 잔류물로 확인될 수 있다.

화학적 유도체(chemical derivate)와 같은 일부 물질의 경우, 그 공정은 정제 및 합성 결합으로 설명될 것이다.

### - 합성(synthesis)

특정한 화학적 반응 또는 생화학적 반응은 물질을 생성시키는 원료 사이에서 발생한다. 그 예로 protease나 lipase 등에 의한 효소분열, Grignard-반응(Grignard-reaction), sulfonation을 들 수 있다. 또한 많은 유도 과정이 이 유형에 속한다.

새롭게 합성된 물질의 경우 화학적 조성이 제공될 수 없기 때문에, 원료는 반응(예. 화학적 반응 형태)의 상세한 기술서와 함께 주요 확인요소가 된다. 화학적 반응 형태는 물질에 존재할 것이라 예상되는 분자를 나타낸다. 최종적인 화학적 반응 형태에는 몇 가지 유형들이 있는데, 가수 분해(hydrolysis), 에스테르화(esterification), 알킬치환(alkylation), 염소화(chlorination) 등이 이에 속한다. 이것은 오직 생성 가능한 물질에 대해 일반적인 정보만을 제공하기 때문에, 물질에 대한 완전한 설명 및 확인을 위해서는 대부분의 경우 크로마토그래픽 지문(chromatographic fingerprint)이 필수적인 절차가 될 것이다.

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

### -정제(refinement)

정제를 통해 구성성분의 화학적 ID는 변경되지 않지만, 구성성분들의 농도는 변경(예. 식물 조직에 대한 냉공정(cold processing)은 알코올로 인한 추출에 의한다)되

는 곳에서 정제는 자연적 혹은 광물성 기원의 물질에 많은 방법들이 적용될 수 있다.

정제는 추출과 같은 공정으로 상세히 정의될 수 있다. 물질의 확인은 공정의 유형으로 알 수 있다.

- 정제 또는 분류와 같은 물리적 방법에 의해 유도된 물질의 경우, 분류의 경계 범위(cut-off range) 및 한계 요소가 지정되어야 할 것 이다(예. 분자 크기, 사슬 길이, 끓는 점, 변동 범위 등).
- 야금 공정의 생성물, 원심 분리된 침전물, 필터 잔류물 등 농축에 의해 유도된 물질의 경우, 농축 절차는 원료와 비교하여 발생 물질의 일반적인 구성과 함께 기술될 수 있다.

예	
EC 번호	EC 명칭
408-250-6	Organotungsten compound (reaction products of tungsten hexachloride with 2-methylpropan-2-ol, nonylphenol and pentane-2, 4-dione)

- 일정한 반응의 잔류물(예. slag, tars, heavy ends)에서, 그 공정은 결과물질의 일반적인 조직과 함께 설명될 것이다.

예	
EC 번호	EC 명칭
283-659-9	주석, 용해 잔류물
	<b>EC 설명</b> 주석 및 주석 합금의 사용 및 생산에서 발생하는 물질은 주요 원료와 부차적인 원료에서 얻을 수 있고, 재생된 플랜트 중간체(recycled plant intermediates)를 포함하고 있다. 주로 주석 화합물로 이루어져 있고, 기타 잔류 비철금속 및 비철금속의 화합물을 포함하고 있다.
293-693-6	Soybean meal, protein extrn. Residue
	<b>EC 설명</b> 주로 탄수화물을 포함하고 있는 부산물은 탈지대두(defatted soybean)의 에탄올 추출에 의해 생성된다.

- 추출물, 추출방법, 추출을 위해 사용되는 용제, 기타 관련 조건(예. 온도/온도 범위)은 제공될 것이다.
- 결합 공정에서, 각각의 공정 절차는 원료 정보를 추가하여 (일반적인 방법으로) 기술될 것이다. 이러한 결합은 화학적 유도에 있어 특수한 관련성을 가진다.

예들:

- 먼저 식물이 추출된다. 그 추출물은 증류되고, 식물 추출물의 증류된 일부는 화학적 유도를 위해 사용된다. 발생 물질은 더욱 정제될 것이다. 정제된 생성물은 생성물의 화학적 조성에 의해 명확히 정의될 것이고, 그 물질을 UVCB 물질로 인정할 필요는 없다. 만약 그 생성물이 UVCB 물질로 간주된다면, 결합 공정은 "식물 추출물의 증류된 일부에 대해 정제된 화학적 유도체"로 설명될 수 있다.

추출물의 추가 공정이 물리적인 유도체만을 포함한다면, 그 조성은 변하지만 새로운 분자들의 의도적인 합성은 없을 것이다. 그럼에도 불구하고 조성의 변화는 다른 물질(예: 식물 추출물의 증류생성물 혹은 침전물)이 생성된다.

- 석유 제품을 생산하는 경우에, 결합을 위해 화학적 유도 및 분류를 종종 사용한다. 예를 들어, 크래킹(cracking)에 의한 오일 증류는 원료 및 새로운 분자의 분류물을 발생시킨다. 그래서 그러한 경우에는 공정의 양 쪽 유형을 취하거나, 증류물을 크래킹의 원료로 기술하여야 한다. 특히, 이것은 종종 공정의 결합을 발생시키는 석유 유도체에 적용한다. 그러나 분리 특정 시스템은 석유 물질의 확인을 위해 사용될 수 있다(4.3.2.2 참조).

추출물의 화학적 유도체는 원인 추출물로서 동일한 구성성분을 포함하지 않을 것이므로, 다른 물질로 간주될 것이다. 이 법칙은 명칭 및 설명에 의한 확인이 초기 EINECS의 명칭 및 설명과 어긋난다는 결론을 가진다. EINECS 목록을 작성할 당시에는 다른 공정으로 추출한 추출물, 다른 용제, 심지어 물리적, 화학적 유도체까지 종종 하나의 단일 항목으로 다루었다. 만일 위해성이 다르지 않고 같은 분류로 인가하였다면, 이러한 물질은 REACH 하에서 단일 물질로 등록되었을 것이다. 그러나 하나의 EINECS 번호에서 몇몇의 다른 물질들을 확인하기 위한 동기가 될 수 있을 것이다(예. EINECS의 물질에 대한 방대한 기술).

#### 4. 기타 물질확인 요소

화학적 명칭, 원료 및 공정의 상세 기술서 이외에 UVCB 물질은 REACH 부록 VI 2 항목에서 요구하는 기타 관련 정보를 포함해야 한다.

특히 UVCB 물질에서 특수한 유형의 경우, 기타 확인요소는 관련성이 있을 수 있다. 추가적인 기타 확인요소는 다음과 같다.

- 화학적 조성에 대한 일반적인 설명
- 크로마토그래픽 지문 또는 기타 지문 유형
- 참조 물질 (예. ISO)
- 물리적-화학적 요소 (예. 끓는점)
- 컬러 인덱스 번호
- AISE 번호

원료 및 공정의 다양한 유형을 위한 규칙 및 기준, 명칭 사용 방법, UVCB 물질의 확인을 위한 원료 및 공정 정보에 관한 안내는 아래에서 포함하고 있다. 다음 단락에서, 생물학적, 화학적, 광물성 원료 및 공정(합성 또는 정제)의 결합으로 UVCB 물질의 네 가지 하위 유형을 기술하고 있다.

IUCLID 5에서 UVCB 물질을 기술하는 방법에 대한 안내는 본 지침서의 8.2.4를 참조

#### **UVCB 하위 유형 1, 생물학적 원료(source) 및 합성 공정의 경우**

생물학적 특질을 가진 물질은 (생)화학적 공정에서 변경되어 원료에 존재하지 않는 구성성분을 생성시킬 수 있다(예. 식물 추출물의 화학적 유도체, 추출물의 효소 처리 생성물). 예를 들어, 단백질은 프로테아제로 가수 분해되어 올리고펩티드를 생성시킬 수 있고, 또한 나무에서 추출되는 셀룰로오스는 카르복시화되어 카르복시 메틸 셀룰로오스(CMC)를 생성시킬 수 있다.

발효물(발효 생성물) 또한 이 하위 유형에 속한다. 예를 들어, 발효 찌꺼기는 당과 비교하여 많은 다른 구성성분을 포함하고 있는 당 발효물이다. 발효물이 더욱 정제될 때, 그 물질들은 결국 화학적 조성에 따라 완전하게 확인될 수 있을 것이고, UVCB 물질로 인정되어서는 안 된다.

효소는 생물학적 기원의 원료에서 추출 및 정제에 의하여 유도될 수 있는 물질의 특수한 무리이다. 비록 원료 및 공정이 상술될 수 있다고 하더라도, 이것은 효소에 관한 일정한 정보를 만들어내지 못한다. 이러한 물질의 경우, 분류, 명칭, 확인을 위해 매우 특수한 시스템을 사용할 수 있다(4.3.2.3 참조).

물질의 확인을 위한 최종 공정 절차가 진행될 것이고, 또한 물질의 확인과 관련된 다른 공정 절차도 진행될 것이다.

화학적 공정에 대한 설명은 관련 절차 상황에 대한 설명과 함께 공정 유형에 관한 일반적인 설명이 될 것이다(에스테르화, 알칼리 가수 분해, 알킬화, 염소화, 치환 등).

생화학적 공정에 대한 설명은 반응을 촉진시키는 효소의 명칭에 대한 설명과 함께 일반적인 촉매 반응에 관한 설명이 될 것이다.

발효 작용, 종의 (조직) 배양, 효소류에 의해 생산된 물질의 경우에 발효의 유형 및 일반적인 조건(일회 또는 연속, 호기성, 혐기성, 산소 결핍성, 온도, pH 등)이 제공되어야 한다. 또한 효소물(효소 생성물)을 분리시키기 위한 추가 공정절차에 대한 설명이 필요하다(예. 원심분리, 침전, 추출 등). 만약 이러한 물질들이 더욱 정제된

다면, 이것은 분류물, 농축물, 잔류물을 생산할 것이다. 이러한 추가 공정에 의한 물질들은 추가 공정절차의 부가적인 상세 기술서로 확인될 수 있다.

### UVCB 하위 유형 2, 화학적, 광물성 원료(source) 및 합성 공정의 경우

새로운 분자를 합성하는 공정을 통해 유도된 화학적 또는 광물성 원료에서 얻을 수 있는 UVCB 물질은 "반응물(reaction products)"이다. 화학적 반응물의 예로는 에스테르화물, 알킬화물, 염소화물이 있다. 분리된 효소의 적용에 의한 생화학적 반응은 화학적 반응의 특수한 유형이다. 그러나 완전한 미생물(complete micro-organisms)의 사용에 있어 합성의 복잡한 생화학적 방법(complex biochemical pathway)을 적용한다면, 발생 물질을 효소물로 간주하는 것이 좋을 것이고, 또한 원료에 의한 것 보다 오히려 발효공정 및 효소류에 의해 확인하는 것이 더 나은 방법이다(UVCB 하위 유형 4 참조).

모든 반응물이 자동적으로 UVCB로 기술되어야 하는 것은 아니다. 만약 어떠한 반응물이 화학적 조성(일부 가변성 포함)에 의해 충분히 정의될 수 있다면, 복합구성 물질(4.2.2 참조)로서의 확인이 더 선호되어야 한다. 반응물의 조적이 불충분하게 알려 있거나 그 예측이 어려운 경우에만, 물질은 UVCB 물질("반응물")로 인정되어야 한다. 반응물의 확인은 반응을 위한 원료와 물질이 생성되는 (생)화학적 반응 절차에 근거한다.

예		
EC 번호	EINECS 명칭	CAS-번호
294-006-2	Nonanedioic acid, reaction products with 2-amino-2methyl-1propanoll	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyde, reaction products with diethylene glycol and phenol	91673-32-4

반응물에 있어 주요 확인요소는 생산 공정에 대한 설명이다. 물질을 확인하기 위해 최종 공정 및 가장 관련성이 높은 공정 절차가 제공될 것이다. 화학적 공정에 대한 설명은 관련 공정 환경에 대한 설명과 함께 공정의 유형(예. 에스테르화, 알칼리 가수 분해, 알킬화, 염소화, 치환 등)에 관한 일반적인 설명이 될 것이다. 생화학적 공정은 반응을 촉진하는 효소의 명칭 및 반응의 유형으로 설명될 것이다.

### UVCB 하위 유형 3, 생물학적 원료 및 정제 공정의 경우

의도적으로 기존의 분자를 생성하는 정제 공정으로 생성된 생물학적 기원을 가진 UVCB 물질은 추출물일 수 있고, 추출물의 분류물이나 농축물일 수 있다. 또한 생물학적 기원을 가진 물질의 정제된 추출물 또는 공정 잔류물일 수도 있다.

추출물이 추가 공정을 거치자마자, 물질은 더 이상 추출물로 인정되지 않지만, 다른 UVCB 하위 유형에 속하는 또 다른 물질이 된다(예. 추출물의 분류물 또는 잔류물). 이러한 물질들은 추가 공정 요소를 통해 상술될 것이다. 만약, 추출물이 화학적 반

음 또는 생화학적 반응에서 변경되어 새로운 분자(유도체)를 생성한다면, 물질을 정확히 정의하기 위한 물질의 확인은 UVCB 하위 유형 2나 4.2의 안내를 통해 해결할 수 있다.

추가 공정을 거친 추출물에 대한 차별화는 새로운 명칭과 설명이 EINECS 목록에 있는 명칭 및 설명과 다를 것이라는 중요성을 가질 것이다. 목록을 작성할 당시에는 그러한 차별화는 존재하지 않았고, 다른 용제와 추가 공정 절차를 거친 추출물의 모든 유형은 단일 항목 안에 포함되었다. UVCB 물질의 이러한 하위 유형에 대한 첫 번째 주요한 확인요소는 물질의 기원이 이루어지는 생물(유기체)의 과, 속, 종이다. 물질의 추출을 위해 사용되는 생물의 조직이나 일부(예. 껍수, 채장, 줄기, 씨앗, 뿌리)는 제공되어야 한다. 미생물학적 기원을 가진 물질에서, 종의 혈통적 유형 및 유전적 형태가 정의될 것이다.

만일 UVCB물질이 다른 종에서 유도된다면, 심지어 화학적 조성이 유사할지라도 다른 물질로 간주될 것이다.

예	
EC 번호	EINECS 명칭
290-977-1	Oxidised logwood(Haematoxylon campechianum) extract
	<b>EC 설명</b> 이 물질은 산화 컬러 인덱스 규정 No C.I. 75290에 따라 컬러 인덱스에서 확인할 수 있다.
282-014-9	Pancreatic extracts, deproteinated

두 번째 주요한 확인요소는 물질의 공정(예. 추출 공정, 분류 공정, 정제 공정, 농축 공정, 잔류물의 구조에 영향을 미치는 공정)이다. 그러므로 추출물의 정제는 다른 공정에 의한다. 예를 들어 다른 용제 및 다른 정제 절차를 사용하는 것은 다른 물질을 생성할 것이다.

정제를 위해 더 많은 절차를 거칠수록, 물질의 화학적 조성에 의해 물질을 정의할 수 있는 가능성이 증가한다. 그러한 경우에, 다른 원료 종(source species) 또는 다른 공정으로 변경한다고 해서 자동적으로 다른 물질이 되는 것은 아니다.

생물학적 기원을 가진 물질의 주요 확인요소는 관련 절차에 관한 설명이다. 추출물의 경우, 추출 공정은 물질의 확인이 가능할 정도로 상세히 설명될 것이고, 적어도 사용된 용제는 명시되어야 할 것이다.

추가 공정 절차가 물질의 생산을 위해 사용될 때, 분류나 농축과 같은 관련 공정 절차의 결합을 설명하게 될 것이다(예. 경계범위(cut-off range)를 포함하는 추출 및 분류의 결합).

#### UVCB 하위 유형 4, 화학적, 광물성 원료 및 정제 공정의 경우

비생물학적 기원을 가진 물질(예. 광물, 광석, 석탄, 천연가스, 원유, 기타 화학 산업을 위한 원료 또는 원료로부터 발생한 물질, 그리고 의도적인 화학적 반응 없이 공정으로부터 발생하는 물질)은 공정의 (정제된) 분류물, 농축물, 잔류물일 수 있다.

석탄과 원유는 증류 공정이나 기화 공정에서 사용되어 매우 다양한 물질(예. 석유 물질, 연료 가스 등과 타르와 슬래그 같은 잔류물)을 생성한다. 흔히 증류되거나 기타 방법으로 분류된 생성물은 곧 화학적 반응을 포함한 추가 공정을 거친다. 그러한 경우, 물질의 확인에 있어 공정이 원료보다 더 적합하기 때문에 UVCB 하위 유형 2에서 제공한 안내에 따를 것이다.

석유 물질의 경우, 특수한 확인 시스템을 사용한다(4.3.2.2 참조). 그 시스템에 의해 확인되는 물질은 분류물 및 화학적 반응물을 포함한다.

UVCB 하위 유형 4에서 기타 물질들은 직접적으로 사용되거나 추출 후에 사용되는 금속의 적당량을 포함하고 있는 광석으로, 다양한 야금 공정이 광석에 적용된다(용해로부터 발생한 mattes, 슬래그와 같은 잔류물).

벤토나이트 또는 칼슘 탄산염과 같은 광물은 산 용해, 화학적 침전 공정을 거치거나, 이온 교환 칼럼(ion-exchange columns)에서 공정이 이루어질 수 있다. 화학적 조성이 완전히 정의된 때, 광물은 4.2의 적절한 안내에 따라 확인되어야 한다. 만약 광물이 오직 기계적인 공정(예. 그라인딩(grinding), 시빙(sieving), 원심 분리, 부유 선광(flotation) 등)만을 거친다면, 생성물은 여전히 광물과 동일한 것으로 간주된다. *제조공정을 통해 생산된 광물들은 조성이 유사하고 독성프로필이 같은 경우 -확인 목적으로<sup>13)</sup>- 자연적으로 발생한 광물과 같은 것으로 간주될 수 있다.*

비생물학적 기원을 가진 물질의 주요 확인요소는 관련 공정 절차에 대한 설명이다.

분류 공정은 이전의 관련 공정 절차에 대한 설명과 함께 분리된 분류물에 대한 한계 요소 및 경계 범위로 설명될 것이다.

13) 자연발생 및 화학적으로 생성된 광물들의 확인을 위한 접근방법이 반드시 법적인 요건들(예: 등록면제)이 동일하다는 것을 의미하는 것은 아니다.

농축 절차에서, 공정의 유형(예. 증발 농축, 침전 등)은 제공될 것이고, 주요 구성성분의 초기 농축과 최종 농축 사이의 비율 역시 이전 공정 절차에 대한 정보와 함께 제공될 것이다.

비생물학적 기원을 가진 잔류물에서 주요 확인요소는 잔류물을 생성시킨 공정에 대한 설명이다. 이 공정은 잔류물을 생성시키는 일부 물리적인 반응일 수 있다(예. 정제, 분류, 농축 공정).

#### 4.3.1.3 분석적 정보

분광자료(spectral data)가 UVCB 물질의 구조에 관한 정보를 주는 경우에, 이 분석적 정보가 제공된다. 몇몇의 분광기 이용 조사 기법은 분광을 이용한다(UV/VIS, 적외선, 핵자기공명, 질량분광). 기법들과 이러한 기법들을 사용하는 방법 및 통찰력은 계속적인 변화를 있을 것이다. 그러므로 적절한 분광자료를 제공하는 것은 등록자의 책임이다.

지문(fingerprint)처럼 사용할 수 있는 크로마토그램은 물질의 구조에 대한 특징을 밝히기 위해 제공될 것이다. 또한, 만일 적용할 수 있다면, 기타 유효 구성성분 분리 기술(valid constituent separation techniques)이 사용될 것이다.

#### 4.3.2 UVCB 물질의 특정 유형

본 섹션은 UVCB 물질의 특정한 그룹에 관한 안내를 제공한다. 탄소-사슬 길이에 변동이 있는 물질(4.3.2.1), 오일 또는 원료와 유사한 오일에서 얻은 물질(4.3.2.2), 효소(4.3.2.3).

##### 4.3.2.1 탄소-사슬(carbon-chain) 길이에 변동이 있는 물질

UVCB 물질에서 이 그룹은 탄소-사슬 길이에 변동이 있는 긴 사슬(long-chain) 알킬 물질로 다룬다(예. 파라핀과 올레핀). 이 물질들은 자연산 지방 또는 오일로부터 얻을 수 있거나 합성으로 생성된다. 자연산 지방은 식물 또는 동물에서 생성된다. 식물에서 얻을 수 있는 긴 탄소-사슬 물질은 일반적으로 짝수의 사슬 길이를 가진다. 반면에 동물을 원료로 하여 얻을 수 있는 긴 탄소-사슬 물질은 (일부) 홀수의 사슬 길이를 가진다. 합성으로 생성된 긴 탄소-사슬 물질은 짝수와 홀수를 모두 포함하여 탄소 사슬의 전체적인 범위에서 구성된다.

#### 확인요소 및 명명 규칙

그룹은 개별적인 구성성분들이 일반적인 구조적 특징을 갖는 물질들로 구성되어 있다. : 하나 이상의 긴 사슬 알킬 그룹이 부착된 기능적 그룹(functional groups). 구성

성분들은 다음의 알킬-사슬 그룹이 가지는 특징의 하나 이상에 대해 서로가 다르다.

- 탄소 사슬의 길이(탄소 수)
- 포화
- 구조(선형 또는 가지형)
- 기능적 그룹의 포지션

구성성분의 화학적 구분은 다음 세 가지의 Descriptors를 사용함으로써 충분히 설명될 수 있고, 체계적으로 명명될 수 있다.

- Alkyl그룹의 탄소-사슬 길이에 존재하는 탄소 원자의 수를 나타내는 Alkyl Descriptor.
- 아민, 암모늄, 카르복산과 같은 물질의 기능그룹을 나타내는 기능성 Descriptor .
- 염 Descriptor, 나트륨(Na<sup>+</sup>), 탄산염(CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>), 염화물(Cl<sup>-</sup>)과 같은 일부 염의 양이온과 음이온.

#### Alkyl Descriptor

- 일반적으로 Alkyl Descriptor C<sub>x</sub>-y는 x에서 y까지 모든 사슬 길이를 구성하는 포화 선형 Alkyl-사슬로 간주된다(예. C<sub>8-12</sub>는 C<sub>8</sub>, C<sub>9</sub>, C<sub>10</sub>, C<sub>11</sub>, C<sub>12</sub>와 일치).
- Alkyl Descriptor가 오직 짝수 혹은 홀수의 수로 된 Alkyl 사슬을 의미한다면 표시되어야 한다(예. C<sub>8-12</sub> (짝수)).
- Alkyl Descriptor가 가지형 Alkyl 사슬을 의미한다면 표시되어야 한다(예. C<sub>8-12</sub> (가지형) or C<sub>8-12</sub> (선형 및 가지형)).
- Alkyl Descriptor가 불포화 Alkyl 사슬을 의미한다면 표시되어야 한다(예. C<sub>12-22</sub> (C<sub>18</sub> 불포화)).
- 좁은 Alkyl 사슬 길이 배열은 더 넓은 배열과 반대인 배열을 포함하지 않는다(예. C<sub>10-14</sub> 는 C<sub>8-18</sub>와 일치하지 않음).
- Alkyl Descriptor는 Alkyl 사슬의 원료로 간주할 수 있다(예. 코코야자, 수지(獸脂)). 그러나 탄소-사슬 길이 배열은 원료의 배열과 일치해야 한다.

위에서 설명한 규칙은 탄소 사슬 길이에 변동을 가진 물질을 설명하기 위해 사용되어야 한다. 그 규칙은 정확한 화학적 조성에 의해 확인할 수 있는 명확하게 정의된 질에는 적합하지 않다.

Alkyl Descriptor, 기능성 Descriptor, 염 Descriptor에 관한 정보는 UVCB 물질의 이러한 특수 유형에 대한 명칭에 근거를 두고 있다. 덧붙여, 원료 및 공정에 관한

정보는 물질을 더 정확히 확인하는데 있어 유용하게 작용할 것이다

실례		
Descriptor 명칭		명칭
Alkyl Descriptor	alkyl chain-lengths C <sub>10-18</sub>	fatty acids(C <sub>10-18</sub> ) cadmium salt
Functionality Descriptor	fatty acid (carboxylic acid)	
Salt Descriptor	cadmium salt	
Alkyl Descriptor	di- C <sub>10-18</sub> -alkyl-dimethyl	di-C <sub>10-18</sub> -Alkyl-dimethylammonium chloride
Functionality Descriptor	ammonium	
Salt Descriptor	chloride	
Alkyl Descriptor	trimethyl tallow-alkyl	trimethyl-tallowalkyl-ammonium chloride
Functionality Descriptor	ammonium	
Salt Descriptor	chloride	

#### 4.3.2.2 석유 또는 석유와 같은 원료에서 얻을 수 있는 물질

석유 또는 석유와 같은 원료(예. 석탄)에서 얻을 수 있는 물질은 매우 복잡하고 다양하며, 또한 부분적으로 정의되지 않은 조직을 가진 물질이다. 이 장에서 석유 물질은 UVCB 물질의 특정한 유형을 확인하는 방법을 논증하기 위해 사용된다. 그러나 석탄 등의 원료와 유사한 오일로부터 얻을 수 있는 기타 물질에도 동일한 접근법이 적용될 수 있다.

석유 정제 산업에서 사용되는 재료는 원유이거나 혹은 하나 이상의 공정을 통해 얻을 수 있는 기타 특정한 정제 흐름(refinery stream)에서 얻어진 것일 수 있다. 최종 생산물의 조직은 생산에서 사용된 원유(원유의 구성 조직은 원산지에 따라 다르기 때문이다) 및 차후 정제 공정에 달려있다. 그러므로 석유 물질의 조직에는 자연적이고 공정-독립적인 가변성이 존재한다[라스무센 외 1999].

#### 1. 명명 규칙

석유 물질의 확인을 위해 확립된 명명 체계에 따라 명칭을 부여할 것을 권장한다 [US EPA에 의해 사용됨]. 이 명칭은 일반적으로 정제 공정, 흐름원(stream source), 일반적인 조직 및 특징을 포함한다. 어떠한 물질이 4 ~ 6개로 구성된 응축된 링(condensed ring) 방향족(芳香族) hydrocarbon의 5 w/w-% 이상을 포함한다면, 이 정보는 그 설명 내용에 포함될 것이다. EINECS 번호를 부여 받은 석유 물질의 경우, EC목록에서 제공된 명칭을 사용할 수 있다.

#### 2. 확인요소

석유 물질의 확인을 위한 조건 및 정의는 일반적으로 흐름원(stream source), 정제 공정, 일반적 조직, 탄소 수, 끓는점 및 기타 적절한 물리적 특성, 주된 hydrocarbon 유형을 포함한다[US EPA].

REACH 부록 VI 2항목에서 확인요소를 제공해야 한다. 석유 물질은 조직에 관한 상세 기술서보다 오히려 공정에 관한 상세 기술서를 근거로 생산된다는 점이 인정되고 있다. 그러므로 명칭, 탄소-사슬 길이 범위, 끓는점, 점도, 한계값(cut-off values), 기타 물리적 속성과 같은 특징들은 가능한 명확하게 석유 물질을 확인하는데 있어 조직에 관한 정보보다 일반적으로 더 유용하다.

비록 화학적 구성이 UVCB물질을 위한 주요 확인요소가 아닐지라도 알려진 주요 구성성분( $\geq 10\%$ )이 제공될 것이며 그 구성은 일반적인 조건, 즉 분자 무게범위, 알파벳 및 방향족, 수소화합 정도와 기타 필수 정보로 설명되어야 할 것이다. 더구나 유해성 분류에 영향을 미치는 더 낮은 농도의 다른 구성성분은 명칭과 전형적인 농축에 의해 확인될 수 있을 것이다.

#### 4.3.2.3 효소(enzymes)

효소는 대부분 미생물의 발효에 의해서 생산되지만, 때로는 식물이나 동물원에 의해 만들어진다. 발효 또는 추출 그리고 그 이후의 정제단계들로부터 얻어지는 효소 농축액은 물 이외에도 활성효소단백질과 발효로부터의 잔류물을 구성하는 기타 성분들(예: 단백질(proteins), 펩티드(peptides), 아미노산(amino acid), 탄수화물(carbohydrate), 지질(lipids), 무기염(inorganic salts)을 함유하고 있다.

효소 단백질의 안정성에 영향을 주거나 그 조성을 변화시키지 않고 분리될 수 있는 물을 제외하고 발효나 추출공정에서 얻어진 효소 단백질과 기타 성분들은 확인용도의 물질로 간주되어야 한다.

효소 물질은 보통 10-80%(w/w)의 효소 단백질을 포함한다. 그 밖의 다른 성분들의 비율은 다양하며, 사용된 생산 미생물, 발효 배양기, 발효 공정의 조작변수, 적용된 정제과정에 따라 달라진다. 그러나 이들 성분의 조성은 아래의 표에 나타난 범위 내에 있는 것이 일반적이다.

활성효소단백질	10-80%
기타 단백질 +펩티드와 아미노산	5-55%
탄수화물	3-40%
지질	0-5%
무기염	1-45%
총계	100%

효소물질은 가변성과 부분적으로 알려지지 않은 조성으로 인해 “UVCB물질”로 간주되어야 한다. 효소단백질은 UVCB물질의 구성성분으로 간주되어야만 한다. 고도로 정제된 효소는 명확하게 정의된 물질(복합구성 또는 단일구성 물질)로 취급될

수도 있으며, 그에 따라 적절히 확인되어야 한다.

EINECS에서 효소의 주요 확인요소는 촉매활성이다. 효소는 추가적 상세사항 없이 일반 기입으로 목록에 오르거나 원료 미생물이나 기질을 나타내는 특정 기입으로 목록에 오른다.

실례		
EINECS에서 효소는 상세한 기술서 없이 특정한 항목을 포함한 일반 항목으로 목록에 작성되어 있다.		
EC 번호	EINECS 명칭	CAS 번호
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Proteinase, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Elastase(돼지 채장)	39445-21-1
262-402-4	Mannanase	60748-69-8

EU집행위원회가 위탁한 효소들에 대한 연구 [UBA, 2000]은 효소 명명을 위한 국제적인 체계인 IUBMB(International Union of Biochemistry and Molecular Biology; [www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/](http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/))에 따라 효소들을 확인할 것을 제안한다.

본 지침서에서 이 접근법을 채용하고 있으며, 이 접근법은 EINECS에 비하여 더 체계적이고, 상세하며 포괄적인 효소들의 확인을 가능하게 한다.

### 1. 명명 규칙

효소들은 IUBMB명명 규칙 [<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.htm>]에 따라 명명된다.

IUBMB분류 시스템은 각 효소 타입과 촉매기능(예:  $\alpha$ -amylase는 3.2.1.1)<sup>14)</sup>을 위해 네 자리의 고유번호를 제공한다. 각각의 번호는 아미노산 서열과 출처가 서로 다른 효소로 구성되어 있지만 효소의 기능성은 동일하다. IUBMB명칭 목록의 명칭과 번호를 물질확인에 사용해야 한다.

IUBMB명칭 목록은 효소를 6개의 주요 그룹으로 분류한다.

1. 산화환원효소(Oxidoreductases)
2. 전이효소(Transferases)
3. 가수분해효소(Hydrolase)
4. 분해효소(Lyases)
5. 이성화효소(Isomerases)
6. 결합효소(Ligases)

다음의 예들은 IUBMB명명법에 따른 기입을 보여주기 위해 제공되었다.

14) “EC번호”라는 용어(=Enzyme Commission번호)와 “IUBMB번호”는 종종 동의어로 사용된다. 오해를 피하기 위해서, IUBMB로부터의 네자리 코드번호에 대해 “IUBMB번호”라는 용어를 사용하도록 권고된다.

EC3..4.22.33

**일반명:** (후르츠 부로멜라인)fruit bromelain

**반응:** 펩티드 결합의 특이성이 큰 단백질의 가수분해. Bz-Phe-Val-Arg+ NHMec는 훌륭한 합성기질(synthetic substrate)이지만 Z-Arg-Arg-NHMec에 아무런 작용도 하지 않는다(c.f. stem bromelain).

**기타 명(들):** 쥬스 브로멜라인(juice bromelain); ananase; bromelase; bromelin; extranase; juice bromelain; 파인애플 효소; trumanase; fruit bromelain FA2

**코멘트:** 파인애플 나무인 *Ananas comosus*로부터. chicken cystatin에 의해 거의 억제되지 못함. 소분자 기질(small molecule substrates)에 대해 유사한 작용을 가진 또 하나의 cysteine endopeptidase, pinguinain(이전의 EC3.4.99.18)은 동속 식물인 *Bromelina pinguin*으로부터 얻어지지만 pinguinain는 chicken cystatin의해 억제된다는 점에서 fruit bromelain과 다르다 [4] peptidase과 Cl(papain과). 이전의 EC 3.4.22.5이며 EC3.4.22.4에 포함된다.

다른 데이터베이스에 링크: BRENDA, EXPASY, MEROPS, CAS등록번호: 9001-00-7

**참고자료:** 생략(원문 참조)

IUBMB시스템에 따른 효소분류의 예

Examples for enzyme classification according IUBMB system ( <a href="http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html">http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html</a> )	
<b>Proteases are numbered by the following criteria:</b>	
3.	<b>Hydrolases</b>
3.4	<b>Acting on peptide bonds (peptidases), with subclasses:</b>
3.4.1	$\alpha$ -Amino-Acyl-Peptide Hydrolases (now in EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidyl-Amino-Acid Hydrolases (now in EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptide Hydrolases (now in EC 3.4.13)
3.4.4	Peptidyl Peptide Hydrolases (now reclassified within EC 3.4)
3.4.11	Aminopeptidases
3.4.12	Peptidylamino-Acid Hydrolases or Acylamino-Acid Hydrolases (now reclassified within 3.4)
3.4.13	Dipeptidases
3.4.14	Dipeptidyl-peptidases and tripeptidyl-peptidases
3.4.15	Peptidyl-dipeptidases
3.4.16	Serine-type carboxypeptidases
3.4.17	Metallocoarboxypeptidases
3.4.18	Cysteine-type carboxypeptidases
3.4.19	Omega peptidases
3.4.21	Serine endopeptidases
<b>And further, specific enzymes are identified:</b>	
3.4.21.1	chymotrypsin
3.4.21.2	chymotrypsin C
3.4.21.3	metridin
3.4.21.4	trypsin
3.4.21.5	thrombin
3.4.21.6	coagulation factor Xa
3.4.21.7	plasmin
3.4.21.8	now covered by EC 3.4.21.34 and EC 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidase
3.4.21.10	acrosin
3.4.21.11	now covered by EC 3.4.21.36 and EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-Lytic endopeptidase
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Endopeptidases of unknown catalytic mechanism

IUBMB번호가 추가된 EINECS로부터의 예			
EC번호	EINECS명	CAS번호	IUBMB번호
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisin	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cellulase	9012-54-8	3.2.1.4

## 2. 확인요소(Identifier)

효소 물질들은 포함하고 있는 효소 단백질(IUBMB 명명법)과 발효로부터 기타 성분들에 의해 확인된다. 효소 단백질 외에 각각의 특정 구성성분이 보통 1%이상의 농도로 존재하지는 않는다. 이들의 특정 구성성분의 실체가 알려져 있지 않다면, 그것들은 그룹화 접근법으로 나타낼 수 있다(즉, 단백질, 펩티드, 아미노산, 탄수화물, 지질 및 무기염). 하지만, 성분의 실체가 알려진 경우에는 성분을 나타내야 하며, 성분 농도가 10%를 넘거나 성분이 분류 및 표시 그리고/혹 PBT평가<sup>15)</sup>와 관련된다면 성분이 확인되어야만 한다.

### 효소 단백질

농축물 내의 효소 단백질은 다음의 사항으로 확인되어야 한다.

- IUBMB번호
- IUBMB에 의해 주어진 명칭들(계통적인 명칭, 효소명, 유사 명칭)
- IUBMB에 의해 주어진 코멘트
- 반응 및 반응 유형
- EC번호 및 명칭(적합할 경우)
- CSA번호 및 명칭(이용 가능할 경우)

효소에 의해 유도된 반응은 자세히 기술해야 한다. 이 반응이 IUBMB에 의해 규정되어야 한다.

실례
.alpha.-amylase: .alpha.-(1-4)-와 연결된 포도당(glucose) 단위를 포함하는 Polysaccharide +H <sub>2</sub> O=maltooligosaccharides; d-포도당에 단위에 연결된 3개 이상의 1,4-.alpha.를 포함하는 Polysaccharides 내에 1,4-.alpha.-d-glucosidic 연결의 가수분해(endohydrolysis)

효소 종류에 따라 반응 유형이 배정되어야 할 것이다. 이것으로는 산화, 환원, 제거, 첨가 혹은 반응 명칭이 될 수 있다.

15) PBT평가와 관련 농도 한계에 대한 더 많은 정보는 PBT평가에 관한 RIP3.2 지침서의 화학물질 안전성 평가 섹션에서 찾아볼 수 있다.

실례

.alpha.-amylase: O-glycosyl 결합 가수분해(endohydrolysis)

### 효소 단백질 이외의 성분

중량 기준 10%이상 혹은 분류 및 표시, 그리고/혹은 PBT평가와 관련된 모든 구성 성분들은 확인되어야만 한다. 10% 미만의 성분들의 실체가 화학그룹으로 나타낼 수 있을 것이다. 그것들의 농도 혹은 농도 범위들이 제시되어야 한다. 즉,

- (글루코)단백질(Glyco)Proteins
- 펩티드와 아미노산(Peptides and Amino acids)
- 탄수화물(Carbohydrates)
- 지질(Lipids)
- 무기 물질(Inorganic Material)(예: 염화나트륨(sodium chloride) 혹은 기타 무기염)

효소 농축물의 다른 성분들을 충분히 확인하는 것이 불가능할 경우 생물학적 기원의 다른 UVCB물질과 마찬가지로 생산되는 미생물의 명칭(속명(genus)과 종명(strain), 또는 관련이 있을 경우 유전형)이 제시되어야만 한다.

이용 가능한 경우 추가적인 매개 변수(예: 기능적 매개변수(pH나 최적 온도와 범위), 동적 매개변수(고유 활성도나 전환수(turnover number)), 리간드, 기질과 생성물, 공동인자가 제공될 수 있다.

## 제5장 물질의 동일성 확인을 위한 기준

다른 제조/수입 업체의 물질들이 동일한지 확인할 때 지켜야 하는 규정이 있다. 이러한 규정은 기존화학물질목록(EINECS(결정사항 설명서, EINECS와 ECHA 웹사이트에 등록할 물질 기준 : Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999))을 작성할 때 적용한 것으로, 물질을 구분하고 물질의 명칭을 정하며, 그 특정한 물질과 공동으로 등록된 잠재적 물질을 찾아내는 공통적인 기준이다. 다음 단락에서 특정 물질을 구분하고, 물질의 명칭을 정하는 지침을 소개하겠다. 동일 물질로 인정되지 않는 물질은 전문가의 판단에 맡긴다. 과학적으로 인정받지 못한 물질에 관한 데이터를 공유해야 한다. 이것은 TGD의 주제는 아니지만 RIP 3.4에서 다룬다.

- 단일구성물질에는 “≥80%” 규칙을, 복합구성물질에는 “<80%/≥10%” 규칙을 적용한다. 물질의 기술 정도와 순수도, 분석 정도는 아무런 상관이 없다. ‘동일’ 물질은 모든 생산 과정에서 종류와 양이 각기 다른 불순물과 섞일지도 모른다. 하지만 명확하게 분류된 물질은 보통 주성분을 함유하고 있으며, 생산 과정에서 발생하는 불순물(자세한 내용은 4.2장 참조)과 물질을 안정시키는데 필요한 첨가제만 허용한다.

각기 다른 제조자의 명확하게 분류된 물질에 함유된 불순물 목록이 확연하게 서로 다를 경우, 전문가의 판단에 따라 그러한 차이점이 한 물질에 관한 시험 데이터를 화학물질 정보교환 포럼(SIEF) 회원들과 공유하는 문제에 영향을 끼치는가를 판단한다.

- 합성물의 수화물과 무수물(물이 포함되지 않은 물질)은 동일 물질로 간주한다.

실례			
명칭과 공식	CAS 번호	EC 번호	규정
황산동(Cu·H <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S)	7758-98-7	231-847-6	이 물질은 무수의 형태로 다룬다.(EC 번호 : 231-847-6)
황산구리(2+), 염(1:2)	7758-99-8		
5수화물 (CuH <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S·5H <sub>2</sub> O)			

수화물과 무수의 형태는 각기 다른 화학 명칭과 CAS 번호를 갖고 있다. 하지만 등록 서류는 하나로 제출한다. 무수의 형태도 등록해야 한다. 수화물 형태도 이 등록 규정에 따른다.

- 산이나 염기, 그것들의 염은 다른 물질로 간주한다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
201-186-8	Peracetic acid(과초산) C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	이 물질은 나트륨 염과 동일한 물질로 간주하지 않는

		다.(EINECS 220-624-9)
220-624-9	Sodium glycollate C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> -Na	이 물질은 유사한 산과 동일한 물질로 간주하지 않는다.(EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-Chloroaniline C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> ClN	이 물질은 benzenamine과 2-chloro-, hydrobromide(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> ClN HBr)와 동일한 물질로 간주하지 않는다.

- 각각의 염(나트륨이나 칼륨)은 다른 물질로 간주한다.

EC 번호	실례 명칭	규정
208-534-8	안식향산나트륨(Sodium benzoate) C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> -Na	이 물질은 칼륨염과 동일한 물질로 간주하지 않는다.(EINECS 209-481-3)
20-481-3	안식향산칼륨(Potassium) C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> -K	이 물질은 나트륨염과 동일한 물질로 간주하지 않는다.(EINECS 208-534-8)

- 분지형이나 선형 Alkyl 사슬은 다른 물질로 간주한다.

EC 번호	실례 명칭	규정
295-083-5	인산(Phosphoric acid), dipentyl ester, 분지형과 선형	이 물질은 개별적인 물질, 즉 인산(Phosphoric acid), dipentyl ester, 분지형이나 인산, n-dipentyl ester와 동일하게 간주하지 않는다.

- 분지형 그룹은 국제순수응용화학연맹(IUPAC)의 명칭을 사용한다. 추가 정보 없이 Alkyl 그룹을 함유한 물질은 특정한 세부사항이 명시되지 않는 한 분지되지 않은 선형 체인만 포함한다.

EC 번호	실례 명칭	규정
306-791-1	Fatty acids, C12-16	선형 Alkyl 그룹과 분지되지 않은 Alkyl 그룹이 함유된 물질만 동일 물질로 간주한다.
279-420-3	알콜, C12-14	
288-454-8	Amines, 12-18-Alkylmethyl	

- iso와 neo, 분지와 같은 첨가어가 붙는 Alkyl 그룹을 포함한 물질은 세부정보가 없는 한 동일물질로 간주하지 않는다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
266-944-2	Glycerides, C <sub>12-18</sub> 이 물질은 SDA 물질 명칭인 C <sub>12</sub> -C <sub>18</sub> trialkyl glyceride와 SDA 보고 번호인 16-001-00으로 불린다.	이 물질은 어느 단계에서나 분지하는 포화된 Alkyl 체인을 함유한 C <sub>12-12-iso</sub> 물질과 동일하게 간주하지 않는다.

- 명확한 세부사항이 명시되지 않는 한, 산이나 알코올 등의 Alkyl 체인은 포화된 체인으로 취급한다. 포화되지 않은 체인은 상세하게 열거하고, 다른 물질로 간주한다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
200-313-4	Stearic acid, pure C <sub>18</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	이 물질은 Oleic acid와 순수, C <sub>18</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub> 와 동일 물질로 간주하지 않는다. (EINECS 204-007-1)

- 키랄(chiral) 중심을 가진 물질.

키랄 중심 하나를 가진 물질은 오른쪽과 왼쪽으로 회전하는 형태에 존재한다.(이성질체) 이에 반하는 증거가 없을 경우, 물질은 두 형태를 모두 지닌 (라세미산)화합물이다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
201-154-3	2-chloropropan-1-ol	각각의 이성질체 (R)-2-chloropropan-1-ol과 (S)-2-chloropropan-1-ol은 동일하게 등록하지 않는다.

한 물질에 단일 enantiomeric 형태로 여러 개 있을 경우, 복합구성물질 규정을 적용한다.

다중 키랄 중심을 지닌 물질은 2n 형체에 존재한다.(여기서 n은 키랄 중심의 숫자를 말함) 각기 다른 형체는 서로 다른 물리화학적 특성과 독물학적 특성이나 생태독물학적 특성을 지닌다. 그것들은 개별적인 물질로 간주한다.

- 무기 촉매(Inorganic catalyst)

무기 촉매는 혼합물로 간주한다. 금속 성분이나 금속 화합물은 개별적인 물질로 취급한다(특별한 사용지침이 없을 경우).

실례		
	명칭	규정
	Cobalt oxide-aluminium 산화물 촉매	Cobalt II 산화물 Cobalt III 산화물 Aluminium 산화물 Aluminium cobalt 산화물 과 개별적으로 구분해서 취급한다.

- 다른 생산 유기체를 이용할 지라도 유해특성들이 크게 다르지 않거나 동일한 분류를 보증한다면 같은 IUBMB번호를 가진 효소 농축물은 동일한 물질로 간주될 수 있다.

### 복합구성물질(multi-constituent substances)

Directive 67/548/EEC는 물질이 시장출시 규정한다. 물질의 생산 방식은 아무런 상관이 없다. 그러므로 시장에서 판매되는 복합구성물질은 EINECS에 포함되어 있다. 단 개별성분이 모두 EINECS에 등록돼 있을 경우에 한한다. 예를 들어 이성질체 복합물 difluorobenzenes은 EINECS에 등록돼 있지 않더라도 EINECS 목록인 1,2-difluorobenzenes(206-680-7)과 1,3-difluorobenzenes(206-746-5), 1,4-difluorobenzenes(208-742-9)에 포함된다.

그 대신에 REACH는 제조된 물질의 등록을 요구한다. 물질을 '제조'할 때 어느 정도 다른 단계(예 : 각기 다른 정화 단계나 증류 단계)를 거쳐야 하는지 결정하는 규정이다. 복합구성물질을 생산하면 반드시 등록해야 한다(개별 구성성분의 등록에 의해 커버되지 않는다). 예를 들어 이성질체 혼합물 difluorobenzenes을 생산하면 'difluorobenzenes'은 이성질체 혼합물(mixture)로 등록해야 한다. 하지만 복합구성물질의 경우, 각각의 구성성분에 관한 정보로 그 물질의 위험성을 충분히 설명할 수 있다면 그 물질을 시험할 필요가 없다. 각각의 이성질체인 1,2-difluorobenzenes과 1,3-difluorobenzenes, 1,4-difluorobenzenes가 생산되어 나중에 혼합되면 각각의 이성질체를 등록해야 하고, 이성질체 혼합물은 혼합물(preparation)로 간주한다.

A, B, C라는 주성분으로 구성된 복합구성물질은 A와B라는 주성분으로 구성된 복합구성물질이나 A, B, C, D의 reaction mass와 동일하게 간주되지 않는다.

- 복합구성물질은 개별 성분의 일부분만 지닌 물질과 동일하게 간주하지 않는다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
207-205-6	2,5-difluorobenzenes	이 두 물질은 가능한 모든 이성질체의 일부분이기 때문에 이성질체 혼합물 difluorobenzenes과 동일하게 간주하지 않는다.
207-211-9	2,4-difluorobenzenes	

- 복합구성물질은 등록된 각각의 성분과 별도로 다룬다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
208-747-6	1,2-difluorobenzenes	이 물질은 cis-와 trans-이성질체의 혼합물(mixture)이다. (IZ)-1,2-Dibromoethene과 (IE)-1,2-Dibromoethene은 이 이성질체 혼합물의 등록으로 커버되지 않는다.

#### UVCB 물질

구성성분이 좁게 분포된 복합구성물질은 그보다 넓게 구성된 복합성분물질과 동일하게 간주되지 않으며, 그 반대도 마찬가지이다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
288-450-6	Amines, C <sub>12-18</sub> -Alkyl, acetates	'amines, C <sub>12-14</sub> -Alkyl, acetates'이나 'amines, C <sub>12-20</sub> -Alkyl, acetates' 혹은 'amines, dodecyl(C <sub>12</sub> -Alkyl), acetates', 또는 짝수의 Alkyl chain을 지닌 물질들은 이 물질과 동일하게 간주하지 않는다.

- 한 종/속에 속한 물질은 다른 종/속에서 분리된 물질과 동일하게 간주하지 않는다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
296-286-1	Glycerides, 해바라기씨 오일 di-	이 물질은 Glycerides, soya di-(EINECS : 271-386-8)과 동일하게 간주하지 않으며, Glycerides, tallow di-(EINECS : 271-388-9)와도 동일하지 않다.
232-401-3	Linseed 오일, epoxidized	이 물질은 Linseed 오일, epoxidized (EINECS :

		272-038-8)와 동일하지 않으며, 아마씨 오일, maleated (EINECS : 268-897-3)나 castor oil, epoxidized(EINECS에 등록되지 않음)와도 동일하지 않다.
--	--	---

- 정제된 추출물이나 농축액은 추출물과 다른 물질로 간주한다.

실례		
EC 번호	명칭	규정
232-299-0	Rape oil  추출물과 물리적으로 변형된 파생물. 그것은 주로 fatty acids erucic, linoleic과 oleic의 glycerides로 구성되어 있다.(Brassica napus, Cruciferae)	‘(Z)-Docos-13-enoic acid(erucic acid)’이란 물질 ‘rape oil’의 한 구성성분이다. Erucic acid는 reape oil에서 나온 순수물질로 구별되기 때문에 rape oil과 동일하게 간주하지 않는다. Erucic acid는 별도로 EINECS에 등록되어 있다.(EINECS : 204-011-3) palmitic과 oleic acid, oleic acid, linolenic acid, erucic acid, eicosenoic acid를 섞은 분리 혼합물은 각각의 성분들이 오일 전체를 나타내지 않기 때문에 rape oil과 동일하게 간주하지 않는다.

## 6 사전등록 상의 물질확인 및 문의

물질을 식별해서 명칭을 정하는 법에 관한 지침은 TGD 4장에 언급했다. 이 지침에 따라서 REACH의 목적을 위해 동일한 물질을 파악한다. 이제 기존물질(phase-in)을 사전등록하고 신규물질(non phase-in)을 조사하는 법에 관한 자세한 정보를 아래에 소개한다.

제4조에 따르면 모든 제조자나 수입업자는 REACH 규정을 준수할 모든 의무를 가지고 있으며 다른 제조자나 수입업자와 논의와 관련된 Title III하의 모든 과정을 위해 제3자 대리인(third party representative)을 선임한다. Title III는 또한 사전에 등록되지 않은 기존물질과 신규물질에 관한 규정뿐만 아니라 사전에 등록된 기존물질에 관한 규정을 다루고 있다. 그러므로 이 장에서 ‘잠재적인 등록자’란 말은 ‘잠재적인 제조자’나 ‘잠재적인 수입업자’ 혹은 ‘잠재적인 제조자나 수입업자의 대표로 임명된 제3자 대리인’으로 해석한다.

### 6.1 사전등록

사전등록 과정의 목적은 동일 물질의 잠재적 등록자를 모두 불러 모아서 특히 척추동물에 관한 실험을 할 때 중복 연구를 피하고자 하는 것이다.

사전등록 과정은 다음과 같다.

1. 잠재적인 등록자가 ECHA에 한정된 확인요소를 제출한다.
2. ECHA는 한정된 식별요소를 바탕으로 물질목록을 작성하고, 웹사이트에 목록을 올린다.
3. 다른 데이터 소유자들은 그러한 목록을 바탕으로 ECHA에 관련 정보를 제공할 수 있다.
4. ECHA는 목록에서 식별변수가 일치하는 물질의 잠재적 등록자들이 서로 접촉하도록 유도하고, 데이터 소유자들과의 관계를 촉진시켜나간다. 잠재적 등록자들은 자신들의 물질이 목록에 있는 다른 물질과 동일한지를 확인한다. 이때 TGD 4장에 제시된 규정을 따른다.
5. ECHA에 동일 물질에 관한 정보를 제출한 잠재적 등록자들은 동질성을 확인하자마자 화학물질 정보교환 포럼에 참석한다.

첫 번째 단계에서 잠재적 등록자는 일련의 한정된 물질확인 요소들을 제출해야 한다(제28조).

-EC 번호와

-CAS 번호와 명칭

-IUPAC 학명에 언급된 화학명칭이나 다른 국제적인 화학명칭

-다른 명칭

IT 시스템의 도움을 받아 이러한 정보를 제출한다. 잠재적인 등록자는 순차적인 시스템에 따르고, 위에서 제시한 물질확인 정보는 REACH-IT 웹사이트를 통해 제시된다.

물질확인(예 : 불순도 식별)에 관한 추가 정보는 본 단계에서 관련되지 않는다. 잠재적 등록자는 또한 다른 QSAR와 read-across, 혹은 범주접근법(category approach)과 같은 물질의 한정된 물질확인 요소들을 제시할 수 있다.

## 6.2 문의(Inquiry)

잠재적 등록자는 사전에 등록하지 않은 기존물질이나 신규물질을 등록하기 전에 ECHA에 의뢰해서 동일 물질(24 조항)이 이미 등록되어 있지 않는지 문의해야 한다. 이때 다음과 같은 사항을 문의한다.

사용 사이트를 제외하더라도 잠재적 등록자의 신분이 Annex VI의 1항목에 명시되어 있는가?

물질확인 정보가 Annex VI의 2항목에 명시되어 있는가?

- 이러한 정보를 얻으려면 잠재적 등록자가 척추동물에 관한 새로운 연구를 해야 한다.
- 이러한 정보를 얻으려면 잠재적 등록자가 다른 새로운 연구를 해야 한다.

IT 시스템과 IUCLID(연간 10톤 이상 판매되는 화학물질목록) 5의 도움을 받아 위와 같은 정보를 제공한다. 잠재적 등록자는 TGD 4장에 제시된 규정에 따라서 물질을 식별하고 물질의 명칭을 정해야 한다.

ECHA는 동일물질이 이미 등록되어 있는지 확인한다. 이때 TGD 4장에 제시된 규정을 따라 모든 일을 처리한다. 그리고 나서 잠재적 등록자와 (있다면) 이전 등록자에게 결과를 알려준다.

## 7. 실례(examples)

다음 페이지에 주어진 예들은 사용자가 본 지침서의 안내를 이용하는 방법을 보여 주는 것만을 목적으로 한다. 이것들은 REACH와 관련된 의무들 대한 어떤 선례도 보여주지 않는다.

다음의 예들은 아래를 포함한다.

- 'Diethyl peroxydicarbonate'는 안정제로서의 역할 또한 하는 용매를 포함한 복합 구성물질(multi-constituent substance)위한 실례이다(7.1장 참조)
- 'Zolimidine'은 단일구성물질로서 혹은 복합구성물질로서도 확인될 수 있는 물질을 위한 실례이다.
- 제조반응 중에 형성된 '이성질체 혼합물(mixture of isomers)은 복합구성물질을 위한 예로서 포함된다(7.3장 참조). 이 물질은 이전 개별 이성질체들의 EINECS 수록에 의해 에 커버되었다.
- 'Fragrance AH'는 다른 특징을 갖도록 생산된 물질의 실례이며, 여러 농도 범위를 지닌 다섯 가지 성분의 반응물로 설명될 수 있다(7.4장). 그것은 또한 80%규칙과 10%규칙으로부터 정당화된 벗어남을 위한 실례이다.
- 추가적인 물리적 특징을 필요로 하는 명확하게 정의된 물질의 실례로서 montmorillonite를 포함한 비철 '광물(mineral)'은 7.5장에 포함된다.
- lavendula의 정제오일은 식물로부터 얻어지는 UVCB물질을 위한 실례이다(7.6장).
- 'Chrysanthemum오일과 그것으로부터 분리된 이성질체들'은 생물학적인 기원(origin)의 UVCB물질이며, 그것은 추가적인 공정을 거친다(7.7장).
- 'Phenol, isopropylated, phosphate'는 가변적인 UVCB물질의 실례이며, 그것은 완전하게 규정될 수 없다.
- 'Quaternary 암모늄 화합물'은 탄소-사슬(carbon-chain)의 길이의 변화를 지닌 물질들을 위한 실례들이다.
- '석유물질(petroleum substances)'을 위한 두 가지 예들, 즉, 가솔린 혼합 흐름 및 가스 오일들이 7.10장에 포함된다.
- 두 가지 예들, 즉 효소, 라카아제(laccase) 및 아밀라제(amyase)가 7.11장에 제 공된다.

### 7.1 DIETHYL PEROXYDICARBONATE

diethyl peroxydicarbonate '물질'(EC 238-707-3, CAS 14666-78-5, C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>6</sub>)은 IsododECHANe (EC 250-816-8, CAS 31807-55-3) 18%용액으로 생산된다. IsododECHANe은 또한 폭발성에 대한 안정제 역할을 수행한다. 물질의 안전한 취급을 보장하는 가능한 가장 높은 농도는 27%용액이다.

위에 설명된 물질이 등록을 위해 확인되고 명명되는 방법은?

REACH에서 물질의 정의에 따르면, 물질의 안전성에 영향을 주지 않거나 물질의 조성 변화 없이 분리될 수 있는 용매들은 제외되어야만 한다. 위의 경우처럼 IsododECHAne은 또한 안정제로 역할을 수행하고 있으며, 물질의 폭발특성들 때문에 완전하게 분리될 수 없다. IsododECHAne은 단순한 용매가 아닌 첨가제로 간주되어야만 한다. 하지만 IsododECHAne은 여전히 단일구성물질(mono-constituent substance)로 간주되어야만 한다.

따라서 IsododECHAne은 안전한 취급을 보장하는 가능한 가장 높은 농도 용액으로 간주되어야만 한다.

Diethyl peroxydicarbonate(상한농도:27%; 표준농도: 22%)

## 7.2 Zolimidine

제조된 메탄올용액은 'zolimidine'(EC 214-947-4; CAS 1222-57-7, C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S)과 'imidazole'(EC 206-019-2; CAS 288-32-4, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>)을 포함한다. 용매인 메탄올을 제거하여 제조과정을 최적화한 후에도 여전히 그 물질은 여전히 zolimidine 74-85%와 imidazole 4-12%의 넓은 순도범위를 지닌다.

위에 설명된 물질이 등록을 위해 확인되고 명명되는 방법은?

REACH에서 물질의 정의에 따르면, 물질의 안전성에 영향을 주지 않거나 물질의 조성 변화 없이 분리될 수 있는 용매들은 제외되어야만 한다. 위의 경우처럼, 메탄올은 어려움 없이 분리될 수 있고, 용매가 제거된 물질은 등록되어야만 한다.

일반적으로 하나의 주요 물질 구성성분이 80%이상으로 존재하면 그 물질은 단일구성 물질로 간주된다. 만약 하나 이상의 물질 구성성분이 10%이상 80%미만으로 존재하면 복합구성 물질로 간주된다. 한계치가 초과될 수도 미달할 수도 있어 위의 예는 경계선상에 있는 경우가 된다. 따라서 단일구성 물질인 "zolimidine"으로 혹은 복합구성 물질인 "zolimidine"과 "imidazole"의 반응물로 간주될 수 있다.

이러한 경계선상의 경우, 그 물질의 주요 구성성분들의 대표 농도는 이 물질을 설명하기 위한 최선의 방법을 결정하기 위해 이용될 수 있다.: 예들

- (1) 만약 대표농도가 zolimidine = 77%와 imidazole = 11%이라면, zolimidine과 imidazole의 반응물로서 간주하는 것이 권고된다.
- (2) 만약 대표농도가 zolimidine = 85%와 imidazole = 5%이라면, 단일구성 물질인

“zolimidine”으로 간주하는 것이 권고된다.

- (3) 제조공정이 통제되지 않은 넓은 범위농도의 결과를 가져와 대표농도가 도출될 수 없다면, 복합구성 물질로 간주하는 것이 권고된다.

### 7.3 이성질체(isomers)의 혼합물

해당하는 물질이 제조반응 중에 형성된 두개의 이성질체(isomers)의 혼합물(반응물)이다. 개별 이성질체가 EINECS에 신고 되어 있다. Directive 67/548/EEC는 시장에 물질출시를 규제했다. 물질의 생산방식은 중요하지 않음으로, 혼합물(mixture)은 두개의 개별 이성질체들의 EINECS 목록에 포함되어 있다. REACH는 제조된 물질들의 등록을 요구한다. 물질 생산 중에 수행되는 다른 공정 단계들이 어느 정도 제조의 정의에 의해 커버되는지를 확립하는 것은 케이스별 결정이다. 만약 (4.2.2장에 따라)복합구성 물질로 간주된다면, 물질의 유해성 프로필이 충분히 개별 구성성분에 대한 정보에 의해 설명될 경우 그 물질 자체를 시험할 필요는 없다. 하지만, 기존물질이라는 것을 증명하기 위해 개별 이성질체의 EINECS목록에 들어가 있음을 보여주는 참조정보가 있어야 한다.

#### 1. 명칭 및 기타 확인요소(identifier)

<b>IUPAC name or other international chemical name (of the substance)</b>	Reaction mass of 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol and 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
<b>Other names (of the substance)</b>	2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol Reaction mass of Ethanol, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- and water Ethanol, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- (9CI) isomeric compound
<b>EC number (of the substance)</b> <b>EC name</b> <b>EC description</b>	There exists no EC number for the mixture, as the mixture was not reported for EINECS. However, the substance was covered by the EINECS entries for the constituents (279-502-9, 279-501-3). Therefore, the mixture should be regarded as phase-in substance.
<b>CAS number (of the substance)</b> <b>CAS name</b>	not available not available
<b>EC number (constituent A)</b> <b>EC name</b> <b>EC description</b>	279-502-9 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
<b>EC number (constituent B)</b> <b>EC name</b> <b>EC description</b>	279-501-3 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
<b>CAS number (constituent A)</b> <b>CAS name</b>	80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
<b>CAS number (constituent B)</b> <b>CAS name</b>	80584-88-9 Ethanol, 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
<b>Other identity code</b> <b>Reference</b>	ENCS number 5-5917

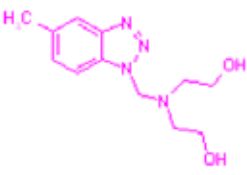
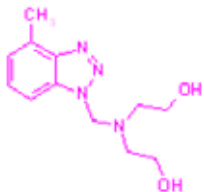
## 2. 조성 정보 - 주요 구성성분들

Main constituents						
	IUPAC name	CAS number	EC number	Mol. formula Hill method	Typical conc. (%w/w)	Conc. range (%w/w)
A	Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	60	50-70
B	Ethanol, 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	40	30-50

Main constituents	
	Other names:
A	2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
B	2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol

Main constituents		
	EC name	EC description
A	2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/
B	2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/

Main constituents		
	CAS name	CAS numbers
A	Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0
B	Ethanol, 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9

Main constituents			
	Molecular Formula CAS method	Structural formula	SMILES code
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

## 7.4 방향족 AH

방향족 AH는 gamma(iso-alpha) methyl ionone과 그것의 이성질체들이다. 그것은 이성질체의 비율이 다른 세 가지의 다른 속성(A, B, C)으로 생산된다.

다음의 표는 그 다른 속성들의 조성에 대한 개관을 제공한다.

다른 속성들을 지닌 방향족 AH의 조성

농도범위(%)	A속성	B속성	C속성	전체범위
gamma(iso-alpha)methyl ionone	80-85	65-75	50-60	50-85
delta(iso-beta) methyl ionone	6-10	3-7	3-7	3-10
alpha n-methyl ionone	3-11	10-20	20-30	3-30
gamma n-methyl ionone	0.5-1.5	2-4	2-4	0.5-4
beta n-methyl ionone	0.5-1.5	4-6	5-15	0.5-15
pseudo methyl ionones	0.5-1.5	1-3	1-3	0.5-3

물질확인을 위한 몇 개의 선택이 있다.

- A속성은 적어도 gamma (iso-alpha) methyl ionone 이성질체의 80%를 포함한다. 따라서 다른 이성질체들을 불순물로 지닌 gamma (iso-alpha) methyl ionone 이성질체에 기초한 단일구성 물질로 간주될 수 있다.
- B & C속성은 gamma (iso-alpha) methyl ionone 이성질체 80%미만과 기타 이성질체들 10%이상을 포함한다. 따라서 그것들은 복합구성 물질들로 간주될 수 있다.
  - B속성: 불순물로서 다른 이성질체들을 지닌 gamma(iso-alpha) methyl ionone(65-75%)와 alpha-methyl ionone(10%-20%)의 반응물
  - C속성: 불순물로서 다른 이성질체들 지닌 gamma(iso-alpha) methyl ionone(50-60%)와 alpha-n methyl ionone(20-30%) [그리고 beta n-methyl ionone(5-15%)포함할 수 있음] 의 반응물

그 조성은 변하기 쉽고 이따금 한 개의 이성질체가 10%이상(따라서, 일반적으로 주요 구성성분이라 함)과 이따금 10%미만(따라서, 일반적으로 불순물이라 함)으로 존재한다.

다른 속성들을 분리해서 등록하는 것이 가능할 수 있다. 이것은 세 번의 등록을 의미한다. 하지만, 자료의 read-across가 정당화 될 수도 있다.

대체방법으로 다음을 고려할 수 있다.

- 두 가지의 하위 속성을 지닌 단일구성 물질로 등록. 이 경우 하위 속성들은 80% 규칙에서 벗어남(4.2.1장 참조)
- 5개의 이성질체들의 한정된 반응물(복합구성 물질)로 등록. 이 경우 몇몇 이성질체들(주요 구성성분)은 불순물들로부터 주요 구성성분들을 구별하는 10%규칙으

로부터 벗어난다.

- 조성의 가변성이 각각의 이성질체를 위한 전체 범위에 의해 커버되는 한정된 반응물로 등록

다음은 고려하는 것이 중요할 수 있다.

- 세 가지 속성이 같거나 매우 유사한 물리화학적 특성들을 가진다.
- 세 가지 속성이 유사한 이용 및 노출 시나리오들을 가진다.
- 모든 속성들이 같은 유해성 분류 및 표시를 가지며, SDS와 SR(safety report)의 내용이 동일하다.
- 이용 가능한 시험자료(와 앞으로의 시험)가 그 세 가지 속성들의 가변성을 커버한다.

이 예들에서 5개 이성질체의 한정된 반응물(복합구성 물질)로서 물질확인이 설명된다. 정당성 증명은 80%규칙(4.2.1장 참조)과 10%규칙(4.2.2장 참조)으로부터 벗어나기 때문에 필요하다. 각 속성이 그 자체로 나타남으로, 세 가지 속성들의 각각의 조성이 등록서류에 명시되어야만 한다. 하지만, 공식조건들 하에서 적어도 2번의 등록이 필요할 수 있다: (1) Gamma (iso-alpha) methyl ionone와 (2) gamma (iso-alpha) methyl ionone와 alpha-n-methyl ionone

### **물질확인**

방향족 AH는 동일한 질이지만 다른 조성을 가진 세 가지 다른 속성들(A, B, C)로 생산된다. 세 가지 모든 속성들이 복합구성 물질을 위한 하나의 등록서류에 설명된다. 비록 이것이 80%/10%규칙이 엄격하게 적용되지 않는다는 것을 의미할 지라도 (1) 이용 가능한 시험 자료가 세 가지 속성들의 가변성을 커버하고, (2) 세 가지 속성들이 매우 유사한 물리화학적 특성들을 지니며, (3) 모든 속성들이 동일한 유해성 분류 및 표시(따라서, SDS가 동일함)를 가진다. 그리고 (4) 세 가지 속성들이 유사한 이용과 노출시나리오들(따라서, 유사한 CSR)을 가짐으로 하나의 복합구성 물질로서 등록이 정당화 된다.

## 1. 명칭 및 기타 확인요소

IUPAC name or other international chemical name	Reaction mass of 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one
Other names	Methyl Ionone Gamma Quality A Methyl Ionone Gamma Quality B Methyl Ionone Gamma Quality C
EC number	not available
EC name	/
EC description	/
CAS number	not available
CAS name	/

## 2. 조성정보 - 주요 구성성분들(main constituents)

이론적으로, 추가적인 enantiomers가 가능하다. 하지만, 다음 이성질체들은 분석된다.

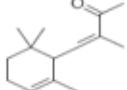
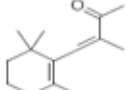
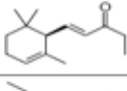

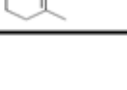
Main constituents						
	IUPAC name	CAS number	EC number	Mol. formula Hill method	Min. conc. (%w/w)	Max. conc. (%w/w)
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	127-51-5	204-846-3	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	50	85
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	79-89-0	201-231-1	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	3	30
D	1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one	not available	not available	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	0.5	4
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	0.5	15

Main constituents	
	Other names:
A	alpha-iso-methyl ionone; gamma methyl ionone
B	beta-iso-methyl ionone; delta methyl ionone
C	alpha-n-methyl ionone
D	gamma-n-methyl ionone
E	beta-n-methyl ionone

Main constituents		
	EC name	EC description
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
C	[ <i>R</i> -( <i>E</i> )]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
D	1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/

Main constituents		
	CAS name	CAS number
A	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	127-51-5
B	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	79-89-0
C	1-Penten-3-one, 1-[(1 <i>R</i> )-2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl]-, (1 <i>E</i> )-	127-42-4
D	not available	not available
E	1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	127-43-5

Main constituents		
	Other identity code	Reference
A	2714 07.036	FEMA EU Flavour Register
B	07.041	EU Flavour Register
C	2711 07.009	FEMA EU Flavour Register
D	not available	not available
E	2712 07.010	FEMA EU Flavour Register

Main constituents			
	Molecular Formula CAS method	Structural formula	SMILES code
A	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
B	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
C	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>
D	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem>
E	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>

Main constituents		
	Molecular weight / g mol <sup>-1</sup>	Molecular weight range
A	206.33	/
B	206.33	/
C	206.33	/
D	206.33	/
E	206.33	/

### 3. 조성정보 - 불순물 및 첨가제

Impurities						
	IUPAC name	CAS number	EC number	Mol. formula	Typical conc. (%w/w)	Conc. range (%w/w)
F						
number of non-specified impurities:				11 (pseudo methyl ionones)		
total concentration of non-specified impurities:				0.5 – 3%w/w		
Additives						
	IUPAC name	CAS number	EC number	Mol. formula	Typical conc. (%w/w)	Conc. range (%w/w)
G	Butylated Hydroxytoluene (BHT)	128-37-0	204-881-4	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	0.1	0.05 – 0.15

### 4. 다른 속성들에 대한 정보

Concentration range [%]	Quality A	Quality B	Quality C
gamma (iso-alpha) methyl ionone	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (iso-beta) methyl ionone	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alpha n-methyl ionone	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-methyl ionone	0.5 - 1.5	2 - 4	2 - 4
beta n-methyl ionone	0.5 - 1.5	4 - 6	5 - 15
pseudo methyl ionones	0.5 - 1.5	1 - 3	1 - 3

### 7.5 광물(minerals)

광물은 지각에서 발견된 무기 구성성분들의 조합으로 정의되며, 일련의 특징적인 화학 조성들, 결정 형태들(고밀도 결정에서 비결정까지), 그리고 물리화학적인 특징들을 가지고 있다.

광물은 화학적인 변형이 없는 경우 등록으로부터 면제된다. 비록 광물이 화학적 공정 또는 처리, 혹은 물리적 광물학적 변형(예를 들면 불순물 제거)이 있다하더라도 화학적인 구조가 변화하지 않는 경우 등록이 면제된다.

몇몇 광물들은 그것들의 화학적인 조성에 의해 독특하게 설명(4.2.1장과 4.2.2장의 단일구성 및 복합구성 물질들 참조)될 수 있는 반면에 다른 것들은 그것의 화학물질 조성만으로는 이러한 물질들을 확인하기에 충분하지 않다(4.2.3장 참조).

다른 단일 혹은 복합 구성 물질들과는 반대로, 많은 광물들의 확인은 화학적 조성과 내부구조(예: X-ray 회절(diffraction)에 의해 밝혀진 것처럼)에 기초되어야만 한다. 왜냐하면, 이것들이 함께 그 광물의 실체(essence)를 나타내고 그것의 물리화학적 특성들을 결정하기 때문이다.

다른 복합구성 물질들에 대해, 광물의 CSA번호가 물질확인(즉, 무기 구성성분의 조합)의 일부로 이용될 수 있다. (체계적인 광물학에 의해 규정된 대로) 무기 구성성분들의 CAS번호들은 다른 구성성분들을 설명하기 위해 사용된다. 만약 개별 무기 성분(단일구성 물질)이 생산되면, 이 물질의 CAS번호는 물질확인을 위해 사용되어야만 한다.

- Kaolin 광물(EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7)은 기본적으로 수산화알루미늄규산염(hydrated aluminosilicate)점토인 1차 및 2차 Kolinites(EINECS: 215-286-4, CAS: 1302-78-9)로 구성된다.

Kaolone의 단일 구성성분(예: Kaolinites )을 생산하기 위해 정제공정이 Kaolin에 적용될 경우에 그 물질을 위한 CAS/EINECS번호는 EINECS: 215-286-4, CAS:1318-74-7 될 것이다

- EINECS에 “주로 montmorillonite로 구성된 콜로이드 점토”로 설명된 Bentonite 광물(EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9)은 높은 비율로 무기 성분인 Montmorillonite(EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0)를 포함하지만 유일한 성분은 아니다.

순수 Montmorillonite(EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0)가 생산될 경우, r 그 물질을 확인하기 위해 사용될 CAS번호는 Montmorillonite의 CAS번호이다.

Bentonite(EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9)와 Montmorillonite(EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0)는 동일한 물질로 간주되지 않는다는 것이 강조되어야만 한다.

결론적으로 광물은 일반적으로 무기 성분(들)의 조합에 따라 명명된다. 그것들은 단일구성 물질 혹은 복합구성 물질들(일반지침 4.2.1장과 4.2.2장)로 간주될 수 있다. 몇몇 광물들은 그것들의 화학적인 조성만으로 설명될 수 없어, 그것들을 충분히 확

인하기 위해서 추가적으로 물리적 특성 또는 공정 요소들을 요구한다(4.2.3장 참조). 몇몇 예들이 다음 표에 제공된다.

#### 광물의 예들

Name	CAS	EINECS	Additional description <sup>17</sup>
Cristobalite	14464-46-1	238-455-4	O <sub>2</sub> Si (crystal structure: cubic symmetry)
Quartz	14808-60-7	238-878-4	O <sub>2</sub> Si (crystal structure: rhombohedra symmetry)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Also known as Diatomite, Kieselgur and Celite Description: A soft siliceous solid composed of skeletons of small prehistoric aquatic plants. Contains primarily silica.
Dolomite	16389-88-1	240-440-2	CH <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .1/2Ca.1/2Mg
Feldspar-group minerals	68476-25-5	270-666-7	An inorganic substance that is the reaction product of high temperature calcination in which aluminium oxide, barium oxide, calcium oxide, magnesium oxide, silicon oxide, and strontium oxide in varying amounts are homogeneously and ionically interdiffused to form a crystalline matrix.
Talc	14807-96-6	238-877-9	Mg <sub>3</sub> H <sub>2</sub> (SiO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>
Vermiculite	1318-00-9	-	(Mg <sub>0.33</sub> [Mg <sub>2.3</sub> (Al <sub>0.1</sub> Fe <sub>0.1</sub> ) <sub>0.1</sub> ](Si <sub>2.33</sub> -3.33 Al <sub>0.67</sub> -1.67)(OH) <sub>2</sub> O <sub>10</sub> .4H <sub>2</sub> O)

#### 광물들을 위해 요구되는 분석정보

원소의 조성	화학적인 조성은 광물내의 구성비와 구성성분의 수에 관계없이 광물의 조성에 대한 전반적인 개관을 제공한다. 협약에 의해 화학적인 조성은 산화물로 나타냄
분광데이터(XRD 혹은 이에 상응하는 것)	XRD 또는 다른 기법은 결정학상의 구조에 기초하여 광물을 확인함 광물을 확인하는 XRD 또는 IR 피크(peak)는 분석방법 혹은 문헌참고의 간략한 설명과 함께 제공되어야만 함
전형적인 물리화학적 특성들	광물들은 특정 물리화학적인 특성들을 지니는데 이것은 광물들의 확인완료를 가능하게 한다. 예를 들면, - 매우 낮은 경도 - 팽창능력 - Diatomite의 형태(광학현미경) - 표면(질소흡착)

#### 7.6 LAVANDIN GROSSO의 정제유(essential oil)

정제유는 식물들로부터 얻어지는 물질들이다. 따라서 정제유는 또한 식물학적으로 도출된 물질들로서 특징지을 수 있다.

일반적으로 식물학적으로 도출된 물질들은 식물이나 식물의 일부분을 추출, 증류, 압착, 분화, 정제, 농축, 발효의 처리에 의해 식물이나 그것의 일부를 가공함으로써 얻어지는 복합적인 자연 물질들이다. 이들 물질들의 조성은 속(genus), 종(species), 성장조건, 원재료의 수확기간 및 적용되는 공정기술에 따라 다르다.

복합구성 물질의 실례에서처럼 정제유는 그것들의 주요 구성성분들에 의해 규정될 수 있다. 하지만, 정제유는 수백 가지에 이르는 구성성분들로 구성되어 있으며, 많은 요소들(예: 속(genus), 종(species), 성장조건들, 수확기간, 이용되는 공정)에 따라 상당히 변할 수 있다. 따라서 주요 구성성분들 자주 UVCB물질을 설명하기에 충분하지 않다. 정제유는 4.3.1장에서 설명된 대로 식물소스(plant source)와 처리공정의해 설명되어야만 한다(UVCB 하위-타입3을 이용).

많은 경우에 산업계 표준이 정제유에 대해 이용 가능하다(많은 정제유들을 위한 ISO표준도 있음). 표준들에 대한 정보는 추가적으로 제공될 수 있다. 하지만, 물질 확인은 제조된 물질들에 기초해야만 한다.

아래 예들은 “Lavandin grosso의 정제유(essential oil)”을 설명하며, 그것을 위해 ISO표준(ISO8902-1999).

## 1. 명칭 및 기타 확인요소들

### 명칭

<b>Species</b>	<i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
----------------	---

### 공정

<b>Description of (bio)chemical reaction processes used for the manufacture of the substance:</b>	
Water steam distillation of the flowering tops of <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) and subsequent separation of the water from the Essential Oil;	
The subsequent separation is a spontaneous, physical process, which normally takes place in a separator (a so-called "florentine flask") enabling an easy isolation of the separated oil. The temperature at this stage of the distillation process is about 40 °C.	

### 명칭

<b>IUPAC name or other international chemical name</b>	Essential oil of <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
<b>EC number</b>	297-385-2
<b>EC name</b>	Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext.
<b>EC description</b>	Extractives and their physically modified derivatives such as tinctures, concretes, absolutes, essential oils, oleoresins, terpenes, terpene-free fractions, distillates, residues, etc., obtained from <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae <sup>18</sup> .
<b>CAS number</b>	93455-97-1
<b>CAS name</b>	Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext.

## 2. 조성정보-알려진 구성성분들

Known constituents					
	Chemical name EC CAS IUPAC other	Number EC CAS	Mol. Formula Hill method	Typical conc. % (w/w)	Conc. range % (w/w)
A	EC linalyl acetate  CAS 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, acetate  IUPAC 3,7-Dimethyl octa-1,6-dien-3-yl acetate	EC 204-116-4  CAS 115-95-7	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	33	28 – 38
B	EC linalool  CAS 1,6-octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-  IUPAC 3,7-Dimethyl octa-1,6-diene-3-ol	EC 201-134-4  CAS 78-70-6	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	29,5	24 – 35
C	EC Bornan-2-one  CAS Bicyclo[2.2.1] heptan-2-one, 1,7,7- trimethyl-  IUPAC 1,7,7-Trimethylbicyclo[2.2.1]-2- heptanone  Other camphor	EC 200-945-0  CAS 76-22-2	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O	7	6 – 8

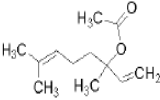
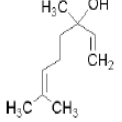
<b>D</b>	<b>EC</b> Cineole <b>CAS</b> 2-oxabicyclo [2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- <b>IUPAC</b> 1,3,3-Trimethyl-2-oxabicyclo[2.2.2]octane <b>Other</b> 1,8-cineole	<b>EC</b> 207-431-5 <b>CAS</b> 470-82-6	$C_{10}H_{18}O$	5,5	4 – 7
<b>E</b>	<b>EC</b> P-menth-1-en-4-ol <b>CAS</b> 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- <b>IUPAC</b> 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol <b>Other</b> terpinene-4-ol	<b>EC</b> 209-235-5 <b>CAS</b> 562-74-3	$C_{10}H_{18}O$	3,25	1,5 – 5
<b>F</b>	<b>EC</b> 2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetate <b>CAS</b> 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate <b>IUPAC</b> 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol <b>Other</b> (±)-Lavandulol acetate	<b>EC</b> 247-327-7 <b>CAS</b> 25905-14-0	$C_{12}H_{20}O_2$	2,25	1,5 – 3
<b>G</b>	<b>EC</b> DL-borneol <b>CAS</b> Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, (1R,2S,4R)-rel- <b>IUPAC</b> (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol <b>Other</b> borneol	<b>EC</b> 208-080-0 <b>CAS</b> 507-70-0	$C_{10}H_{18}O$	2,25	1,5 – 3
<b>H</b>	<b>EC</b> Caryophyllene <b>CAS</b> Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (1R,4E,9S)- <b>IUPAC</b> (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylene bicyclo[7.2.0]undec-4-ene <b>Other</b>	<b>EC</b> 201-746-1 <b>CAS</b> 87-44-5	$C_{15}H_{24}$	1,75	1 – 2,5

	trans-beta-caryophyllene				
I	<b>EC</b> (E)-7,11-dimethyl-3-methylenedodeca-1,6,10-triene <b>CAS</b> 1,6,10-Dodecatriene, 7,11-dimethyl-3-methylene-, (6E)- <b>IUPAC</b> (E)-7,11-Dimethyl-3-methylene-1,6,10-dodecatriene <b>Other</b> trans-beta-farnesene	<b>EC</b> 242-582-0 <b>CAS</b> 18794-84-8	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	1,1	0,2 – 2
J	<b>EC</b> (R)-p-mentha-1,8-diene <b>CAS</b> cyclohexen, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (4R)- <b>IUPAC</b> (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexene <b>Other</b> limonene	<b>EC</b> 227-813-5 <b>CAS</b> 5989-27-5	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1	0,5 – 1,5
K	<b>EC</b> 3,7-dimethylocta-1,3,6-triene <b>CAS</b> 1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl- <b>IUPAC</b> 3,7-Dimethylocta-1,3,6-triene <b>Other</b> cis-beta-ocimene	<b>EC</b> 237-641-2 <b>CAS</b> 13877-91-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1	0,5 – 1,5

알려진 구성성분들 ≥ 10%

Known constituents		
	EC name	EC description
A	linalyl acetate C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	
B	linalool C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	

Known constituents		
	CAS name	Related CAS numbers
A	linalyl acetate C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	115-95-7
B	linalool C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	78-70-6

Known constituents			
	Molecular Formula CAS method	Structural formula	SMILES code
A	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>		
B	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O		

Known constituents		
	Molecular weight	Molecular weight range
A	196.2888	/
B	154.2516	/

## 7.7 CHRYSANTHEMUM OIL 및 그것으로부터 분리된 이성질체

어느 기업에서 물/에탄올(1:10)의 혼합물을 포함하는 용매와 함께 국화과 (Compositae)인, Chrysanthemum cinerariaefolium의 꽃과 잎들을 갈아서 추출한 chrysanthemum oil을 생산하고 있다. 추출 후에 용매가 제거되고 순수 추출물이 추가 단계에서 최종 chrysanthemum oil이 된다.

게다가, 두 이성질체가 다음의 반응물로서 추출물로부터 분리된다.

### Jasmolin I

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

### Jasmolin II

(CyclopropanECHARboxylic acid, 3- [(1E)-3-methoxy-2-methyl-3-oxo-1-propenyl] - 2, 2 - d i m e t h y l - , (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-ylester, (1R,3R)-; CAS 번호 1172-63-0

게다가 그 기업은 Jasmolin I 과 Jasmolin II의 이성질체 반응물 또한 합성하기로 결정했다.

그 기업은 다음의 질문을 한다.

1. 등록을 위해 chrysanthemum oil을 어떻게 확인할 것인가?
2. 분리된 이성질체 Jasmolin I 과 Jasmoiln II 의 반응물이 그 oil의 등록에 의해 커버되는가?
3. 두 이성질체의 합성혼합물은 chrysanthemum oil에서 분리된 이성질체의 혼합물과 동일한 것으로 간주되는가?

### 1. 등록을 위해 chrysanthemum oil을 어떻게 확인할 것인가?

chrysanthemum oil은 그것의 화학적인 조성(자세한 안내는 4.3장 참조)에 의해 충분히 확인될 수 없는 UVCB물질로서 간주된다. 소스나 공정과 같은 다른 확인요소들은 필수적이다. chrysanthemum oil은 생물학적 성질을 지니고 있으며, 그것이 얻어지는 유기체의 일부 및 종, 그리고 정제공정에 의해 확인되어야만 한다. 하지만, 화학조성 및 구성성분들의 정체(identity)는 알려진 만큼 제공되어야 한다.

다음의 정보는 그 물질을 충분히 확인하기 위해 필요한 것으로 간주된다.

<b>Name of the substance</b>	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; oil obtained from crushed blossoms and leaves by extraction with water:ethanol (1:10)			
<b>Source</b>				
<b>Genus, specie, sub-specie</b>	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae			
<b>Part of plant used for oil</b>	Blossoms and leaves			
<b>Process</b>				
<b>Method of manufacture</b>	Crushing followed by extraction			
<b>Solvent used for extraction</b>	Water:ethanol (1:10)			
<b>Composition information – known constituents in % (w/w)</b>				
<b>Name of constituent</b>	<b>EC-no</b>	<b>CAS-no</b>	<b>Min %</b>	<b>Max %</b>
<b>Pyrethrin I:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl) cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-chrysanthemate	204-455-8	121-21-1	30	38
<b>Pyrethrin II:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl) cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
<b>Cinerin I:</b> 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	246-948-0	25402-06-6	5	10
<b>Cinerin II:</b> 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropane carboxylate	204-454-2	121-20-0	8	15
<b>Jasmolin I:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclo propanecarboxylate	none	4466-14-2	4	10
<b>Jasmolin II:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclo pent-2-en-1-yl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	none	1172-63-0	4	10
Furthermore the substance contains up to 40 constituents below 1%.				

그 물질을 6개의 주요 구성성분(Pyrethrin I, Pyrethrin II, Cinerin I, Cinerin II, Jasmolin I 과 Jasmolin II의 반응물) 명확히 정의된(well-defined) 복합구성물질로 확인되는 것도 고려할 수 있다.

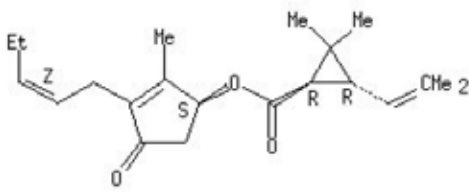
제조 공정이 단순히 “압착(crushing)”이라면, 그 물질은 자연에서 생성되는 물질로 간주될 것이며, Directive 67/548/EEC에 따라 위험물질 분류기준에 일치하지 않는다면, 등록의 의무로부터 면제될 것이다.

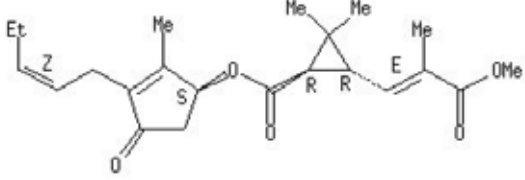
## 2. 분리된 이성질체 Jasmolin I 과 Jasmolin II의 반응물이 그 오일의 등록에 의해 커버되는가?

단일 구성물질이 전체 UVCB물질에 커버되지 않으며, 그 반대도 마찬가지이므로 분리된 이성질체 Jasmolin I 과 Jasmolin II의 반응물은 Chrysanthemum cinerariaefolium, Compositae 오일의 등록에 의해 커버되지 않는다. Jasmolin I 과 II의 반응물이 다른 물질로 간주된다.

Jasmolin I 과 Jasmolin II의 반응물은 두개의 주요 구성성분을 지닌 복합구성 물질로 간주될 수 있다.

다음 정보는 그 물질을 충분히 확인하기 위해 필요한 것으로 간주된다.

<b>IUPAC name of the substance</b>	<b>Reaction mass of</b> (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) <b>and</b> (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)			
<b>Other name</b>	Reaction mass of Jasmolin I and Jasmolin II			
<b>Purity of the substance</b>	95 – 98% (w/w)			
<b>Composition information – main constituents in % (w/w)</b>				
<b>Name of constituent</b>	<b>EC-no</b>	<b>CAS-no</b>	<b>Min %</b>	<b>Max %</b>
<b>Jasmolin I:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	none	4466-14-2	40	60
<b>Molecular formula</b>				
<b>Structural formula</b>	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub>			
<b>Molecular weight</b>	M = 374 g/mol			
<b>Jasmolin II:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl	none	1172-63-0	35	65

<p>[1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]- 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2- methyl-3-oxoprop-1- enyl)cyclopropanecarboxylate</p>			
<p><b>Molecular formula</b></p> <p><b>Structural formula</b></p> <p><b>Molecular weight</b></p>	 <p>C<sub>21</sub>H<sub>30</sub>O<sub>3</sub> M = 330 g/mol</p>		

3. 두 이성질체의 합성혼합물은 chrysanthemum oil에서 분리된 이성질체의 혼합물과 동일한 것으로 간주되는가?

물질의 구성성분들에 의해 충분히 설명되는 화학적으로 명확히 정의된 물질들에 대해 그 물질이 추출물로부터 분리 또는 화학적인 공정에 의한 합성 여부는 관련이 없다. 따라서 만약 혼합물의 순도와 주요 구성성분들의 농도범위가 동일하다면 합성된 Jasmolin I 과 jasmolin II의 반응물은 비록 다른 공정들로부터 얻어졌다고 할지라도 Chrysanthemum으로부터 분리된 이성질체 혼합물과 동일한 것으로 간주될 수 있다.

4. 결론

두개의 물질이 다음과 같이 확인된다.

1. Chrysanthemum cinerariaefolium, Compositae; 1:10비율의 물과 에탄올에 꽃과 잎들을 넣어 압착해서 추출한 오일
2. 물질의 제조공정과는 별개로, 이성질체 Jasmolin I 과 Jasmolin II의 반응물

위의 물질들이 식물보호 및 살생물제로만 사용된다면, 그것들은 REACH하에서 등록된 것으로 간주될 것이다(제15조).

## 7.8 PHENOL, ISOPROPYLATED, PHOSPHATE

Phenol, isopropylated, phosphate(3:1)은 isopropylated 실체의 가변성이 완전하게 규정될 수 없는 UVCB물질이다.

### 1. 명칭 및 기타 확인요소들

<b>IUPAC name or other international chemical name</b>	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)
<b>Other names</b>	Phenol, isopropylated, phosphate Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (based on a 1:1 mol ratio propylene to phenol)
<b>EC number</b>	273-066-3
<b>EC name</b>	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)
<b>EC description</b>	/
<b>CAS number</b>	68937-41-7
<b>CAS name</b>	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)

### 2. 조성정보 - 주요 구성성분들

Main constituents					
IUPAC name	CAS number	EC number	Mol. formula Hill method	Typical conc. (%w/w)	Conc. range (%w/w)
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Unspecified		

Main constituents	
EC name	EC description
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	/
CAS name	CAS number
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7

## 7.9 QUATERNARY AMMONIUM COMPOUNDS

어느 기업이 다음의 물질들을 합성하고 있다.

### A물질

Quaternary ammonium compounds, di-C<sub>10-18</sub>-alkyldimethyl, chlorides

EC번호: 294-392-2

CAS번호: 91721-91-4

탄소사슬 길이 분포(carbon-chain-lengths-distribution):

C <sub>10</sub>	10%
C <sub>11</sub>	5.5%
C <sub>12</sub>	12%

C <sub>13</sub>	7.5%
C <sub>14</sub>	18%
C <sub>15</sub>	8%
C <sub>16</sub>	24%
C <sub>17</sub>	7%
C <sub>18</sub>	8%

#### **B물질**

Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides

EC번호: 263-087-6

CAS번호: 61789-77-3

이 물질의 정확한 조성에 대해 이 회사에서 모름

#### **C물질**

Didodecyldimethylammonium bromide

#### **D물질**

Didodecyldimethylammonium chloride

#### **E물질**

E물질은 Didodecyldimethylammonium bromide와 Didodecyldimethylammonium chloride의 반응물로 제조되어진다(C물질과 D물질의 반응물).

#### **F물질**

Quaternary ammonium compounds, di-C<sub>14-18</sub>-alkyldimethylammonium, chlorides

EC번호: 268-072-8

CAS번호: 68002-59-5

탄소사슬 길이 분포(carbon-chain-lengths-distribution):

C <sub>14</sub>	20%
C <sub>15</sub>	10%
C <sub>16</sub>	40%
C <sub>17</sub>	10%
C <sub>18</sub>	20%

#### **G물질**

Quaternary ammonium compounds, di-C<sub>4-22</sub>-alkyldimethyl, chlorides

탄소사슬 길이 분포(carbon-chain-lengths-distribution): 한개의 프라임 부호 ' 이 중결합을 나타내고, 두개의 프라임 부호 "는 삼중결합을 나타낸다.)

C <sub>4</sub>	10%
C <sub>6</sub>	5.5%
C <sub>8</sub>	12%
C <sub>10</sub>	7.5%
C <sub>12</sub>	18%
C <sub>14</sub>	8%
C <sub>16</sub>	24%
C <sub>18</sub>	7%
C <sub>18</sub> '	8%
C <sub>18</sub> "	7%
C <sub>20</sub>	8%
C <sub>22</sub>	8%

지금까지, 이 기업은 물질의 명명에 B물질 Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides, EC번호 263-087-6, CAS번호 61789-77-3)만을 이용하고 있다. B 물질이 모든 물질(A물질부터 G물질까지)에 가장 적합하기 때문이다. 이 회사는 B물질의 등록으로 모든 물질(A물질부터 G물질까지)을 커버하는 것이 가능한지를 알고 싶어 한다.

### 1. 일반적 의견

지방 및 오일 또는 합성 대체제로부터 얻어진 Hydrocarbon(parffins, olefins)은 그것들의 탄소사슬 분포 또는 그것들의 출처(alkyl descriptor), 기능군(functionality descriptor)에 의해서 확인된다.

그 사슬길이 분포(예: C<sub>8-18</sub>)는 다음을 나타낸다.

- 포화
- (분지되지 않은)선형
- 모든 탄소번호 포함(C<sub>8</sub>, C<sub>9</sub>, C<sub>10</sub>, C<sub>11</sub>,..., C<sub>18</sub>), 반면에 좁은 분포는 더 넓은 분포를 커버하지 못하고, 그 반대도 마찬가지이다.

그렇지 않다면, 그것은 이런 방식으로 나타내야 한다.

- 불포화(C<sub>16</sub>불포화)
- 분지(C<sub>10</sub>분지)
- 짝수(C<sub>12-18</sub>짝수)

원료에 의해 설명되는 탄소사슬(carbon chain)은 원료에서 발생하는 분포를 포함한다(예: tallow alkyl amines).

tallow alkyl amine은 다음과 같은 탄소사슬 길이 분포를 지닌 99%의 1차 선형사슬 alkyl amine이다(Ullmann, 1985) [한 개의 프라임 부호 ' 이중결합 하나를 나타내고, 두개의 프라임 부호 "는 삼중결합 하나를 나타낸다]

C <sub>12</sub>	10%
C <sub>14</sub>	5.5%
C <sub>14'</sub>	12%
C <sub>15</sub>	7.5%
C <sub>16</sub>	18%
C <sub>16'</sub>	8%
C <sub>17</sub>	24%
C <sub>18</sub>	7%
C <sub>18'</sub>	8%
C <sub>18"</sub>	8%

## 2. 등록을 위해 그 물질들을 확인하는 방법

다음은 각각의 물질을 (지금까지 명명에 사용해온)B물질과 비교하여 두 물질들이 동일한 물질로 간주될 수 있는지를 결정한다.

### A물질과 B물질의 비교

다음의 사슬길이 분포는 B물질의 "coco"에서 볼 수 있다(Ullmann, 1985)한 개의 프라임 부호(')는 이중결합 하나를 나타내고, 두개의 프라임 부호(")는 삼중결합 하나를 나타낸다]

C <sub>6</sub>	0.5%
C <sub>8</sub>	8%
C <sub>10'</sub>	7%
C <sub>12</sub>	50%
C <sub>14</sub>	18%
C <sub>16'</sub>	8%
C <sub>18</sub>	1.5%
C <sub>18'</sub>	6%
C <sub>18"</sub>	1%

따라서 A물질의 탄소사슬 길이 분포는 B물질 "coco"의 탄소사슬 길이 분포로부터 벗어난다. 두 물질의 질적/양적 조성이 상당히 어긋남으로 두 물질은 동일하다고 간주될 수 없다.

### B물질과 C물질의 비교

B물질인 "Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyl dimethyl, chlorides"는 다른

탄소사슬 길이(C<sub>6</sub>에서 C<sub>18</sub> 짝수, 선형, 포화 및 불포화)를 가진 구성성분들의 혼합인 반면에, C물질은 하나의 다른 음이온(bromide)을 지닌 하나의 한정되고 포화된 사슬 길이(C<sub>12</sub>)를 지닌 단일 성분을 나타낸다. 따라서 C물질은 B물질과 동일한 것으로 간주될 수 없다.

### **B물질과 D물질의 비교**

B물질인 “Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides”는 다른 탄소사슬 길이(C<sub>6</sub>에서 C<sub>18</sub> 짝수, 선형, 포화 및 불포화)를 가진 구성성분들의 혼합인 반면에, D물질은 한정되고 포화된 탄소사슬 길이(C<sub>12</sub>)와 동일한 음이온(chloride)을 지닌 단일 성분을 나타낸다. B물질과 D물질은 다른 명칭을 가지고 있으며, 단일 구성성분이 어떤 성분을 포함하는 혼합물에 의해 커버되지 못하고 그 반대도 마찬가지이므로 동일한 물질로 간주될 수 없다.

### **B물질과 E물질의 비교**

E물질은 C물질과 D물질의 혼합물이다. 둘 다 포화된 C<sub>12</sub>의 포화된 사슬 길이를 가지고 있지만 다른 음이온(bromide와 chloride)을 가지고 있다. B물질인 “Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides”는 다른 탄소사슬 길이(C<sub>6</sub>에서 C<sub>18</sub> 짝수, 선형, 포화 및 불포화)를 가진 성분들의 혼합물이며, 음이온으로 chloride를 가진다. 하지만 E물질은 추가적인 음이온을 지닌 C<sub>12</sub> 탄소사슬 길이에 의해서만 나타난다. 따라서 B물질과 E물질은 동일한 물질로 간주될 수 없다. 결과적으로 E물질을 위한 개별등록이 필요하다.

### **B물질과 F물질의 비교**

F물질인 “Quaternary ammonium compounds, di-C<sub>14-18</sub>-alkyldimethylammonium, chlorides”는 다른 탄소사슬 길이(C<sub>14</sub>에서 C<sub>18</sub> 짝수 및 홀수 번호, 선형 및 포화)을 지닌 성분들의 혼합물(mixture)이다. F물질은 탄소사슬 길이 분포 범위와 구성에 있어서 B물질과 다르다. F물질은 좁은 탄소사슬 길이 분포를 지니고 추가적으로 C<sub>15</sub>-와 C<sub>17</sub>-탄소사슬을 가진다. 따라서 B물질과 F물질은 동일한 것으로 간주될 수 없다.

### **B물질과 G물질의 비교**

탄소사슬 분포가 거의 같은 범위에 있어서 B물질과 G물질은 매우 유사해 보인다. 하지만 G물질은 추가적으로 탄소사슬 길이 C<sub>4</sub>, C<sub>20</sub>, C<sub>22</sub>를 포함한다. G물질의 탄소사슬 길이 분포는 B물질보다 더 넓은 범위를 포함한다. 따라서 B물질과 G물질은 동일한 물질로 간주될 수 없다.

## **3. 결론**

Hydrocarbons(paraffins, olefins)는 3개 descriptors(alkyl, functionality, salt) 모두

가 같을 때, 동일물질로 간주될 수 있을 뿐이다.

위의 주어진 실례에서 descriptors들은 항상 서로가 다르다. 따라서 그 물질들은 B 물질의 한번 등록으로 커버될 수 없다.

## 7.10 석유계 물질(PETROLEUM SUBSTANCES)

4.3.3.2장에 특정 UVCB물질들을 위한 지침을 이용하여, 두개의 실례를 포함시켰다.

### 7.10.1 Gasoline blending stream(C<sub>4</sub>-C<sub>12</sub>)

#### 1. 명칭 및 기타 확인요소

##### 명칭

IUPAC name or other international chemical name	Naphtha (petroleum), catalytic reformed
---	---

##### 원료

Identification or description of stream source	Crude oil
--	-----------

##### 공정

정제공정 설명	촉매개질(Catalytic reforming)공정
탄소범위	C <sub>4</sub> -C <sub>12</sub>
끓는점 범위 또는 한계점 범위	30°C~220°C
기타 물리적 특성들(예:점도)	(점도)40°C에서 7mm <sup>2</sup> /s이하
EC번호	273-271-8
CAS번호	68955-35-1
EC명/CAS명	Naphtha(petroleum), catalytic reforming
EC기재사항/CAS기재사항	촉매개질 공정(catalytic reforming process)으로부터의 생성물질의 종류에 의해 생산된 hydrocarbon의 복합화합물. 이것은 C <sub>4</sub> 에서 C <sub>12</sub> 범위에서 탄소수를 압도적으로 지니고 있는 hydrocarbon들로 구성되어 있으며, 끓는점은 대략 30°C에서 220°C(90°F~430°F)이다. 이것은 상대적으로 방향족의 분지된 사슬 hydrocarbon를 큰 비율로 포함하고 있다. 이 stream은 10 vol-% 혹은 그 이상의 벤젠을 함유할 수도 있다.

#### 2. 조성정보

Known constituents			
IUPAC name	CAS number	EC number	Conc. range (%w/w)
Benzene	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluene	108-88-3	203-625-9	20-25
Xylene	1330-20-7	215-535-7	15-20

## 7.10.2 Gas oils

### 1. 명칭 및 기타 확인요소들

IUPAC name or other international chemical name	Gas oils (petroleum), heavy atmospheric
---	---

### 원료

Identification or description of stream source	Crude oil
--	-----------

### 공정

정제공정 설명	상압증류 (Atmospheric distillation)
탄소 범위	C7 - C35
끓는점 범위 또는 한계	121 °C
기타 물리적 특성 (예: 점도)	20mm <sup>2</sup> /s at 40°C (정도)
EC 번호	272-184-2
CAS 번호	68783-08-4
EC 명칭 / CAS 명칭	gas oils(석유), 중질 대기
EC 기재내용 / CAS 기재내용	원유를 증류하여 얻은 복합 hydrocarbon, 물질을 구성하는 hydrocarbon는 C <sub>7</sub> 에서 C <sub>35</sub> 범위의 탄소수가 대부분이고 끓는점의 범위는 121°C에서 510°C이다(250°F~950°F).

## 2. 화학적 성분

관련 자료 없음

## 7.11 효소(Enzyme)

4.3.2.3 장의 특수 UVCB물질에 관한 지침을 사용하여 효소 농축물의 두 가지 예를 포함 : 서브 킬리신 : subtilisin( IUBMB에 의한 명칭과 기타성분)

알파 아밀라아제 :  $\alpha$ -amylase( IUBMB 명칭과 production organism 로 확인)

### 7.11.1 Subtilisin

<u>효소 단백질</u>	Subtilisin
IUBMB 번호	3.4.21.62
IUBMB에 의해 주어진 명칭	Subtilisin ;
(체계적인 명칭, 효소명, 동의어)	alcalase; alcalase 0.6L ; alcalase 2.5L ; ALK-enzyme ; bacillopeptidase A ;

bacillopeptidase B ; Bacillus subtilis alkaline  
 proteinase biopraser ; biopraser AL 15 ;  
 biopraser AL 30 ; colistinase ; (see also  
 comments); subtilisin J ; subtilisin S41 ;  
 subtilisin Sendai ; subtilisin GX ; subtilisin E  
 ; etc.

**IUBMB에 의해 주어진 설명**

subtilisin은 serine endopeptidase이며,  
 peptidase 군 S8의 일종이다. (동족 효소에는 들어있  
 으나) 시스테인(cysteine) 잔류물에는 포함되어  
 있지 않다. 변형종에는 subtilisin BPN(subtilisinB,  
 subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse  
 proteinase, subtilisin Novo, bacterial  
 proteinase Novo로도 불림)과 subtilisin  
 Carlsberg (subtilisin A, subtilopeptidase A,  
 alcalase Novo)가 있다. 동종 효소들은 다양한  
 Bacillus subtilis 계와 기타 Bacillus종에 의해 생산된다.

**반응**

Hydrolysis peptide amides인 P1은 불변의(uncharged)  
 잔류물을 더 선호하고 펩티드 결합 특이성이 크다.

**반응형태**

Hydrolases ; peptide bonds에 작용(peptidases) ;  
 Serine endopeptidases

**EC 번호**

232-752-2

**EC 명칭**

서브틸리신(subtilisin)

**CAS 번호**

9014-01-1

**CAS 명칭**

서브틸리신(subtilisin)

**효소 단백질의 농도**

26%

**기타 성분**

기타 단백질, 펩티드, 아미노산

39%

탄수화물

11%

지질

1%

무기염

23%

**추가 매개변수**

기질과 생성물

단백질 또는 oligopeptides, water peptides

## 7.11.2 $\alpha$ -Amylase

<u>효소단백질</u>	$\alpha$ -Amylase
IUBMB 번호	3.2.1.1
IUBMB에 의해 주어진 명칭 (체계적인 명칭, 효소명, 동의어)	1,4- $\alpha$ -D-glucan glucanohydrolase ; glycogenase $\alpha$ -amylase alpha-amylase endoamylase Taka-amylase A
IUBMB에 기록된 설명	전분, 글리코겐, 관련 다당류와 올리고당에 임의적으로 작용 ; 감소그룹은 $\alpha$ -배열에서 분리된다. ' $\alpha$ ' 라는 용어는 유리당 그룹의 최초의 무질서한 배열과 관계가 깊은 것이며 가수 분해된 결합의 배열과는 상관이 없다.
반응	1,4- $\alpha$ -결합 D-포도당 세 개 이상을 포함하는 다당류에서 1,4- $\alpha$ -D-글루코시드 결합의 endo-가수분해
반응 형태	hydrolases; glycosidases; glycosidases ; 즉. O-와 S-의 글리코실 화합물의 가수분해 효소
EC 번호	232-565-6
EC 명칭	Amylase, $\alpha$ -
CAS 번호	9000-90-2
관련된 CAS 번호	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (모두 삭제됨)
CAS 명칭	Amylase, $\alpha$ -
효소 단백질 농도	37%
<u>기타성분</u>	
기타 단백질, 펩티드, 아미노산	30%
탄수화물	19%
무기염	14%
<u>추가 매개변수</u>	
기질과 생성물	전분; 글리코겐; 물 ; 다당류; 올리고당;

## 8. IUCLID5에서 물질의 기술(記述)

이 장에서는 IUCLID 5에 등재된 각기 다른 물질들, 즉 단일구성물질과 복합구성물질, 화학적 구성과 다른 식별변수로 정의되는 물질에 대해 설명한다.

### 8.1 일반 원칙

IUCLID 5에는 물질 식별과 관련된 세 가지 중요한 항목이 있다.

‘**목록(Inventories)**<sup>16)</sup>’ 하위에 위치한 EC 목록

‘**목록**’ 하위에 위치한 ‘**참고 물질**’ 목록

‘**물질**’ 데이터 세트의 섹션 1.1과 섹션 1.2



16) 현재 EC 목록만 완성되어 있다. 나중에 TSCA 같은 다른 목록을 이 부분에 추가할 수 있다

### 8.1.1 목록

목록 섹션에는 유럽 위원회(European Commission)/유럽 화학 기구(European Chemicals Agency)에서 관리하고 제공하는 EC 목록(자세한 내용은 3.3장 참조)과 참고 물질목록이 있다. 참고 물질 목록은 사용자가 관리하고 업그레이드하는 지역 목록이다.

사용자가 EC 목록 탭을 선택하면 목록의 자료를 검색하고 열어볼 수 있다.(예 : EC 번호, CAS 번호, EC 명칭 등) 이와 같은 정보는 읽기 전용이다.

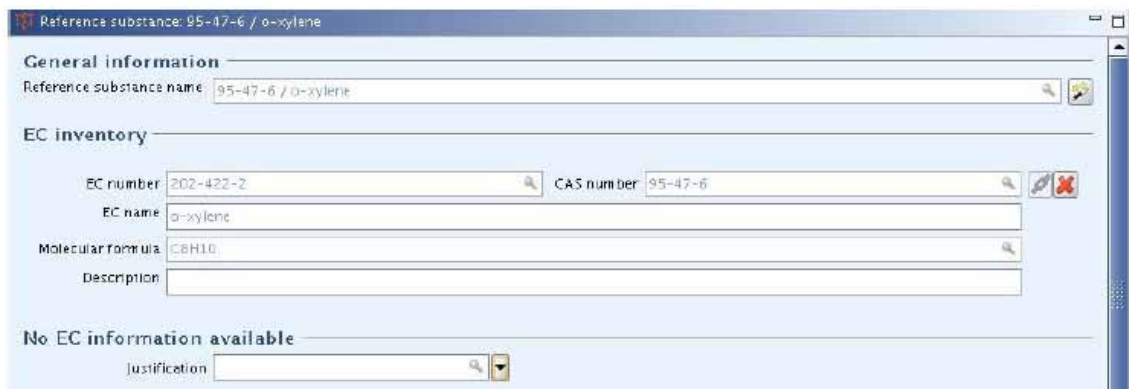
사용자가 참고 목록 탭을 선택하면 불순물과 첨가제를 포함한 제조 물질을 식별하는데 필요한 성분 목록을 입수할 수 있다.

다시 말해서 참고물질 목록은 물질의 구성단위를 만들고 유지한다. 참고 물질은 다양한 물질에 적절하게 재사용할 수 있다.

실례
어떤 물질이 91%의 1,2-dimethylbenzene과 5%의 1,3-dimethylbenzene으로 구성되어 있다고 해보자. 그렇다면 1,2-dimethylbenzene과 1,3-dimethylbenzene은 참고 물질 목록에 등재해야 한다. 그와 같은 정보는 참고물질 목록에 저장하고 보존한다. 같은 성분이 다른 물질에서 각기 다른 퍼센트를 차지하고 있다면 그 내용을 지역 목록에 기록하고, 그 정보를 쉽게 다시 사용할 수 있다.

아래 도해들은 IUCLID 5의 참고 목록 섹션이다. 여기서는 각각의 섹션을 따로 분리해서 그림으로 제시하지만, IUCLID 5에서는 한 화면에 모두 나와 있다.

#### 참고목록 - 파트 1



‘참고물질- 파트1’ 도해에는 다음과 같은 것들이 포함되어 있다.

- 참고 물질 명칭

이 명칭은 자유롭게 선택할 수 있다.(여기서는 95-47-6/ 1,2-dimethylbenzene을 사용했음)

- EC 목록

EC 번호와 같은 맞춤 정보(built-in information)를 포함한 읽기 전용 EC 목록과 연

결되어 있음.

- EC 정보사용 불가

EC 목록 정보를 이용할 수 없는 이유(적절하지 않거나 아직 제시되지 않았다고 같은 이유)를 구체적으로 나열한 선택 목록

## 참고물질- 파트 2

CAS information

CAS number: 95-47-6

CAS name: o-xylene

IUPAC name: 1,2-dimethylbenzene

Description:

Synonyms:

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

Related CAS information

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

‘참고물질- 파트2’ 도해에는 다음과 같은 정보가 포함되어 있다.

- CAS 관련 정보를 포함한 CAS 정보(CAS 번호와 CAS 명칭)

일반적인 규칙에 따라서 EC 번호와 연관된 CAS 번호를 제시한다. CAS 번호가 하나 이상이면(예를 들어 삭제된 CAS 번호와 각기 다른 법률 시스템에서 이런 시스템의 기대치에 맞게 물질을 설명하기 위해 사용하는 동일 물질의 CAS 번호) 다른 CAS 번호를 CAS 관련 번호로 제시한다.

- IUPAC 명칭

물질의 영어로 된 (화학) 명칭을 ‘IUPAC 명칭’ 칸에 기록해야 한다는 사실을 명심한다. 이 칸에는 물질의 출처(source)와 처리과정(process)으로 정의하는 UVCB 물질도 기록할 수 있다.

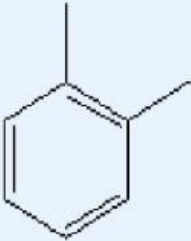
- 추가 정보 설명 칸

물질 설명에 관한 추가 정보는 이 칸에 기록한다. 예를 들어 UVCB 물질이나 무기물에 관한 설명 기록함.

- 별칭

다른 언어로 된 IUPAC 명칭을 기록한다.

### 참고물질 - 파트 3

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

Buttons: Load..., Zoom..., Delete

‘참고물질-파트3’ 도해에는 다음과 같은 정보가 포함되어 있다.

- 분자식

힐 방식(Hill method)에 따라 분자식을 제시한다.

- 범주를 포함한 분자 질량

- 스마일스 표기(SMILES notation)

- InChI 코드

- 구조식 그림

### 8.1.2 물질 데이터 세트(IUCLID 1.1, 1.2, 1.3, 1.4 섹션)

IUCLID 5 데이터 세트에는 종점연구기록(endpoint study records)처럼 물질에 관한 모든 데이터, 즉 물질 구성을 포함한 분류와 표지, 화학적 특징(chemical identity)에 관한 정보가 포함되어 있다. 데이터는 11개 섹션으로 나누어져 있다.

‘물질’이라는 탭을 선택하면 물질 데이터 세트를 만들고 검색하며, 열람하고 업데이트할 수 있다.

‘물질’ 데이터에서 물질 식별과 구성에 관한 자세한 정보는 1.1 섹션과 1.2 섹션에 있다.

#### 물질확인 - 파트 1

The screenshot displays the IUCLID 5 software interface. On the left, a 'Section tree' is visible with '1.1 Identification' selected. The main window shows the 'Substance: O-XYLENE / EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Isp' details. The '1.1 Identification' section is expanded, showing fields for 'Third party flags', 'Role in the supply chain', 'Reference substance', 'Type of substance', and 'Trade names'. The 'Trade names' section is circled in red, showing a table with the following entries:

Name
TG OX
Ortho-X
TG OX2

섹션 1.1(물질 식별)에는 다음과 같은 정보가 포함되어 있다.

- 참고물질

해당 물질과 관련된 참고물질을 기록한다. 물질 명칭도 기록한다.

- 물질 형태

예를 들어 물질 형태 목록에서 단일구성물질을 선택한다.

- 회사명

내부 및 외부 회사명을 모두 기록할 수 있다.

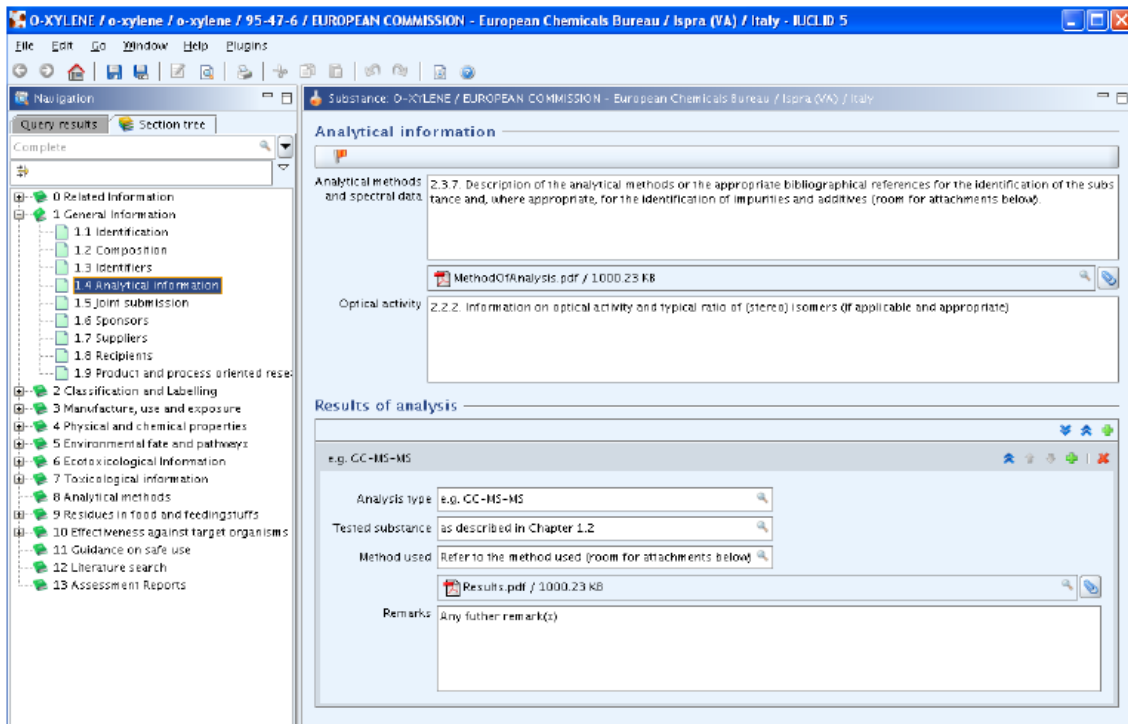
섹션 1.2(물질 구성)는 구성단위인 관련된 참고 물질을 포함해서 물질의 구성을 설명한다.

제조된 물질과 첨가제의 모든 성분(예 : 주성분과 불순물)을 제시한다. IUCLID 5의 섹션 1.2에서 빈칸을 채워 넣는 자세한 방법을 보여주는 실례는 8.2장에서 소개한다.

섹션 1.3(식별변수)은 IT 관점에서 물질을 식별하는 정보를 제공한다. 예를 들어 사용자는 SDS 시스템, 안전 데이터 시트 시스템(Safety Data Sheet system)과 같은 다른 IT 시스템에서 같은 물질을 구별할 때 쓰는 식별변수를 나열할 수 있다. 그리하여 IUCLID 5와 다른 시스템 간의 데이터 교환을 개선할 수 있다. 이것은 이 TGD에서 설명한 물질 식별의 일부가 아니다.

섹션 1.3은 다른 등록 프로그램에서 배포하는 식별 번호(예 : 리치 등록 번호)를 저장할 수 있는 가능성을 제공한다. 이러한 정보는 또한 이 TGD에서 설명한 물질 식별의 일부가 아니다.

## 물질확인 - 파트 2



섹션1.4(분석 정보)는 물질의 광학활성에 관한 정보를 비롯해서 물질의 분석 정보17)를 다룬다.

## 8.2 IUCLID 5 작성하는 방법 실례

8.2.1장에서 단일구성물질의 IUCLID 5를 작성하는 법을 예로 들고, 8.2.2장에서는 복합구성물질의 IUCLID 5 작성예시, 8.2.3장에서는 화학적 구성과 다른 식별변수로 정의되는 물질의 IUCLID 5 작성예시, 8.2.4장에서는 UVCB 물질의 IUCLID 5 작성예시를 소개한다.

### 8.2.1 단일구성물질

실례 : 단일구성물질			
명칭	1,2-dimethylbenzene		
주성분	일반적인 함유량	비교적 낮은 함유량	비교적 높은 함유량
	%(w/w)	%(w/w)	%(w/w)
1,2-dimethylbenzene	91	88	93
불순물			
1,3-dimethylbenzene	5	2	7
1,4-dimethylbenzene	2	0.5	3
물	2	0.5	3

섹션1.1은 물질명칭을 소개한다. 이 TGD에 따르면 이 물질은 '1,2-dimethylbenzene'이라는 단일구성물질이다. 다시 말해 IUCLID 5에서 이 물질의 데이터 세트가 섹션1.1의 참고물질 1,2-dimethylbenzene과 연관되어 있다는 뜻이다.

섹션1.2에서는 물질 구성을 설명한다.

- 순도

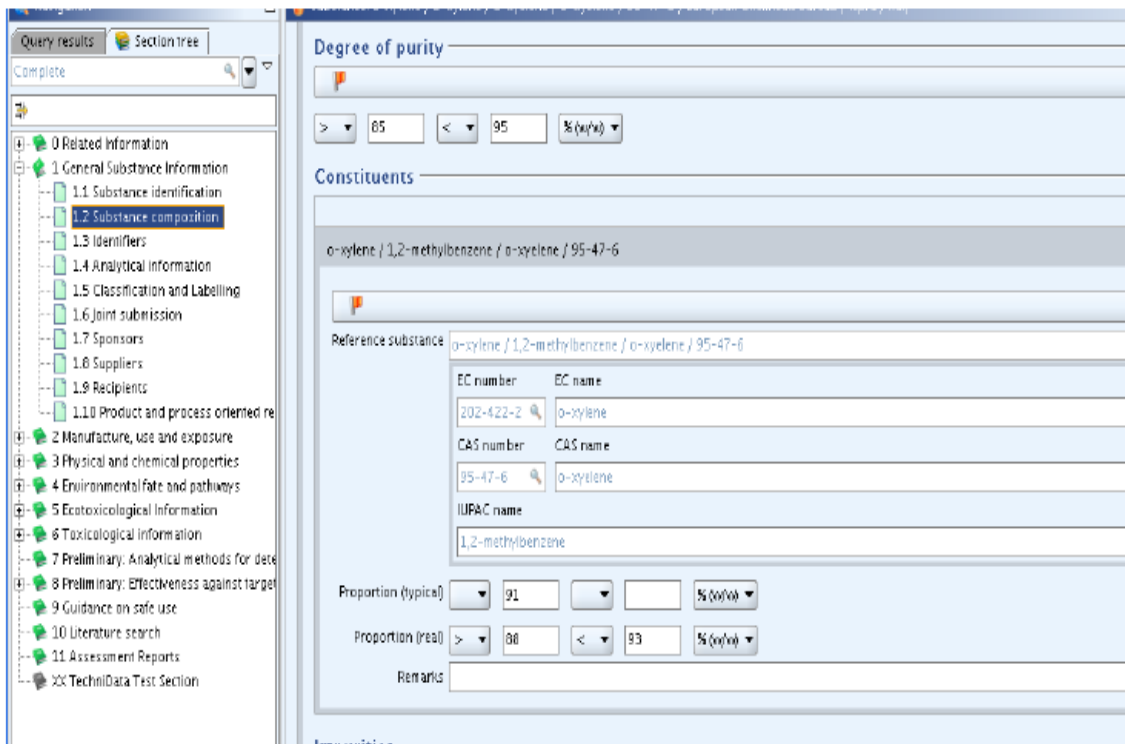
여기서 단일구성물질의 주성분 순도(보통  $\geq 80\%$ )를 제시한다.(상하 한계도 제시함)

- 구성물

16) 이 부분은 IUCLID 5를 베타 테스트 한 후에 다시 정리할 수 있다.

여기서 단일구성물질의 화학적 식별자(EC 번호, EC 명칭, CAS 번호, CAS 명칭, IUPAC 명칭)를 제시한다. 화학적 특징은 참고물질과 연관 지어 밝힌다.

‘평가’ 칸에는 어떤 정보도 기록할 수 있다. 80% 이상 규칙에 위배될 경우, 그 이유를 기록해야 한다.(4.2.2장 참조)



– 불순물

≥1% 농도의 불순물(혹은 물질 분류와 관련되어 있을 경우, 비교적 낮은 농도 한계치보다 높은 불순물)은 최소한 화학적 식별변수(EC 번호와 EC 명칭, CAS 번호와 CAS 명칭, IUPAC 명칭)로 설명해야 한다. 화학적 특징은 참고물질과 연관 지어 밝힌다. 각각의 불순물 농도(일반 농도와 범주)는 %(w/w)로 표기한다.

별도로 기재되지 않은 불순물의 번호와 총 농도를 알고 있을 경우, 총 농도를 100%까지 완벽하게 기재해야 한다.

– 첨가제

모든 첨가제의 화학적 식별변수(EC 번호와 EC 명칭, CAS 번호와 CAS 명칭, IUPAC 명칭)를 기재해야 한다. 화학적 특징은 참고물질과 연관 지어 밝힌다. 모든 첨가제의 농도(일반 농도와 범주)는 %(w/w)로 표기한다.

## 8.2.2 복합구성물질

실례 : 복합구성물질			
명칭	1,4-dimethylbenzene과 1,2-dimethylbenzene, 1,3-dimethylbenzene 혼합물		
주성분	일반 함유율	비교적 낮은 함유율	비교적 높은 함유율
	%(w/w)	%(w/w)	%(w/w)
1,4-dimethylbenzene	35	30	40
1,2-dimethylbenzene	30	25	35
1,3-dimethylbenzene	25	20	30
불순물			
물	10	5	12

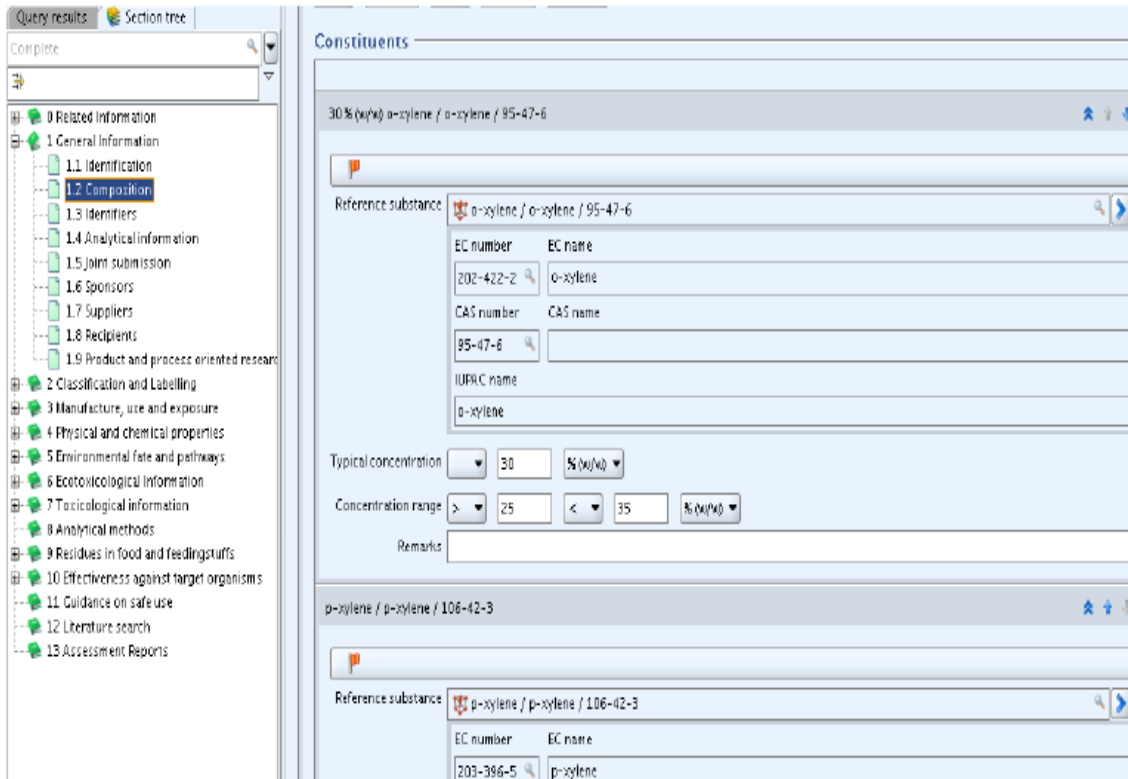
이 TGD에 따르면 이 물질은 세 가지 성분으로 구성된 복합구성물질이며, '1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene, 1,3-dimethylbenzene 혼합물'이라 불린다. 물은 물질에서 더 이상 분리할 수 없는 잔여용매이며, 주성분이 아니라 불순물로 간주한다.

다시 말해 이 물질의 데이터 세트는 IUCLID 5에서 참고물질인 '1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene, 1,3-dimethylbenzene 혼합물'과 연관 지어야 한다.(섹션 1.1 참조)

The screenshot shows the IUCLID 5 software interface. The main window displays the 'Substance identification' section for a mixture of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene, and 1,3-dimethylbenzene. The 'Chemical name' field contains the full name of the mixture. The 'Legal entity' is set to 'EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Ispra (VA) / Italy'. The 'Role in the supply chain' section shows 'Role flags' and 'Role' options (Manufacturer, Importer, Only representative, Downstream user). The 'Reference substance' section lists the EC number (215-535-7) and CAS number (1330-20-7) for the mixture, with the EC name 'styrene'.

모든 성분의 첨가제와 불순물, 화학적 특징, 일반 농도, 농도 범주는 섹션 1.2에 기

재한다. 화학적 특징은 참고물질과 연관 지어 밝힌다.



### 8.2.3 화학적 구성과 다른 식별변수로 정의되는 물질

몇 가지 경우에 독특한 물질을 식별하려면 다른 주요 식별변수가 필요하다.(4.2.4장 참조) 이와 같은 추가적 변수는 각각의 물질 형태에 따라 다르다. 하지만 추가적 변수는 물질을 식별하는 결정적인 요소이다. 예를 들어 광물질의 경우, 독특한 물리적 특징과 화학적 특징을 지닌 광물학적 구성과 결정체 구조를 식별하기 위해서 원소 구성 결과와 스펙트럼 데이터를 결합하는 일이 매우 중요하다.(7.3장의 예시 참조)

물리-화학적 특징은 다음과 같다.

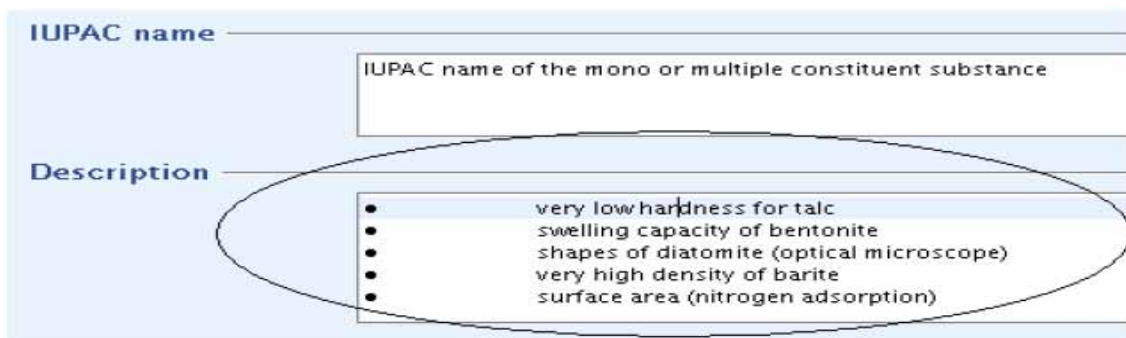
- 결정체 구조(x선 회절로 드러남)
- 모양
- 경도
- 팽창력
- 밀도
- 표면적
- 기타

**실례 : 화학적 구성과 다른 식별변수로 정의되는 물질**

독특한 물리-화학적 특징으로 완벽하게 식별되는 광물질과 같은 특정한 광물질의 추가적인 주요 식별변수를 제시할 수 있다. 그러한 물리-화학적 특징은 다음과 같다.

- 활석의 매우 낮은 경도
- 벤토나이트의 팽창력
- 규조암의 모양(광학현미경)
- 중정석의 높은 밀도
- 표면적(질소 흡착)

이와 같은 정보는 데이터 세트와 연결된 참고 물질 설명 칸에 기록한다.(IUCLID 5의 섹션1.1)



#### 8.2.4 UVCB 물질

UVCB 물질은 물질의 모든 성분을 밝혀낼 수 없으므로, 성분의 IUPAC 명칭으로 기재할 수 없다. 혹은 정확한 물질구성이 변하기 때문에 보통 명확성 부족이라고 기재하기도 한다. UVCB 물질의 주요 식별 변수는 물질의 출처(source)와 사용한 처리과정과 연관되어 있다. UVCB 물질의 경우, 성분과 불순물의 차이가 명확하지 않기 때문에 ‘주성분’과 ‘불순물’이란 용어를 사용하지 않는다.

하지만 화학적 구성과 성분의 특징은 알려진 한도 내에서 가능한 모두 밝힌다. 물질의 구성은 종종 비교적 일반적인 방법으로 설명한다. 예를 들어 ‘선형 지방산 C8-C16’이나 ‘알코올 C10-C14와 4-10 ethoxylate 단위를 함유한 알코올 ethoxylate’라고 설명한다.

UVCB 물질을 기재할 때 단일구성물질과 복합구성물질에서 설명한 것과 같은 시스템 사용한다. UVCB 물질의 참고물질과 알려진 성분을 기록한다.

참고물질로 UVCB 물질을 정의할 때 유의할 점은 UVCB의 (화학적)명칭을 ‘IUPAC 명칭’ 칸에 기재하는 것이다.(UVCB 물질이 ‘고전적인’ IUPAC 명칭을 지니고 있는 경우는 드물지만 말이다.) ‘설명’ 칸에는 추가 정보(예 : 반응조건)를 기록한다.

**실례 : UVCB 물질**

명칭	증류물(석탄), 고온, 벤졸 분별
설명	대략 30°C에서 180°C(86°F에서 356°F)의 증류범위를 가진 고온의 석탄을 분별 증류한 증류물. 주로 이황화탄소와 시클로펜타디엔, 황하수소 약간을 포함한 방향족 hydrocarbon과 C4에서 C6 지방성 화합물로 구성되어 있음.

**EC inventory**

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

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

Molecular formula: [Empty]

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 aliphatic and aromatic hydrocarbons with carbon disulfide, cyclopentadiene and some hydrogen sulfide.

No EC information available

Justification: [Empty]

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 180°C (86°F to 356°F). Composed primarily of C4 to C6 aliphatic and aromatic hydrocarbons with carbon disulfide, cyclopentadiene and some hydrogen sulfide.

물질 데이터 세트는 단일구성물질과 복합구성물질에서 설명한 것과 같은 것을 사용한다. 데이터 세트는 섹션 1.1에서 물질을 정의하는 참고물질과 연관되어 있다.

**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: [Flag]

Role:  Manufacturer  Importer  Sole representative

**Reference substance**

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

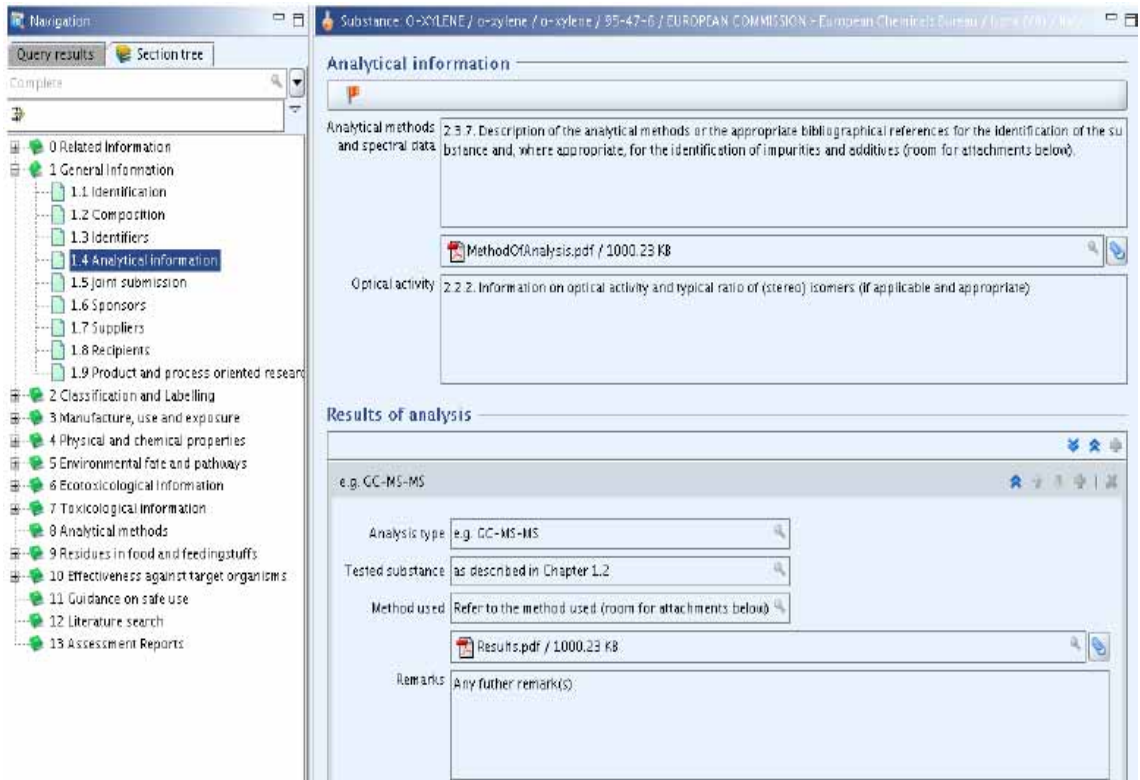
알려진 성분들은 단일구성물질과 복합구성물질에서 설명한 것처럼 적합한 참고물질로 정의한다.

### 8.3 분석 정보 보고하기

분석 정보는 섹션 1.4에 기록한다. 이 섹션은 두 부분으로 나뉘어진다.

- 분석 정보

## - 분석 결과



이 부분은 리치의 필수조건(Annex IV)과 직결된다.

### 분석 정보

- 분석 방법 : 이 칸에는 분석 방법을 설명한다.(리치, Annex IV, 2.3.7) 내용이 길 경우, 문서 첨부도 가능하다.
- 광학활성 : 이 칸에는 광학활성과 (입체) 이성질체의 일반 비율에 관한 정보를 기록한다. 단 응용가능하고 적절한 정보만 기재한다.(리치, Annex IV, 2.2.2)

### 분석 결과

사용자가 분석 결과와 관련된 식별 정보를 제공하고, 크로마토그램과 같은 항목을 추가할 수 있도록 분석 결과를 제시한다. 분석 결과는 스펙트럼 데이터를 제공하거나(리치, Annex IV, 2.3.5) 크로마토그래피 자료를 제공할 때(리치, Annex IV, 2.3.6) 사용할 수 있다.

## 9. 참고자료

The European Parliament and the Council of the European Union (2006) Regulation (E) No 1907/2007 of the European Parliament and of the Council concerning the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and repealing Council Regulation (EEC) No 793/93 and Commission Regulation (EC) No 1488/94 as well as Council Directive 76/769/EEC and Commission Directives 91/155/EEC, 93/67/EEC and 2000/21/EC. 18 December (2006)

Council of the European Union (2006) Proposal for a Regulation of the European Parliament and of the Council concerning the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 12 Juny (2006) 7524/06

Council of the European Union (2005) Proposal for a Regulation of the European Parliament and of the Council concerning the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 19 December (2005) 15921/05

EC (2003-A) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003COM (2003) 644 final: Volume I.

EC (2003-B) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003COM (2003) 644 final: VOLUME II – Annexes I to IX to the Proposal for a Regulation

EC (2003-C) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003COM (2003) 644 provisional version; VOLUME III - Annex X part A to the Proposal for a Regulation

EC (2003-D) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003COM (2003) 644 provisional version; VOLUME IV - Annex X part B to the Proposal for a Regulation.

EC (2003-E) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003COM (2003) 644 provisional version: VOLUME V - Annex X part C to the Proposal for a Regulation.

EC (2003-F) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003COM (2003) 644 final: VOLUME VI – Annexes XI to XVII to the Proposal for a Regulation (contains amended Financial Statement on p. 247et seq.)

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

ECB (2005) Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/EEC (Directives 79/831/EEC and 92/32/EEC) Non-confidential version. EUR 20519 EN. Updated version of June 2005.

European Parliament (2005) European Parliament legislative resolution on the Proposal for a Regulation of the European Parliament and of the Council on the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 17 November (2005) P6\_TA-PROV(2005)11-17

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

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

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 chemicals 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](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](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/alkyl-rg.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/alkyl-rg.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](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: Descriptions 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.