물질확인 및 명명 길라잡이

2007년 6월

REACH 이행에 관한 길라잡이

법적 공지

이 문서는 REACH 의무사항과 그 이행방법을 설명하고 있는 안내 자료입니다. 그러나 REACH 규정 원문만이 확실한 법적 참고자료이며, 본 문서에 담긴 정보는 법적 권고사항에 해당되지 않음을 알려드립니다. 유럽화학물질관리청(European Chemicals Agency)은 본 문서의 내용과 관련한 어떤 책임도 지지 않습니다.

© 유럽화학물질청, 2007
저자의 동의 없이 무단복제를 금합니다.

서 문

이 안내서는 REACH 규정에 따른 등록 요구사항을 이행하는 데 필요한 업계용 안내 자료이다. 이는 이해관계가 있는 모든 측이 REACH 규정 하의 의무조항을 완수하는 데 도움을 주기 위해 마련한 여러 가지 안내 문건 중 일부이다. 이 문건들은 REACH의 핵심절차 뿐 아니라 업계 또는 당국이 REACH 하에서 이용해야 할 몇 가지 구체적인 과학적, 기술적 방법에 대한 자세한 안내정보를 담고 있다.

본 안내서는 유럽위원회(EC)가 주관하는 REACH 이행 프로젝트(RIPs)의 일환으로 제작 및 논의되었으며, 회원국들과 업계, 비정부 기구 등 모든 관련 조직을 대상으로 한다. 본 안내서는 유럽화학물질관리청의 웹 사이트(http://echa.europa.eu/reach_en.html)에서 구할 수 있다. 보충자료는 완성 또는 업데이트되는 대로 해당 웹 사이트에 게재될 예정이다.

<목 차>

서문 ····· 111
목차 ····· 113
1 일반사항 ····· 115
1.1 목적 ····· 116
1.2 범위 ····· 116
1.3 TGD의 구성 ····· 117

2 정의와 약어 ····· 118
2.1 약어 ····· 118
2.2 정의 ····· 118

3 REACH의 물질 확인 체계 ····· 121
3.1 물질의 정의 ····· 121
3.2 EC 목록 ····· 122
3.2.1 REACH 발효 시 EC 목록의 역할 ····· 122
3.2.1 REACH 발효 후 REACH 목록 ····· 123
3.3 REACH 내 물질 확인을 위한 요건 ····· 123

4 REACH 내 물질 확인과 명명에 대한 지침 ····· 124
4.1 서론 ····· 124
4.2 조성이 충분히 정의된 물질 ····· 128
4.2.1 단일성분 물질 ····· 130
4.2.2 다성분 물질 ····· 131
4.2.3 화학조성이 정의된 물질과 기타 주요 식별자 ····· 135
4.3 UVCB 물질 ····· 136
4.3.1 UVCB 물질에 대한 일반 지침 ····· 137
4.3.2 특수한 UVCB 물질 ····· 145

아미노펩티다아제
디펩티다아제

5 동일물질 여부 확인을 위한 기준 ····· 152

6 사전등록 및 조회시의 물질명 ····· 157
6.1 사전등록 ····· 157
6.2 조회 ····· 158

7 예 ····· 158
7.1 디에틸 퍼옥시디카보네이트 ····· 159
7.2 졸리미딘 ····· 160

7.3 이성질체 혼합물 ····· 161
7.4 프래그런스 AH ····· 163
7.5 미네랄 ····· 167
7.6 Lavandin Grosso 정유 ····· 169
7.7 국화오일과 그것으로부터 분리된 이성질체 ····· 174
7.8 페놀, 이소프로필화, 인산염 ····· 177
7.9 제4급 암모늄 화합물 ····· 178
7.10 석유물질 ····· 183
7.10.1 가솔린 혼합유(C4-C12) ····· 183
7.10.2 경유(석유) ····· 183
7.11 효소 ····· 184
7.11.1 서브틸리신 ····· 184
7.11.2 알파-아밀라아제 ····· 185

8 IUCLID 5 내 물질에 관한 기술내용 ····· 187
8.1 일반적 원칙 ····· 187
8.1.1 목록 ····· 188
8.1.2 물질 자료 집합(IUCLID 섹션 1.1, 1.2, 1.3, 1.4) ····· 190
8.2 IUCLID 5 작성법의 예 ····· 192
8.2.1 단일성분 물질 ····· 192
8.2.2 다성분 물질 ····· 194
8.2.3 화학조성과 기타 식별자로 정의된 물질 ····· 195
8.2.4 UVCB 물질 ····· 196
8.3 분석정보의 기록 ····· 198

9 참고자료 ····· 198

<표>

표1.1 REACH 관련 RIP3 안내문서 ····· 115
표2.1 약어 ····· 118
표2.2 정의 ····· 119
표3.1 REACH 부속서 VI2항의 물질확인 매개변수 ····· 124
표4.1 다양한 형태의 잘 정의된 유사물질 표본에 대한 주요 식별자의 분류 ····· 125
표4.2 다양한 형태의 UVCB 물질 표본에 대한 주요 식별자의 분류 ····· 126

1 일반사항

2003년 10월 29일 유럽위원회가 REACH 규정에 관한 제안[EC, 2003-A to EC, 2003-F]을 발표한 뒤 위원회 당국과 회원국들은 모든 관련대상에 대해 REACH를 실제 적용할 수 있도록 대비하는 것을 목표로 "중간 전략"을 시작했다.

유럽위원회는 REACH를 위한 기술적 준비과정의 일환으로 여러 가지 REACH 이행 프로젝트(RIPs)를 통해 REACH에 필요한 방법론과 수단, 기술적 지침의 개발을 조율하고 있다.

이 RIP 3.10 기술지침문서(TGD)는 법적 구속력을 보유하고 있지는 않으나 REACH의 테두리 내에서 화학물질의 확인, 명명, 신고에 관한 방법론을 다루고 있다.

REACH 규정은 오로지 "물질"에 초점을 둔다. REACH 체계가 제대로 운영되기 위해서는 물질을 분명히 확인하는 과정이 필수적이다. 물질 확인에 관한 이 TGD는 업계와 회원국, 유럽화학물질관리청(European Chemicals Agency: ECHA)을 지원하기 위해 마련되었다.
이 TGD는 기존의 화학물질 관련법률(특히, 위험물질에 관한 지침 (Directive 67/548/EEC))을 비롯한 여러 EU 법률 하에서 시행된 물질 확인 경험을 근간으로 한다. REACH 법률의 범위 내에서 적합한 통상적 관행도 포함한다. 적절하다고 판단될 경우에는 유럽 공동체 밖의 기타 화학물질 계획에서 사용된 접근법 또한 고려대상으로 삼았다.

다양한 종류의 물질에 대해 각각 맞춤 설계된 지침을 포함시켰다.

본 TGD는 개별적으로 사용될 수도 있으나, 유럽화학물질관리청 웹 사이트 내 특정 영역(http://echa.europa.eu/reach_eu.html)을 통해 얻을 수 있는 여러 관련 TGD들 중 일부에 해당한다. 아래 **표 1.1**은 산업계를 위한 안내문서의 목록이다. 그 밖의 정보를 확인하려면 http://ecb.jrc.it/REACH 참고.

표 1.1 REACH 관련 RIP3 안내문서

RIP	문서 제목
3.1	등록 지침 중간체에 대한 지침 중합체에 대한 지침 제품 및 공정 중심 연구개발(PPORD)에 대한 지침
3.2	화학물질안정성보고서(CSR)에 대한 지침
3.3	정보요건에 대한 지침
3.4	자료공유에 대한 지침
3.5	하위사용자들을 위한 지침
3.6	분류, 표지, 포장에 대한 지침
3.7	승인 신청에 대한 지침
3.8	규약에 대한 지침
3.9	사회 경제적 분석에 대한 지침
3.10	물질 확인에 대한 지침

1.1 목적

본 기술지침문서(TGD)의 목적은 제조자와 수입자에게 REACH와 관련된 물질의 특성을 기록하는 방법에 대한 명확한 지침을 제공하기 위함이다. TGD는 물질 확인의 중요한 핵심 요소로써, 해당 물질을 어떻게 명명할지 안내해준다. 또한 REACH 하에서 어떤 물질들이 동일한 것으로 간주되어야 할지 여부에 대해서도 지침을 제공한다. 동일 물질의 확인은 기존물질의 사전등록 과정과 신규물질 관련 질의, 자료공유, 공동제출을 위해 중요하다.

물질의 확인은 산업계 내 전문가들에 의해 실시되어야 한다. 물질 확인에 대한 전문 기술이 부족한 산업계 내 관계자들을 위해 본 TGD의 부속서에 매개변수에 관한 추가적 안내사항을 담았다.

이에 더해 본 TGD는 물질의 화학적 본질의 특성을 기술하고 확인하는 데 도움이 되는 몇몇 관련 도구 링크의 목록을 제공한다.

1.2 범위

REACH 제 1조에 의하면 이 규정은 제조, 수입, 시장출시, 물질 단독으로나 조제품과 완제품 내에 포함된 물질의 사용과 관련이 있다. 조제품과 완제품 자체는 REACH의 규제대상이 아니다.

REACH 제 10조에 제시된 바와 같이, 물질을 등록하기 위해서는 REACH 부속서 Ⅵ의 2항에 명시된 매개변수를 사용하여 물질정보(identity)를 기록해야 한다(표 3.1 참조). 본 TGD는 REACH 내 물질의 법적 정의에 해당하는 물질들의 적절한 확인에 중점을 두며, 부속서 Ⅵ 2항의 물질 확인 매개변수에 대한 지침을 제공한다. 정보는 각 물질을 확인하기에 충분할 만큼 제시해야 한다. 요청정보를 제공하는 것이 기술적으로 불가능하거나 과학적 기준에서 필요하다고 여겨지지 않을 때는 하나 또는 그 이상의 물질 확인 매개변수가 생략될 수 있다. 생략을 할 경우 그 이유를 명확히 제시하도록 한다.

물질을 확인하는 데 있어 접근 방법은 물질의 유형에 따라 다르다. 따라서 본 TGD는 사용자가 서로 다른 종류의 물질에 대해 해당하는 장을 참고할 수 있도록 안내해 준다.

Directive 67/548/EEC의 틀 안에서 사용된 EC 목록들(EINECS, ELINCS, NLP 목록)은 물질 확인에 있어 중요한 도구이다. 이들 목록이 REACH 하에서 갖는 역할에 대한 지침은 3.2장에서 다룬다.

REACH(와 본 TGD)의 범위에 해당하는 물질들은 보통 제조과정 중 화학반응의 결과물이며 서로 다른 별개의 성분을 포함하고 있을 수 있다. REACH에서 규정한 물질에는 자연발생 물질에서 화학적으로 유도되거나 분리된 물질 또한 포함되며 이러한 물질은 단일 원소나 분자로 (예: 순수 금속이나 특정 광물) 혹은 몇 가지 성분으로 (예: 정유, 금속 매트) 구성되어 있다. 그러나 다른 유럽공동체 법령에 의해 규제되는 물질들은 REACH 등록이 면제되는 경우가 많다(REACH 2조 참조). REACH 부속서 Ⅳ에 열거된 물질들과 REACH 부속서 Ⅴ에 명시된 기준을 만족시키는 물질들 또한 등록이 면제된다. 그러나 등록을 면제받았다고 해서 그 물질이 반드시 본 규정의 다른 편(예: 제11편 분류 및 표시 목록)에 대해서도 면제를 받는 것은 아님을 유념해야 할 것이다.

따라서 등록자들은 등록이나 기타 의무사항의 범주에 속하는지 판단하기 위해 REACH에 언급된 정의와 면제 규칙을 확실히 파악해야 한다.

REACH 하의 등록은 오로지 물질에만 해당된다. 그러나 본 규정의 조항들은 제조, 시장출시, 물질 단독으로나 조제품과 완제품 내에 포함된 물질의 사용에 적용된다.

더욱이 본 TGD는 구조적으로 연관된 물질의 분류에 대해서는 어떤 지침도 포함하고 있지 않다. 분류는 물질의 고유특성에 관한 정보 요건에 대한 기술적 지침 문서인 RIP 3.3에서 다룬다.

본 TGD에서 다루지 않은 문제에 대해서는 (표 1.1에서 언급된) 다른 지침서나 주무당국 안내데스크를 참조할 수 있다.

1.3 TGD의 구조

본 TGD의 목적 및 범위와 같은 배경 정보는 1장에서 다루었고 사용된 약어와 정의는 2장에서 찾아볼 수 있다. REACH에서 물질 확인체계에 대한 관련정보(예: 법적 원문 내 물질 정의와 정보 요건)는 3장에 제시되어 있다.

물질 확인과 명명을 위한 실질적 지침은 4장에서 다룬다.

- 4.1장은 "잘 정의된" 물질과 "잘못 정의된" 물질 간의 차이를 구분해 설명한다. 이 두 가지 주요 분류집단 내에서 각 물질에 따른 물질 확인 고유 지침을 사용해 다양한 물질 형태를 알아낼 수 있다. 사용자가 특정 형태의 물질에 대한 확인 지침이 실린 해당 장을 찾을 수 있도록 기본도표를 제시해 놓았다.

- 이후 나올 여러 장에는 각 물질 형태별로 설명과 예가 담긴 일련의 규칙으로써 특정 지침이 제공된다.

5장은 물질을 동일한 것으로 간주할지 여부를 확인하기 위한 지침이 제공된다. 사전등록과 질의과정 내의 물질 정보에 관한 지침은 6장에서 제시한다.

또한 7장에서는 4장의 실질적 지침을 사용해 몇 가지 자세한 실례를 들어 산업계에서 본 TGD의 지침을 어떻게 활용할 수 있을지를 설명했다.

끝으로 8장은 IUCLID 5에 담긴 물질에 대한 설명과 관련한 지침을 제시한다.

부속서 Ⅰ은 물질의 화학적 본질의 특성을 기술하고 확인하는 데 도움이 되는 관련 도구 링크의 목록을 제공한다.

부속서 Ⅱ는 명명 규칙, EC 번호와 CAS 번호, 분자식과 구조식 표기, 분석방법과 같이 물질 확인 과정에서 사용되는 개별 물질 확인 매개변수에 대한 배경정보를 추가적으로 제공한다.

2 정의와 약어

2.1 약어

본 기술지침문서에서 사용된 주요 약어를 **표 2.1**에 열거하고 설명하였다.

표 2.1 약어

약 어	의 미
AISE	국제세제 • 세정제협회
CAS	화학물질정보서비스(미국화학학회 산하 부서)
EC	유럽위원회
EINECS	유럽기존화학물질목록
ELINCS	유럽신규화학물질목록
ENCS	기존 및 신규 화학물질 (일본)
ESIS	유럽 화학물질 정보시스템
EU	유럽 연합
GC	가스 크로마토그래피
GHS	세계조화시스템
HPLC	고성능 액체 크로마토그래피
InChI	IUPAC 국제 화학물질 식별자
INCI	국제화장품원료명명법
IR	적외선 분광법
ISO	국제표준화기구
IUCLID	국제통합화학물질정보데이터베이스
IUBMB	국제 생화학 분자생물학 연맹
IUPAC	국제 순수 및 응용화학 연맹
MS	질량 분광법
NLP	더 이상 폴리머로 취급하지 않는 물질
NMR	핵자기공명 분광법
ppm	백만분율
REACH	화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한 (유럽의 신화학물질 관리제도)
RIP	REACH 이행 프로젝트
SIEF	물질정보교환포럼
SMILES	단순화된 분자 입력라인 기입사항
TGD	기술지침문서
TSCA	유독물질 규제법 (미국)
UVCB	화학구조가 알려져 있지 않거나 가변적인 물질, 복합반응 생성물 또는 생물학적 물질
UV/VIS	자외선-가시광선 흡수 분광법
w/w	무게비
XRD	X선 회절
XRF	X선 형광

2.2 정의

본 기술지침문서에서 사용된 주요 정의를 **표 2.2**에 열거하고 설명하였다.
본 정의는 REACH 규정과 물질과 혼합물의 분류, 포장, 표지에 관한 향후 규정에 사용되는 정의를

참작한다. 이런 이유로 인해 일부 용어는 Directive 67/548/EEC 하에서 사용된 것과 다르게 정의된다.

표 2.2 정의

정 의	설 명
첨가물(additive)	어떤 물질을 안정시키기 위해 의도적으로 첨가한 물질[1]
합금(alloy)*	거시적으로 균질하며, 두 가지 이상의 성분으로 구성되어, 기계적인 수단으로 쉽게 분리되기 어렵게 조합된 금속물질.
완제품(article)*	제조 과정 중 그 화학적인 조성을 결정하는 것 이상으로 그 기능을 결정하는 특수한 형태나 표면, 또는 디자인을 얻는 물체(object).
크로마토그래피지문 (chromatographic fingerprint)	분석 크로마토그램에서의 특징적 성분 분포상태로 물질 조성을 표시하는 것.
구성요소 (component)	조제품을 만들기 위해 의도적으로 추가한 물질
성분(constituent)	고유한 화학적 본질로 특징지을 수 있는, 물질 속에 존재하는 단일한 종
EC 목록 (EC Inventory)	이전의 EU 화학물질 규제체계에서 나온 세 가지 유럽 물질 목록인 EINECS, ELINCS, NLP 목록을 합쳐서 EC 목록이라 한다. EC 목록은 물질의 식별자로써 EC 분류번호의 근원이다.
불순물(impurity)	생산된 물질 안에 의도치 않게 포함된 성분. 불순물은 출발물질에 들어있을 수도 있고, 제조공정 중 이차 혹은 불완전 반응의 결과로 생길 수 있다. 최종 물질에 들어있긴 하지만, 의도적으로 추가된 것은 아니다.

중간체 (intermediate)*	다른 물질로의 변형(이하 "합성(synthesis)"이라 표기)을 목적으로 화학공정을 위해 제조되어 사용 또는 소비되는 물질. (a) 비분리 중간체(non-isolated intermediate)란 합성과정에서 합성이 이루어지는 설비로부터 의도적으로 제거되지 않는(추출견본을 제외하고) 중간체를 의미한다. 이러한 설비로는 반응용기, 그 부속 장비 및 다음 반응단계를 위한 용기간 이동을 위하여 행해지는 배관작업뿐 아니라, 연속 공정 또는 회분식 공정에서 물질이 통과하는 모든 설비를 포함한다. 단, 제조공정 이후에 물질이 저장되는 탱크 또는 기타 용기는 제외된다. (b) 현장분리 중간체(on-site isolated intermediate)란 비분리 중간체의 기준에 해당하지 않는 중간체를 의미하며, 하나 이상의 법인체에 의해 중간체의 제조와 그 중간체로부터 다른 물질의 합성이 동일한 장소에서 이루어지는 것을 의미한다. (c) 수송분리 중간체(transported isolated intermediate)란 비분리 중간체의 기준에 해당하지 않는 중간체로 서로 다른 장소 간에 이송되거나 다른 장소로 공급되는 중간체를 의미한다.

1 다른 영역에서는 첨가물이 PH 조절제나 착색제 등과 같은 다른 기능을 할 수도 있다. 그러나 REACH와 본 TGD에서는 첨가물을 안정제로 본다.

IUCLID	IUCLID는 화학물질에 관한 자료 운영을 위한 데이터베이스 및 관리 체계
주성분 (main constituent)	첨가물이나 불순물이 아닌, 어떤 물질의 상당부분을 차지하는 물질을 뜻하며, 그 때문에 물질의 명명과 상세한 물질의 확인에 사용된다.
제조 (manufacturing)*	자연 상태에서 물질을 생산 및 추출하는 것
단량체(monomer)*	특정 공정에 사용되는 관련 고분자형성반응 조건 하에서 추가적으로 일련의 같거나 다른 분자와 공유결합을 형성 할 수 있는 물질.
단일성분물질 (mono-constituent substance)	일반적으로 하나의 주성분이 최소 80%(w/w)를 차지하는 조성을 보이는 물질을 가리킨다.
다성분물질 (multi-constituent substance)	일반적으로 하나 이상의 주성분이 10% 이상, 80% 미만 농도로 들어있는 조성비의 물질을 말한다.
신규물질(non-phase-in substance)	REACH 하에서 기존물질에 대해 제공된 유예제도에서 혜택을 받지 못하는 등록을 요하는 물질.
화학적으로 변형되지 않은 물질 (not chemically modified substance)*	화학적 공정 또는 처리를 거쳤거나 물리적으로 광물학상의 변형을 겪었어도(예를 들어, 불순물제거를 위해) 화학적인 구조가 변하지 않고 남아있는 물질.
기존물질 (phase-in substance)*	아래의 기준 중 적어도 하나를 충족시키는 물질. (a) 유럽기존화학물질목록(EINECS)에 등재된 물질. (b) 제조자 또는 수입자가 서류로 증명할 수 있다는 조건 하에, 1995년 1월 1일 또는 2004년 5월 1일 유럽연합에 가입한 국가 혹은 EU 역내에서 제조되었으나 본 규정 발효 전 15년 동안 최소 한 번도 제조자나 수입자에 의해 시장에 출시되지 않은 물질. (c) 제조자 또는 수입자가 서류로 증명할 수 있다는 조건 하에, 본 규정이 시행되기 전에 제조자 또는 수입자에 의해서 1995년 1월 1일 또는 2004년 5월 1일 유럽연합에 가입한 국가 혹은 EU 역내의 시장에 출시되었으며, Directive 67/548/EEC의 제8조 제1항의 첫 번째 단(indent)에 따라 신고된 것으로 간주되었으나 본 규정에서 정한 고분자의 정의를 만족하지 않는 물질.
조제(preparation)*	두 가지 이상의 물질로 구성된 혼합물이나 용액[2]
고분자(polymer)*	한 가지 이상의 단량체 단위(monomer units)의 배열(sequence)로 특징지어진 분자들(molecules)로 구성된 물질. 이러한 분자들은 분자량이 어떤 범위로 분포되어야 하며, 이 분자량의 차이는 주로 단량체 단위의 수가 다른 것에 기인한다. 고분자(Polymer)는 아래의 사항을 수용한다.

	(a) 최소한 1개 이상의 다른 단량체 단위나 다른 반응물(reactant)과 공유결합되어 있는 최소한 3개 이상의 단량체 단위를 포함하는 분자의 무게가 과반수 (b) 동일한 분자량을 가진 분자의 무게가 과반수 미만 위와 같은 정의의 문맥상, "단량체 단위"란 고분자상의 단량체 물질의 반복 형태(reacted form)를 의미한다.
물질(substance)*	그 안정성을 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.
자연발생물질 (substance which occurs in nature)*	자연 상태에서 발견되는 물질로 가공하지 않았거나 단지 인력, 기계 또는 중력을 이용하여 가공, 즉 물에 용해, 물로 추출, 부유선별법, 증기증류, 열을 가해 수분을 제거, 또는 공기에서 추출되는 물질을 말한다.

* REACH 규정 3조에 의한 정의

3 REACH의 물질 확인 체계

REACH에는 물질의 정의(제 3조)와 등록 목적으로 물질을 확인하는 데 필요한 물질 확인 매개변수(부속서 Ⅵ, 2항)가 포함되어 있다.

본 장에서는 REACH내의 물질 정의를 소개하고(3.1장) 이전 화학물질 규제체계로부터 EC 목록을 어떻게 사용하는지에 관한 포괄적 지침을 제공하며(3.2장) REACH에서 나온 물질 확인요건에 대한 추가적 배경정보를 제공한다(3.3장).

3.1 물질의 정의

REACH에서 물질은 다음과 같이 정의된다(제 3조, 정의 1).

> 물질이란 그 안정성을 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.

REACH 내 물질의 정의는 위험물질에 관한 지침 제 7차 개정판(Directive 67/548/EEC의 개정지침 Directive 92/32/EEC)에서 사용된 물질의 정의와 동일하다. 두 경우 모두에서 정의는 단일 분자구조로 규정된 순수화합물 이상을 의미한다. 물질의 정의는 불순물과 같이 서로 다른 성분까지 포함한다.

2 GHS 상의 정의: "혼합물이란 반응하지 않는 두 가지 이상의 혼합물이나 용액 (혼합물과 조제는 동의어)"
주: 혼합물/조제는 다성분 물질과 같지 않다. 다성분 물질은 "...의 반응질량"이라고 명명된다. 다성분 물질은 화학반응의 결과물이지만 조제를 만들 때는 의도적 화학반응이 발생하지 않는다.

3.2 EC 목록

이전 화학물질 규제체계 하에는 세 개의 단독 목록이 존재했다. 유럽기존화학물질목록(EINECS), 유럽신규화학물질목록(ELINCS), 더 이상 폴리머로 취급하지 않는 물질(NLP) 목록이 그것이다.

1971년 1월 1일과 1981년 9월 18일 사이에 유럽 시장에 나와 있던 물질들은 유럽기존화학물질목록(EINECS)[3]에 등재되어 있다. 1981년 9월 18일 이후 신고 및 시장 출시된 물질들은 유럽신규화학물질목록(ELINCS)에 올라 있다.

고분자는 EINECS 신고가 면제되었고 Directive 67/548/EEC 내의 특별 규칙 하에 종속되었다. "고분자"라는 용어는 Directive 67/548/EEC의 제 7차 개정지침 (Directive 92/32/EEC)에서 좀 더 상세하게 정의되었다. 이 정의를 실행함에 따라 EINECS의 신고규칙 하에서 고분자로 간주되었던 물질 중 일부가 제 7차 개정지침 하에서는 더 이상 고분자로 간주되지 않게 되었다. EINECS에 등재되어 있지 않은 모든 물질이 신고 가능하기 때문에 이론상으로는 모든 NLP(더 이상 폴리머로 취급하지 않는 물질)이 신고 되어야 한다. 그러나 유럽 각료이사회는 더 이상 폴리머로 취급하지 않는 물질이 이전처럼 신고 대상이 되지 않아야 할 것임을 분명히 했다. 유럽위원회는 더 이상 폴리머로 취급하지 않는 물질의 목록(NLP 목록)을 작성하라는 요청을 받았다. 이 목록에 포함될 물질은 1981년 9월 18일부터 1993년 10월 31일 사이에 유럽 시장에 출시되었으며 EINECS의 신고규칙 하에서 고분자로 간주되었으나 7차 개정지침 하에서는 더 이상 고분자로 간주되지 않는 조건을 만족시키는 물질이다. NLP 목록은 비전면적인 목록이다.

이들 세 가지 EINECS, ELINCS, NLP 목록을 합친 것을 EC 목록이라고 한다. 이 목록에 올라있는 각각의 물질은 유럽위원회에 의해 할당받은 EC 번호를 가지고 있다 (EC 번호에 대한 좀 더 상세한 정보는 부속서 Ⅱ 참조).

이러한 물질에 관한 정보는 유럽화학물질국 웹사이트(http://ecb.jrc.it)의 서브섹션 "ESIS"에서 얻을 수 있다. 향후에는 등록된 물질 목록이 유럽화학물질관리청에 의해 관리 및 발표될 것이다.

3.2.1 REACH 발효 시 EC 목록의 역할

제조자와 수입자는 물질이 기존물질인지 신규물질인지 확인하는 도구로 EC 목록을 사용할 수 있다. 따라서 EC 목록은 제조자와 수입자가 어떤 경우 물질의 등록이 요구되는지와 사전등록이나 질의가 필요한지 여부를 알아보는 데 도움을 준다.

어떤 물질이 EINECS나 NLP 목록에 등재되어 있다면 모든 제조자와 수입자는 그 물질을 기존물질로 간주한다. 특정 상황 하에서는 EINECS나 NLP 목록에 등재되어 있지 않은 물질도 기존물질로 간주될 수 있다. (1) NLP 기준을 충족시키지만 NLP 목록에는 올라 있지 않은 물질, (2) 유럽 역내나 2004년 5월 유럽연합에 가입한 국가에서 제조되었으나 REACH 규정 발효 전 15년 동안 최소한 한 번이라도 제조자나 수입자에 의해 시장 출시되지 않은 물질.

3 EINECS는 업계에 의한 추가물질 신고가 가능했던 유럽핵심목록(ECOIN)을 기초로 하고 있다. ECOIN은 유럽 시장에 출시된 것으로 추정되는 서로 다른 화학물질 목록(예: TSCA)을 섞은 것이었다.

어떤 물질이 Directive 67/548/EEC에 따라 사전에 신고되었고 따라서 ELINCS에 등재되어 있다면 제출된 신고서는 REACH를 위한 등록으로 간주된다(제 24조). 이러한 물질들은 관련 제조자나 수입자에 의해 이미 등록된 것으로 간주하며 그 제조자/수입자로부터 최초 등록을 필요로 하지 않는다. 그러나 그 제조자/수입자는 등록을 지속적으로 업데이트할 의무가 있다. 그 외 ELINCS에 등재된 물질의 제조자/수입자들(이전 신고에 적용되지 않는)은 (신규물질에 대해) 등록 의무가 있고 사전 등록자와 자료를 공유하게 된다. 이 문제에 관한 지침을 더 알고 싶다면 등록 지침을 참조할 수 있다.

3.2.2 REACH 발효 후 REACH 목록

REACH가 발효되면 유럽화학물질관리청이 등록된 물질 목록을 관리하게 된다. 각 등록자는 물질을 등록할 때마다 등록 번호를 받는다. EC 번호(EINECS, ELINCS, NLP 번호 중 하나)가 없는 물질에 대해서는 유럽화학물질관리청이 물질 확인 후 EC 번호를 할당할 것이다.

유럽화학물질관리청은 그 목록을 정기적으로 업데이트한다. 새로운 REACH 물질들(REACH에서 신규물질이라 부르는 물질)이 추가될 것이다. 등록 절차가 있으므로 이 새로운 등록 물질 목록으로 인해 "오류"가 있었던[4] 현재의 EINECS를 "수정"할 수 있다. 새로운 REACH 물질에 EC 번호를 배정하는 체계는 EINECS, ELINCS, NLP 목록에 사용된 방법을 따를 가능성이 가장 높다.

때로 EINECS에서 물질에 대한 설명이 비교적 광범위한 경우가 있다. 이 경우에는 등록예정자에게 해당 물질을 좀 더 상세히 설명하도록 요구한다(예: IUPAC명이나 기타 식별자를 통해). EINECS 내용이 모호하다 하더라도 기존규칙으로부터 혜택을 얻으려면 등록자는 그 물질이 목록 중 어떤 영역에 속하는지 지정해야 한다. 이러한 경우 유럽화학물질관리청이 해당 물질에 신규 EC 번호를 할당하는 것이 적절한지 여부를 결정하게 된다.

물질 확인과 관련한 사전등록, SIEF 구성, 공동제출에 대한 보다 상세한 지침은 RIP 3.4 자료공유 지침에 제시되어 있다.

3.3 REACH 내 물질 확인을 위한 요건

REACH 법률에 의거, 등록이 요구되는 경우 서류에는 부속서 Ⅵ 2항에 명시된 대로 물질 확인에 대한 정보가 포함되어야 한다. 이 정보는 각 물질을 제대로 확인하기에 적합해야 한다. 만약 하나 이상의 물질 확인 매개변수에 관한 정보를 제공하는 것이 기술적으로 불가능하거나 과학적 기준에서 불필요하다고 여겨질 때는 그 이유가 분명히 명시되어야 한다[부속서 Ⅵ의 유의사항 참조].

REACH 제 28조에 따라 제조자와 수입자가 유예제도로부터 혜택을 받고 등록을 준비하는 동안에도 제조나 수입활동을 지속할 수 있으려면 기존물질에 대해 사전등록을 해야 한다. REACH는 이 단계의 물질 확인 요건에 있어 부속서 Ⅵ 2항에 따른 확인 관련 서류 일체를 요구하지 않는다. 단지 등록 후보자가 그 물질이나 (해당하는 경우) 물질군의 명칭을 EC 번호와 CAS 번호와 함께(가능한 경우에만) 제시하도록 규정하고 있다.

---

4 EINECS는 1990년 6월 15일에 발행되었고 십만 가지 이상의 물질을 포함하고 있다. 이 목록을 사용하는 동안 많은 오류가 확인되었다(부정확한 화학물질명, 화학식, CAS RN과 같은 활자 오류). 이 때문에 2002년 3월 1일에 고침표가 발행되었다. 그럼에도 모순점들이 계속해서 추가적으로 발견되었다.

REACH 부속서 VI에 포함된 물질 확인 매개변수의 개요는 **표 3.1**에 나타나 있다.

표 3.1 REACH 부속서 VI 2항의 물질 확인 매개변수

2.	**물질의 확인** 각각의 물질에 대하여 제공된 정보는 각 물질을 확인하기에 충분해야 한다. 아래의 항목 중 하나 이상에 대한 정보를 제공하는 것이 기술적으로 불가능하거나 과학적 기준에서 불필요하다고 여겨질 때는 그 이유가 분명히 명시되어야 한다.
2.1	**각 물질의 명칭 또는 기타 식별자**
2.1.1	IUPAC 명명법 상의 명칭이나 기타 국제 화학물질명
2.1.2	기타 명칭(일반명, 상품명, 약어)
2.1.3	EINECS 또는 ELINCS 번호 (가지고 있고, 해당될 경우)
2.1.4	CAS 명칭과 CAS 번호 (가지고 있는 경우)
2.1.5	기타 식별 부호(가지고 있는 경우)
2.2	**각 물질의 분자식과 구조식 관련 정보**
2.2.1	분자식과 구조식(SMILES 표기법 포함, 있는 경우)
2.2.2	(입체)이성질체의 광활성도와 특징적 비율에 관한 정보(적용 가능하고 해당될 경우)
2.2.3	분자량 또는 분자량 범위
2.3	**각 물질의 조성**
2.3.1	순도(%)
2.3.2	이성질체와 부산물을 포함한 불순물의 성질
2.3.3	(상당한 양의) 주요 불순물이 차지하는 비율
2.3.4	모든 첨가물(예: 안정제나 억제제) 의 성질과 크기의 정도(.....ppm, ...%)
2.3.5	분광 데이터(자외선, 적외선, 핵자기공명 또는 질량스펙트럼)
2.3.6	고성능 액체 크로마토그램, 가스 크로마토그램
2.3.7	물질 확인 및 적절한 경우에 한해 불순물과 첨가물 확인을 위한 분석방법이나 적절한 문헌에 대한 설명. 이 정보는 해당 방법을 재연할 수 있을 정도로 충분한 것이어야 한다.

4 REACH 내 물질 확인과 명명에 대한 지침

4.1 서론

확인과 명명에 관한 규칙은 물질 형태에 따라 다르다. 실질적인 이유로 본 지침서는 각 종류의 물질에 대해 사용자가 적절한 지침이 제시되어 있는 장으로 곧장 안내되도록 구성되어 있다. 이를 위해, 서로 다른 물질 형태에 대한 설명을 아래에 제시했고 마지막에는 해당하는 장을 찾을 수 있는 검색표를 제시했다.

물질 확인은 최소한 REACH 부속서 VI 2항(**표 3.1** 참조)에 열거된 물질 확인 매개변수를 사용해야 한다. 따라서 모든 물질은 적절한 확인 매개변수들의 조합으로 확인되어야 한다.

- IUPAC과/또는 다른 명칭 및 기타 식별자, 예: CAS 번호, EC 번호(부속서 VI 2.1항)
- 분자와 구조 정보 (부속서 VI 2.2항)
- 화학적 조성 (부속서 VI 2.3항)

물질은 그 화학적 조성과 물질에 포함된 각 성분의 화학적 성질과 함량으로 완전히 확인된다. 대다수 물질은 이러한 간단한 확인이 가능하지만 특정 물질에 있어서는 REACH의 범위 내에서 그것이 불가능하거나 부적절하다. 이런 경우 기타 혹은 추가적 물질 확인 정보가 요구된다.

따라서 물질을 크게 두 집단으로 나눌 수 있다.

1. “잘 정의된 물질”: 정성 및 정량 조성이 명확히 밝혀져 있어 REACH 부속서 Ⅵ 2항의 확인 매개변수를 바탕으로 충분히 확인 가능한 물질.
2. “UVCB 물질”: 화학구조가 알려져 있지 않거나 가변적인 물질, 복합반응 생성물 또는 생물학적 물질. 이러한 물질은 위의 매개변수로 충분히 확인할 수 없다.

잘 정의된 물질에 대한 조성 변화 정도는 주성분의 농도 범위의 상하한선으로 지정되어 있다. UVCB 물질은 그 변화폭이 비교적 크고/크거나 예측 불가능하다.

잘 정의된 물질(성분이 많고 각 성분이 넓은 범위 내에 속하는 반응생성물)과 UVCB 물질(가변적이고 예측하기 힘든 조성을 가진 반응생성물) 중 어느 쪽에도 속하지 않는 경계선적인 경우가 있을 것이라는 점이 인정된다. 이 때 가장 적절한 방식으로 물질을 확인하는 것은 등록자의 책임이다.

“잘 정의된 물질” 중 주성분이 하나인 경우와 하나 이상인 경우에 확인과 명명 규칙이 각각 다르다. 그리고 “UVCB"에 속하는 다양한 물질 형태에 대해 서로 다른 확인 및 명명 규칙이 제시되어 있다.

표 4.1과 **4.2**에는 다양한 물질 형태 중 몇 가지 사례에 해당하는 주요 식별자들이 열거되어 있다. 이 예들은 물질 확인에 있어 유사점과 차이점을 쉽게 식별할 수 있는 방식으로 분류해 놓았다.

표 4.1과 **4.2**는 가능한 모든 물질 형태를 포괄하는 목록을 제시하지 않는다. 이 같은 확인 및 명명 규칙에 따른 물질의 분류는 공식적인 물질 분류 체계가 아니라 특정 규칙을 알맞게 적용하고 본 TGD에서 적절한 지침을 찾는 데 있어 실질적인 도움을 주는 것으로 간주되어야 할 것이다.

표 4.1 다양한 형태의 잘 정의된 유사물질 표본에 대한 주요 식별자의 분류

공통적 특징	보기 또는 표본	주요 식별자
화학적 조성이 잘 정의된 물질 [4.2장]	단일성분 물질 예 - 벤젠(95%) - 니켈(99%) [4.2.1장]	화학조성: 한 가지 주성분이 80% 이상 - 주성분의 화학적 본질 (화학명, CAS 번호, EC 번호 등) - 일반 농도와 상하한선
	다성분 물질 예: 2-,3-,4-클로로톨루엔의 반응질량(각각 30%)	화학조성: 10% 이상 80% 미만인 주성분들의 혼합물 (반응질량)

	[4.2.2장]	- 주성분 각각의 화학적 성질 - 각 성분과 반응 질량 자체의 일반 농도와 상하한선
	화학조성 이상의 것으로 정의되는 물질 예: 흑연과 다이아몬드 [4.2.3장]	단일성분 또는 다성분 물질로써의 화학조성과 그 외 물리적 또는 특징적 기준항목 (예: 결정형태, (지질학적) 광물조성 등)

표 4.2 다양한 형태의 UVCB 물질 표본에 대한 주요 식별자의 분류

공통적 특징		보기 또는 표본	주요 식별자		
			원료	공정	기타 식별자
UVCB 물질 (화학구조가 알려져 있지 않거나 가변적인 물질, 복합반응 생성물 또는 생물학적 물질) [4.3장]	생물재료(B)	생물재료 추출물 예: 천연향, 천연오일, 천연염료와 색소	• 식물이나 동물의 종 (species)과 (family) • 식물/동물의 부분	• 추출 • 분별, 농축, 분리, 정제 등. • 유도*	• 알려진 조성이나 일반적 조성 • 크로마토그래피를 비롯한 기타 지문 • 관련 규격 • 색지수 • 표준 효소 지수 • 유전암호 • 입체 배열 • 물리적 성질 • 함수/활성도 • 구조 • 아미노산 배열
		복합 생물 고분자 예: 효소, 단백질, DNA나 RNA 조각, 호르몬, 항생물질			
		발효생성물 항생물질, 생물 고분자 물질, 혼합효소, 비나세(vinasses, 당 발효 생성물) 등.	• 배지 • 응용 미생물	• 발효 • 생성물의 분리 • 정제 단계	• 생성물의 형태. 예: 항생물질, 생물 고분자 물질, 단백질 등 • 알려진 조성

	물질조성이 제대로 정의되어 있지 않거나 복합적 혹은 가변적인 화학물질과 광물질(UVC)	예측하기 어렵고 가변적인 조성을 가진 반응 혼합물	• 출발물질	• 화학반응 형태. 예: 에스테르화, 알킬화, 수소첨가	• 알려진 조성 • 크로마토그래피를 비롯한 기타 지문 • 관련 규격 • 분리범위 • 사슬 길이의 범위 • 방향족 화합물/지방성 화합물 비율 • 알려진 조성 • 표준 지수
		• 분별물이나 증류물. 예: 석유물질 • 점토. 예: 벤토나이트 • 타르	• 원유 • 석탄/토탄 • 무기가스 • 무기물	• 분별, 증류 • 분별물 전환 • 물리적 공정 • 잔류물	
		농축물이나 용해물(예: 금속성 광물) 또는 다양한 용해나 야금공정의 잔류물(예: 슬래그)	• 광석	• 제련 • 열처리 • 여러 가지 야금 공정	• 알려진 조성이나 일반적 조성 • 금속 농도

* 밑줄 친 공정은 새로운 분자의 합성을 나타낸다.

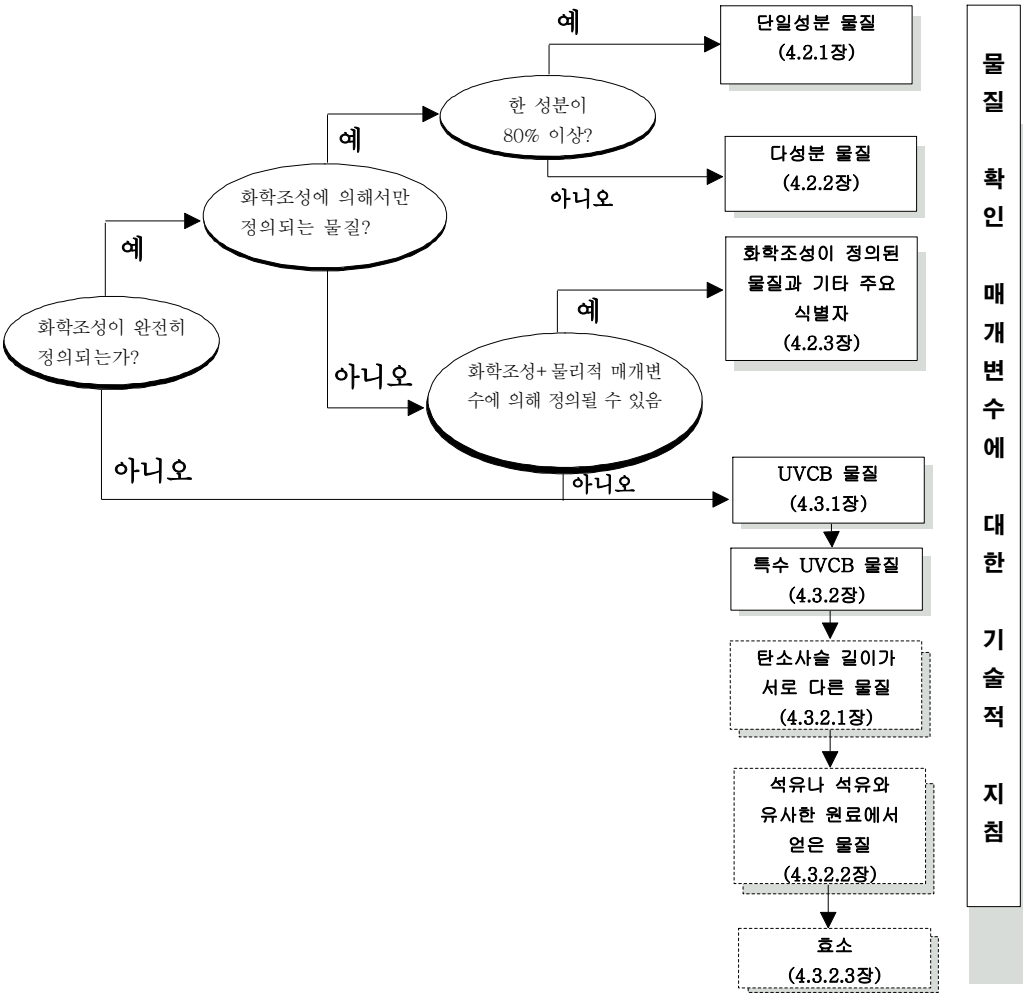
이 장은 다양한 종류의 물질의 물질 확인에 관한 세부적 지침을 포함하는 서브 챕터(하위 장)들로 나누어져 있다. 해당하는 장을 찾기 위한 검색표를 **그림 4.1**에 제시했다.

그림 4.1의 검색표는 개략적인 기준을 바탕으로 한다. 등록자는 가장 적절한 장을 선택하여 해당 형태의 물질에 대한 규칙과 기준에 맞게 물질의 정보를 기록할 책임이 있다.

기본 규칙은 가능한 한 화학 조성과 성분 확인으로 물질을 최대한 정의하는 것이다. 이것이 기술적으로 불가능할 경우에만 다양한 UVCB 물질에 대해 명시된 바대로 다른 식별자들을 사용한다.

등록자가 본 TGD의 물질확인 규칙과 기준에서 벗어날 경우 정당한 사유를 제시해야 한다. 물질의 확인은 투명하고 책임이 있으며 일관성이 확보되어야 한다.

그림 4.1 다양한 형태의 물질에 대한 해당 지침을 나타내는 TGD 장 및 부속서 검색표



물질의 확인, 그리고 적절한 경우 불순물과 첨가물의 확인을 위한 분석법과/또는 적절한 서지참조가 제공될 필요가 있다(REACH 부속서 Ⅵ 2.3.5, 2.3.6, 2.3.7항). 이 정보는 확인 방법을 재연할 수 있을 만큼 충분해야 한다.

4.2 조성이 충분히 정의된 물질

화학조성이 충분히 정의된 물질은 주성분에 따라 명칭이 정해진다. 그러나 일부 물질의 경우 화학조성만으로는 특성을 기술하기에 불충분하다. 이런 경우에는 물질 확인을 위해 그 물질의 화학구조에 관한 물리적 매개변수가 몇 가지 더 추가되어야 한다.

일반 규칙상, 물질의 조성을 최대 100% 다루는 것을 목표로 하며 각각의 성분에 대해 구조적 정보를 포함한 모든 화학적 상세정보가 제공되어야 한다. 화학조성으로 정의되는 물질은 아래와 같이 구분된다.

- 주성분: 첨가물이나 불순물 외에 물질 안에 들어있는 성분으로 해당 물질에서 상당 부분을 차지하여 물질 명명과 물질의 세부적 확인에 사용된다.

- 불순물: 생산된 물질 안에 의도치 않게 포함된 성분. 불순물은 출발물질에 들어있을 수도 있고, 제조공정 중 이차 혹은 불완전 반응의 결과로 생길 수 있다. 최종 물질에 들어있긴 하지만, 의도적으로 추가된 것은 아니다.

- 첨가물: 물질을 안정시키기 위해 의도적으로 첨가한 물질

단일성분 물질이나 다성분 물질 내에서 주성분이 아닌 모든 성분(첨가물을 제외하고)을 불순물이라 본다. 일부 분야에서는 “미량성분(traces)"이라는 용어를 흔히 쓰기도 하지만 본 TGD에서는 ”불순물(impurities)"이라는 용어만을 사용한다.

각기 다른 성분마다 확인 요건도 다르다.
- 주성분은 물질의 명명에 기여하며 각각의 주성분은 관련된 모든 식별자에 의해 완벽히 명시되어야 한다.
- 불순물은 물질의 명명에 기여하지 않으며 명칭과 CAS 번호, EC 번호 그리고/또는 분자식에 의해서만 명시된다.
- 첨가물은 물질 조성에 기여하며 (명명에는 기여하지 않음) 항상 완전히 확인되어야 한다.

단일성분 물질과 다성분 물질을 구분하기 위해 몇 가지 규정이 사용된다.
- 단일성분 물질은 한 가지 성분이 최소 80%(w/w) 들어있고 불순물 함량은 최대 20%(w/w)인 물질이다.
  단일성분 물질은 하나의 주성분에 따라 명칭이 정해진다.

- 다성분 물질은 주성분 몇 가지가 대략 10%(w/w) 이상 80%(w/w) 미만의 농도로 존재하는 물질이다.
  다성분 물질은 두 가지 이상 주성분의 반응질량으로 명명된다.

위에 언급된 규칙은 지침용으로 고안된 것이다. 타당한 사유가 있을 시에는 규칙에서 벗어난 사항도 수용 가능하다.

보통은 농도가 1% 이상인 불순물이 명시된다. 그러나 분류와/나 PBT 평가[5]와 관련된 불순물은 항상 명시하도록 한다. 일반 규칙상, 물질의 조성 정보는 100%까지 완전히 갖춰져야 한다.

REACH 규정과 본 TGD 내의 첨가물은 물질의 안정성을 유지하는 데 필수적인 안정제이다. 따라서 첨가물은 물질의 필수 성분이며 질량수지를 만들 때 고려대상이 된다. 그러나 REACH와 본 TGD 상의 정의 이외에 “첨가물”이라는 용어는 PH 조절제나 착색제처럼 다른 기능을 가진 의도적으로 첨가된 물질로 사용되기도 한다. 이렇게 의도적으로 첨가된 물

5 PBT 평가와 관련 농도 한계에 관한 더 많은 정보는 RIP 3.2 TGD PBT 평가의 화학물질 안정성 평가 섹션에서 찾아볼 수 있다.

질들은 원래 물질의 일부가 아니며, 따라서 질량수지를 만들 때 고려대상이 되지 않는다.

REACH에서 정의한 바에 의하면 조제는 물질을 의도적으로 혼합한 것이므로 다성분 물질로 간주하지 않는다.[6]

단일성분 물질에 대한 상세한 지침은 4.2.1장에, 다성분 물질에 대한 상세한 지침은 4.2.2장에 수록되어 있다. 추가 정보(예: 특정 광물)가 필요한 물질에 대한 지침은 4.2.3장에서 찾을 수 있다.

4.2.1 단일성분 물질

단일성분 물질은 한 가지 주성분이 최소 80%(w/w) 들어있는 양적 조성으로 정의되는 물질이다.

4.2.1.1 명명 규칙

단일성분 물질은 주성분의 이름을 따서 명명한다. 원칙적으로 명칭은 IUPAC 명명 규칙에 따라 영어로 제시되어야 한다(부속서 I 참조). 그 밖에 세계적으로 인정된 명칭을 추가로 제시할 수 있다.

4.2.1.2 식별자

단일성분 물질은 주성분의 화학명과 기타 식별자(분자식과 구조식 포함), 불순물과/이나 첨가물의 화학적 성질 및 분광, 분석 정보로 입증되는 일반농도와 농도범위에 의해 확인된다.

주성분	함량(%)	불순물	함량(%)	물질명
m-xylene(크실렌)	91	o-xylene	5	m-xylene
o-xylene(크실렌)	87	m-xylene	10	o-xylene

일반적으로 주성분은 그 함량이 80% 이상이며 위에 언급된 모든 매개변수에 의해 완전히 명시되어야 한다. 농도가 1% 이상인 불순물은 화학명(IUPAC와/나 CAS 명칭), CAS 번호와 EC 번호 그리고/또는 분자식 중 적어도 하나의 식별자에 의해 명시되어야 한다. 분류와/나 PBT 평가[7]와 관련된 불순물은 농도와 상관없이 동일한 식별자들에 의해 항상 명시되도록 한다.

> 80% 규칙을 정확히 적용하기 위해 PH 조절제나 착색제같이 의도적으로 첨가된 물질은 질량수지에 포함시키지 않는다.

"80% 규칙"은 신규물질의 신고에 적용되어 왔다(Directive 67/548/EEC). 이는 대략적인 규칙으로 보일 수도 있으나 이 80% 규칙에 어긋나는 경우에는 정당한 이유를 밝혀야 한다. 정당성이 인정되는 경우의 예는 다음과 같다.

---

6 향후 GHS의 분류와 표지 규정 하에서 "조제"는 "혼합물"로 불리게 된다.

7 PBT 평가와 관련 농도 한계에 관한 더 많은 정보는 RIP 3.2 TGD PBT 평가의 화학물질 안정성 평가 섹션에서 찾아볼 수 있다.

- 주성분 함량이 80% 미만이지만, 80% 규칙을 만족시키면서 물질명이 동일한 단일성분 물질과 물리화학적 특성이 비슷하고 유해성 프로파일(hazard profile)이 같다고 여겨질 경우.

- 주성분과 불순물의 농도범위가 80% 기준과 부분적으로 일치하고 주성분이 80% 이하인 경우가 드물 때.

예									
물질	**주성분**	**고함량 (%)**	**일반 함량 (%)**	**저함량 (%)**	**불순물**	**고함량 (%)**	**일반함량 (%)**	**저함량 (%)**	**물질명**
1	o-xylene (크실렌)	90	85	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
주성분과 불순물의 농도범위로 인해 물질 1과 2는 o-크실렌과 m-크실렌이라는 두 가지 주성분을 가진 다성분 물질로 간주될 수도 있고 단일성분 물질로 간주될 수도 있다. 이 경우에는 두 물질 모두를 단일성분 물질로 본다. 이렇게 결정되는 이유는 o-크실렌이 대체로 80%를 넘는다는 점 때문이다.									

IUCLID 5에 담긴 단일성분 물질을 설명하는 방법에 관한 지침은 8.2.1장에 제시되어 있다.

4.2.1.3 분석 정보

단일성분 물질의 구조를 확인하기 위해서는 충분한 분광 데이터가 필요하다. 몇 가지 분광광도법이 적절하게 쓰일 수 있으며 그 예로는 자외선-가시광선 흡수 분광법(UV/VIS), 적외선 분광법(IR), 핵자기 공명 분광법(NMR), 질량 분광법(MS) 등이 있다. 무기물 분석에는 X선 회절(XRD)이나 X선 형광(XRF), 원자 흡수 분광법(AAS)이 더 적합하다.

물질의 조성을 확인하는 데는 가스 크로마토그래피(GC)나 고성능 액체 크로마토그래피(HPLC)와 같은 크로마토그래피 기법이 필요하다. 적절할 경우에 한해 확실한 성분 분리 기술 또한 사용될 수 있다.

분광 및 분석 기법은 지속적으로 변화할 수밖에 없다. 따라서 적절한 분광, 분석 데이터를 제시하는 것은 등록자의 책임이다.

4.2.2 다성분 물질

다성분 물질은 하나 이상의 주성분의 농도가 10%(w/w) 이상, 80%(w/w) 미만인 양적 조성으로 정의되는 물질이다. 다성분 물질은 제조공정의 결과물이다.[8]

REACH는 물질이 생산될 때 등록을 요구하고 있다. 다성분 물질이 제조되는 경우 그 다성분 물질은 등록되어야 한다.[9,10] 물질제조의 여러 단계에서 어느 정도까지 "제조"의 정의에

8 조제와 다성분 물질의 차이점은 조제는 화학반응 없이 두 가지 이상의 물질을 혼합하여 얻어지는 반면 다성분 물질은 화학반응의 결과물이라는 점이다.

적용되는지는 사례에 따라 개별적으로 정해진다. 이전에 EINECS에 의해 적용된 모든 물질(예: 모든 개별 성분이 EINECS에 등재된 경우 다성분 물질도 포함)은 기존물질로 승인된다. 이러한 물질은 그 물질의 위험 프로파일이 개별 성분 정보로 충분히 설명될 경우 검사과정이 필요 없다.

4.2.2.1 명명 규칙

다성분 물질은 그 물질을 생산하는 데 필요한 출발 물질이 아니라 해당 물질 자체의 주성분의 반응질량으로 명명된다. 일반적인 포맷은 "[주성분 명칭]의 반응질량"이다. 명칭의 순서는 일반 농도 비율이 가장 높은 성분부터 시작된다. 일반 함량이 10% 이상인 주성분만이 명칭에 기여한다. 원칙적으로 명칭은 IUPAC 명명 규칙에 따라 영어로 제시되어야 한다. 그 밖에 세계적으로 인정된 명칭을 추가로 제시할 수 있다.

4.2.2.2 식별자

다성분 물질은 그 물질의 화학명과 식별자와 성분들의 양적, 질적 화학조성(분자식과 구조식을 포함한 화학적 성질)에 의해 확인되며 분석정보로 증명된다.

예				
주성분	**함량(%)**	**불순물**	**함량(%)**	**물질명**
m-xylene o-xylene	50 45	p-xylene	5	m-xylene과 o-xylene의 반응질량

다성분 물질의 경우 화학조성이 알려져 있고 하나 이상의 주성분이 그 물질의 확인과 관련되어 있다. 더욱이 그 물질의 화학조성은 대푯값과 범위로 예측 가능하다. 주성분들은 모든 관련 매개변수로 완전히 명시되어야 한다. 주성분(10% 이상)과 불순물(10% 미만)의 일반농도의 합은 100%가 되어야 한다.

> 10%와 80% 규칙을 정확히 적용하기 위해 pH 조절제나 착색제같이 의도적으로 첨가된 물질은 질량수지에 포함시키지 않는다.

농도가 1% 이상인 불순물은 화학명, CAS 번호와 EC 번호, 그리고/또는 분자식 중 적어도 한 가지 식별자에 의해 명시되어야 한다. 분류와/나 PBT 평가와 관련된 불순물은 농도와 관계없이 동일한 식별자에 의해 항상 명시하도록 한다.

예								
주성분	**고함량(%)**	**일반함량(%)**	**저함량(%)**	**불순물**	**고함량(%)**	**일반함량(%)**	**저함량(%)**	**물질명**
aniline (아닐린)	90	75	65	phenanthrene (페난트렌)	5	4	1	아닐린과 나프탈렌의 반응질량
naphthalene(나프탈렌)	35	20	10					

9 많은 물질이 REACH 등록에서 면제된다 (예: 부속서 Ⅵ에 기재된 물질들).

10 이 접근법은 광물 등 다수 특정 물질에는 적용되지 않는다 (자세한 사항은 7.5장 참조).

본 TGD의 규칙에 의하면 이 물질은 다성분 물질이다. 한 성분의 범위가 80% 이상이지만 이런 경우는 드물게 나타날 뿐이고 일반 조성은 80% 미만이기 때문이다.

물질 내 한 가지 성분의 함량이 80% 이상이더라도 그 물질을 다성분 물질로 간주하는 것이 편리한 경우가 있다. 예를 들어 어떤 물질이 두 가지 성분을 포함하고 있는데 하나는 85%이고 다른 하나는 10%로 불순물에 해당하는 함량이다. 두 성분 모두가 그 물질에게서 희망하는 기술적 효과에 기여하고 또한 반드시 필요하다. 이런 경우 하나의 성분 함량이 80% 이상이더라도 이 물질은 두 가지 성분 물질이라 할 수 있다.

IUCLID 5에 담긴 다성분 물질을 설명하는 방법에 관한 지침은 8.2.2장에 제시되어 있다.

4.2.2.3 분석 정보

분광 데이터가 다성분 물질의 조성에 관한 정보를 제공하는 경우 이 정보가 제시되어야 한다. 몇 가지 분광광도법이 적절하게 쓰일 수 있으며 그 예로는 자외선-가시광선 흡수 분광법(UV/VIS), 적외선 분광법(IR), 핵자기 공명 분광법(NMR), 질량 분광법(MS) 등이 있다. 무기물 분석에는 X선 회절(XRD)이나 X선 형광(XRF), 원자 흡수 분광법(AAS)이 더 적합하다.

물질의 조성을 확인하는 데는 가스 크로마토그래피(GC)나 고성능 액체 크로마토그래피(HPLC)와 같은 크로마토그래피 기법이 필요하다. 적절할 경우에 한해 그 밖의 타당한 성분 분리 기술 또한 사용될 수 있다.

분광 및 분석 기법은 지속적으로 변화할 수밖에 없다. 따라서 적절한 분광, 분석 데이터를 제시하는 것은 등록자의 책임이다.

4.2.2.4 다성분 물질의 개별 성분 등록

일반적으로 (사전)등록을 목적으로 하는 물질정보 기록은 다성분 물질 접근법(즉, 다성분 물질의 등록)을 따른다. 정당한 사유가 있을 경우 이 접근법과 달리 개별 성분이 등록될 수 있다. 표준 사례에서 벗어나 물질의 개별 성분으로 물질을 확인(하고 향후 등록)하는 것은 다음의 경우에 가능하다.

- 정보 요건이 축소되지 않는다.
- 개별 성분을 등록하는 접근법을 정당화할 만한 데이터가 충분히 존재한다. 즉, 이 접근법은 표준 접근법에 비해 추가적 검사(척추동물 검사)를 요하지 않는다.
- 개별 성분을 등록함으로써 더욱 효율적인 결과를 얻는다(즉, 동일한 성분으로 구성된 물질의 수많은 등록 건을 피할 수 있다).
- 개별 반응질량의 조성 정보가 제공된다.

이 같은 규정상 유연성이 자료 요건을 회피하는 데 남용되어서는 안 된다. 이 접근법을 가령 연간 1200톤 생산되는 C성분 50%, D성분 50%의 조성으로 이루어진 다성분 물질“(C+D)"에 적용하면 이하 정보와 함께 두 건의 등록이 발생하게 된다.

C 물질
- 톤수: 600
- 1000톤 이상일 때 이행되어야 할 자료 요건 (부속서 X)

D 물질
- 톤수: 600
- 1000톤 이상일 때 이행되어야 할 자료 요건 (부속서 X)

이 접근법은 법적 주체당 동일 물질의 총량을 합산하도록 하는 REACH 요건과 결합되어야 한다. 자료 요건은 다음과 같이 성립되어야 한다.

- 개별 물질의 총량을 모두 합산한다(물질에 포함된 양에 따라).
- 그 성분을 포함하는 물질의 최대량을 표시한다.

정보요건은 가장 높은 결과치를 바탕으로 정해진다. 톤수 신고에 있어서는 각각의 개별 성분의 톤수를 합산한 결과가 채택된다. 아래에 이 접근법을 실제로 이행하는 방법을 보여주는 간단한 예를 소개한다.

예시 1
다성분 물질 "C+D+E"는 하나의 법적 주체 내의 공정 결과물이며, 이로부터 서로 다른 물질이라는 결과가 나온다.
물질 1: C 50% + D 25% + E 25%, 1100 tpa
물질 2: C 50% + D 50%, 500 tpa

또한 이 경우에는 반응생성물이 출발점이기도 하다. 즉, 두 물질이 다성분 물질로 등록되어야 한다. 개별 성분을 등록하는 접근법을 따를 경우[11] 다음의 사항이 적용된다.

이 경우 물질 D의 신고 내용:
톤수: 25% * 1100) + (50% * 500) = 525 tpa

정보 요건은 가장 엄격한 요건을 바탕으로 결정된다. 이 경우에는 다성분 물질 "C+D+E"의 총 톤수가 1000 tpa를 넘으므로 1000 tpa 이상이 된다.
유의사항: 이 예에서 물질 C와 E도 마찬가지로 등록되어야 한다.

예시 2
다성분 물질 "G+H+I"는 하나의 법적 주체 내의 공정 결과물이며, 이로부터 서로 다른 물질이라는 결과가 나온다.
물질 3: G 65% + H 15% + I 20%, 90 tpa
물질 4: G 60% + H 40%, 90 tpa
물질 G의 신고:

11 이 예는 정보요건의 성립과 물질용량 신고를 보여주기 위한 목적으로만 제시한 것이다. 이 접근법이 이 경우에 정당한지 여부를 다루지는 않는다.

톤수: (65% * 90) + (60% * 90) = 112.5 tpa
정보 요건은 가장 엄격한 요건을 바탕으로 결정된다. 이 경우, 성분 G의 총 톤수가 100 tpa를 넘으므로 100 tpa 이상이 된다.
유의사항: 이 예에서 물질 H와 I도 마찬가지로 등록되어야 한다.

언급된 정보 요건을 정하는 일 외에 새로운 연구(척추 동물을 대상으로)가 몇 가지나 실시되어야 하는지 또한 고려되어야 한다. 등록예정자는 방법을 결정하기 전에 기존에 (척추동물을 대상으로 한) 연구가 충분히 나와 있는지, 그리고 규정에서 제시된 유연성으로 인해 (척추동물에 대한) 신규 시험수가 줄어들지 늘어날지 여부를 숙고해야 한다. (척추동물 대상의) 신규 시험을 피할 수 있는 전략이 채택된다.

불확실한 경우, 등록을 목적으로 물질명을 기록하는 표준 방식은 항상 물질이 제조되는 대로 물질을 확인하는 것이다.

4.2.3 화학조성이 정의된 물질과 기타 주요 식별자

화학조성으로 확인 가능한 물질 중 일부는(예: 무기 광물질) 고유한 물질명을 얻기 위해 다른 식별자들에 의해 추가적으로 명시되어야 한다. 이들 물질은 단일성분 물질일 수도 있고 다성분 물질일 수도 있지만, 물질명을 명확히 기록하기 위해서는 앞의 여러 장에서 설명한 물질 확인 매개변수 외에 다른 주요 식별자가 있어야 한다.

예
일부 독특한 구조를 가진 비금속 광물(천연 또는 인공의) 또한 물질을 명확히 확인하기 위해 형태와 광물조성이 필요하다. 카올리나이트(kaolinite), 칼륨·알루미늄 규산염(potassium aluminium silicate), 장석(feldspar), 석영(quartz)으로 구성된 카올린(kaolin) (CAS 1332-58-7)이 이에 해당한다.

최근 나노 기술의 발달과 관련 위험 효과에 대한 통찰로 인해 향후 물질에 관한 추가적 정보의 필요성이 제기될 수 있다. 현재의 전개 상황은 본 TGD 내 나노 형태의 물질 확인에 관한 지침을 포함할 만큼 무르익지 않았다.

4.2.3.1 명명 규칙

원칙적으로, 단일성분 물질(4.2.1장 참조)이나 다성분 물질(4.2.2장 참조)과 동일한 명명 규칙을 따라야 한다.

무기 광물질의 경우 구성 성분에 광물학상의 명칭이 사용될 수 있다. 예를 들어 인회석은 다성분 물질로, 인산염 광물군으로 이루어져 있다. 이들은 결정격자 내에 각각 OH^-, F^-, Cl^- 이온 농도가 높은 데서 이름 붙여져 보통 수산화인회석(hydroxylapatite), 불소인회석(fluorapatite), 염소인회석(chlorapatite)이라 불린다. 가장 흔한 세 종류의 혼합식은 $Ca_5(PO_4)_3(OH, F, Cl)$이다. 다른 예로는 특수한 탄산칼슘 결정구조 중 하나인 아라고나이트가 있다.

4.2.3.2 식별자

이 물질들은 단일성분 물질(4.2.1장 참조)이나 다성분 물질(4.2.2장 참조) 규칙에 따라 확인 및 명명된다. 그 밖에 구체적으로 어떤 주요 확인 매개변수가 추가되는가는 물질에 따라 다르다. 기타 주요 식별자의 예에는 분광 데이터를 이용한 원소 조성, X선 회절(XRD)으로 나타내는 결정구조, 적외선 흡수 최대치, 팽창지수, 양이온 교환능력 또는 기타 물리적·화학적 특성이 있다.

광물에 있어서는 원소 조성과 분광 데이터 결과를 합산하여 광물학적 조성과 결정구조를 확인하는 것이 중요하다. 이 결과는 다시 결정구조(X선 회절에 의해 나타난), 형태, 경도, 팽창도, 밀도, 그리고/또는 표면적과 같은 특유의 물리화학적 특성으로 확증된다.

그 외 특수한 주요 식별자가 특정 광물의 경우 제공될 수 있다. 광물은 특징적인 물리화학적 특성을 가지고 있어 이를 사용해 물질 확인을 마무리할 수 있기 때문이다. 활석의 매우 낮은 경도, 벤토나이트의 팽창도, 규조토의 형태, 중정석의 매우 높은 밀도, 표면적(질소 흡착) 등이 그 예이다.

IUCLID 5에 포함된 화학조성이 정의된 물질과 기타 주요 식별자를 설명하는 방법에 관한 지침은 8.2.3장에 제시되어 있다.

4.2.3.3 분석 정보

단일성분 물질(4.2.1장 참조)이나 다성분 물질(4.2.2장 참조)과 동일한 분석 정보가 제공되어야 한다. 분광 데이터와 GC 또는 HPLC 크로마토그램으로 충분히 확인할 수 없는 물질의 경우 그 밖의 분석 기술로부터 얻은 정보, 즉 광물의 X선 회절, 원소 분석 등이 제공되어야 한다. 물질의 구조를 확인하기 위해 충분한 정보가 제시되어야 한다는 것이 표준이다.

4.3 UVCB 물질

화학구조가 알려져 있지 않거나 가변적인 물질, 복합반응 생성물 또는 생물학적 물질, 즉 UVCB 물질은 그 화학조성만으로는 충분한 확인이 불가능하다. 그 이유는 다음과 같다.

- 성분의 수가 상대적으로 많고/거나
- 조성이 상당 부분 알려져 있지 않고/거나
- 조성의 변화폭이 상대적으로 크거나 예측하기 어렵다.

그 결과 UVCB 물질을 확인하는 데는 화학조성에 대해 알려진 내용뿐 아니라 다른 형태의 정보도 필요하다.

표 4.2를 보면 다양한 형태의 UVCB 물질의 주요 식별자들이 그 물질의 원료와 사용된 공정, 또는 여러 "기타 주요 식별자들"(예: "크로마토그래피나 기타 지문")과 관련이 있음을 알 수 있다. **표 4.2**에 제시된 식별자들의 수와 종류는 형태의 변화정도를 대략적으로 나타내는 것이며 이것이 전체적 개요로 간주되어서는 안 된다. 가령 복합반응 생성물이나 생물

학적 출처를 가진 물질의 화학조성이 알려진 경우 그 물질은 때에 따라 적절히 단일성분이나 다성분 물질로 확인되어야 한다. 물질을 UVCB로 정의할 때 발생하는 결과는 원료나 공정에 어떤 상당한 변화가 있게 되면 다른 물질이 되어 다시 등록해야 할 가능성이 높다는 것이다. 어떤 반응 혼합물이 "다성분 물질"로 확인된다면 그 물질은 최종 물질의 조성이 명시된 범위 내에 머무는 한 다른 원료와/나 다른 공정으로부터 얻어질 수 있다. 따라서 등록을 새로 할 필요가 없게 된다.

UVCB 물질에 관한 포괄적 지침은 4.3.1장에 실려 있고, 탄소사슬 길이가 서로 다른 물질, 석유나 석유와 유사한 원료에서 얻은 물질, 효소와 같은 특수한 형태의 UVCB 물질에 관한 세부 지침은 4.3.2장에서 찾아볼 수 있다.

4.3.1 UVCB 물질에 대한 일반 지침

본 TGD의 이 장은 UVCB 물질의 확인을 위해 REACH 부속서 Ⅵ(2항)의 물질 확인 매개변수 외의 특정 주요 식별자들을 사용하는 법에 관한 포괄적 지침을 제공한다.

4.3.1.1 화학조성 정보

UVCB 물질은 확인할 수 없는 성분이 있기 때문에 성분의 IUPAC 명칭으로 명시될 수 없거나 정확한 조성이 계속 바뀌기 때문에 개략적으로는 명시되더라도 특이성은 실을 수 없다. 성분과 불순물을 구분할 수 없으므로 "주성분"과 "불순물"이라는 용어는 UVCB 물질에는 해당되지 않는 것으로 봐야 한다.

그렇다 해도 성분의 화학조성과 특징은 알 수 있는 만큼 제시되어야 한다. 조성을 기술할 때는 가령 "선형 지방산 C8-C16"이나 "알코올 C10-C14와 4-10에톡시레이트 단위로 구성된 알코올 에톡시레이트"처럼 대략적인 방식으로 제시되는 경우가 많다. 또한 화학조성에 관한 정보는 잘 알려진 참조 표본이나 기준을 바탕으로 제시될 수 있으며, 많은 경우 지수와 기존의 코드가 추가적으로 사용될 수 있다. 조성에 관한 기타 일반정보는 특징적인 최대치 분포 형태를 보여주는 크로마토그래피나 분광 이미지를 가리키는 이른바 "지문"으로 이루어질 수 있다.

UVCB 물질에 있어서 10% 이상 농도로 존재하는 알려진 성분은 최소한 영문식 IUPAC, 그리고 가급적으로 CAS 번호로 명시되어야 하며, 알려진 성분의 일반적인 농도와 농도 범위 또한 제시되어야 한다. 물질의 분류와/나 PBT 평가[12]와 관련된 성분은 농도와 무관하게 항상 동일한 식별자에 의해 확인되어야 한다.

알려지지 않은 성분은 가능한 경우에 한해 그 화학적 속성을 포괄적으로 기술함으로써 확인한다. 첨가물은 잘 정의된 물질에 대한 설명과 유사한 방식으로 완전히 명시되어야 한다.

12 PBT 평가와 관련 농도 한계에 관한 더 많은 정보는 RIP 3.2 TGD PBT 평가의 화학물질 안정성 평가 섹션에서 찾아볼 수 있다.

4.3.1.2 주요 확인 매개변수 - 명칭, 원료, 공정

물질의 화학조성만으로는 물질을 확인하는 데 불충분하기 때문에 명칭, 출처나 원료, 공정 시 사용된 가장 크게 연관된 단계를 사용하여 물질을 확인하는 것이 일반적이다. 물질의 그 밖의 특성도 관련있는 일반적 식별자(예: 끓는점)나 특정 물질 집단의 결정적 식별자(예: 효소의 촉매 활성)로써 중요한 식별자가 될 수 있다.

1. 명명 규칙

일반적으로 UVCB 물질의 명칭은 원료와 공정을 결합한 것이고, 일반적으로 원료명을 앞에, 그 다음으로 공정을 표시하는 형식을 취한다.

- 생물 원료에서 얻어진 물질은 그 종의 이름에 의해 확인된다.
- 비생물 원료에서 얻어진 물질은 출발 물질에 의해 확인된다.
- 새로운 분자의 합성이 수반된 경우, 공정은 화학반응의 형태로 확인된다. 또는 추출, 분류, 농축 등의 정제단계의 형태나 잔류물로 확인하기도 한다.

예	
EC 번호	**EC 명칭**
296-358-2	Lavender(라벤더), Lavandula hybrida(라반듈라 히브리다), 추출, 아세틸화
307-507-9	Lavender(라벤더), 라반듈라 라티폴리아(Lavandula latifolia), 추출, 유황처리, 팔라듐염

EC 목록에서 반응생성물의 경우에는 다른 형식이 사용되며 그 예는 다음과 같다.
- EINECS: 주요 출발물질, 그 외 출발물질의 반응 생성물
- ELINCS: 출발물질의 반응 생성물

예	
EC 번호	**EC 명칭**
232-341-8	아질산, 4-메틸-1과 3-벤젠디아민염산염의 반응 생성물
263-151-3	지방산, 코코넛, 디에틸렌트리아민의 반응 생성물
400-160-5	톨유 지방산, 디에탄올아민, 붕산의 반응 생성물
428-190-4	2,4-디아미노-6-[2-(2-메틸-1H-이미다졸-1-일)에틸]-1,3,5-트리아진과 시아누르산의 반응 생성물

본 TGD에서 반응 생성물 명칭의 일반적 형식은 "[출발 물질의 명칭]의 반응 생성물"이다. 원칙적으로 명칭은 IUPAC 명명 규칙에 따라 영어로 제시되어야 한다. 그 밖에 세계적으로 인정된 명칭을 추가로 제시할 수 있다. 명칭에서 "반응"이라는 말 대신 에스테르화나 염 생성 등과 같이 포괄적으로 설명된 특정 반응 형태를 사용하도록 권장된다(아래의 네 가지 특수 UVCB 하위 분류의 지침 참조).

2. 원료

원료는 두 종류로 나눌 수 있다.

2.1. 생물학적 원료

생물에서 얻은 물질은 생물의 속(genus), 종(species), 과(family)로 정의되어야 하며(예: 피너스 쳄브라(Pinus cembra), 소나무과(Pinaceae)는 Pinus(속), cembra(종), Pinaceae(과)를 뜻한다), 관련성이 있을 경우 계통이나 유전형도 표시한다. 적절한 경우에 한해 물질을 추출하는데 사용된 유기체 조직이나 부분, 즉, 골수, 췌장, 줄기, 씨, 뿌리 등도 제시되어야 한다.

예	
EC 번호	**EC 명칭**
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae(사카로미세스 세레비시아), 추출
	EC 설명
	Saccharomycelaceae과의 Saccharomyces cerevisiae로부터 얻어진 추출물과 그것을 물리적으로 변형한 유도체, 즉 팅크, 응결물, 앱솔루트, 정유, 함유 수지, 테르펜, 무 테르펜 분별물, 증류물, 잔류물 등.
296-350-9	Arnica mexicana(아르니카 멕시카나), 추출
	EC 설명
	Compositae(국화과)의 Arnica mexicana로부터 얻어진 추출물과 그것을 물리적으로 변형한 유도체, 즉 팅크, 응결물, 앱솔루트, 정유, 함유 수지, 테르펜, 무 테르펜 분별물, 증류물, 잔류물 등.

2.2. 화학 또는 광물 원료

화학반응으로 인한 반응 생성물의 경우, 영어로 된 IUPAC 명칭으로 출발물질을 기술해야 한다. 광물질 원료는 인광석(phosphate ores), 보크사이트(bauxite), 고령토(china clay), 무기가스(mineral gas), 석탄(coal), 토탄(peat) 등의 일반적 용어로 기술해야 한다.

3. 공정

새로운 분자의 합성이 수반된 경우, 공정은 화학반응의 형태로 확인된다. 또는 추출, 분별물, 농축 등의 정제단계의 형태나 정제 잔류물로 확인하기도 한다.

화학 유도체와 같은 일부 물질의 공정은 정제와 합성을 합쳐서 기술해야 한다.

- 합성
  출발 물질들 간에 특정 화학 또는 생화학적 반응이 일어나 그 결과 물질이 생성된다. 그리냐르 반응(Grignard-reaction), 술폰화(sulfonation), 프로테아제(protease)나 리파아제(lipase)에 의한 효소 분리(enzymatic splitting) 등이 그 예이다. 여러 유도반응 또한 이 형태의 공정에서 일어난다.

화학조성이 제공될 수 없는 새롭게 합성된 물질에 있어서 출발물질은 상세 반응내용, 즉 화학반응의 형태와 더불어 주요 식별자이다. 화학반응의 형태는 그 물질에 어떤 분자가 포함되어 있을지를 나타낸다. 최종 화학반응에는 가수분해, 에스테르화(esterification), 알킬화(alkylation), 염소화(chlorination) 등 몇 가지 형태가 있다. 화학반응 형태로는 생성될 수 있는 물질에 대한 대략적인 정보밖에 얻을 수 없으므로, 물질의 특성을 완전히 기술하고 확인하기 위해 크로마토그래피 지문도 필요한 경우가 많다.

예	
EC 번호	**EC 명칭**
294-801-4	Linseed oil(아마인유), 에폭시화, 테트라에틸렌펜타민(tetraethylenepentamine)과의 반응 생성물
401-530-9	(2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzophenone과 triethoxysilane)과 (silica와 methyltrimethoxysilane의 가수분해 생성물)의 반응 생성물

- 정제

정제는 천연 또는 광물질에 여러 방식으로 적용될 수 있으며, 이 때 성분의 화학적 성질은 변하지 않지만 성분의 농도는 변한다(예: 식물 조직을 저온 공정 후 알코올로 추출).

정제는 추출 등의 공정에서 특징이 더 뚜렷이 드러날 수 있다. 물질의 확인은 어떤 공정을 거치는가에 따라 달라진다.

- 정제나 분획화 등의 물리적 방법으로 얻어진 물질의 경우, 분획물의 절삭 범위와 매개변수가 명시되어야 한다(예: 분자 크기, 사슬 길이, 끓는점, 휘발성 범위 등).
- 야금 공정 생성물, 원심분리 침전물, 여과기 잔류물 등과 같이 농축공정으로 얻어진 물질의 경우, 출발물질과 비교한 결과물질의 일반적 조성과 함께 농축 단계도 명시되어야 한다.

예	
EC 번호	**EC 명칭**
408-250-6	organotungsten 혼합정광 (텅스텐헥사클로라이드(tungsten hexachloride)와 2-methylpropan-2-ol, nonylphenol 그리고 pentane-2,4-dione의 반응 생성물)

- 슬래그, 타르, 납사분해유와 같은 특수 반응의 잔류물의 경우, 결과물의 일반적 조성과 더불어 공정 방식도 기술되어야 한다.

예	
EC 번호	**EC 명칭**
283-659-9	주석(tin), 용해 잔류물
	EC 설명
	1차와 2차 원료, 재생 중간체에서 얻어진 주석과 주석합금의 사용 및 제조시 나오는 물질. 주로 주석 화합물로 이루어지며 기타 잔류 비(非)철 금속과 그 화합물을 포함할 수 있다.
293-693-6	대두박(soybean meal), 단백질 extn.(확장) 잔류물
	EC 설명
	탈지대두를 에탄올 추출하여 생산한, 탄수화물을 주로 함유하는 부산물

- 추출물의 경우, 추출 방식, 추출에 사용된 용제, 기타 관련 조건(예: 온도/온도 범위)을 제시해야 한다.

- 복합 공정의 경우, 원료 정보와 더불어 각각의 공정 단계가 (포괄적 방식으로) 명시되어야 한다. 이러한 복합 공정은 특히 화학 유도물질과 관련이 많다.

예:

○ 맨 처음 식물이 추출되고, 그 추출물이 증류된 후, 식물 추출물의 증류된 분획물이 화학적 유도에 사용 된다. 그 결과 생성된 물질을 추가로 정제한다. 정제된 생성물은 그 화학적 조성에 의해 잘 정의될 수 있고, 그 물질을 UVCB 물질로 취급할 필요가 없다. 그래도 그 물질이 UVCB로 간주된다면 이 복합공정은 "식물 추출물의 증류된 분별물을 정제한 화학 유도체"로 기술될 수 있다.

추출물의 추가 공정이 물리적 유도만을 포함하는 경우, 물질의 조성은 변하지만 의도된 새로운 분자의 합성은 일어나지 않는다. 그러나 조성이 변함으로써 다른 물질이 생성된다. 예: 식물 추출물의 증류물이나 침전물.

○ 석유제품 생산의 경우, 화학적 유도와 분별이 함께 사용되는 경우가 많다. 예를 들어, 석유 증류 distillation 후 열분해를 하면 출발물질의 분별물과 새로운 분자가 생성된다. 따라서 이 경우 두 가지 공정 모두를 확인하거나 증류물을 열분해의 출발물질로 명시해야 한다. 이것은 특히 여러 공정을 결합하여 얻어지는 경우가 많은 석유 유도체에 적용된다. 그러나 석유 물질을 확인하는 데는 개별적인 특정 시스템이 사용될 수 있다(4.3.2.2장 참조).

추출물의 화학 유도체는 원래 추출물과 동일한 성분을 가지고 있지 않게 되므로 다른 물질로 간주되어야 한다. 이 규칙을 적용하면 명칭과 설명에 의한 확인이 이전의 EINECS 명칭과 설명과 달라지는 결과를 가져올 수도 있다. EINECS 목록을 구성할 당시에는 서로 다른 공정과 다른 용제로부터 얻은 추출물과 심지어 물리적 또는 화학적 유도체까지도 단일 엔트리(entry) 하에 포함되는 경우가 많았다. 이 물질들은 유해성이 서로 다르지 않고 동일하게 분류될 수 있다면 REACH 하에서 단일 물질로 등록될 수 있다. 그러나 하나의 EINECS 번호 하에 있는 여러 다른 물질을 확인해야할 이유(예: EINECS 상의 광범위한 물질 설명)가 있을 수 있다.

4. 기타 물질 확인 매개변수

UVCB 물질은 화학명, 원료, 공정 내용 외에도 REACH 부속서 Ⅵ 2항에서 요구하는 바에 따라 기타 모든 관련 정보를 포함해야 한다.

특히 특정 UVCB 물질의 경우 관련 있는 기타 확인 매개변수가 있을 수 있다. 기타 추가될 수 있는 식별자는 다음과 같다.

- 화학조성의 포괄적 기술
- 크로마토그래피 지문이나 기타 다른 종류의 지문
- 참고 자료 (예: ISO)
- 물리-화학적 매개변수(예: 끓는점)

- 색지수 번호
- AISE 번호

UVCB 물질의 확인을 위한 규칙과 기준, 명칭, 원료, 공정 정보의 사용법에 관한 세부 지침은 다양한 원료와 공정을 대상으로 아래에 소개했다. 뒤에 이어지는 여러 단락에서 UVCB 물질의 네 가지 하위 형태가 생물 또는 화학/광물 원료와 공정의 결합으로 기술되어 있다.

IUCLID 5의 UVCB 물질을 기술하는 법에 관한 지침은 8.2.4장에 제시되어 있다.

UVCB 하위 형태 1, 원료는 생물원료이고 공정은 합성일 때

생물 물질은 출발물질에 들어있지 않던 성분을 만들어내기 위해 (생)화학 공정에서 변경될 수 있다(예: 식물 추출물의 화학 유도체나 추출물의 효소처리 후 생성물). 예를 들어 단백질은 올리고 펩티드(oligopeptides)를 만들기 위해 프로테아제에 의해 가수분해될 수 있고, 나무에서 뽑은 셀룰로오스는 카르복시메틸셀룰로오스(Carboxy Methyl Cellulose, CMC)를 얻기 위해 카르복실화될 수 있다.

발효 생성물 또한 이 UVCB 하위 형태에 속할 수 있다. 예를 들어, 비나세(vinasse)는 당 발효 생성물로써 당에 비해 성분이 많이 다르다. 발효 생성물이 더 많이 정제되면 그 물질은 결국 화학조성에 의해 완전히 확인 가능해져서 더 이상 UVCB 물질로 취급되지 않는다.

효소는 생물 원료의 추출과 추가 정제로 얻을 수 있는 특수한 물질군이다. 원료와 공정을 상세히 열거할 수는 있겠지만 그렇다 해도 효소에 관한 구체적 정보가 나오지는 않는다. 이러한 물질에 대해 특수한 분류, 명명, 확인 체계가 사용되어야 한다(4.3.2.3장 참조).

물질 확인을 위해, 마지막 공정 단계와/나 물질 정보(identity)와 관련 있는 기타 공정 단계가 제시되어야 한다.

화학 공정에 대한 설명은 공정의 종류(에스테르화, 알칼리 가수분해, 알킬화, 염소화, 치환 등)와 관련된 공정 환경을 포괄적으로 기술해야 한다.

생화학 공정에 대한 설명은 촉매 반응과 그 반응을 촉진시키는 효소의 이름을 포괄적으로 기술한다.

발효나 종의 (조직) 배양에 의해 생산된 물질의 경우에는 해당 발효 종, 발효 형태와 전반적인 조건(회분식 또는 연속식, 호기성, 혐기성, 무산소, 온도, pH 등)과 발효 생성물을 분리하는 데 적용된 추가 공정 단계(예: 원심분리, 침전, 추출 등)가 제시되어야 한다. 이 물질들이 추가적으로 정제된다면 그 결과 분별물이나 농축물, 잔류물이 생성될 수 있다. 이렇게 추가 공정을 거친 물질은 추가 공정 단계의 상세 사항을 더해 확인된다.

UVCB 하위 형태 2, 원료는 화학 또는 광물 원료이고 공정은 합성일 때

화학 또는 광물 원료에서 얻어져 새로운 분자가 합성되는 공정을 거쳐서 만들어지는 UVCB 물질은 "반응 생성물"이다. 에스테르화나 알킬화, 염소화 생성물이 화학 반응 생성물의 예이다. 분리된 효소를 적용함으로써 생기는 생화학 반응은 특수한 형태의 화학 반응이다. 그러나 완전 미생물을 사용하여 복합 생화학 합성 경로가 적용될 경우 그 결과 얻어진 물질을 발효 생성물로 간주하고 물질 확인에 있어서 출발 물질이 아닌 발효 공정과 발효 종을 사용하는 편이 낫다(UVCB 하위 형태 4 참조).

모든 반응 생성물을 자동적으로 UVCB로 명시해서는 안 된다. 화학 조성(일부 가변성 포함)에 의해 충분히 정의될 수 있는 반응 생성물은 다성분 물질(4.2.2장 참조)로 간주하는 편이 더 선호된다. 반응 생성물의 조성이 충분히 알려져 있지 않거나 예측하기 어려운 경우에만 그 물질을 UVCB 물질("반응 생성물")로 보아야 한다. 반응 생성물의 확인은 그 반응의 출발물질과 해당 물질이 생성된 (생)화학 반응 공정을 바탕으로 한다.

예		
EC 번호	**EINECS 명칭**	**CAS 번호**
294-006-2	Nonanedioic acid, 2-amino-2-methyl-1-propanol과의 반응 생성물	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyde, diethylene glycol과 phenol과의 반응 생성물	91673-32-4

반응 생성물의 주요 식별자는 제조 공정에 대한 설명이다. 물질 확인을 위해 마지막 공정 또는 가장 관련성 높은 공정 단계가 제시되어야 한다. 화학 공정에 관해 기술할 때는 공정의 형태(예: 에스테르화, 알칼리 가수분해, 알킬화, 염소화, 치환 등)와 관련된 공정 환경을 포괄적으로 기술해야 한다. 생화학 공정은 반응의 종류와 그 반응을 촉발시키는 효소의 이름으로 기술해야 한다.

UVCB 하위 형태 3, 원료는 생물 원료이고 공정은 정제일 때

생물 원료에서 의도적으로 새로운 분자를 생성하지 않는 정제 공정을 거쳐 만들어지는 UVCB 물질에는 생물원료 추출물, 추출물의 분획물, 추출물의 농축물, 정제 추출물, 공정 잔류물 등이 있다.

추출물이 추가 공정을 거치는 순간 그 물질은 더 이상 추출물과 동일하지 않고 다른 UVCB 하위 형태에 속하는 다른 물질이 된다(예: 추출물의 분획물 또는 잔류물). 이러한 물질은 추가적인 공정 매개변수로 명시되어야 한다. 추출물이 화학 또는 생화학 반응에서 변경되어 새로운 분자(유도체)를 생성한 경우, 그 물질의 확인은 UVCB 하위 형태 2나 4.2장의 잘 정의된 물질의 지침을 사용한다.

추가 공정 처리된 추출물을 이렇게 구분하게 되면 새로운 명칭과 설명이 EINECS 목록에 나온 내용과 달라질 수 있다. 이 목록을 작성할 당시에는 이러한 구분이 없었고, 서로 다른 용제와 추가 공정 단계를 사용한 모든 종류의 추출물이 단일 엔트리 하에 포함되기도 했다.

이 하위 형태의 UVCB 물질을 위한 첫 번째 주요 식별자는 해당 물질이 처음 얻어진 유기체의 과

(family), 속(genus), 종(species)이다. 적절한 경우, 물질의 추출에 사용된 유기체의 조직이나 부분, 즉, 골수, 췌장, 줄기, 씨, 뿌리 등도 제시되어야 한다. 미생물에서 얻어진 물질의 경우 그 종의 계통과 유전형도 명확히 밝혀야 한다.

다른 종에서 얻어진 UVCB 물질은 그 화학조성이 유사하다 하더라도 다른 물질로 간주된다.

예	
EC 번호	**EC 명칭**
290-977-1	산화 로그우드(logwood) (Haematoxylon campechianum) 추출물
	EC 설명
	이 물질은 색지수에서 색지수 구조 No C.I. 75290 산화로 확인된다.
282-014-9	췌추출물, 단백질 제거

두 번째 주요 식별자는 물질의 공정(예: 추출 공정), 분별, 정제 또는 농축 공정, 또는 잔류물의 조성에 영향을 주는 공정이다. 따라서 서로 다른 공정(예: 다른 용제를 사용하거나 다른 정제 단계를 거침)에 의해 추출물을 정제하면 다른 물질이 생성된다.

정제 단계가 더 많아질수록 물질의 화학조성에 의해 물질을 정의할 수 있는 가능성이 더 커진다. 그런 경우, 원료 종이나 공정에 의한 변경사항이 다르다고 해서 자동적으로 다른 물질이 되는 것은 아니다.

생물 물질의 주요 확인 매개변수는 관련 공정에 대한 기술내용이다. 추출물의 경우, 추출 공정은 물질의 특성과 연관된 상세내용까지 기술되어야 한다. 최소한 사용된 용제는 명시되어야 한다.

물질을 제조하기 위해 분별이나 농축 등의 추가 공정 단계가 사용되었다면 관련된 공정 단계들을 함께 기술해야 한다(예: 추출과 절삭 범위를 포함한 분별을 함께 씀).

UVCB 하위 형태 4, 원료는 화학 또는 광물 원료이고 공정은 정제일 때

비생물 물질은 광물, 광석, 석탄, 천연가스, 원유와 이들로부터 얻어진 물질, 또는 기타 화학공업용 원재료와 의도된 화학반응이 없는 공정에서 생성된 물질이다. 이 물질은 (정제) 분별물이나 농축물, 또는 이들 공정의 잔류물일 수 있다.

석탄과 원유는 증류나 가스화 공정에 사용되어 매우 다양한 물질(예: 석유 물질과 연료 가스 등)과 타르, 슬래그 등의 잔류물을 만들어낸다. 증류되거나 분별된 생성물은 곧바로 화학반응을 포함하는 추가 공정을 거치는 경우가 대부분이다. 이런 경우, 물질은 원료보다 공정과 더 관련이 많으므로 물질의 확인은 UVCB 하위 형태 2에 해당하는 지침을 따른다.

석유 물질에는 특수 확인 체계가 사용된다(4.3.2.2장 참조). 이 체계에 해당하는 물질에는 분별물과 화학반응 생성물이 있다.

그 밖에 UVCB 하위 형태 4에 속하는 물질에는 서로 다른 양의 금속을 함유하고 있는 광석, 광석

농축물, 슬래그 등이 있으며, 함유된 금속은 야금공정으로 추출할 수 있다.

벤토나이트(bentonite)나 탄산칼슘(calcium carbonate)과 같은 광물은 산 용해와/나 화학적 침전에 의해, 또는 이온교환 칼럼에서 공정 처리될 수 있다. 화학조성이 완전히 밝혀진 경우, 광물은 4.2장에서 적절한 부분의 지침에 따라 확인되어야 한다. 광물이 기계적 방법(예: 분쇄, 체질, 원심분리, 부유선별)에 의해서만 공정 처리된 경우, 이들은 채굴 당시의 광물과 여전히 동일한 것으로 간주된다. 조성이 유사하고 독성 프로파일이 같을 경우, 제조공정을 거쳐 생산된 광물은 - 확인 목적으로[13] - 자연적으로 발생한 광물과 동일하게 간주될 수 있다.

비생물 물질의 주요 확인 매개변수는 관련 공정 단계의 기술내용이다.

분별물의 경우, 매개변수와 분리된 분별물의 절삭 범위, 그리고 관련이 있을 경우 이전 공정에 관한 기술 내용과 함께 분별 공정이 기술되어야 한다.

농축 단계에 있어서는 공정의 유형(예: 증발, 침전 등)이 제시되어야 하고, 주성분의 출발 농도와 마지막 농도의 비율, 그리고 이전 공정 단계에 관한 정보가 제시되어야 한다.

비생물 잔류물의 주요 확인 매개변수는 잔류물이 만들어진 공정에 관한 기술내용이다. 잔류물을 생성하는 모든 물리적 반응(예: 정제, 분별, 농축 공정)이 이에 해당된다.

4.3.1.3 분석 정보

분광 데이터가 UVCB 물질의 조성에 관한 정보를 제공하는 경우 이 정보가 제시되어야 한다. 분광(UV/VIS, 적외선, 핵자기공명, 질량 스펙트럼)을 알아보는 데 사용되는 몇 가지 분광광도법이 있다. 분석기법과 이러한 기법의 사용법에 대한 통찰은 끊임없이 변화하게끔 되어있다. 따라서 적절한 분광 데이터를 제시하는 것은 등록자의 책임이다.

물질 조성의 특성을 기술하기 위해 지문으로 사용될 수 있는 크로마토그램이 제시되어야 한다. 적용 가능할 경우, 기타 타당한 성분 분리 기술도 사용될 수 있다.

4.3.2 특수한 UVCB 물질

이 절(section)은 특수한 UVCB 물질군에 관한 지침을 제공한다. 탄소사슬 길이가 서로 다른 물질(4.3.2.1), 석유나 석유와 유사한 원료에서 얻어진 물질(4.3.2.2), 효소(4.3.2.3).

4.3.2.1 탄소사슬 길이가 서로 다른 물질

이 UVCB 물질군은 탄소사슬 길이가 서로 다른 긴 사슬 알킬 물질을 다룬다(예: 파라핀과 올레핀). 이러한 물질들은 천연 지방이나 석유에서 얻어지거나 합성으로 생산된다. 천연 지방은 식물이나

13 자연적으로 생겨난 광물과 화학적으로 생산된 광물의 확인에 동일한 접근법이 사용된다고 해서 반드시 법적 요건(예: 등록 면제)도 같은 것은 아니다.

동물로부터 얻는다. 식물에서 유래된 탄소사슬이 긴 물질은 사슬길이가 보통 짝수로만 되어 있는 반면, 동물 원료에서 얻어진 탄소사슬이 긴 물질은 사슬길이가 홀수인 것도 일부 포함되어 있다. 합성으로 생산된 탄소사슬이 긴 물질은 짝수와 홀수로 된 모든 범위의 탄소사슬로 구성된다.

식별자와 명명 규칙

이 물질군은 각각의 성분들이 공통의 구조적 특징(하나 이상의 긴 사슬 알킬기에 작용기(functional group)가 덧붙여진 구조)을 가지고 있는 물질들로 이루어진다. 아래에 나오는 알킬 사슬기의 특징 중 하나 이상에 대해 각각의 성분에 차이가 있다.

- 탄소 사슬의 길이(탄소 수)
- 포화 상태
- 구조(선형 또는 가지형)
- 작용기의 위치

아래 세 가지 기술어를 사용하여 성분의 화학적 특성을 충분히 기술하고 체계적으로 명명할 수 있다.

- 알킬기의 탄소사슬 길이 내 탄소 원자의 수를 설명하는 알킬 기술어.
- 물질의 작용기(예: 아민, 암모늄, 카르복시산)를 식별해내는 기능성 기술어.
- 염류 기술어, 모든 염류의 양이온/ 음이온. 예: 나트륨(Na+), 탄산염($CO3^{2}$), 염화물(Cl).

알킬 기술어

- 일반적으로 알킬 기술어 Cx-y는 x에서 y까지의 모든 사슬 길이로 이루어진 포화된 선형 알킬 사슬을 가리킨다. 예: C8-12는 C8, C9, C10, C11, C12에 해당한다.
- 알킬 기술어가 짝수나 홀수로 된 알킬 사슬만을 가리킬 때는 그것을 표시해야 한다.
  예: C8-12(짝수)
- 알킬 기술어가 가지형 알킬 사슬을 (함께) 언급하는 경우 그것을 표시해야 한다.
  예: C8-12(가지형) 또는 C8-12(선형과 가지형)
- 알킬 기술어가 불포화 알킬 사슬을 (함께) 언급하는 경우 그것을 표시해야 한다.
  예: C12-22(C18 불포화)
- 알킬 사슬길이의 분포가 좁은 것은 분포가 넓은 것에 적용될 수 없고 그 반대도 마찬가지이다.
  예: C10-14는 C8-18과 일치하지 않는다.
- 알킬 기술어는 알킬 사슬의 원료(예: 코코넛, 수지) 또한 나타낼 수 있다. 그러나 해당 탄소사슬 길이의 분포는 원료의 분포와 반드시 일치해야 한다.

위에 설명된 체계는 다양한 탄소사슬 길이를 가지는 물질을 기술하는 데 사용되어야 한다. 이는 명확한 화학구조에 의해 확인될 수 있는 잘 정의된 물질에는 적합하지 않다.

알킬 기술어, 기능성 기술어, 염류 기술어에 관한 정보는 이 종류의 UVCB 물질의 명칭을 정하는 근간이 된다. 또한, 원료와 공정에 관한 정보도 물질을 좀 더 정확히 식별하는 데 도움이 된다.

예		
기술어		명칭
알킬 기술어 기능성 기술어 염류 기술어	알킬 사슬 길이 C_{10-18} 지방산,fatty acids (카르복시산,carboxylic acid) 카드뮴염cadmium salts	fatty acids (C10-18) cadmium salts
알킬 기술어 기능성 기술어 염류 기술어	di-C_{10-18}-alkyl-dimethyl 암모늄ammonium 염화물chloride	di-C10-18-alkyl-dimethylammonium chloride
알킬 기술어 기능성 기술어 염류 기술어	trimethyl tallow-alkyl ammonium chloride	trimethyl-tallowalkyl-ammonium chloride

4.3.2.2 석유나 석유와 유사한 원료에서 얻어진 물질

석유(석유 물질)나 석유와 유사한 원료(예: 석탄)에서 얻어진 물질들은 그 조성이 매우 복잡하고 가변적이거나 부분적으로 규정되지 않은 물질이다. 이 장은 석유 물질을 다루고 있으며 이 특수한 종류의 UVCB 물질을 확인하는 방법을 보여준다. 그러나 석탄과 같이 기타 석유와 유사한 원료에서 얻어진 물질에도 동일한 접근법이 적용될 수 있다.

정유산업에서 사용되는 출발물질은 원유 또는 하나 이상의 공정으로 얻어지는 모든 정제유이다. 최종 생성물의 조성은 제조에 사용된 원유(원유의 조성은 산지에 따라 다르기 때문)와 뒤이은 정제 공정에 따라 달라진다. 따라서 석유물질들의 조성은 공정과는 별개로 원래부터 차이가 있다 [Rasmussen 외, 1999].

1. 명명 규칙

석유 물질을 확인하는 데 있어서는 기존의 명명 체계[US EPA에 의해서도 사용되는]에 따라 이름을 정하도록 권고된다. 이 명칭은 주로 정제 공정, 원료, 일반적 조성이나 특성으로 구성된다. 물질이 4~6개로 이루어진 축합 고리 방향족 탄화수소를 5 w/w-% 이상 포함하고 있다면 물질에 대해 기술할 때 이 정보를 포함시켜야 한다. EINECS 번호가 있는 석유물질의 경우에는 EC 목록에 오른 명칭을 사용해야 한다.

2. 식별자

석유물질 확인을 위한 조항과 정의에는 주로 원료, 정제 공정, 일반 조성, 탄소수, 비점범위나 그 외 적절한 물리적 특성, 주요 탄화수소 종류[US EPA] 등이 포함된다.

REACH 부속서 Ⅵ, 2항의 확인 매개변수가 제시되어야 한다. 석유물질은 제조 시 조성보다 성능사양이 더 중시된다. 따라서 일반적으로 석유물질을 가능한 한 명확히 확인하기 위해서는 명칭, 탄소사슬 길이 범위, 끓는점, 점도, 절단값과 같은 특징과 기타 물리적 속성이 조성 정보보다 더 유용하다.

화학조성은 UVCB 물질의 주요 식별자가 아니지만 알려진 주요 성분(함량 10% 이상)을 표시하고 조성을 포괄적으로 기술해야 한다. 예: 분자량 범위, 지방성 화합물 또는 방향족 화합물, 수소첨가도, 그 외 필수 정보. 덧붙여 위험 분류에 영향을 주는 기타 농도가 낮은 모든 성분의 명칭과 일반 농도를 제시해야 한다.

4.3.2.3 효소

효소는 미생물을 발효시켜 만드는 경우가 대부분이지만 때로는 식물이나 동물에서 얻어지기도 한다. 발효나 추출 후 뒤이은 정제 단계를 거쳐 만들어지는 효소 농축액은 물 이외에 활성 효소 단백질과 발효한 뒤 남은 잔류물로 이루어진 다른 성분(예: 단백질proteins, 펩티드peptides, 아미노산amino acids, 탄수화물carbohydrates, 지질lipids, 무기염inorganic salts)을 함유하고 있다.

효소 단백질의 안정성에 영향을 주거나 그 조성을 변화시키지 않고 분리될 수 있는 물을 제외하고 발효나 추출 공정에서 얻어진 효소 단백질과 기타 성분들은 확인 용도의 물질로 간주되어야 한다.

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

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

효소 물질은 가변성과 부분적으로 알려지지 않은 조성으로 인해 'UVCB 물질'로 간주되어야 한다. 효소 단백질은 UVCB 물질의 성분으로 보아야 한다. 고도로 정제된 효소는 잘 정의된 물질(단일성분 또는 다성분 물질)로 취급될 수도 있으며, 그에 따라 적절히 확인되어야 한다.

EINECS에서 효소의 주요 식별자는 촉매활성이다. 효소는 추가적 상세사항 없이 일반 엔트리로 등록되거나 원료 미생물이나 기질(基質)을 나타내는 특수 엔트리로 등록된다.

예		
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 췌장)	39445-21-1
262-402-4	Mannanase	60748-69-8

유럽위원회가 의뢰한 효소 관련 연구[UBA, 2000]는 IUBMB(국제 생화학 분자생물학 연맹,

www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/)의 국제 효소 명명 시스템에 따라 효소를 확인할 것을 제안했다.

본 TGD에서는 이 접근법을 사용하고 있으며 이는 EINECS에 비해 더욱 체계적이고, 상세하며 포괄적인 효소 확인을 가능케 할 것이다.

1. 명명 규칙

효소는 IUBMB 명명 규칙에 따라 이름이 정해진다 [http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html].

IUBMB 분류 체계는 각각의 효소 종류와 촉매기능에 대해 네 자리의 고유번호를 제공한다(예: α-amylase는 3.2.1.1)[14]. 각각의 번호는 아미노산 서열과 출처가 서로 다른 효소로 구성되어 있지만 효소의 기능성은 동일하다. IUBMB 명칭 목록의 명칭과 번호를 물질 확인에 사용해야 한다. IUBMB 명칭 목록은 효소를 여섯 개의 주요 그룹으로 분류한다.

1. 산화 환원 효소(Oxidoreductases)
2. 전이 효소(Transferases)
3. 가수 분해 효소(Hydrolases)
4. 분해 효소(Lyases)
5. 이성화 효소(Isomerases)
6. 결합 효소(Ligases)

아래의 예는 IUBMB 명칭 목록에 따른 엔트리를 설명하기 위한 것이다.

EC 3.4.22.33

일반명: fruit bromelain

반응: 펩티드 결합의 특이성이 큰 단백질의 가수분해. Bz-Phe-Val-Arg＋ NHMec는 훌륭한 합성 기질이지만 Z-Arg-Arg-NHMec는 아무런 작용도 하지 않는다(c.f. stem bromelain).

기타 명칭: juice bromelain, ananase, bromelase, bromelin, extranase, juice bromelain, pinase, pineapple enzyme, traumanase, fruit bromelain FA2

설명: 파인애플 나무,*Ananas comosus*에서 얻어짐. 닭의 cystatin에 의해 거의 억제되지 않음. 소분자 기질에서 유사한 작용을 하는 또 다른 cysteine endopeptidase인 pinguinain(구 EC 3.4.99.18)은 동속 식물인 *Bromelia pinguin*에서 얻어지지만 pinguinain은 닭의 cystatin에 의해 억제되다는 점에서 fruit bromelain과는 다르다[4]. peptidase 과(family) Cl (papain 과). 구 EC 3.4.22.5이며 EC 3.4.22.4에 포함.

다른 데이터베이스 링크: BRENDA, EXPASY, MEROPS, CAS 등록번호: 9001-00-7

14 "EC 번호"(=효소에 지정된 번호,Enzyme Commission number)와 "IUBMB 번호"라는 용어는 종종 동의어로 사용된다. 오해를 피하기 위해 IUBMB의 네 자리 수 코드에는 "IUBMB 번호"라는 표현을 사용하도록 권고된다.

참고자료:

1. Sasaki, M., Kato, T.와 Iida, S. 식물성 티올 프로테아제(thiol proteases) 네 종류에서 공통된 항원결정기. *J. Biochem.* (도쿄) 74(1973) 635-637.[Medline UI: 74041600]
2. Yamada, F., Takahashi, N. 과 Murachi, T. 파인애플, 열매 브로멜라인(fruit bromelain) FA2의 프로테이나아제(proteinase)의 정제와 특성. *J. Biochem.* (도쿄) 79(1976) 1223-1234. [Medline UI: 76260156]
3. Ota, S., Muta, E., Katanita, Y. 와 Okamoto, Y. 줄기와 열매 브로멜라인(bromelains)의 단백질 가수분해 활성 성분의 분류와 몇 가지 특성에 관한 재조사. *J. Biochem.* (도쿄) 98(1985)219-228. [Medline UI: 86008148]
4. Rowan, D.D., Buttle,D.J. 와 Barrett, A.J. 파인애플 나무의 시스테인 프로테이나아제. *Biochem. J.* 266(1990)869-875. [Medline UI: 90226288]

IUBMB 체계에 따른 효소 분류의 예 (http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html)	
프로테아제(단백질 분해 효소)의 번호는 아래 기준에 의해 매겨진다.	
3.	**Hydrolases(가수분해효소)**
3.4	**펩티드 결합에 작용(펩티다아제,peptidases)하며 하위분류는 아래와 같다.**
3.4.1	α-Amino-Acyl-Peptide Hydrolases (현재 EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidyl-Amino-Acid Hydrolases (현재 EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptide Hydrolases (현재 EC 3.4.13)
3.4.4	Peptidyl Peptide Hydrolases (현재 EC 3.4 내에서 재분류됨)
3.4.11	Aminopeptidases
3.4.12	Peptidylamino-Acid Hydrolases 또는 Acylamino-Acid Hydrolases (현재 EC 3.4 내에서 재분류됨)
3.4.13	Dipeptidases
3.4.14	Dipeptidyl-peptidases 와 tripeptidyl-peptidases
3.4.15	Peptidyl-dipeptidases
3.4.16	Serine-type carboxypeptidases
3.4.17	Metallocarboxypeptidases
3.4.18	Cysteine-type carboxypeptidases
3.4.19	Omega peptidases
3.4.21	Serine endopeptidases
	이 외의 특수한 효소들이 확인된다.
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	현재 EC 3.4.21.34와 EC 3.4.21.35에 속함
3.4.21.9	enteropeptidase
3.4.21.10	acrosin
3.4.21.11	현재 EC 3.4.21.36과 EC 3.4.21.37에 속함
3.4.21.12	12 a-Lytic endopeptidase
...	
3.4.21.105	
3.4.99	촉매 기작을 알 수 없는 endopeptidases

IUBMB 번호가 덧붙여진 EINECS의 예			
EC 번호	**EINECS 명칭**	**CAS 번호**	**IUBMB 번호**
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. 식별자

효소 물질은 포함하는 효소 단백질(IUBMB 명칭)과 발효로부터 얻어지는 다른 성분들로 확인된다. 효소 단백질을 제외한 개별 성분은 농도가 1%를 넘지 않는 것이 보통이다. 이들 개별 성분의 특성이 알려져 있지 않은 경우 이들을 범주화해서 나타낼 수 있다 (단백질, 펩티드, 아미노산, 탄수화물, 지질, 무기염 등). 그러나 성분의 특성이 알려진 경우에는 성분을 표시해야 하며, 성분 농도가 10%를 넘거나 성분이 분류, 표지와/나 PBT 평가[15]와 관련이 있는 경우에는 성분을 확인해야 한다.

효소 단백질

농축물 내의 효소 단백질은 다음의 사항으로 확인되어야 한다.

- IUBMB 번호
- IUBMB에서 받은 명칭 (계통명, 효소명, 이명(異名))
- IUBMB에 기록된 설명
- 반응과 반응유형
- EC 번호와 명칭(해당될 경우)
- CAS 번호와 명칭(보유하고 있을 경우)

효소에 의해 유도된 반응은 명시되어야 한다. 이 반응은 IUBMB에 의해 규정된다.

예
.alpha.-amylase: alpha-(1-4)-와 연계된 glucose 단위를 포함하는 Polysaccharide + H2O = maltooligosaccharides; 1,4-.alpha.-결합 d-glucose 세 개 이상을 포함하는 polysaccharides 내 1,4-alpha.-d-glucosidic 결합의 endohydrolysis.

15 PBT 평가와 관련 농도 한계에 관한 더 많은 정보는 RIP 3.2 TGD PBT 평가의 화학물질 안정성 평가 섹션에서 찾아볼 수 있다.

효소 분류에 따라 반응의 유형이 배정되어야 한다. 산화, 환원, 제거, 첨가 또는 반응명 등이 이에 해당된다.

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

효소 단백질 외의 성분

농도가 10% (w/w) 이상이거나 분류, 표지와/나 PBT 평가[16]와 관련된 모든 성분이 확인되어야 한다. 농도가 10% 미만인 성분의 특성은 화학물질 그룹으로 표시할 수 있다. 성분의 일반 농도나 농도 범위를 제시해야 한다.

- (글리코)단백질
- 펩티드와 아미노산
- 탄수화물
- 지질
- 무기물질 (예: 염화나트륨이나 기타 무기염)

효소 농축물의 다른 성분들을 충분히 확인하는 것이 불가능할 경우 기타 생물학적 UVCB 물질과 마찬가지로 생산 미생물의 명칭 (속명과 종명, 또는 관련이 있을 경우 유전형)이 제시되어야 한다.

추가적 매개변수가 있는 경우에는 그것을 제시할 수 있다. 예: 기능적 매개변수(pH나 최적 온도와 범위), 동적 매개변수(고유 활성도나 전환수(turnover number)), 리간드, 기질과 생성물, 공동인자.

5 동일 물질 여부 확인을 위한 기준

여러 제조자/수입자의 물질이 서로 같은 것으로 간주될 수 있는지의 여부 확인 시, 몇 가지 규칙을 따라야 한다. EINECS [의사 결정 안내서, EINECS 물질 보고 기준, ECB 웹사이트; Geiss 외 1992, Vollmer 외 1998, Rasmussen 외 1999] 제정에 적용했던 규칙을 물질 확인 및 명명의 일반적인 기준으로 간주해야 하며 따라서 이는 특정 물질의 공동 등록예정자 확인에도 기준이 된다. 물질 확인 및 명명을 위한 지침이 다음의 글에 나온다. 그러나 동일 물질로 간주되지 않은 물질도 전문가 판단을 적용하여 구조적으로 서로 관련된 물질로 볼 수 있다. 그럼에도 불구하고 과학적으로 합당한 경우 이러한 물질의 정보 공유가 가능하다. 그러나 이는 본 TGD의 주제가 아니며 RIP 3.4 Data Sharing에 자세한 내용이 나온다.

- 다성분 물질을 위한 “80% 미만, 10% 이상”규칙뿐만 아니라 단일 성분 물질의 “80% 이상”규칙도 적용되어야 한다.

16 PBT 평가와 관련 농도 한계에 관한 더 많은 정보는 RIP 3.2 TGD PBT 평가의 화학물질 안정성 평가 섹션에서 찾아볼 수 있다.

물질의 공업용급 (technical grade), 순수급 (pure grade), 분석용급 (analytical grade) 간에 아무런 차이가 없다. "동일"물질이라 해도 불순물의 종류와 양이 서로 다른 모든 생산 과정의 모든 등급을 다 지닐 수 있다. 그러나 잘 정의된 물질에는 정상적으로 주요 성분이 들어있어야 하며 불순물은 오직 생산 과정 (4.2장 참조)에서 비롯된 불순물 및 물질을 안정시키는 데 필요한 첨가물만 허용된다.

서로 다른 제조 원료로 만든, 잘 정의된 물질의 불순물 프로파일이 현저하게 다를 경우, 전문가의 판단을 적용하여 이러한 차이가 테스트 데이터를 다른 SIEF 회원과 공유할 수 있는지 여부에 영향을 미칠지 결정해야 한다.

- 화합물의 수화물 (hydrate) 및 무수화물 (anhydrous)은 동일 물질로 봐야 한다.

예			
명칭 및 분자식	**CAS 번호**	**EC 번호**	**규칙**
황산동 (Copper sulphate, $Cu \cdot H_2O_4S$) 황산구리(2+)염(1:1), 오수화물 (pentahydrate) ($Cu.H_2O_4S \cdot 5H_2O$)	7758-98-7 7758-99-8	231-847-6	본 물질은 물질의 무수화물 (EC 번호:231-847-6)에 포함된다.

수화물과 무수화물은 서로 다른 화학명과 CAS 번호를 갖는다. 그러나 등록 서류는 하나만 제출해야 한다. 무수화물은 등록되어야 한다. 수화물은 무수화물 등록에 포함된다.

- 산 또는 염기 및 산성염, 염기성염은 다른 물질로 간주되어야 한다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
201-186-8	과초산 (Peracetic acid) $C_2H_4O_3$	예를 들어 본 물질의 나트륨염 (sodium salt, EINECS 220-624-9)과 동일한 물질로 간주되지 않음.
220-624-9	소디움 글리콜레이트 (Sodium glycollate) $C_2H_4O_3.Na$	예를 들어 본 물질에 상응하는 산(EINECS 201-186-8)과 동일한 물질로 간주되지 않음.
202-426-4	2-클로로아닐린 (2-Chloroaniline) C_6H_6CIN	예를 들어 벤젠아민 (benzenamine), 2-클로로, 브롬화수소 (hydrobromide) (C_6H_6CIN, HBr) 와 동일한 물질로 간주되지 않음.

- 개별 염은 (예. 나트륨, 칼륨)은 다른 물질로 간주되어야 한다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
208-534-8	벤조산나트륨 (Sodium benzoate) $C_7H_5O_2.Na$	예를 들어 칼륨염 (EINECS 209-481-3)과 동일한 물질로 간주되지 않음.
209-481-3	벤조산칼륨 (Potassium benzoate) $C_7H_5O_2.K$	예를 들어 나트륨염 (EINECS 208-534-8)과 동일한 물질로 간주되지 않음.

- 분지형 (branched) 알킬 사슬 또는 선형 (linear) 알킬 사슬은 다른 물질로 간주되어야 한다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
295-083-5	인산 (Phosphoric acid), dipentyl ester, 분지형 및 선형	본 물질은 개별 물질의 인산, dipentyl ester, 분지형 또는 인산, n-dipentyl ester와 동일한 물질로 간주되지 않음.

- 분지형기 (branched group)는 IUPAC 명칭을 사용하여야 한다. 알킬기를 포함한 물질은 추가 정보가 없고 구체적으로 지정되지 않는 한 비분지형 (unbranched) 선형 사슬만을 가리킨다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
306-791-1	지방산 (fatty acids), C12-16	선형 알킬키, 비분지형 알킬기를 지닌 물질만 동일한 물질로 간주됨.
279-420-3	알코올, C12-14	
288-454-8	아민, C12-18-알킬메틸	

- 이소 (iso), 네오 (neo), 분지형 등의 부가적인 용어가 붙은 알킬기 물질은 이러한 용어가 붙지 않은 물질과 동일한 물질로 간주되지 않는다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
266-944-2	글리세리드 (Glycerides), C_{12-18} 본 물질은 SDA 물질명칭: C12-C18 트리알킬 글리세리드 및 SDA 보고 번호: 16-001-00으로 확인됨.	본 물질은 위치에 관계없이 포화알킬사슬을 지닌 $C_{12-18-ISO}$ 물질과 동일한 물질로 간주되지 않는다.

- 명확한 구체적 사항이 없는 경우 산 혹은 알코올 등의 알킬사슬은 오직 포화사슬만을 나타내는 것으로 봐야한다. 불포화사슬은 불포화로 명기되어야 하며 다른 물질로 간주된다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
200-313-4	스테아르산 (stearic acid), 순$C_{18}H_{36}O_2$	본 물질은 올레산 (Oleic acid), 순$C_{18}H_{34}O_2$ (EINECS 204-007-1)와 동일한 물질로 간주되지 않음.

- 키랄 중심 (chiral centre)을 지닌 물질

하나의 키랄 중심을 지닌 물질은 좌선형, 우선형 (이성질체)의 형태로 존재할 수 있다. 이와 다른 사항을 구체적으로 지시하는 말이 없으면 물질은 두 형태의 동일한 혼합물 (라세미 혼합물)로 간주된다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
201-154-3	2-클로로프로판-1-ol	개별 이성질체 (R)-2-클로로프로판-1-ol 및 (S)-2-클로로프로판-1-ol은 본 수록어와 동일한 물질로 간주되지 않음.

물질이 단일한 이성질체 형태로 농축되는 경우 다성분물질 규칙이 적용된다.

다수의 키랄 중심을 지닌 물질은 2n 형태 (n은 키랄 중심의 수)로 존재할 수 있다. 이렇듯 다른 형태들은 서로 다른 물리화학적, 독성 및 생태독성 속성을 지닐 수 있다. 이들은 서로 다른 물질로 간주되어야 한다.

- 무기촉매 (Inorganic catalyst)

무기촉매는 조제로 간주된다. 확인 목적에서 성분 금속 혹은 금속성 화합물은 개별 물질로 봐야 한다. (구체적 지정 사항이 없는 경우)

예		
	명칭	규칙
	산화코발트-산화알루미늄 촉매	다음과 같이 따로따로 분류되어야 함. - 산화코발트 (II) - 산화코발트 (III) - 산화알루미늄 - 산화알루미늄코발트

- 동일한 IUBMB 번호를 지닌 효소 농축액은 다른 생산 유기체를 사용하더라도 유해 속성이 크게 다르지 않고 동일하게 분류될 수 있다는 점에서 같은 물질로 간주될 수 있다.

다성분물질

지침 67/548/EEC는 물질의 시장출시에 대한 규제였고 물질 생산 방법과는 관계가 없었다. 따라서 시장에서 판매되는 다성분물질은 모든 개별 성분들이 EINECS 목록에 들어있는 경우 EINECS를 기준으로 했다. 예를 들어 이성질체 혼합물 difluorobenzene은 EINECS 1,2-Difluorobenzene (206-680-7) 수록어를 기준으로 했다. 1,3-Difluorobenzene (206-746-5)와 1,4-Difluorobenzene (208-742-9)는 이성질체 혼합물이지만 EINECS 목록에 올라있지 않았다.

REACH에서는 이와 달리 제조 물질의 등록이 요구된다. 물질을 생산하는 동안 어느 정도의 다양한 생산 과정이 '제조(manufacturing)'의 정의에 들어가는 지는 경우에 따라 결정한다. (예. 다양한 정제 및 증류 과정) 다성분물질이 생산되면 이를 등록해야 한다. (이는 개별 성분 등록에 포함되지 않는다.) 따라서 예를 들어 이성질체 혼합물 difluorobenzene이 생산되면 "difluorobenzene"이 이성질체 혼합물로 등록되어야 한다. 그러나 다성분물질의 경우 개별 성분에 대한 정보만으로 물질 독성이 충분히 설명될 수 있으면 물질 테스트를 할 필요가 없다. 만약 이성질체 1,2-Difluorobenzene, 1,3-Difluorobenzene, 1,4-Difluorobenzene가 따로 생산된 후 나중에 혼합되는 경우 각각의 이성질체가 따로 등록되어야 하며 이성질체 혼합물은 조제로 간주된다.

A, B, C의 주요 성분을 지닌 다성분물질은 A, B를 주요 성분으로 한 다성분물질이나 A, B, C, D의 반응질량과 같은 물질로 간주되지 말아야 한다.

- 다성분물질은 단지 단일 성분의 부분 집합으로 된 물질과 같은 물질로 보지 않는다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
207-205-6	2,5-Difluorotoluene	본 두 물질은 단순히 모든 가능한 이성질체의 부분 집합일 뿐이므로 이성질체 혼합물 difluorotoluene과 같은 물질로 간주되지 않음.
207-211-9	2,4-Difluorotoluene	

- 다성분물질의 등록이 개별 성분까지 모두 아우르는 것은 아니다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
208-747-6	1,2-Dibromoethylene	본 물질은 cis-, trans- 이성질체를 나타낸다. 개별 물질 "(1Z)-1,2-Dibromoethene과 (1E)-1,2-Dibromoethene은 본 이성질체 혼합물의 등록에 포함되지 않음.

UVCB 물질

- 성분이 한정적으로 분포된 다성분 물질은 폭넓게 구성된 다성분 물질과 동일한 물질로 간주되지 않으며 이 반대의 경우도 마찬가지다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
288-450-6	아민, $C_{12\text{-}18\text{-}alkyl}$, 아세테이트	물질 "아민, $C_{12\text{-}14\text{-}alkyl}$, 아세테이트", "아민, $C_{12\text{-}20\text{-}alkyl}$, 아세테이트", "아민, dodecyl ($C_{12\text{-}alkyl}$), 아세테이트" 혹은 짝수개의 알킬 사슬을 지닌 물질과 본 물질을 동일한 물질로 보지 않음.

- 종 (species)/ 속 (genus)의 성질을 지닌 물질을 다른 종/속과 유리된 물질과 동일한 물질로 간주하지 않는다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
296-286-1	글리세리드, 해바라기유 di-	본 물질은 글리세리드, 소야 di- (EINECS : 271-386-8) 혹은 글리세리드 탤로 di- (EINECS : 271-288-9)와는 다른 물질로 간주됨.
232-401-3	에폭시화 아마인유 (Linseed oil)	물질은 산화 아마인유 (EINECS: 272-038-8), 말레이트 아마인유 (EINECS: 268-897-3), 에폭시화 피마자유 (EINECS에 등재되지 않음)와는 다른 물질로 간주됨.

- 정제추출물 혹은 농축물은 추출물과는 다른 물질로 간주된다.

예		
EC 번호	**명칭**	**규칙**
232-299-0	평지기름 (Rape oil) 추출물 및 추출물의	물질 "(Z)-Docos-13-enoic 산 (에루스산)"은 물질 "평지기름"의 구성성분임. 에루스산은 평지기름에서 순물질로 분리

	물리적 파생물. 주로 에루스, 리놀레, 올레 지방산의 글리세리드로 구성됨. (유채과, 십자화과)	되었기 때문에 평지기름과 동일한 물질로 간주되지 않음. 에루스산은 독자적으로 EINECS에 등재됨 (204-011-3). 팔미트산, 올레산, 리놀레산, 리놀렌산, 에루스산, 에이코센산은 구성물질이 전체 기름을 나타내지 않기 때문에 평지기름과 동일한 물질로 보지 않음.

6 사전등록 및 조회 시의 물질명

물질 확인 및 명명 방법에 대한 지침이 본 TGD의 4장에 나와 있다. 본 지침에 따라 둘 이상의 물질을 REACH의 목적에 맞게 동일한 물질로 볼 수 있는지 여부를 판단해야 한다. 기존 물질의 사전등록 및 기존에 없던 물질 조회를 위한 내용이 아래에 보다 자세히 나와 있다.

4조 (Atricle 4)에 따르면 제조자 혹은 수입자는 누구나 REACH 규제하의 모든 의무사항을 준수해야할 전적인 책임을 지며 다른 제조자, 수입자와의 토의를 포함한 3장 (Title III)의 모든 처리 절차를 위해 제 3자의 대리자를 지정할 수 있다. 3장은 또한 사전 등록되지 않은 기존물질 및 기존에 없던 물질에 대한 규칙과 함께 사전 등록된 기존물질에 대한 규칙도 포함하고 있어 본 장에서 '등록예정자'라는 단어는 '제조예정자' 혹은 '수입예정자', '제조예정자 또는 수입예정자가 대리로 지정한 제 3자'로 해석되어야 한다.

6.1 사전등록

사전등록과정의 목적은 연구의 중복, 특히 척추동물에 대한 실험 중복을 막기 위해 동일한 물질의 등록예정자를 한데 묶는 것이다. 사전등록은 기존 물질에만 적용된다.

사전등록과정은 다음과 같다.

1. 등록예정자는 한정된 물질정보 매개변수 세트를 유럽화학물질관리청에 제출해야 한다.

2. 한정된 물질정보 매개변수 세트를 토대로 유럽화학물질관리청은 물질 목록을 작성하고 이를 웹사이트에 게재한다.

3. 다른 데이터 보유자는 목록을 토대로 관련 정보를 유럽화학물질관리청에 제출할 수 있다.

4. 유럽화학물질관리청은 물질정보 매개변수가 일치하는 목록 물질의 등록예정자들이 서로 연락을 취할 수 있게 하는 한편 데이터 보유자와의 접촉도 용이하게 한다. 이는 잠재 등록자가 자신의 물질이 목록상의 다른 물질과 동일한 물질로 간주될 수 있는지의 여부를 확인할 수 있도록하기 위한 절차이다. 여기에는 본 TGD의 4장에 설명된 규칙이 적용되어야 한다.

5. 일단 물질의 동일성이 확인되고 나면 동일한 물질에 대한 정보를 유럽화학물질관리청에 제출한 등록예정자들은 모두 SIEF (물질정보교환포럼)의 참가자가 된다.

첫 번째 단계에서 잠재 등록자는 다음과 같은 제한된 물질 확인 세트를 제출해야 한다. (28조)

- EC 번호
- CAS 번호 및 명칭
- IUPAC 목록 상의 화학명 혹은 다른 국제적 화학명
- 기타 명칭

IT 시스템이 정보 제출을 지원할 것이다. REACH-IT 웹사이트를 통해 등록예정자는 단계적 시스템으로 안내되며, 이 시스템 내에서 물질정보를 위에서 열거된 대로 제출해야 한다.

물질정보에 대한 보다 자세한 내용은 (예. 불순물 정보) 이 단계에 포함되지 않는다. 등록예정자는 QSAR, read-across, 목록 접근을 위해 관련된 다른 물질 정보의 한정된 매개변수 세트도 제시할 수 있다.

물질 확인과 관련하여 사전등록 및 SIEF 형성, 공동제출에 대한 보다 자세한 정보는 RIP 3.4 Guidance on data sharing에 나와 있다.

6.2 조회

기존에 없던 물질이나 등록되지 않은 기존 물질의 경우 잠재 등록자는 등록에 앞서 유럽화학물질관리청에 동일 물질에 대한 등록이 이미 제출되지 않았는지 조회할 의무가 있다. (24조) 조회 내용은 다음과 같다.

- 부속서 Ⅵ의 1항에 명시된 바와 같이 등록예정자 신원. 이용 사이트는 예외.
- 부속서 Ⅵ의 2항에 명시된 바와 같이 물질정보
- 어떠한 정보적 필요사항 때문에 등록예정자가 척추동물 실험을 포함한 새로운 연구를 해야 하는지
- 어떠한 정보적 필요사항 때문에 등록예정자가 기타 새로운 연구를 해야 하는지

IT 시스템과 IUCLID 5가 정보 제출을 지원할 것이다. 등록예정자는 본 TGD의 4장에 명시된 규칙에 따라 물질 정보 및 명칭을 제출해야 한다.

유럽화학물질관리청은 동일한 물질이 이전에 등록된 바 있는지 여부를 확정하게 된다. 여기에도 본 TGD의 4장에 명시된 규칙이 적용되어야 한다. 심사 결과는 등록예정자와 이전 등록자 (해당 경우)에게 다시 통보된다.

7 예

다음의 예는 사용자가 본 TGD를 어떻게 이용할 수 있는지 보여주는 것만을 목적으로 한다. REACH 관련 의무사항에 대한 전례가 아님을 밝혀둔다.

예는 다음과 같다.

- '디에틸 퍼옥시디카보네이트 (Diethyl peroxydicarbonate)'는 안정제로 작용하는 용매가 들어 있는 단일성분물질의 예이다. (7.1장 참조)

- '졸리미딘 (Zolimidine)'은 단일성분물질 혹은 다성분물질로 확인될 수 있는 물질의 예이다. (7.2장 참조)

- 제조 반응 중에 형성된 '이성질체 혼합물'은 다성분 물질의 예에 들어간다. (7.3장 참조) 이전에는 EINECS의 개별 이성질체 수록 물질이 본 물질을 포함했다.

- '프레그런스 AH (Fragrance AH)'는 다른 특징을 갖도록 생산된 물질의 예이며, 여러 농도 범위를 지닌 다섯 가지 성분의 반응물로 설명될 수 있다. (7.4장 참조) 또한 80% 규칙과 10% 규칙의 합당한 편차 예도 된다.

- 물리적 성질이 추가로 설명될 필요가 있는, 잘 정의된 물질의 예로 몬모릴로나이트 (Montmorillonite)를 포함한 비금속성 '미네랄'은 7.5장에 해당한다.

- '라벤다 정유'는 식물에서 얻은 UVCB 물질의 예이다. (7.6장)

- '국화 오일 (Chrysanthemum oil) 및 국화 오일에서 분리된 이성질체'는 생물학적 원료를 사 용하여 후에 가공시킨 UVCB 물질의 예이다. (7.7장)

- '페놀, 이소프로필화, 인산염 (phenol, isopropylated, phosphate)'은 완전히 경계를 뚜렷이 할 수 없는 가변 UVCB 물질의 예이다. (7.8장)

- '제4급 암모늄 화합물 (Quaternary ammonium compounds)'은 탄소 사슬 길이가 변화하는 물질 예이다. (7.9장)

- '석유 물질 (petroleum substances)'의 두 가지 예인 가솔린 혼합유 (gasoline blending stream) 및 경유 (gas oil)는 7.10장에 해당한다.

- 효소, 라카아제 (laccase), 아밀라아제 (amylase)의 두 가지 예는 7.11장에 해당한다.

7.1 디에틸 퍼옥시디카보네이트 (Diethyl Peroxydicarbonate)

물질 '디에틸 퍼옥시디카보네이트' (EC 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$)는 18% isododecane (EC 250-816-8, CAS 31807-55-3)용액으로 생산된다. Isododecane은 또한 폭발성에 대한 안정제 역할을 한다. 본 물질의 안전한 취급을 위해 가능한 최고 농도는 27% 용액이다.

위에서 설명한 물질은 등록을 위해 어떤 방법으로 확인되고 명명되어야할까?

REACH의 물질 정의에 따르면 물질 안정성에 영향을 주지 않고 분리되는 용매 혹은 물질 구성을 변화시키지 않고 분리되는 용매는 제외되어야 한다. 상기의 경우 isododecane은 안정제의 역할을 할 뿐만 아니라 물질의 폭발성으로 인해 완전히 분리될 수 없기 때문에 용매만이 아닌 첨가물로 간주되어야 한다. 그러나 여전히 본 물질은 단일성분물질로 봐야한다.

따라서 본 물질은 안전한 취급을 위해 가능한 최고 농도의 용액으로 다음과 같이 등록되어야 한다.

디에틸 퍼옥시디카보네이트 (상한농도: 27%, 일반 농도: 22%)

7.2 졸리미딘(Zolimidine)

본 제조된 메탄올 용액에는 '졸리미딘' (EC 214-947-4, CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$)과 '이미다졸(imidazole)' (EC 206-019-2, CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$)이 들어있다. "메탄올" 용매를 제거하고 제조 공정을 최적화한 후에도 본 물질은 74-86%의 졸리미딘 순도 범위와 4-12%의 이미다졸 순도 범위를 갖는다.

위에서 설명한 물질은 등록을 위해 어떤 방법으로 확인되고 명명되어야할까?

REACH의 물질 정의에 따르면 물질 안정성에 영향을 주지 않고 분리되는 용매 혹은 물질 구성을 변화시키지 않고 분리되는 용매는 제외되어야 한다. 상기의 경우 메탄올이 별 어려움 없이 분리될 수 있으므로 용매가 분리된 물질을 등록해야 한다.

일반적으로 물질은 하나의 주요 성분이 80%이상 들어있을 경우 단일성분물질로 등록된다. 또한 하나의 주요 성분이 10%이상 80%이하 들어있는 경우에는 다성분물질로 등록된다. 위의 예는 역치를 초과할 수도, 역치에 미만일 수도 있기 때문에 그 경계선에 있는 경우이다. 따라서 물질은 단일성분물질 "졸리미딘"으로 등록되거나 "졸리미딘"과 "이미다졸"의 반응물인 다성분물질로 등록될 수 있다.

이러한 경계선 상의 경우 물질 주요 성분의 일반 농도를 사용하여 최선의 물질 설명 방법을 결정한다.

예. (1) 일반 농도가 졸리미딘 77%, 이미다졸 11%인 경우 물질을 졸리미딘과 이미다졸의 반응물로 보는 것이 좋다.

(2) 일반 농도가 졸리미딘 85%, 이미다졸 5%인 경우 물질을 단일성분물질 "졸리미딘"으로 보는 것이 좋다.

(3) 제조 공정으로 통제할 수 없는 범위의 농도 결과가 나왔기 때문에 일반 농도를 정할 수 없는 경우 물질을 다성분물질로 보는 것이 좋다.

7.3 이성질체 혼합물

본 물질은 제조 반응 중에 형성된 두 이성질체의 혼합물 (반응물)이다. 예전에는 각각의 이성질체를 EINECS에 보고했다. 지침 67/548/EEC가 물질의 시장출시를 규제했다. 물질의 생산 방법은 중요하지 않았기 때문에 혼합물은 두 개의 개별 이성질체 EINECS 수록물로 파악되었다. REACH는 제조 물질의 등록을 규정으로 삼는다. 물질을 생산하는 동안 어느 정도의 다양한 생산 과정이 '제조'의 정의에 들어가는 지는 경우에 따라 결정한다. (예. 다양한 정제 및 증류 과정) 다성분물질이 생산되면 이를 등록해야 한다. 이성질체 혼합물이 다성분물질로 등록되는 경우 (4.2.2 장의 지침을 따라) 개별 성분에 대한 정보만으로 물질 독성이 충분히 설명될 수 있으면 물질 테스트를 할 필요가 없다. 그러나 기존 성질을 보여주기 위해 개별 이성질체의 EINECS 수록 사항에 대한 참조정보가 있어야 한다.

1. 명칭 및 기타 물질 확인 정보

IUPAC 명칭 또는 기타 (해당 물질의) 국제적 화학명	2,2'[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol과 2,2'[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol의 반응물
(해당 물질의) 기타 명칭	2,2'[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol 에탄올, 2,2'[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-, 물의 반응물 에탄올, 2,2'[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-(9Cl) 이성질체 화합물
(해당 물질의) EC 번호 **EC 명칭** **EC 설명**	혼합물은 EINECS에 보고되지 않았기 때문에 본 혼합물에 대한 EC 번호는 없음. 그러나 본 물질은 구성성분 EINECS 수록 사항 (279-502-9, 279-501-3)에 포함되어 있었음. 따라서 본 혼합물은 기존 물질로 간주되어야 함.
(해당 물질의) CAS 번호 **CAS 명칭**	없음 없음
(성분 A) EC 번호 **EC 명칭** **EC 설명**	279-502-9 2,2'[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
(성분 B) EC 번호 **EC 명칭** **EC 설명**	279-501-3 2,2'[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
(성분 A) CAS 번호 **CAS 명칭**	80584-89-0 에탄올, 2,2'[[(4methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
(성분 B) CAS 번호 **CAS 명칭**	80584-88-9 에탄올, 2,2'[[(5methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
기타 확인 코드참조	ENCS 번호 5-5917

2. 구성 정보 - 주요 성분

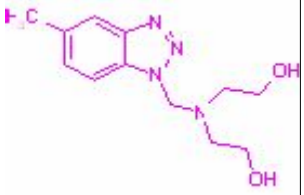
주 요 성 분						
	IUPAC 명칭	**CAS 번호**	**EC 번호**	**분자식 Hill 방법**	**일반농도 (%w/w)**	**농도범위 (%w/w)**
A	에탄올, 2,2'[[(4methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
B	에탄올, 2,2'[[(5methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

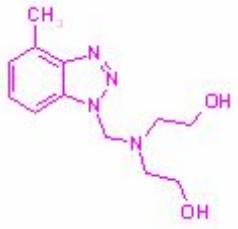
주요성분	
	기타 명칭
A	2,2'[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
B	2,2'[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol

주요성분		
	EC 명칭	**EC 설명**
A	2,2'[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/
B	2,2'[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/

주요성분		
	CAS 명칭	**CAS 번호**
A	에탄올, 2,2'[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0
B	에탄올, 2,2'[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9

주요성분		
	분자량 [g mol^{-1}]	**분자량 범위**
A	250	/
B	250	/

주요성분			
	분자식 CAS 방법	**구조식**	**SMILES 코드**
A	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12
B	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12

7.4 프레그런스 AH (Fragrance AH)

프레그런스 AH는 감마 (이소-알파) 메틸 이오논 (gamma methyl ionone) 및 감마 메틸 이오논의 이성질체로 구성된다. 프레그런스 AH는 이성질체 비율이 다른 세 가지 다른 성질 (A, B, C 성질)로 생산된다.

다음의 표는 서로 다른 성질 물질의 구성에 대한 개괄이다.

서로 다른 성질의 프레그런스 AH 구성

농도 범위[%]	성질 A	성질 B	성질 C	전체 범위
감마 (이소-알파) 메틸 이오논	80-85	65-75	50-60	50-85
델타 (이소-베타) 메틸 이오논	6-10	3-7	3-7	3-10
알파 n-메틸 이오논	3-11	10-20	20-30	3-30
감마 n-메틸 이오논	0.5-1.5	2-4	2-4	0.5-4
베타 n-메틸 이오논	0.5-1.5	4-6	5-15	0.5-15
수도 (pseudo) n-메틸 이오논	0.5-1.5	1-3	1-3	0.5-3

물질 확인에는 다음과 같이 몇 가지 선택사항이 있다.

- A 성질은 최소한 80%의 감마 (이소-알파) 메틸 이온 이성질체를 포함하며 따라서 다른 이성질체는 불순물로 보고 감마 (이소-알파) 메틸 이온 이성질체만을 토대로 단일성분물질로 간주할 수 있다.
- B성질과 C성질은 80% 미만의 감마 (이소-알파) 메틸 이온 이성질체와 10%이상의 기타 이성질체를 포함한다. 따라서 B성질과 C성질은 다성분물질로 간주되어야 한다.
- B성질: 감마 (이소-알파) 메틸 이오논 (65-75%)과 알파 n-메틸 이오논 (10-20%)의 반응물로 다른 이성질체는 불순물로 간주한다.
- C성질: 감마 (이소-알파) 메틸 이오논 (50-60%)과 알파 n-메틸 이오논 (20-30%)의 반응물 [경우에 따라 베타 n-메틸 이오논 (5-15%)도 포함 가능]로 다른 이성질체는 불순물로 간주한다.

본 조성은 변화 가능하며 경우에 따라 이성질체가 10% 이상 (따라서 보통 주성분으로 일컬음)일수도 10% 미만 (따라서 보통 불순물로 일컬음)일수도 있다.

서로 다른 성질을 개별적으로 등록할 수도 있다. 그러면 여기서는 3개의 등록이 가능하다. 그러나 데이터를 read-across하는 방법도 무방하다.

위 사항 대신 다음을 고려할 수도 있다.

- 두 가지의 하위 성질을 지닌 단일성분물질로 등록. 이 경우 하위 성질은 80%의 규칙에서 벗어남. (4.2.1장 참조)
- 5가지 이성질체의 정의된 반응물 (다성분 물질)로 등록. 이 경우 주요 성분과 불순물을 구분하는 10% 규칙에 어긋나는 이성질체 (주성분)가 생김.
- 각 이성질체의 전체 범위를 포함하는 구성 변화를 지닌 정의된 반응물로 등록.

다음의 사항을 고려하는 것이 중요할 수 있다.

- 세 가지 성질이 동일한 혹은 매우 유사한 물리화학적 속성을 지녔다.
- 세 가지 성질이 유사한 사용 및 노출 시나리오를 지녔다.
- 모든 성질이 동일한 위험분류 및 라벨분류에 속하며, 안전 데이터 시트 및 안전 보고서의 내용이 동일하다.
- 이용 가능한 테스트 데이터 (향후 테스트 포함)가 세 가지 성질의 모든 변이를 다 포괄한다.

이 예에서는 본 물질을 5가지 이성질체의 정의된 반응물 (다성분 물질)로 파악하는 방법이 설명되었다. 80% 규칙 (4.2.1장 참조) 및 10% 규칙 (4.2.2장 참조)에서 벗어났기 때문에 합당한지 확인하는 절차가 필요하다. 각각의 성질이 위와 같이 생산되었으므로 세 성질의 각 구성을 등록 서류에 구체적으로 명시해야 한다. 그러나 공식 조건 하에서는 다음과 같이 적어도 두 개의 등록이 필요할 수 있다. (1) 감마 (이소-알파) 메틸 이오논 (2) 감마 (이소-알파) 메틸 이오논 및 알파 n-메틸 이오논의 반응물

물질 확인

프레그런스 AH는 성분은 동일하나 구성비가 다른 세 가지의 다른 성질 (A, B, C)로 생산된다. 모든 세 가지 성질은 다성분 물질로 하나의 등록 서류에 설명된다. 비록 80% 규칙과 10% 규칙이 엄격하게 적용되지 않았지만 하나의 단일성분물질로 등록하는 것은 다음과 같은 이유에서 합당하다. (1) 이용 가능한 테스트 데이터가 세 가지 성질의 변이를 모두 포괄한다. (2) 세 가지 성질이 매우 유사한 물리화학적 속성을 지녔다. (3) 모든 성질이 동일한 위험분류 및 라벨분류에 속한다. (따라서 안전 데이터 시트도 동일) (4) 세 가지 성질이 유사한 사용 및 노출 시나리오를 지녔다. (따라서 화학적 안전 보고서가 유사함)

1. 명칭 및 기타 물질 확인 정보

IUPAC 명칭 또는 기타 국제적 화학명	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one, [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one, 1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-ten-3-one 의 반응물
기타 명칭	메틸 이오논 감마 성질 A

	메틸 이오논 감마 성질 B 메틸 이오논 감마 성질 C
EC 번호	없음
EC 명칭	/
EC 설명	/
CAS 번호	없음
CAS 명칭	/

2. 조성 정보 - 주성분

이론상으로는 거울상 이성질체가 추가될 수도 있다. 그러나 다음의 이성질체가 분석되었다.

주성분						
	IUPAC 명칭	**CAS 번호**	**EC 번호**	**분자식 Hill 방법**	**최소농도 (%w/w)**	**최대농도 (%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	C14H22O	50	85
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	79-89-0	201-231-1	C14H22O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
D	1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one	없음	없음	C14H22O	0.5	4
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0.5	15

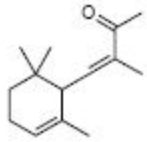
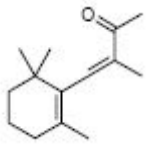
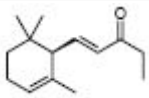
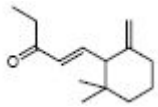
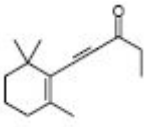
주성분	
	기타 명칭
A	알파-이소-메틸 이오논, 감마 메틸 이오논
B	베타-이소-메틸 이오논, 델타 메틸 이오논
C	알파-n-메틸 이오논
D	감마-n-메틸 이오논
E	베타-n-메틸 이오논

주성분		
	EC 명칭	**EC 설명**
A	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
B	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
C	[*R-(E)*]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
D	1-(2,6,6-methyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
E	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/

주성분		
	CAS 명칭	**CAS 번호**
A	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	127-51-5
B	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	79-89-0

C	1-Penten-3-one, 1-[(1R)]-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-, (1E)-	127-42-4
D	없음	없음
E	1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	127-43-5

주성분		
	기타 확인 코드	**참조**
A	2714 07.036	FEMA EU Flavour Register
B	07.041	EU Flavour Register
C	2711 07.009	FEMA EU Flavour Register
D	없음	없음
E	2712 07.010	FEMA EU Flavour Register

주성분			
	분자식 **CAS 방법**	**구조식**	**SMILES 코드**
A	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C
B	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C
C	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC
D	$C_{14}H_{22}O$		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC
E	$C_{14}H_{22}O$		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

주성분		
	분자량 / $gmol^{-1}$	**분자량 범위**
A	206.33	/
B	206.33	/
C	206.33	/
D	206.33	/
E	206.33	/

3. 조성 정보 - 불순물 및 첨가물

불순물						
	IUPAC 명칭	**CAS 번호**	**EC 번호**	**분자식**	**일반농도 (%w/w)**	**농도범위 (%w/w)**
F						
구체적으로 설명하지 않은 불순물 수: 구체적으로 설명하지 않은 불순물의 총농도:				11 (슈도 메틸 이오논) 0.5-3%w/w		
첨가물						
	IUPAC 명칭	**CAS 번호**	**EC 번호**	**분자식**	**일반농도 (%w/w)**	**농도범위 (%w/w)**
G	Butylated Hydroxytoluen (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0.1	0.05-0.15

4. 다양한 성질 정보

아래는 세 가지 서로 다른 성질에서의 주요 다섯 성분의 농도 범위이다.

농도 범위[%]	성질 A	성질 B	성질 C
감마 (이소-알파) 메틸 이오논	80-85	65-75	50-60
델타 (이소-베타) 메틸 이오논	6-10	3-7	3-7
알파 n-메틸 이오논	3-11	10-20	20-30
감마 n-메틸 이오논	0.5-1.5	2-4	2-4
베타 n-메틸 이오논	0.5-1.5	4-6	5-15
슈도 (pseudo) n-메틸 이오논	0.5-1.5	1-3	1-3

7.5 미네랄

미네랄은 지각에서 발견된 무기 성분의 배합물이며 화학 구성의 특징적 세트, 결정형태 (고결정질에서부터 비결정질에 이르기까지) 및 물리화학적 속성을 지닌다.

화학적으로 변형되지 않은 미네랄은 등록에서 제외된다. 불순물 제거를 위한 예로 미네랄이 화학 공정 혹은 화학 처리를 거치거나 미네랄의 물리적 광물학상 변형이 일어난 경우라 해도 화학적 구조가 변하지 않고 그대로라면 등록 제외가 적용된다.

화학적 구성만으로도 독특한 성질이 설명될 수 있는 미네랄이 있는 반면 (4.2.1장, 4.2.2장의 단일성분물질, 다성분물질을 참조) 화학적 구성만으로는 물질이 구분될 수 없는 미네랄도 있다. (4.2.3장 참조)

다른 단일성분물질 혹은 다성분물질과는 대조적으로 많은 수의 미네랄 확인은 화학적 구성 및 내부 구조 (예. X선회절 분석)를 토대로 해야 한다. 그 이유는 화학적 구성 및 내부 구조가 함께 미네랄의 본질적 성질을 나타내고 미네랄의 물리화학적 속성을 결정하기 때문이다.

다른 다성분물질의 경우 미네랄의 CAS번호가 물질확인 (즉, 무기 성분의 조합)의 일부로 사용된다. 무기 성분 (체계적 광물학 정의에 따라)의 CAS 번호는 여러 다른 성분을 설명하는 데 사용된다. 개별 무기 성분이 생산되는 경우 (단일성분물질) 해당 물질의 CAS 번호가 물질의 확인을 위해 사용되어야 한다. 예는 다음과 같다.

- 카올린 (EINECS: 310-194-1, CAS 1332-58-7)은 기본적으로 수화알루미늄규산염점토(hydrated aluminosilicate clay)인 1차, 2차 카올리나이트 (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7)로 구성된다.

  단일한 카올론 성분 (예. 카올리나이트)을 생산하기 위해 정제 공정을 카올린에 적용하는 경우, 해당 물질의 CAS 번호/ EINECS 번호는 EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7가 된다.

- EINECS에 "콜로이드 점토. 주로 몬모릴로나이트로 구성"이라고 설명된 벤토나이트(EINECS: 215-108-5, CAS 1302-78-9)에는 매우 높은 비율의 무기 성분 몬모릴로나이트(EINECS: 215-288-5, CAS 1318-93-0)가 들어있으나 몬모릴로나이트가 유일한 성분은 아니다.

  순수한 몬모릴로나이트 (EINECS: 215-288-5, CAS 1318-93-0)가 생산되는 경우 물질 확인을 위해 사용되어야 하는 CAS 번호는 몬모릴로나이트의 CAS번호이다.

  벤토나이트 (EINECS: 215-108-5, CAS 1302-78-9)와 몬모릴로나이트 (EINECS: 215-288-5, CAS 1318-93-0)를 동일한 물질로 보지 말아야 한다는 점에 유의해야 한다.

결론적으로 미네랄은 보통 조합의 무기 성분을 따라 명칭이 붙는다. 미네랄은 단일성분물질로도, 다성분물질로도 볼 수 있다. (4.2.1장, 4.2.2장의 일반 지침) 몇몇 미네랄의 경우 화학적 구성만으로는 독특한 성질을 묘사할 수 없어 추가로 물리적 성질을 묘사하거나 공정 매개 변수를 밝혀 물질 확인에 이용해야 한다. (4.2.3장 참조) 다음의 표는 몇 가지 예이다.

미네랄 예

명칭	CAS	EINECS	추가 설명[17]
크리스토발라이트(Cristobalite)	14464-46-1	238-455-4	O_2Si (결정구조, 입방 대칭)
석영 (Quartz)	14808-60-7	238-878-4	O_2Si (결정구조, 사방 육면 대칭)
규조토 (Kieselguhr)	61790-53-2	-	디아토마이트 (Diatomite), 키젤거 (Kieselgur), 셀리트 (Celite)라고도 함. 설명: 작은 선사 수중 식물의 조직으로 구성된 연성의 규토질 고체. 주로 실리카 (silica)함유.
돌로마이트 (Dolomite)	16389-88-1	240-440-2	CH_2O_3.1/2Ca.1/2Mg
장석 (Feldspar) 그룹 미네랄	68476-25-5	270-666-7	다양한 양의 산화알루미늄, 산화바륨, 산화칼슘, 산화마그네슘, 산화실리콘, 산화스트론튬이 균질하고 이온적으로 확산되어 결정 매트릭스를

			형성하는 고온의 석회화 반응물의 무기물질
활석 (Talc)	14807-96-6	238-877-9	$Mg_3H_2(SiO_3)_4$
질석 (Vermiculite)	1318-00-9	-	$(Mg_{0.33}[Mg_{2-3}(Al_{0-1}Fe_{0-1})_{0-1}](Si_{2.33-3.33}Al_{0.67-1.67})(OH)_2$ $O_{10}4H_2O)$

미네랄에 필요한 분석정보

원소 구성	본 화학적 구성은 미네랄의 성분수 및 구성비와는 관계없이 미네랄 구성의 전반적인 개괄을 보여줌. 규정에 따라 본 화학적 구성은 산화물로 표현됨.
분광데이터 (XRD 혹은 이에 상응하는 기법)	XRD 또는 기타 기법은 결정학상의 구조에 기초하여 미네랄을 확인함. 미네랄을 확인하는 특징적인 XRD 혹은 IR의 최고점은 분석 방법 혹은 참고문헌의 간략한 설명과 함께 제시되어야 함.
전형적인 물리화학적 속성	미네랄은 물질확인을 가능케하는 특징적인 물리화학적 속성을 지님. 예. - 매우 낮은 경도 - 팽창능 (swelling capacity) - 디아토마이트의 모양 (광학현미경) - 매우 높은 밀도 - 표면 지역 (질소흡착)

7.6 Lavandin Grosso의 정유(essential oil)

정유는 식물에서 얻어지는 물질이다. 따라서 정유는 식물 유래 물질로도 볼 수 있다.

일반적으로 식물 유래 물질은 식물이나 식물의 일부분을 추출, 증류, 압착, 분별, 정제, 농축, 발효 등으로 처리하는 공정을 가함으로써 얻어지는 복합 천연물질이다. 이들 물질의 조성은 식물의 속, 종, 성장 환경, 원재료의 수확 기간, 적용된 공정 기술에 따라 달라진다.

다른 다성분 물질이 그렇듯이, 정유도 그 주성분으로 정의될 수 있다. 그러나 정유는 많게는 수백 가지 성분을 포함할 수 있으며, 이들 성분은 여러 요인(예: 속, 종, 성장 환경, 수확 기간, 사용된 공정)에 따라 크게 변한다. 따라서 주성분에 대한 설명만으로는 이들 UVCB 물질을 나타내는 데 불충분한 경우가 많다. 정유는 4.3.1장에서 설명했듯이 식물 원료와 처리 공정으로 기술되어야 한다 (UVCB 하위 형태 3을 활용해서).

정유에 관해서는 공업표준이 나와 있는 경우가 많다 (많은 정유에는 ISO-표준도 있음). 표준에 관한 정보를 추가로 제시할 수 있다. 그러나 물질의 확인은 제조시 물질을 바탕으로 해야 한다.

아래 제시한 예는 "Lavandin grosso 정유"에 관한 기술내용이며, 이 물질에는 ISO 표준도 나와 있다 (ISO 8902-1999).

17 *Commission Directive 2001/30/EC (OJL 146, 31.05.2001, p.1)에 나와 있는 설명*

1. 명칭과 기타 식별자

원료

종(species)	*Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae,꿀풀科)

공정

물질 제조에 사용된 (생)화학 반응 공정에 대한 설명
Lavendula hybrida grosso(Lamiaceae)의 꽃봉우리를 수증기 증류한 뒤 정유로부터 물을 분리. 뒤이은 분리는 자발적으로 일어나는 물리적 공정이다. 이 공정은 분리된 정유를 손쉽게 고립시켜주는 분리기(이른바 "피렌체 플라스크(florentine flask)")에서 주로 이루어진다. 증류 공정의 이 단계에서의 온도는 약 40℃이다.

명칭

IUPAC 명칭 또는 기타 국제 화학명	*Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae)의 정유
EC 번호	297-385-2
EC 명칭	Lavender(라벤더), *Lavendula hybrida grosso*, 추출.
EC 설명	Lavandula hybrida grosso, Labiatae[18]로부터 얻어진 추출물과 그것을 물리적으로 변경한 유도체, 즉 팅크, 응결물, 앱솔루트, 정유, 함유 수지, 테르펜, 무 테르펜 분별물, 증류물, 잔류물 등.
CAS 번호	93455-97-1
CAS 명칭	Lavender(라벤더), *Lavendula hybrida grosso*, 추출.

2. 조성 정보 - 알려진 성분

알려진 성분					
	화학명 **EC** **CAS** **IUPAC** **기타**	**번호** **EC** **CAS**	**분자식** **Hill 방식**	**일반 농도** **% (w/w)**	**농도 범위** **% (w/w)**
A	**EC** linalyl acetate **CAS** 1,6-Octadien-3-ol,3,7-dimethyl-,acetate **IUPAC**	**EC** 204-116-4 **CAS** 115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	33	28~38

18 "Labiatae"와 "Lamiaceae"는 유의어.

	3,7-Dimethyl octa-1,6-dien-3-yl acetate				
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	$C_{10}H_{18}O$	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 **기타** camphor	**EC** 200-945-0 **CAS** 76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	7	6~8
D	**EC** Cineole **CAS** 2-oxabicyclo[2.2.2]octane,1,3,3-trimethyl- **IUPAC** 1,3,3-Trimethyl-2-oxabicyclo[2.2.2]octane **기타** 1,8-cineole	**EC** 207-431-5 **CAS** 470-82-6	$C_{10}H_{18}O$	5.5	4~7
E	**EC** P-menth-1-en-4-ol **CAS** 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- **IUPAC** 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol **기타** terpinene-4-ol	**EC** 209-235-5 **CAS** 562-74-3	$C_{10}H_{18}O$	3.25	1.5~5
F	**EC** 2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetate **CAS** 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-,acetate	**EC** 247-327-7 **CAS** 25905-14-0	$C_{12}H_{20}O_2$	2.25	1.5~3

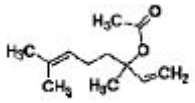
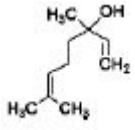
	IUPAC 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol **기타** (±)-Lavandulol acetate				
G	**EC** DL-borneol **CAS** Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol,1,7,7-trimethyl-,(1R,2S,4R)-rel- **IUPAC** (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol **기타** borneol	**EC** 208-080-0 **CAS** 507-70-0	$C_{10}H_{18}O$	2.25	1.5~3
H	**EC** Caryophyllene **CAS** Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene,4,11,11-trimethyl-8-methylene-,(1R,4E,9S)- **IUPAC** (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylene bicyclo[7.2.0]undec-4-ene **기타** trans-beta-caryophyllene	**EC** 201-746-1 **CAS** 87-44-5	$C_{15}H_{24}$	1.75	1~2.5
I	**EC** (E)-7,11-dimethyl-3-methylenedodeca-1,6,10-triene **CAS** 1,6,10-Dodecatriene,7,11-dimethyl-3-methylene-,(6E)- **IUPAC** (E)-7,11-Dimethyl-3-methylene-1,6,10-dodecatriene **기타** trans-beta-farnesene	**EC** 242-582-0 **CAS** 18794-84-8	$C_{15}H_{24}$	1.1	0.2~2
J	**EC** (R)-p-mentha-1,8-diene **CAS**	**EC** 227-813-5 **CAS**	$C_{10}H_{16}$	1	0.5~1.5

	cyclohexen, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-,(4R)- **IUPAC** (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexene **기타** limonene	5989-27-5			
K	**EC** 3,7-dimethylocta-1,3,6-triene **CAS** 1,3,6-Octatriene,3,7-dimethyl- **IUPAC** 3,7-Dimethylocta-1,3,6-triene **기타** cis-beta-ocimene	**EC** 237-641-2 **CAS** 13877-91-3	$C_{10}H_{16}$	1	0.5~1.5

알려진 성분, 농도 10% 이상

알려진 성분		
	EC 명칭	**EC 설명**
A	linalyl acetate $C_{12}H_{20}O_2$	
B	linalool $C_{10}H_{18}O$	

알려진 성분		
	CAS 명칭	**관련 CAS 번호**
A	linalyl acetate $C_{12}H_{20}O_2$	115-95-7
B	linalool $C_{10}H_{18}O$	78-70-6

알려진 성분			
	분자식 **CAS 기법**	**구조식**	**SMILES 코드**
A	$C_{12}H_{20}O_2$		
B	$C_{10}H_{18}O$		

알려진 성분		
	분자량	**분자량 범위**
A	196.2888	/
B	154.2516	/

7.7 국화(Chrysanthemum) 오일과 그것으로부터 분리된 이성체(Isomers)

어느 기업이 국화 오일을 생산하고 있다. 국화 오일은 *Chrysanthemum cinerariafolim*, Compositae (국화과)의 꽃과 잎을 물과 에탄올이 1:10의 비율로 섞인 용제와 함께 압착한 후 추출하여 얻어진다. 추출공정 후에 용제를 제거하고 "순수" 추출물을 추가 정제 공정을 거치고 나면 국화 오일이 만들어진다.

추가로, 두 이성체가 반응 질량으로써 추출물로부터 분리된다.

Jasmolin Ⅰ
(Cyclopropanecarboxylic acid,
2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-,
(1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; CAS 번호 4466-14-2),
그리고
Jasmolin Ⅱ
(Cyclopropanecarboxylic acid, 3-[(1E)-3-methoxy-2-methyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-dimethyl-,
(1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; CAS 번호 1172-63-0

게다가 그 기업은 Jasmolin Ⅰ과Ⅱ의 이성체 반응질량 또한 합성하기로 했다.

이 기업은 다음과 같은 질문을 던져 본다.
1. 등록을 할 때 국화 오일을 어떻게 확인할 것인가?
2. 분리된 이성체 Jasmolin Ⅰ과Ⅱ의 반응 질량은 국화 오일 등록에 포함되는가?
3. 두 이성체의 합성 혼합물은 국화 오일에서 분리된 이성체의 혼합물과 동일한 것으로 간주될 수 있는가?

1. 등록을 위해 국화 오일을 어떤 방식으로 확인해야 하는가?

국화 오일은 그 화학 조성으로 충분히 확인될 수 없는 UVCB 물질로 간주된다(자세한 지침내용은 4.3장 참조). 원료와 공정과 같은 기타 확인 매개변수가 필수적이다. 국화 오일은 생물학적 성질을 가지고 있으므로, 이 물질이 얻어진 유기체의 종과 일부, 그리고 정제 공정(용제와 함께 추출)을 통해 확인되어야 한다. 그러나 화학 조성과 성분의 특성 또한 알려진 만큼 제시되어야 한다.

아래의 정보는 이 물질을 충분히 확인하는 데 필수적인 것으로 여겨진다.

물질명	*Chrysanthemum cinerariafolim*, Compositae(국화과). 압착된 꽃과 잎을 1:10 배율의 물과 에탄올로 추출하여 얻어진 오일.
원료	
속, 종, 아종(亞種)	Chrysanthemum, cinerariafolium, Compositae
오일을 얻는 데 사용된 식물의 부분	꽃과 잎

공정				
제조 방식	압착 후 추출			
추출에 사용된 용제	물:에탄올(1:10)			
조성 정보 - 알려진 성분 %(w/w)				
성분명	**EC 번호**	**CAS 번호**	**최소 농도 (%)**	**최대 농도 (%)**
Pyrethrin Ⅰ: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl) cyclopent-2-enyl[1R-[1α[S*(Z)],3β]]-chrysanthemate	204-455-8	121-21-1	30	38
Pyrethrin Ⅱ: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl) cyclopent-2-enyl[1R-[1α[S*(Z)],3β]]-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerin Ⅰ: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerin Ⅱ: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropane carboxylate	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolin Ⅰ: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclo propanecarboxylate	없음	4466-14-2	4	10
Jasmolin Ⅱ: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclo pent-2-en-1-yl [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-di methyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	없음	1172-63-0	4	10
또한, 이 물질은 농도가 1% 미만인 성분을 최대 40개까지 포함하고 있다.				

이 물질을 6개의 주성분(Pyrethrin Ⅰ, Pyrethrin Ⅱ, Cinerin Ⅰ, Cinerin Ⅱ, Jasmolin Ⅰ, Jasmolin Ⅱ의 반응질량)을 가진 잘 정의된 다성분 물질로 확인하는 것도 고려해볼 수 있을 것이다.
이 물질의 제조 공정이 "압착"만으로 이루어지는 경우 이 물질은 "자연적 발생 물질"로 간주되며, Directive 67/548/EEC에 의거 위험물질 분류 기준에 속하지 않는 한 등록 의무가 면제된다.

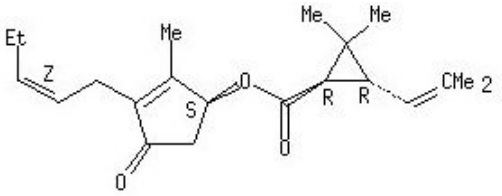
2. 분리된 이성체 Jasmolin Ⅰ과Ⅱ의 반응 질량은 국화 오일 등록에 포함되는가?

분리된 이성체 Jasmolin Ⅰ과Ⅱ의 반응 질량은 *Chrysanthemum cinerariafolim*, Compositae 오일 등록에 포함되지 않는다. 개별 성분은 전체 UVCB 물질에 포함되지 않고 그 반대도 역시 마찬가지이기 때문이다. Jasmolin Ⅰ과Ⅱ의 반응 질량은 다른 물질로 간주된다.

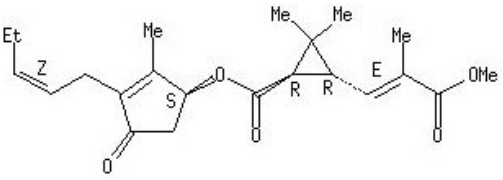
Jasmolin Ⅰ과 Jasmolin Ⅱ의 반응 질량은 2개의 주성분을 가진 다성분 물질로 볼 수 있다(상세한 지침은 4.2.3장 참조).

아래의 정보는 이 물질을 충분히 확인하는 데 필수적인 것으로 여겨진다.

<table>
<tr><td>물질의 IUPAC 명칭</td><td colspan="5">2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclo propanecarboxylate
그리고
2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclo pent-2-en-1-yl [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-di methyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate
의 반응 질량</td></tr>
<tr><td>기타 명칭</td><td colspan="5">Jasmolin Ⅰ과 Jasmolin Ⅱ의 반응질량</td></tr>
<tr><td>물질의 순도</td><td colspan="5">95~98%(w/w)</td></tr>
<tr><td colspan="6">조성 정보 - 주성분 %(w/w)</td></tr>
<tr><td>성분명</td><td colspan="2">EC 번호</td><td>CAS 번호</td><td>최소농도 (%)</td><td>최대 농도 (%)</td></tr>
<tr><td>Jasmolin Ⅰ:
2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-di methyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclo propanecarboxylate</td><td colspan="2">없음</td><td>4466-14-2</td><td>40</td><td>60</td></tr>
<tr><td>분자식

구조식
분자량</td><td colspan="2"></td><td> 

$C_{22}H_{30}O_5$
M=374g/mol</td><td></td><td></td></tr>
</table>

Jasmolin Ⅱ: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclo pent-2-en-1-yl [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	없음	1172-63-0	35	65
분자식 **구조식** **분자량**		 $C_{21}H_{30}O_3$ M=330g/mol		

3. 두 이성체의 합성 혼합물(반응질량)은 국화 오일에서 분리된 이성체의 혼합물과 동일한 것으로 간주될 수 있는가?

그 성분으로 충분히 설명되는 화학적으로 잘 정의된 물질의 경우에는 그 물질이 추출물에서 분리되었거나 화학공정에 의해 합성되었는지 여부는 상관이 없다. 따라서 혼합물의 순도와 주성분의 농도 범위가 같은 한 서로 다른 제조 공정으로부터 얻어졌다 하더라도 Jasmolin Ⅰ과 Jasmolin Ⅱ의 합성 반응 질량은 국화에서 분리된 이성체 혼합물과 동일한 것으로 간주할 수 있다.

4. 결론

두 물질은 다음과 같이 확인된다.

1. *Chrysanthemum cinerariafolim*, Compositae(국화과); 압착된 꽃과 잎을 1:10 배율의 물과 에탄올로 추출하여 얻어진 오일.

2. 물질의 제조 공정과는 상관없이, 이성체 Jasmolin Ⅰ과 Jasmolin Ⅱ의 반응 질량.

상기 물질이 오로지 식물 보호와 살균 제품에만 사용된다면 이 물질은 REACH(제 15조)에 등록된 것으로 간주한다.

7.8 Phenol, Isopropylated, Phosphate(페놀, 이소프로필화, 인산염)

Phenol, isopropylated, phosphate(3:1)는 이소프로필화된 부분의 가변성이 완전히 정의될 수 없는 UVCB 물질이다.

1. 명칭과 기타 식별자

IUPAC 명칭 또는 다른 국제 화학명	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)
기타 명칭	Phenol, isopropylated, phosphate Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (프로필렌과 페놀의 몰 비율은 1:1)
EC 번호 **EC 명칭** **EC 설명**	273-066-3 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) /
CAS 번호 **CAS 명칭**	68937-41-7 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)

2. 조성 정보 - 주성분

주성분					
IUPAC 명칭	**CAS 번호**	**EC 번호**	**분자식 Hill 방식**	**일반농도 (% w/w)**	**농도범위 (% w/w)**
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7	273-066-3	명기되지 않음		

주성분	
EC 명칭	**EC 설명**
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	/
CAS 명칭	**CAS 번호**
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7

7.9 Quaternary Ammonium Compounds (제 4급 암모늄 화합물)

어느 기업이 아래의 물질을 합성하고 있다.

물질 A

Quaternary ammonium compounds(제 4급 암모늄 화합물), di-C10-18-alkyldimethyl, chlorides (염화물)

EC 번호 294-392-2
CAS 번호 91721-91-4

탄소 사슬길이의 분포:
C10 10%

C11	5.5%
C12	12%
C13	7.5%
C14	18%
C15	8%
C16	24%
C17	7%
C18	8%

물질 B

Quaternary ammonium compounds(제 4급 암모늄 화합물), dicoco alkyldimethyl, chlorides(염화물)

EC 번호 263-087-6
CAS 번호 61789-77-3

해당 기업에서는 이 물질의 정확한 조성을 알고 있지 않다.

물질 C

Didodecyldimethylammonium bromide

물질 D

Didodecyldimethylammonium chloride

물질 E

물질 E는 Didodecyldimethylammonium bromide와 Didodecyldimethylammonium chloride의 반응질량으로써 제조된다. (물질 C와 D의 반응 질량)

물질 F

Quaternary ammonium compounds(제 4급 암모늄 화합물), di-C14-18-alkyldimethylammonium, chlorides

EC 번호 268-072-8
CAS 번호 68002-59-5

탄소 사슬길이의 분포:

C14	20%
C15	10%
C16	40%
C17	10%
C18	20%

물질 G

Quaternary ammonium compounds(제 4급 암모늄 화합물), di-C4-22-alkyldimethyl, chlorides

탄소 사슬길이의 분포 (프라임 부호 하나(′)는 이중결합 하나를, 프라임 부호 두 개(″)는 삼중결합 하나를 나타낸다):

C4	0.5%
C6	3.0%
C8	6.0%
C10	10.0%
C12	12.0%
C14	24.0%
C16	20.0%
C18	16.0%
C18′	2.0%
C18″	0.5%
C20	4.0%
C22	2.0%

현재 이 기업은 물질의 명명에 물질 B(Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl chlorides, EC 번호 263-087-6, CAS 번호 61789-77-3)만을 사용하고 있다. 물질 B가 모든 물질(물질 A부터 G까지)에 가장 잘 들어맞기 때문이다. 이 기업은 물질 B의 단일 등록 하에 모든 물질(A부터 G까지)을 포함시킬 수 있을지 알고 싶어한다.

1. 일반적 의견

지방과 기름 또는 합성 대용품으로부터 얻어지는 hydrocarbons,탄화수소(paraffin계, olefin계)는 탄소 사슬 분포나 물질의 출처(알킬 기술어), 작용기(기능성 기술어) (예: 암모늄), 음이온/양이온(염류 기술어) (예: 염화물)에 의해 확인된다.
사슬길이 분포(예: C8-18)는 다음의 것들을 나타낸다.

- 포화됨
- 선형(분지하지 않음)
- 모든 탄소수를 포함(C8, C9, C10, C11,...., C18), 그러나 좁은 분포는 넓은 분포를 포함하지 않고 그 역도 마찬가지이다.

다른 경우에는 이런 식으로 나타낸다.

- 불포화 (C16 불포화)
- 가지형 (C10 가지형)
- 짝수 (C12-18 짝수)

원료로 기술된 탄소 사슬은 그 원료에서 발생하는 분포로 이루어져야 한다. 예: tallow alkyl amines.

tallow alkyl amines(수지 알킬 아민)은 1차 선형 사슬 알킬 아민 99%로 구성되었으며 아래와 같은 탄소 사슬길이 분포를 보인다 (Ullmann, 1985) [프라임 부호 하나(')는 이중결합 하나를, 프라임 부호 두 개('')는 삼중결합 하나를 나타낸다]:

C12	1%
C14	3%
C14'	1%
C15	0.5%
C16	29%
C16'	3%
C17	1%
C18	23%
C18'	37%
C18''	1.5%

2. 등록을 하려할 때 이 물질을 어떤 방법으로 확인할 것인가?

이하는 각각의 물질을 물질 B(지금까지 명명에 사용된 물질)와 비교하여 두 물질이 동일한 것으로 간주될 수 있는지를 알아본 것이다.

물질 A와 B 비교

다음은 물질 B의 "coco"에서 볼 수 있는 사슬길이 분포이다 (Ullmann, 1985) [프라임 부호 하나(')는 이중결합 하나를, 프라임 부호 두 개('')는 삼중결합 하나를 나타낸다]:

C6	0.5%
C8	8%
C10	7%
C12	50%
C14	18%
C16	8%
C18	1.5%
C18'	6%
C18''	1%

따라서 물질 A의 사슬길이 분포는 물질 B "coco"의 탄소 사슬길이 분포에서 벗어난다. 두 물질의 질적, 양적 조성에 큰 차이가 있으므로 이들을 동일하다고 볼 수 없다.

물질 B와 C 비교

물질 B "Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides"는 서로 다른 탄소

사슬길이를 가진 성분들이 혼합된 것(C6~ C18 짝수, 선형, 포화와 불포화)인데 반해 물질 C는 명확한 포화 사슬길이 하나(C12)를 가지는 한 가지 성분과 다른 음이온(브롬화물)으로 된 물질이다. 따라서 물질 C는 물질 B와 동일한 것으로 볼 수 없다.

물질 B와 D 비교

물질 B "Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides"는 서로 다른 탄소 사슬길이를 가진 성분들이 혼합된 것(C6~ C18 짝수, 선형, 포화와 불포화)인데 반해 물질 D는 명확한 포화 사슬길이 하나(C12)를 가지는 한 가지 성분과 동일한 음이온(염화물)으로 된 물질이다. 물질 B와 D는 서로 다른 이름을 가지고 있고 동일한 물질로 간주될 수 없다. 단일 성분은 특정 성분을 포함하는 혼합물에 적용될 수 없고 그 반대도 마찬가지이기 때문이다.

물질 B와 E 비교

물질 E는 물질 C와 D의 혼합물이다. 두 물질 모두 포화된 사슬길이 C12를 가지고 있지만 음이온은 서로 다르다(브롬화물과 염화물). 물질 B "Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides"는 서로 다른 탄소 사슬길이를 가진 성분들이 혼합된 것(C6~ C18 짝수, 선형, 포화와 불포화)이며 염화물을 음이온으로 가진다. 그러나 물질 E는 추가 음이온 브롬화물을 가지고 있는 C12 탄소 사슬길이로만 구성된다. 따라서 물질 B와 E는 동일하다고 볼 수 없다. 그러므로 물질 E를 따로 등록해야 한다.

물질 B와 F 비교

물질 F "Quaternary ammonium compounds, di-C14-18-alkyldimethylammonium, chlorides"는 서로 다른 탄소 사슬길이(C14~C18 짝수와 홀수, 선형, 포화)로 된 성분들의 혼합물이다. 물질 F는 그 조성과 탄소 사슬길이의 범위면에서 물질 B와 다르다. 물질 F는 탄소 사슬길이의 분포가 좁고, 또한 C15-와 C17-탄소 사슬을 가지고 있다. 따라서 물질 B와 F는 동일하다고 볼 수 없다.

물질 B와 G 비교

물질 B와 G는 탄소 사슬 분포가 거의 비슷한 범위에 걸쳐 있기 때문에 매우 유사한 것처럼 보인다. 그러나 물질 G는 추가로 탄소 사슬길이 C4, C20, C22를 포함하고 있다. 물질 G의 탄소 사슬길이 분포는 물질 B보다 더 넓은 범위로 이루어진다. 따라서 물질 B와 G는 동일한 것으로 간주할 수 없다.

3. 결론

탄화수소(paraffin계, olefin계)는 세 가지 기술어 (알킬, 기능성, 염류)가 모두 동일할 때만 같은 물질로 간주될 수 있다.
위에 제시한 예에서는 각 물질마다 기술어가 모두 다르다. 따라서 위의 물질들은 물질 B의 등록 하나로 함께 적용될 수 없다.

7.10 석유 물질

4.3.3.2장의 특수 UVCB 물질에 관한 지침을 사용하여 두 가지 예를 제시한다.

7.10.1 가솔린 혼합유 (C4-C12)

1. 명칭과 기타 식별자

명칭

IUPAC 명칭 또는 기타 국제 화학명	나프타(석유), 촉매개질

원료

원료의 명칭 또는 설명	Crude oil,원유

공정

정제공정의 종류	**촉매개질(Catalytic reforming) 공정**
탄소 범위	C4-C12
끓는점 범위 또는 한계	30℃ ~ 220℃
기타 물리적 특성 (예: 점도)	40℃에서 7mm²/s 이하 (점도)
EC 번호 **CAS 번호** **EC 명칭/ CAS 명칭** **EC 기재내용/ CAS 기재내용**	273-271-8 68955-35-1 Naphtha (petroleum), catalytic reformed 촉매개질 공정 생성물을 증류하여 얻어진 복합 탄화수소 화합물. 이 물질을 구성하는 탄화수소는 C4에서 C12 범위의 탄소수가 많고 약 30℃~220℃(90°F~430°F) 범위에서 끓는다. 이 물질에는 방향족의 가지형 사슬 탄화수소가 비교적 큰 비율을 차지하고 있다. 이 물질은 벤젠(benzene)을 10 vol-% 이상 함유할 수 있다.

2. 조성 정보

알려진 성분			
IUPAC 명칭	**CAS 번호**	**EC 번호**	**농도 범위 (%w/w)**
Benzene(벤젠)	71-43-2	200-753-7	1~10
Toluene(톨루엔)	108-88-3	203-625-9	20~25
Xylene(크실렌)	1330-20-7	215-535-7	15~20

7.10.2 Gas oils, 경유(석유)

1. 명칭과 기타 식별자

IUPAC 명칭 또는 기타 국제 화학명	경유(석유), 상압정제

원료

원료의 명칭 또는 설명	원유

공정

정제공정의 종류	상압 증류(Atmospheric distillation)
탄소 범위	C_7-C_{35}
끓는점 범위 또는 한계	121℃~510℃
기타 물리적 특성 (예: 점도)	40℃에서 20mm^2/s (점도)
EC 번호 CAS 번호 EC 명칭/ CAS 명칭 EC 기재내용/ CAS 기재내용	272-184-2 68783-08-4 Gas oils (petroleum), heavy atmospheric 원유를 증류하여 얻는 복합 탄화수소 화합물. 이 물질을 구성하는 탄화수소는 C_7에서 C_{35} 범위의 탄소수가 많고 약 121℃~510℃(250°F~950°F) 범위에서 끓는다.

2. 화학조성

관련 정보가 없음.

7.11 효소

4.3.2.3장의 특수 UVCB 물질에 관한 지침을 사용하여 효소 농축물의 두 가지 예를 제시한다. subtilisin (IUBMB 명칭과 기타 성분으로 확인됨)과 α-amylase (IUBMB 명칭과 생산 미생물로 확인됨).

7.11.1 Subtilisin(서브틸리신)

효소 단백질	Subtilisin(서브틸리신)
IUBMB 번호	3.4.21.62
IUBMB 상의 명칭	Subtilisin;
(계통명, 효소명, 이명(異名))	alcalase; alcalase 0.6L; alcalase 2.5L; ALK-enzyme; bacillopeptidase A; bacillopeptidase B; Bacillus subtilis alkaline proteinase bioprase; bioprase AL 15; bioprase APL 30; colistinase; (해설도 참조할 것); subtilisin J; subtilisin S41; subtilisin Sendai; subtilisin GX; subtilisin E; 등.

IUBMB에 기록된 설명	Subtilisin은 serine endopeptidase(세린 엔도펩티다아제)이며, peptidase family(효소군) S8의 일종이다. (동족 효소에는 들어있지만) 이 효소에는 cysteine(시스테인) 잔류물이 들어있지 않다. 변형종에는 subtilisin BPN (subtilisin B, subtilopeptidase B, subtilopeptidase C, Nagarse proteinase, subtilisin Novo, bacterial proteinase Novo로도 불림)과 subtilisin Carlsberg (subtilisin A, subtilopeptidase A, alcalase Novo)가 있다. 구 EC 번호는 EC 3.4.4.16이고, 현재는 EC 3.4.21.14에 포함되어 있다. 동종 효소들은 다양한 Bacillus subtilis 계통과 기타 Bacillus종[1,3]에 의해 생산된다.
반응	P1. 가수분해 펩티드아미드에서 펩티드 결합 특이성이 크고, 충전되지 않는 커다란 잔류물이 더 많이 생성되는 단백질 가수분해
반응 형태	히드롤라아제(가수 분해 효소); 펩티드 결합에 작용(펩티다아제); 세린 엔도펩티다아제
EC 번호	232-752-2
EC 명칭	Subtilisin(서브틸리신)
CAS 번호	9014-01-1
CAS 명칭	Subtilisin
효소 단백질 농도	26%
기타 성분	
기타 단백질, 펩티드, 아미노산	39%
탄수화물	11%
지질	1%
무기염	23%
추가 매개변수	
기질과 생성물	단백질 또는 올리고 펩티드, 물, 펩티드

7.11.2 α-amylase (알파-아밀라아제)

효소 단백질	α-amylase
IUBMB 번호	3.2.1.1

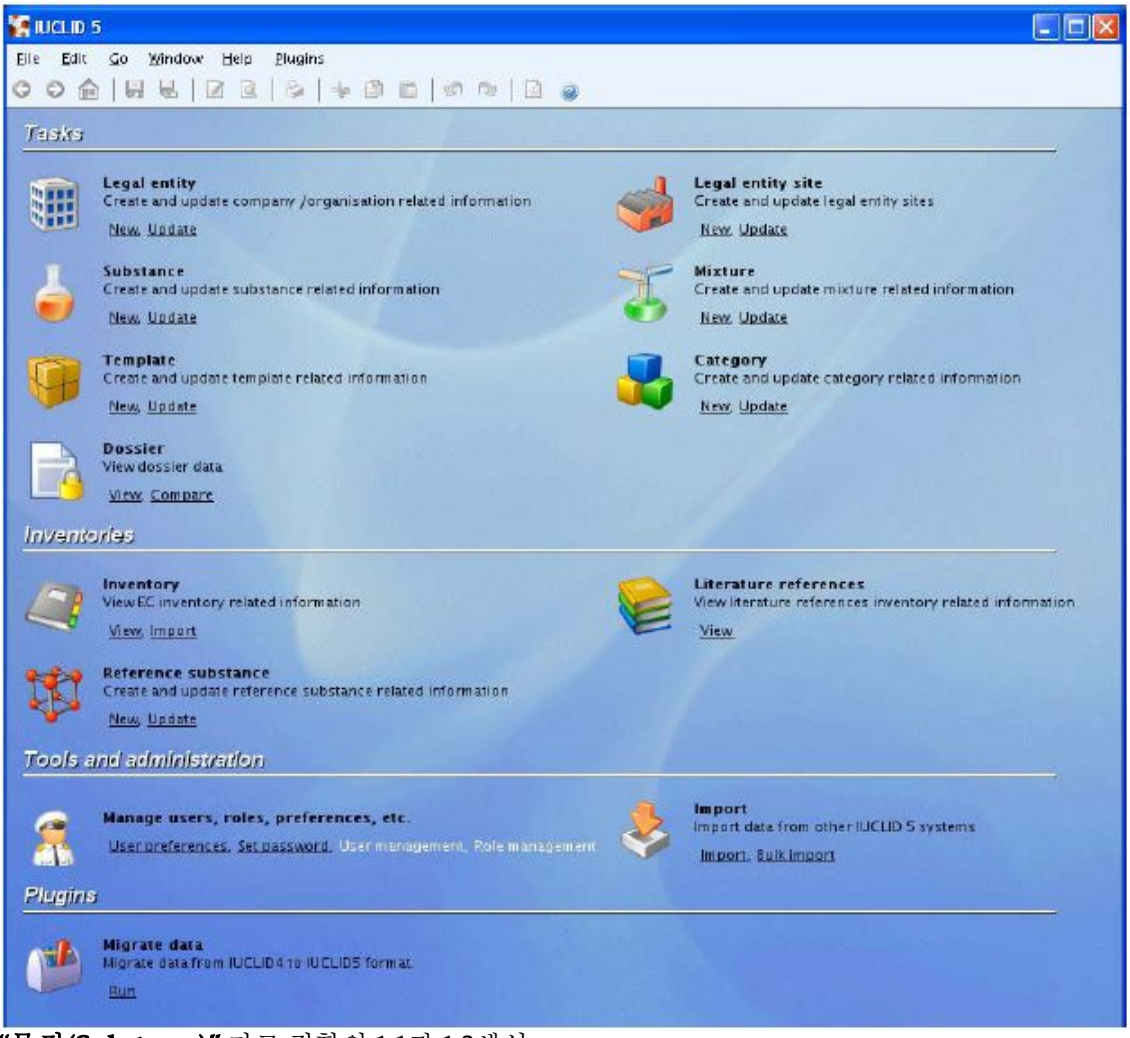
IUBMB 상의 명칭 (계통명, 효소명, 이명(異名))	1,4-α-D-glucan glucanohydrolase; glycogenase; α-amylase ; alpha-amylase; endoamylase; Taka-amylase A
IUBMB에 기록된 설명	전분, 글리코겐, 관련 다당류와 올리고당에 임의적으로 작용함; 감소군은 α-배열에서 분리된다. 'α'라는 표현은 떨어져 나온 유리당 그룹의 최초의 무질서한 배열과 관련된 것이며, 가수분해된 결합의 배열과는 상관이 없다.
반응	1,4-α-결합 D-포도당 세 개 이상을 포함하는 다당류에서 1,4-α-D-글루코시드 결합의 endo-가수분해.
반응 형태	히드롤라아제(가수분해 효소); 글리코시다아제; 글리코시다아제, 즉 O-와 S-글리코실 화합물의 가수분해 효소
EC 번호	232-565-6
EC 명칭	Amylase(아밀라아제), α-
CAS 번호	9000-90-2
관련 CAS 번호들	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(아밀라아제), α-
효소 단백질 농도	37%
기타 성분	
기타 단백질, 펩티드, 아미노산	30%
탄수화물	19%
무기염	14%
추가 매개변수	
기질과 생성물	전분; 글리코겐; 물; 다당류; 올리고당

8 IUCLID 5 내 물질에 관한 기술내용

본 섹션은 서로 다른 종류의 물질 - 단일성분 물질, 다성분 물질, 화학조성과 기타 식별자로 정의된 물질, UVCB 물질 - 이 IUCLID 5 내에서 어떻게 묘사될 수 있는지를 보여준다.

8.1 일반적 원칙

IUCLID 5에는 물질의 확인과 관련해 세 가지 중요 부분이 있다.
"목록(Inventories)" 내의 EC 목록(EC Inventory)[19];
"목록(Inventories) 내의 **"참고 물질(Reference substance)"** 목록;



"물질(Substance)" 자료 집합의 1.1과 1.2섹션

19 현재로서는 EC목록만이 효력이 있다. 차후에 TSCA 등 그 밖의 목록들도 본 섹션에 추가될 수 있다.

8.1.1 목록

목록 섹션에는 유럽 위원회(EC)의 유럽화학물질관리청(ECA)에 의해 중앙 관리 및 제공되는 EC 목록(이에 관한 설명은 3.3장 참조)과 필요할 때마다 사용자들이 직접 관리 및 업그레이드하는 지역 목록인 참고물질 목록이 있다.

사용자가 EC 목록 탭을 선택하면 목록 내 데이터(EC 번호, CAS 번호, EC 명칭 등)를 조회해서 볼 수 있다. 이 정보는 읽기 전용이다.

참고물질 탭을 선택하면 사용자가 제조시 자신의 물질을 확인할 수 있는 정보를 제공하는 데 사용할 성분들(불순물과 첨가물 포함)의 지역 목록을 볼 수 있다.

다시 말해 참고물질 목록 내에 해당 물질의 기본 정보가 만들어져 중앙에서 관리하게 되는 것이다. 참고 물질은 적절할 경우 다양한 물질을 위해 재사용될 수 있다.

예
1,2-dimethylbenzene 91%와 불순물로 1,3-dimethylbenzene 5%로 이루어진 물질이 있다면, 참고물질 목록에서는 1,2-dimethylbenzene과 1,3-dimethylbenzene 모두 규정되어야 한다. 기입한 정보는 저장되고 이 목록에서 관리된다. 같은 성분이 다른 물질에서 다른 비율로 들어있는 것이 발견되면 그것이 이미 그 지역 목록에 오르게 되고, 그 정보는 손쉽게 재사용될 수 있다.

아래 그림들은 IUCLID 5의 참고물질 섹션을 보여준다. 여기서는 여러 개의 그림으로 분리되어 있지만 실제 IUCLID 에서는 한 화면에 나온다.

참고 물질 - Part Ⅰ

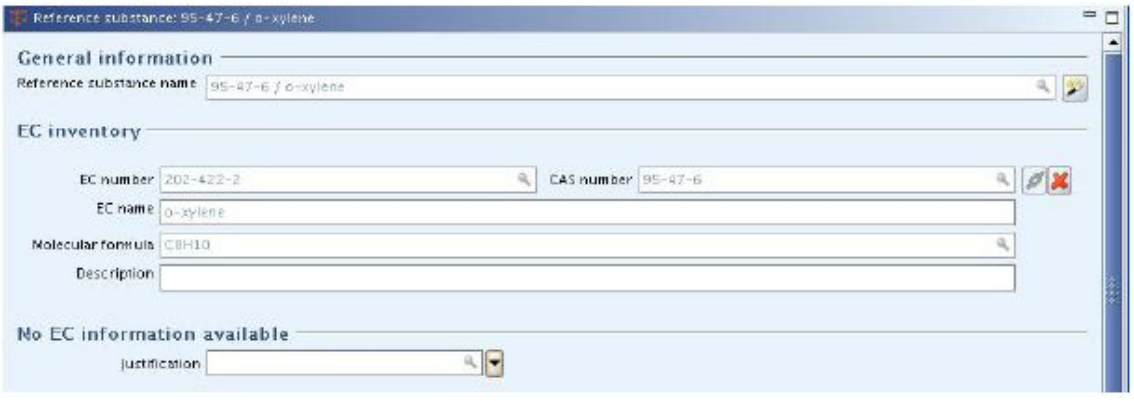


그림 "참고 물질 - Part Ⅰ"에는 이하 내용이 포함된다.

- 참고 물질 명칭(Reference substance name)
  이 명칭은 자유롭게 선택될 수 있다 (여기서는 95-47-6/ 1,2-dimethylbenzene).
- EC 목록(EC inventory)

읽기 전용 EC 목록(EC 번호 등 고유 정보 포함)으로의 링크.

- EC 정보 없음(No EC information available)
  EC 목록 정보가 없는 이유(정당한 사유)가 명시되는 (예: 부적절함, 미배정 상태) 선택 목록.

참고 물질 - Part Ⅱ

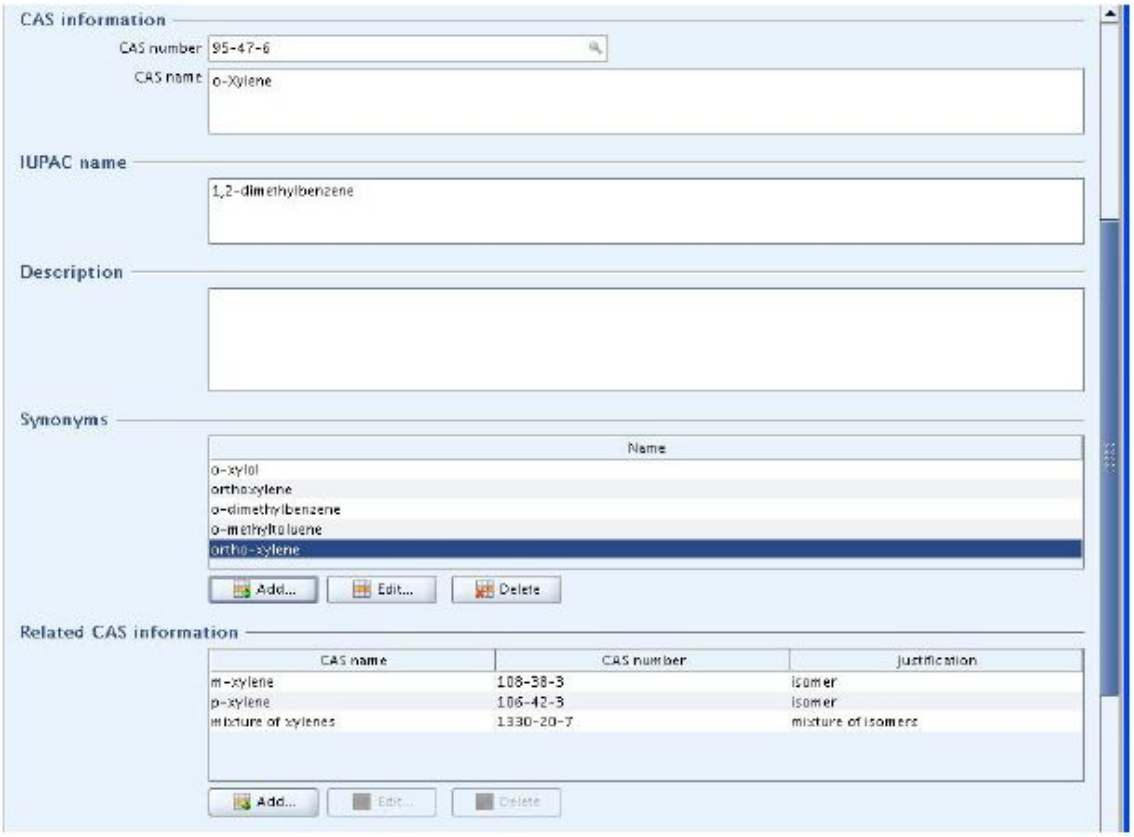


그림 "참고 물질 - Part Ⅱ"에는 이하 내용이 포함된다.

- CAS 정보(CAS 번호와 CAS 명칭)와 관련 CAS 정보
  일반적으로 EC 번호와 연관된 CAS 번호가 제시되어야 한다. CAS 번호가 하나 이상인 경우 (예: 삭제된 CAS 번호 또는 여러 다른 법체계에서 각 체계의 기대사항에 맞게 물질을 설명하기 위해 사용된 동일한 물질의 CAS 번호들), 나머지 CAS 번호는 관련 CAS 번호로 제시한 다.
- IUPAC 명칭
  "IUPAC 명칭" 난에는 물질의 영문 (화학) 명칭을 명기해야 한다는 점을 유의한다. 이 난은 원료와 공정을 통해 설명되는 UVCB 물질에도 쓰일 수 있다.
- 추가 정보를 위한 설명란 (Description)
  물질을 설명하는 데 관련이 있는 모든 추가 정보를 이 난에 기입한다. 예: UVCB 물질 또는 광물용
- 이명(異名)(Synonyms)
  영어 이외의 언어로 된 IUPAC 명칭 또한 이곳에 제시할 수 있다.

참고 물질 - Part Ⅲ

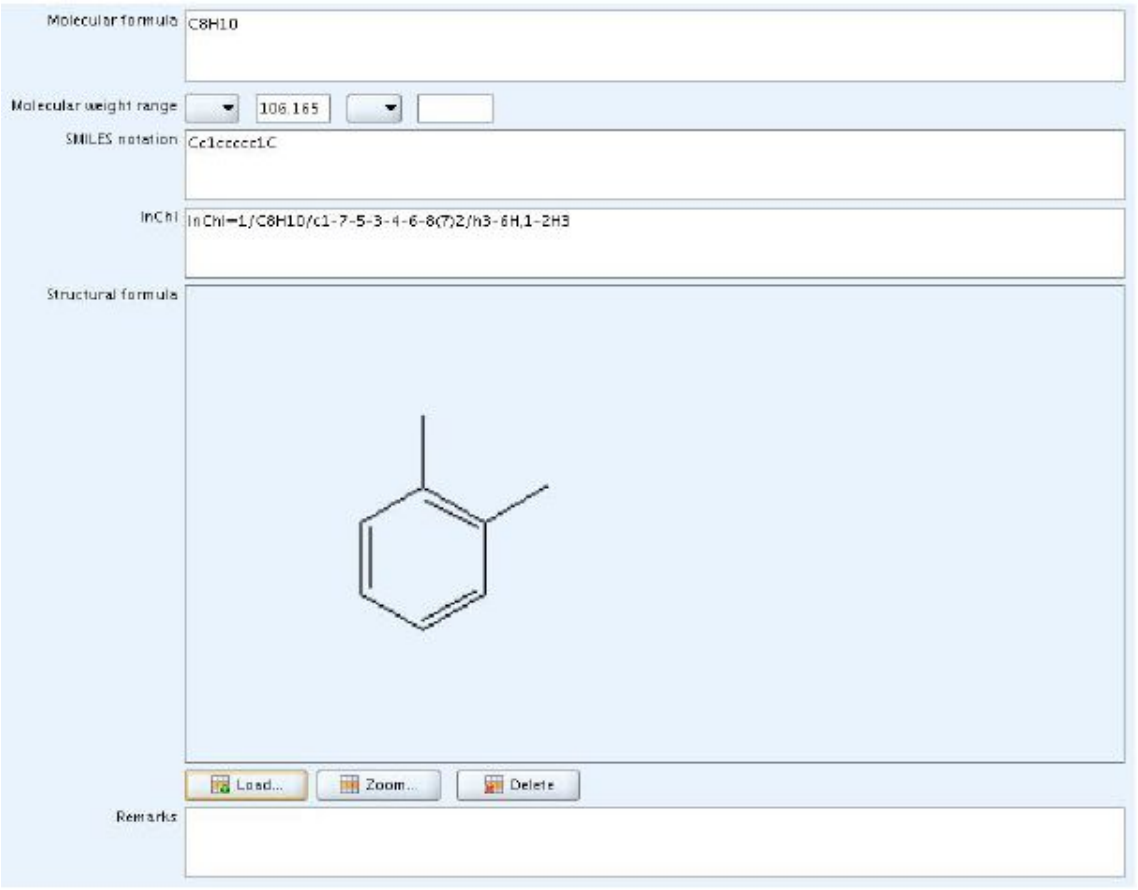


그림 "참고 물질 - Part Ⅲ"에는 이하 내용이 포함된다.

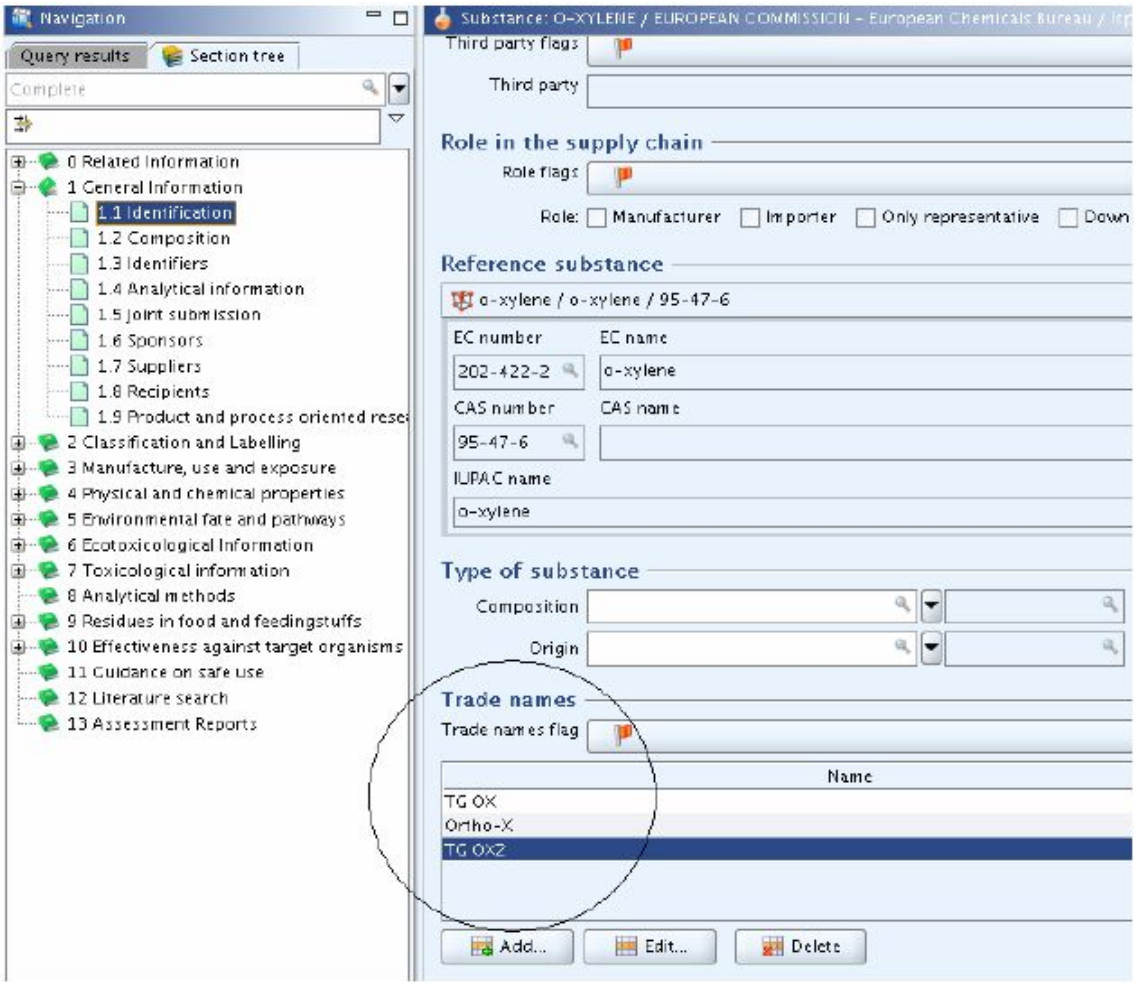
- 분자식(Molecular formula)
  분자식은 Hill 방식에 맞게 제시해야 한다.
- 분자량(Molecular weight)과 분자범위(range)
- SMILES 표기법(notation)
- InChI 코드(code)
- 구조식(Structural formula) 그림

8.1.2 물질 자료 집합 (IUCLID 섹션 1.1, 1.2, 1.3, 1.4)

IUCLID 5 자료 집합에는 종료점(end point) 연구 기록, 분류와 표지에 관한 정보, 물질의 조성을 포함한 화학적 특성과 같은 물질에 대한 모든 자료가 포함되어 있다. 전체 자료는 11개 섹션으로 분류된다.

"물질" 탭에서 물질 자료 집합의 구성, 찾기, 조회, 업데이트가 가능하다.
"물질" 자료 집합에서 물질 확인과 조성에 관한 상세사항은 섹션 1.1과 1.2에 나와 있다.

물질 확인 - Part Ⅰ



섹션 1.1 (물질 확인)에는 이하 내용이 포함된다.

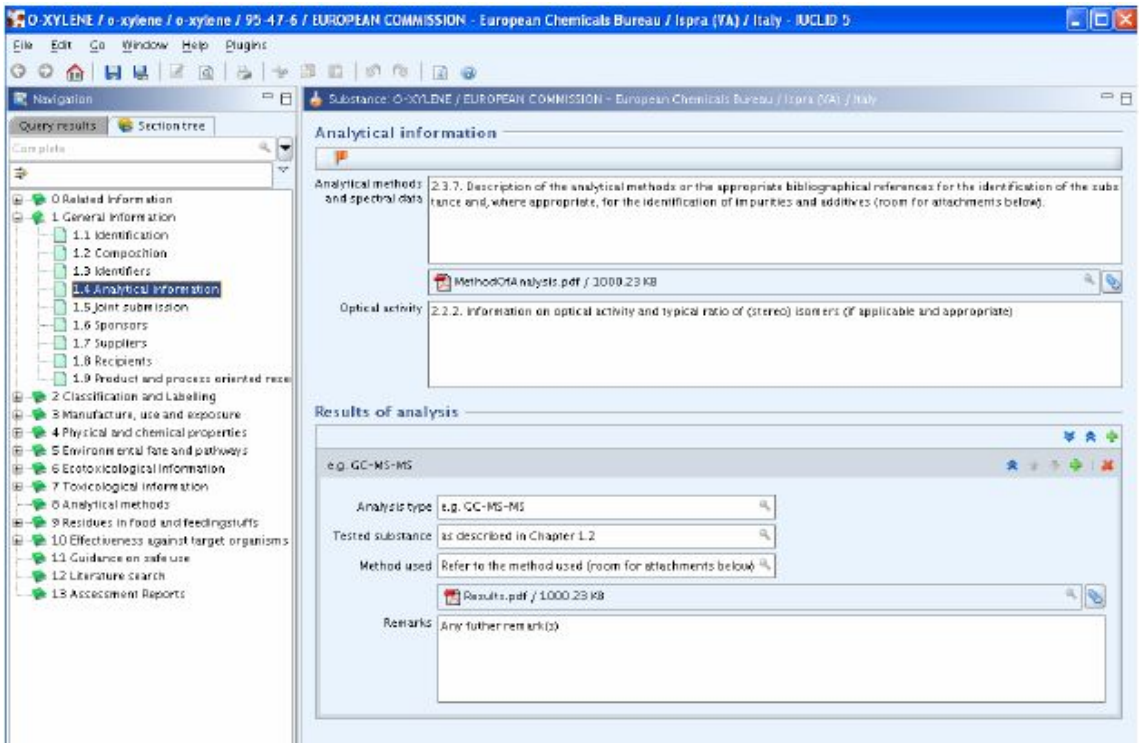
- 참고 물질(Reference substance)
  해당 물질과 관련 있는 참고 물질 링크를 여기에 만든다. 물질 명칭은 그에 따라 정해진다.
- 물질의 종류(Type of substance)
  선택 목록에서 물질의 종류(예: 단일성분 물질)를 고를 수 있다.
- 상품명(Trade names)
  모든 내외부 기업 명칭을 이곳에 기록한다.

섹션 1.2 (물질의 조성)에는 물질의 조성에 관한 설명과 기본 원칙으로써의 관련 참고 물질 링크가 있다. 이곳에는 제조 시 물질의 모든 성분(예: 주성분, 불순물)과 첨가물이 제시된다. IUCLID 5의 섹션 1.2를 작성하는 방법에 관한 상세한 지침을 포함한 예는 8.2장에 나온다.

섹션 1.3 (식별자)에는 IT적 관점에서 물질을 확인하기 위한 정보가 담겨있다. 예: 사용자는 물질안전보건자료(Safety Data Sheet) 시스템과 같은 다른 IT 시스템 내의 동일한 물질에 대해 사용하고 있는 식별자를 명시할 수 있다. 이를 통해 IUCLID 5와 그 외 시스템 간의 자료 교환이 개선된다. 이것은 본 TGD에서 말하는 물질 확인의 일부가 아니다.

섹션 1.3은 서로 다른 규제 프로그램(예: REACH 등록 번호)에 의해 배포된 확인 번호를 저장할 수 있는 가능성 또한 제공한다. 이 정보 역시 본 TGD에서 기술된 물질 확인의 일부가 아니다.

물질 확인 - Part Ⅱ



섹션 1.4 (분석 정보)에는 물질의 광학활성에 관한 정보 등의 물질 분석정보[20]가 담겨 있다.

8.2 IUCLID 5 작성법의 예

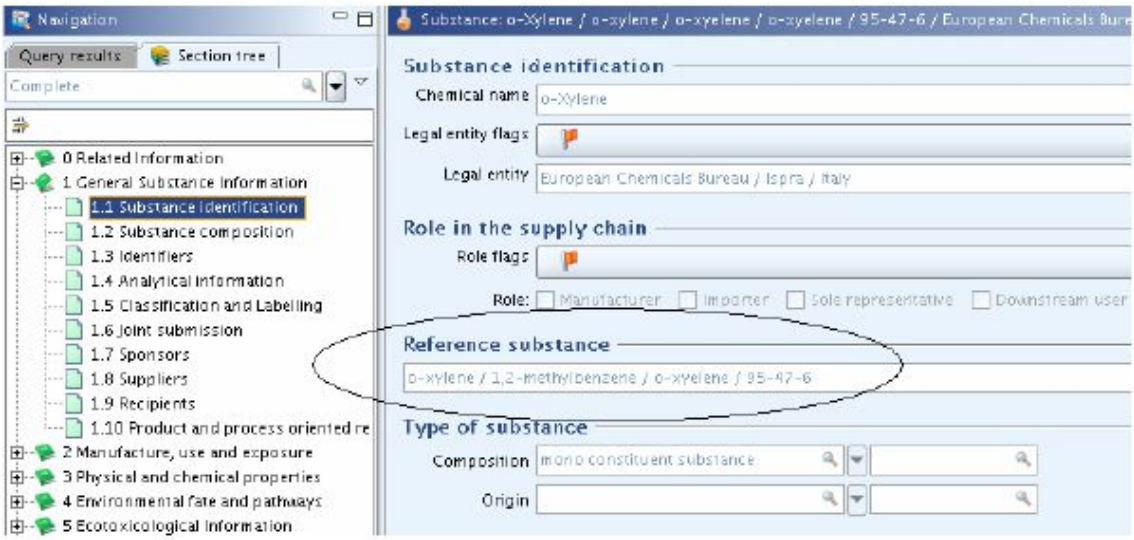
단일성분 물질에 대해 IUCLID 5를 작성하는 방법의 예는 8.2.1장, 다성분 물질에 대한 예는 8.2.2장, 화학조성과 기타 식별자에 의해 정의되는 물질의 예는 8.2.3장, UVCB 물질에 대한 예는 8.2.4장에 제시되어 있다.

8.2.1 단일성분 물질

예: 단일성분 물질			
명칭	1,2-dimethylbenzene		
주성분	**일반 함량 %(w/w)**	**저함량 %(w/w)**	**고함량 %(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

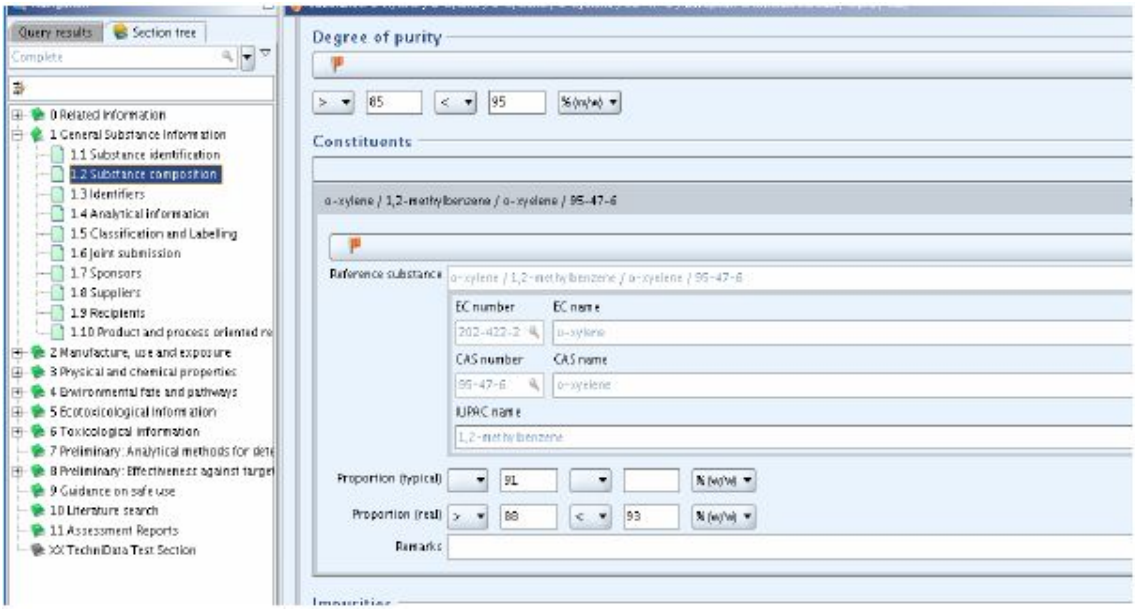
20 이 부분은 IUCLID 5의 베타 테스트 이후 재구성될 수도 있다.

섹션 1.1에는 이 물질의 명칭이 나와 있다. 본 TGD에 의하면 이 물질은 “1,2-dimethylbenzene"이라는 이름의 단일성분 물질이다. 따라서 IUCLID 5 상에서 이 물질의 자료 집합은 섹션 1.1의 참고물질(Reference substance) 1,2-dimethylbenzene로 링크되어야 한다.



1.2장에서 이 물질의 조성은 다음과 같이 정의되어 있다.

- 순도(Degree of purity)
  단일성분 물질의 경우 주성분(일반 농도 80% 이상)의 순도를 이곳에 기입해야 한다(최저와 최고 수치).
- 성분(Constituents)
  단일성분 물질의 경우 화학적 식별자(EC 번호와 EC 명칭, CAS 번호와 CAS 명칭, IUPAC 명칭)를 이곳에 제시한다. 화학적 특성은 참고물질로의 링크에 의해 정의된다.
  “의견(Remarks)"난에는 어떤 정보든 써넣을 수 있다. 80% 규칙(4.2.2장 참조)에서 벗어나 는 경우 정당화하는 데 이 난을 사용한다.



- 불순물

  농도가 1% 이상인 불순물 (또는 물질의 분류와 관련된 경우, 그 보다 낮은 농도 한계 이상인 불순물)은 하나 이상의 화학적 식별자(EC 번호와 EC 명칭, CAS 번호와 CAS 명칭, IUPAC 명칭)로 명시되어야 한다. 화학적 특성은 참고물질 링크에 의해 정의된다. 각각의 불순물의 농도(일반농도와 농도범위)는 %(w/w)로 표시한다.

  불특정 불순물들의 수와 전체 농도를 알 수 있는 경우에는 그것도 명기하여 전체 농도가 100%가 되도록 한다.

- 첨가물

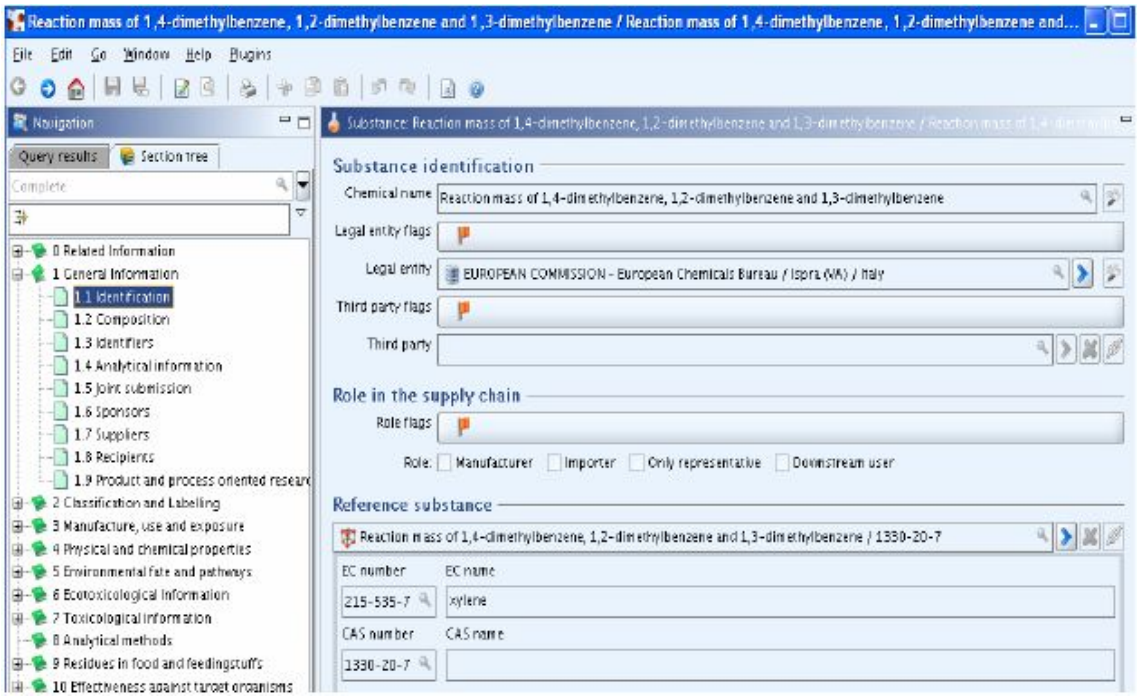
  포함되어 있는 모든 첨가물들은 그 화학적 식별자(EC 번호와 EC 명칭, CAS 번호와 CAS 명칭, IUPAC 명칭)로 명시되어야 한다. 화학적 특성은 참고물질 링크에 의해 정의된다. 개별 첨가물의 농도(일반농도와 농도범위)는 %(w/w)로 표시한다.

8.2.2 다성분 물질

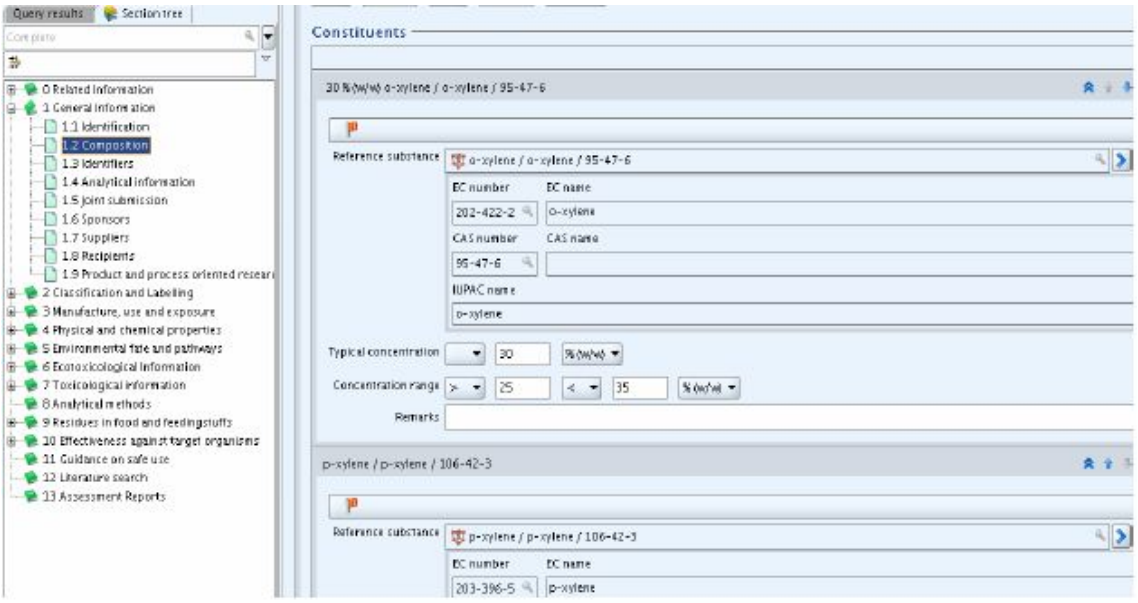
예: 다성분 물질			
명칭	1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene, 1,3-dimethylbenzene 반응질량		
주성분	**일반 함량 %(w/w)**	**저함량 %(w/w)**	**고함량 %(w/w)**
1,4-dimethylbenzene	35	30	40
1,2-dimethylbenzene	30	25	35
1,3-dimethylbenzene	25	20	30
불순물			
물	10	5	12

본 TGD에 의하면 이 물질은 세 개의 주성분을 가진 다성분 물질이며, "1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene, 1,3-dimethylbenzene 반응질량"으로 명명되었다. 물은 물질에서 더는 분리될 수 없는 잔류 용제이고, 주성분이 아니라 불순물로 간주되어야 한다.

따라서 IUCLID 5 상에서 이 물질의 자료 집합은 참고물질(Reference substance) "1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene, 1,3-dimethylbenzene 반응질량"으로 링크되어야 한다(섹션 1.1 참조).



모든 성분과 첨가물, 불순물의 화학적 특성, 일반 농도(Typical concentration)와 농도 범위(Concentration range)는 1.2장에 명시되어 있다. 화학적 특성은 참고물질 링크로 정의된다.



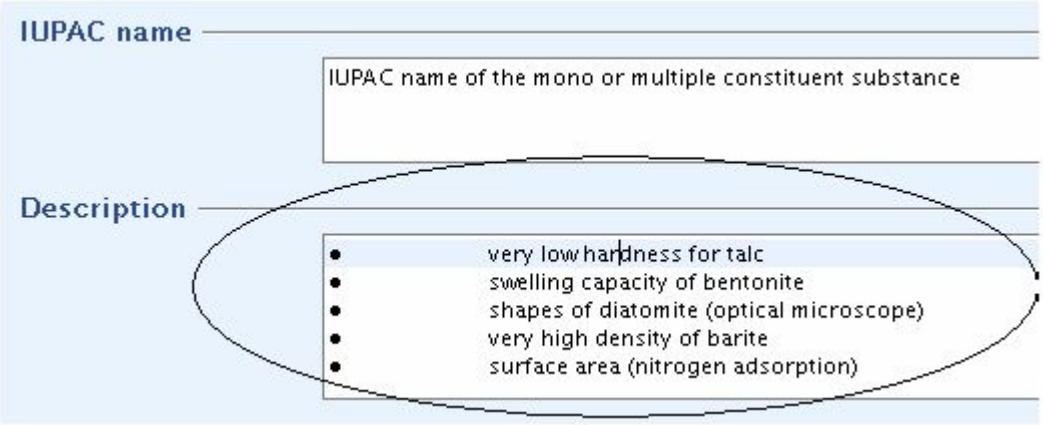
8.2.3 화학조성과 기타 식별자에 의해 정의되는 물질

몇몇 경우에는 물질의 고유한 특성을 제시하기 위해 기타 주요 식별자가 반드시 필요하다 (4.2.4장 참조). 이러한 추가적 매개변수는 물질의 해당 종류 내에서 각각의 물질에 따라 달라진다. 그러나 광물의 경우에는 광물학적 조성과 결정 구조를 확인하기 위해 성분 조성과 분광 데이터 결과를 합치는 것이 중요하다. 이 정보는 특징적인 물리, 화학적 속성에 의해 다시 확인된다(7.3장의 예시도 참조).

물리-화학적 속성
- 결정 구조(X선 회절로 밝혀진 결과)
- 형태
- 경도
- 팽창도
- 밀도
- 표면적
- 기타

예: 화학조성과 기타 식별자로 정의된 물질
특수 광물에 대해서는 특수한 추가적 주요 식별자들이 제시될 수 있다. 광물은 그 물질을 완전히 확인하는 데 필요한 특징적인 물리-화학적 속성을 가지고 있기 때문이다. 예: - 활석의 매우 낮은 경도 - 벤토나이트의 팽창도 - 규조토의 형태(광학 현미경) - 중정석의 매우 높은 밀도 - 표면적(질소 흡착)

이러한 정보는 자료 집합이 링크되는 참고물질의 설명난(Description)에 기입한다(IUCLD 5의 섹션 1.1).



8.2.4 UVCB 물질

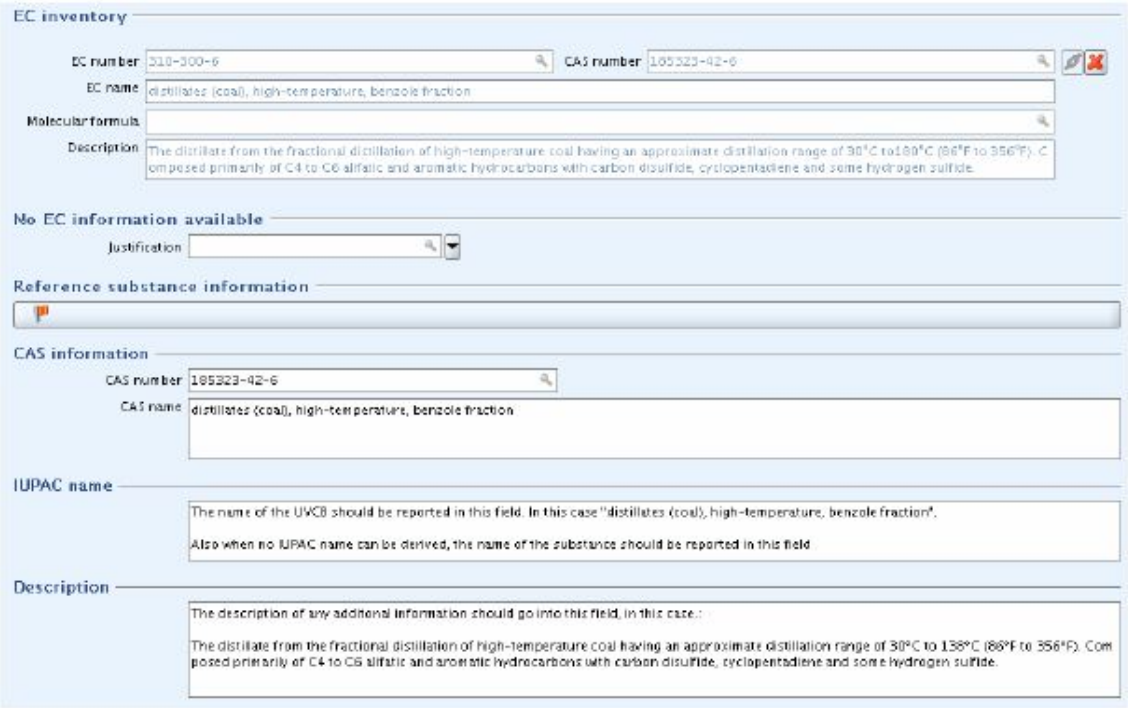
UVCB 물질은 확인할 수 없는 성분이 있기 때문에 성분의 IUPAC 명칭으로 명시될 수 없거나 정확한 조성이 계속 바뀌기 때문에 개략적으로는 명시되더라도 특이성은 실을 수 없다. UVCB 물질의 주요 식별자는 물질의 원료와 사용된 공정과 연관되어 있다. 성분과 불순물을 제대로 구분하기 어려우므로 UVCB 물질에서는 "주성분"과 "불순물"이라는 용어를 사용하지 않는다.

그러나 성분의 화학조성과 특성은 알려진 만큼 최대한 기록한다. 조성을 기술할 때는 가령 "선형 지방산 C8-C16"이나 "알코올 C10-C14와 4-10에톡시레이트 단위로 구성된 알코올 에톡시레이트"처럼 대략적인 방식으로 제시되는 경우가 많다.

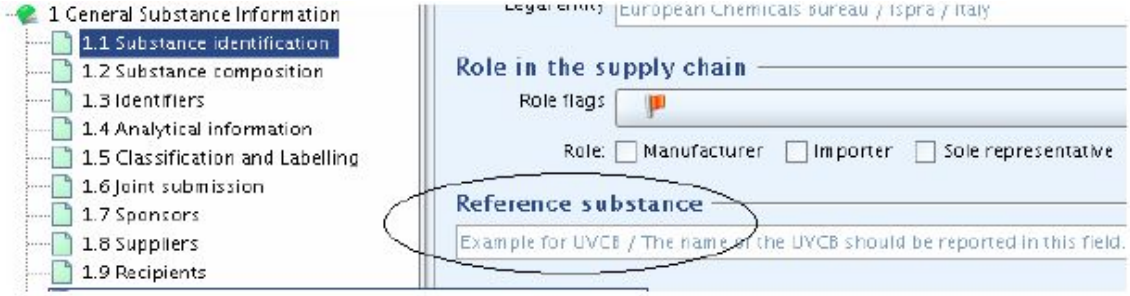
UVCB 물질을 명시하는 데 있어서도 단일성분 물질과 다성분 물질에서 기술된 것과 같은 체계가 적용된다. 물질 자체는 참고 물질과 알려진 성분으로 명시된다.

물질을 참고 물질로 정의할 때 “IUPAC 명칭” 난에 그 UVCB의 (화학)명칭을 기입해야 한다는 점에 주목해야 한다 (UVCB 물질이 “전형적인” IUPAC 명칭을 가지고 있는 경우가 드물기는 하지만). “설명”난은 추가적 정보(예: 반응 조건)를 기입하는 데 사용한다.

예: UVCB 물질	
명칭	증류물(석탄), 고온, 벤졸 분획물
설명	증류 범위가 대략 30℃~180℃(86°F~356°F)인 고온 석탄의 분별 증류에서 얻은 증류물. 주로 C4에서 C6 지방성 화합물과 disulfide, cyclopentadiene를 가지는 방향족 탄화수소 화합물과 약간의 황화수소로 구성됨.



물질 자료 집합에 있어서는 단일성분 및 다성분 물질에 기술된 것과 동일하게 적용된다. 자료 집합은 섹션 1.1의 물질을 정의하는 참고물질과 링크되어 있다.

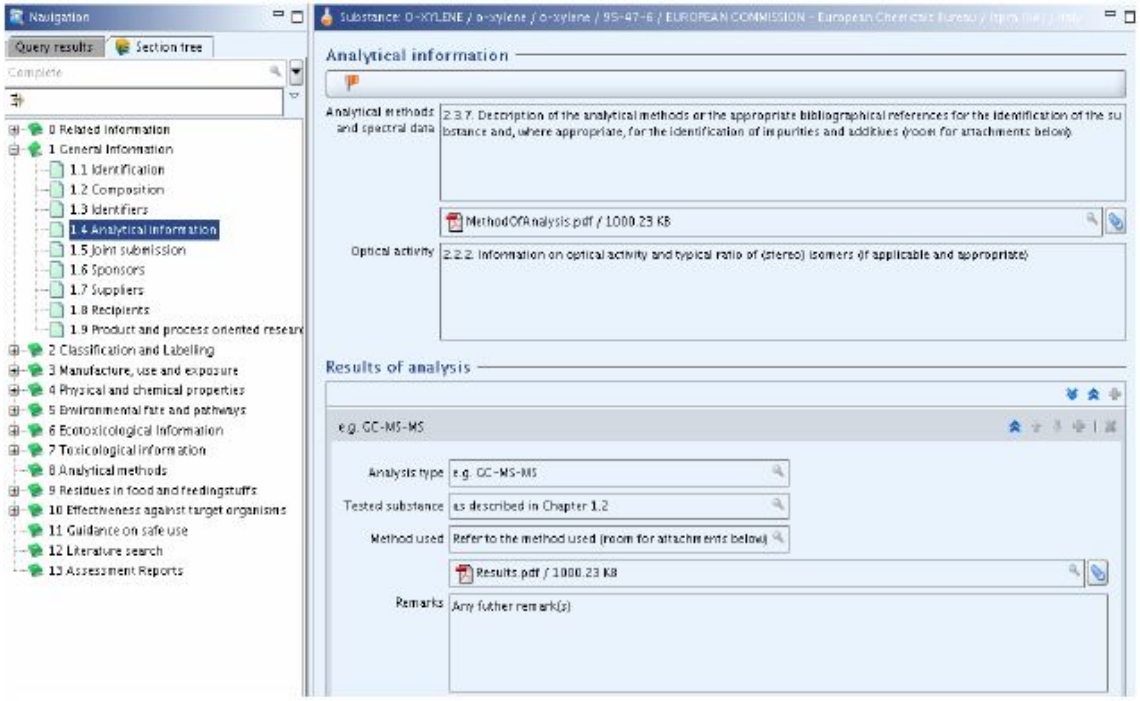


알려진 성분은 단일성분 및 다성분 물질에 대한 기술내용과 같이 해당하는 참고물질에 의해 규정된다.

8.3 분석정보의 기록

분석정보는 1.4장에 기록되어 있다. 이 장은 두 부분으로 나뉜다.

- 분석 정보(Analytical information)
- 분석 결과(Results of analysis)



이 하위영역은 REACH 요구조건(부속서 VI)과 직접적인 관련이 있다:

분석 정보(Analytical information):

- 분석 기법(Analytical methods): 이 난에는 분석 기법에 대한 설명을 기입한다(REACH, 부속서 VI, 2.3.7). 텍스트가 긴 경우에는 문서를 첨부하는 가능성도 포함된다.
- 광학 활성(Optical activity): 이 난에는 적용 가능하고 해당할 경우 (입체) 이성질체의 광활성도와 일반 비율에 관한 정보를 기입한다(REACH, 부속서 VI, 2.2.2).

분석 결과(Results of analysis):

분석결과 항목은 사용자에게 물질확인과 관련된 분석결과에 관한 정보를 제공하고 크로마토그램과 같은 항목을 첨부할 수 있는 가능성을 제공하기 위해 마련되었다. 분광 데이터를 제공하거나(REACH, 부속서 VI, 2.3.5) 크로마토그래피 데이터를 제공하는 데(REACH, 부속서 VI, 2.3.6) 사용될 수 있다.

9 참고자료

유럽 의회와 각료 이사회 (2006)
화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH)에 관한 유럽의회와 각료 이사회의 규정(E) No 1907/2007, 유럽화학물질관리청(ECA)을 설립, Directive(지침) 1999/45/EC를 개정, 각료 이사회 규정 (EEC) No 793/93과 위원회 규정 (EC) No 1488/94, 유럽이사회 지침 76/769/EEC와 유럽위원회 지침 91/155/EEC, 93/67/EEC, 2000/21/EC을 폐지. 12월 18일 (2006)

유럽 각료이사회 (2006)
유럽의회와 각료 이사회가 화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH)에 관한 규정 제안. 유럽 화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정, 7월 12일 (2006) 7524/06

유럽 각료이사회(2005)
화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH)에 관한 유럽의회와 각료 이사회의 규정 제안, 유럽 화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정, 12월 19일 (2005) 15921/05

EC (2003-A) 화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH) 제안, 유럽화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정, 10월 29일 2003COM (2003) 644 최종: Volume Ⅰ.

EC (2003-B) 화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH) 제안, 유럽화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정, 10월 29일 2003COM (2003) 644 최종: Volume Ⅱ - 규정 제안의 부속서 Ⅰ~Ⅳ

EC (2003-C) 화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH) 제안, 유럽화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정, 10월 29일 2003COM (2003) 644 잠정 규정; Volume Ⅲ - 규정 제안의 부속서 X, A편

EC (2003-D) 화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH) 제안, 유럽화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정, 10월 29일 2003COM (2003) 644 잠정 규정; Volume Ⅳ - 규정 제안의 부속서 X, B편

EC (2003-E) 화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH) 제안, 유럽화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정, 10월 29일 2003COM (2003) 644 잠정 규정; Volume Ⅴ - 규정 제안의 부속서 X, C편

EC (2003-F) 화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH) 제안, 유럽화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정, 10월 29일 2003COM (2003) 644 최종: Volume Ⅵ - 규정 제안의 부속서 XI~ XⅦ (p. 247 이하에 수정된 재무제표 포함)

ECB (2003) 위험물질의 분류, 포장, 표지에 관한 Directive 67/548/EEC에 따른 신규 화학물질의 고지. 더 이상 폴리머로 취급하지 않는 물질(NLP) 목록. EUR 20853 EN (ECB 웹사이트를 통해 얻을 수 있음).

ECB (2005) Directive 67/548/EEC의 6차 및 7차 개정판 이행을 위한 의견 매뉴얼 (Directive 79/831/EEC와 92/32/EEC) 공개 자료. EUR 20519 EN. 2005년 6월 업데이트 버전.

유럽의회 (2005) 화학물질의 등록, 평가, 승인 및 제한(REACH)에 관한 유럽의회와 각료 이사회의 규정 제안에 대한 유럽의회 입법 결의안. 유럽화학물질관리청 설립, Directive 1999/45/EC와 잔류성 유기오염물질에 관한 규정(EC) 개정. 11월 17일 (2005) P6_TA-PROV(2005)11-17

Geiss F, Del Bino G, Blech G, 외 (1992) 유럽공동체 시장 기존 화학물질 목록(EINECS 목록). Tox Env Chem 67권, 251~261쪽.

Rasmussen K, Pettauer D, Vollmer G 외 (1999) EINECS 편집본: UVCB 물질에 사용되는 설명과 정의. Tox Env Chem 69권, 403~416쪽.

미국 환경보호청(US EPA) (1978) TSCA PL 94-469 화학물질 후보 목록, 부속서 I . 석유 정제 공정 생산물에 적용되는 일반 명칭. 미국 환경보호청, 유해물질국, 워싱턴 DC 20460.

미국 환경보호청(US EPA) (2005-A) 두 가지 이상의 물질을 포함하는 제품의 유해물질 관리법 목록 등록: 공식 법적 혼합물. Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/mixtures.txt.

미국 환경보호청(US EPA) (2005-B) 두 가지 이상 물질의 혼합물의 유해물질 관리법 목록 등록: 복합 반응 생성물. Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/rxnprods.txt.

미국 환경보호청(US EPA) (2005-C) 다양한 탄소사슬 길이(CX-Y 표기법을 사용한 알킬 범위)를 포함하는 특정 화학물질의 유해물질 관리법 목록 등록. Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/alkyl-rg.txt.

미국 환경보호청(US EPA) (2005-D) 조성이 알려져 있지 않거나 가변적인 화학물질, 복합 반응생성물, 생물학적 물질 (UVCB 물질)의 유해물질 관리법 목록 등록. Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/uvcb.txt.

UBA (2000) 오스트리아 환경청(Umweltbundesamt Austria). 효소에 관한 정보자료. 최종 보고. 오스트리아 환경청과 대학간 기술, 업무 및 문화 연구센터(IFF/IFZ)의 협력 연구. 계약서 번호 B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

Vollmer 외 (1998) EINECS 편집본: 물질, 불순물, 혼합물에 사용된 설명과 정의. Tox Env Chem 65권, 113~122쪽.

Weininger (1998) SMILES, 화학적 언어 및 정보 시스템. 1. 방법론과 부호화 규칙 소개; J. Chem. Inf. Comput. Sci.; 1998;28(1);31-36.

부속서 I 지침 도구

본 부속서는 적절한 IUPAC, CAS, EC 명칭과 CAS, EC 번호, SMILES 표기법을 포함한 분자식과 구조식, 그리고 물질 확인에 필요한 기타 매개변수를 찾는 데 도움이 될 만한 여러 웹사이트 목록과 데이터베이스, 안내서를 소개한다. 기업용 데이터베이스 및 지침 도구는 포함하지 않았다.

일 반		
물질 특성 매개변수	**출처**	**출처 내 설명**
일반	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	사용자가 화학정보를 찾는 데 도움을 주는 데이터베이스와 도구 모음
	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	화학 구조, 물리적 특성, 관련 정보로의 하이퍼링크를 제공하는 무료 데이터베이스
	http://www.accelrys.com/accord/productlisting.html	화학물질 소프트웨어. 알파벳순의 제품 목록
	http://www.syrres.com/esc/freedemos.htm	아래 데이터베이스의 무료 온라인 서치엔진: 환경영향평가데이터베이스(Environmental fate database); KOW (온라인 Log P); PHYSPROP (물리적 특성)

명칭과 기타 식별자		
물질 특성 매개변수	**출 처**	**출처 내 설명**
IUPAC 명칭	http://www.iupac.org 이나 좀 더 구체적으로는: http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html#inorganic (inorganic) http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html (general)	IUPAC 공식 웹사이트
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	IUPAC 화학물질 명명규칙과 권고사항 (IUPAC 승인)
	Nomenclature of Organic Chemistry(유기화학 명명규칙) (Blue Book) Pergamon, 1979[ISBN 0-08022-3699]	IUPAC 명명규칙 관련 주요 간행물, 2006년 업데이트 예정.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (유기 화합물의 IUPAC 명명규칙에 대한 안내서) (권고사항 1993) (보충 Blue Book)	IUPAC 명명규칙 관련 주요 간행물, 2006년 업데이트 예정.

	Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	
	Nomenclature of Inorganic Chemistry(무기 화학 명명규칙) (권고사항 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	IUPAC 명명규칙 관련 주요 간행물, 2005년 7월 업데이트 예정.

명칭과 기타 식별자		
물질 특성 매개변수	**출처**	**출처 내 설명**
IUPAC 명칭	Biochemical Nomenclature and Related Documents (생화학 명명규칙과 관련 문서) (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	IUPAC 명명규칙 관련 주요 간행물
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations (화학 명명규칙의 원칙: IUPAC 권고사항 가이드) Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	모든 유형의 혼합물을 다루는 개론서
IUPAC 명칭	http://www.acdlabs.com/products/name_lab	크게 복잡하지 않은 구조를 명명하는데 크게 도움을 줄 수 있는 상업용 전산 명명 프로그램. 소분자용은 프리웨어도 있음(IUPAC 추천)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	IUPAC 유기화학 명명규칙(IUPAC 추천)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	유기 화합물의 승인된 실용명칭과 준분류 명칭의 전체 목록
	http://www.chemexper.com/	ChemExper Chemical Directory의 목표는 인터넷 상에 자유롭게 접속할 수 있는 일반 화학물질 데이터베이스를 만드는 것이다. 이 데이터베이스는 물리적 특징을 지닌 화학물질을 포함한다. 웹브라우저로 누구나 화학정보를 제출하고 정보를 검색할 수 있다.
IUBMB 명칭	http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/ 또는 http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb	IUBMB 생화학물질 명명 데이터베이스 (IUBMB 승인)
기타 명칭	http://www.colour-index.org	색지수 일반명칭, 국제 색지수, 온라인 4차 개정판.
	http://pharmacos.eudra.org/F3/cosmetic/cosm_inci_index.htm	INCI (국제화장품원료명명법), INCI 공식 웹사이트
기타 식별자	http://www.cenorm.be	CE 표준, 유럽 공식 CE 사이트
EC 번호	http://ecb.jrc.it/	유럽화학물질국(ECB) 공식 웹사이트: ESIS: EINECS, ELINCS, NLP,

		67/548/EEC 부속서 Ⅰ 검색
CAS 번호	http://www.cas.org	CAS 등록 서비스 공식 웹사이트
	http://www.chemistry.org	미국 화학학회 공식 웹사이트

분자식과 구조식		
물질 특성 매개변수	**출처**	**출처 내 설명**
SMILES	http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/	무료 SMILES 생성기
	http://www.daylight.com/smiles/f_smiles.html	사실과 무료 SMILES 생성기
분자량과 SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, 프리웨어 (구입도 가능)
몇 가지 물리-화학적 매개변수	http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm	EPI(평가 프로그램 인터페이스)Suite는 EPA의 오염 예방 유독물질청과 시라큐스 리서치 재단(SRC)이 개발한 윈도우 기반의 물리/화학적 특성과 환경적 운명 추정 모델이다.

부속서 Ⅱ 물질 확인 매개변수의 개별적 기술 지침

본 부속서 내 정보는 기술적 명명 규칙, 다양한 등록 번호의 사용, 분자 및 구조 정보, 분광 데이터 등에 대한 표기법에 익숙하지 않은 TGD 사용자를 위해 고안되었다.

본 부속서는 주요 원칙을 요약하여 전반적인 내용을 소개하고 사용자에게 완전한 정보를 위한 원천정보를 제공한다.

본 개요는 완전한 모든 정보를 담은 것이 아닌 간략화된 버전이며, 전문 사용자가 사용할 만큼 상세하게 기술되어 있지 않다. 어떤 경우에도 이 정보를 공식적인 자료와 동일시해서는 안 된다.

1 IUPAC 또는 기타 국제 명명 규칙 상의 명칭

등록을 할 때는 물질의 영문 IUPAC 명칭이나 그 밖에 잘 규정된 국제적으로 통용되는 명칭을 사용해야 한다.

IUPAC 명칭은 국제적 기구인 국제 순수 및 응용화학 연맹(IUPAC) (적절한 참고자료는 부속서 1 참조)이 정한 국제 표준 화학 명칭에 기반한 것이다. IUPAC 명명 규칙은 유기 및 무기 화학물질 모두를 명명하는 체계적 방식이다. IUPAC 명명규칙에서는 접두어, 접미어, 삽입어를 사용하여 물질 내 작용기들의 종류와 위치를 기술한다.

penta-1,3-dien-1-ol을 예로 들면:
접두어는 ***penta-1,3-***
삽입어는 ***-di***
접미어는 ***-ol***
en-은 이 명칭의 기초가 되는 핵심 명칭이다.

일련의 규칙들은 몇 해에 걸쳐 개발되었고 지속적으로 수정되고 있다. 이는 분자다양성이 있는 새로운 성분과 확인된 물질 간의 모순점이나 혼동사항에 대처하기 위한 것이다. IUPAC가 제정한 규칙은 잘 정의된 물질에 대해서만 사용 가능하다.

IUPAC 명칭의 구성에 관한 대략적인 지침 몇 가지를 아래에 소개한다. 자세한 지원을 원하는 사용자는 본 TGD 문서의 4장에 제시된 지침을 사용하도록 한다.

1.1 유기물질

1단계 탄소원자의 길이가 가장 긴 연속 사슬 내의 C-원자 수를 확인한다.
C 원자 수가 몇 개인가에 따라 핵심 명칭의 첫 부분이 결정된다.

탄소 원자의 수	핵심명

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

2단계 사슬의 포화도를 확인한다. 사슬의 포화도는 핵심명의 두 번째 부분을 결정한다.

포화도	결합	접미어
불포화	이중	-ene
	삼중	-yn
포화	-	-ane

이중결합이나 삼중결합이 여러 개 있는 경우, 결합수는 접미어 앞에 “mono(1)", "di(2)", "tri(3)" 등을 붙여 표시한다.

이중결합 2개를 가진 Pentene: pentadiene

3단계 접두어, 접미어를 합쳐서 핵심명에 덧붙인다.
주의: IUPAC에서 승인된 실용명칭과 준분류 명칭도 핵심명으로 사용할 수 있다.

Benzene, toluene, 등.

4단계 아래 표를 사용한다.
- 치환기와/나 작용기를 확인한다: 1에서 확인된 탄소 원자 사슬에 붙어 있는 탄소족(carbon groups) 또는 비탄소족(non-carbon groups).
- 치환기와/나 작용기의 우선서열을 정한다.
- 첫 번째 치환기/작용기에 접미어를 붙이고 그 뒤에 이어지는 것이 있으면 우선서열에 따라 붙인다.
- 알파벳순으로 나머지 치환기와 작용기에 접두어를 붙인다.

서열	기(基, group)	식(式, formula)	접미어	접두어
1	Carboxylic acid	R-COOH	-oic acid	Carboxy
2	Ester	R-CO-O-R	-oate	-
3	Amide	R-CONH$_2$	-amide	Carbamoyl
4	Cyanide	R-CN	-nitrile	Cyano
5	Aldehyde	R-CHO	-al	Oxo
6	Ketone	R-CO-R	-one	Oxo
7	Alcohol	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Thiol	R-SH	-thiol	Sulfanyl
9	Amine	R-NH$_2$	-amine	Amino

1.2 무기물질

1.2.1 단순 무기물의 명명

무기물질은 일련의 규칙(IUPAC 레드북(red book), 7.1의 참고자료 참조)을 바탕으로 명명하며, 이 규칙 중 가장 기본적인 내용을 아래에 소개한다.

1 단원자 음이온은 이름 끝에 -ide를 붙여 명명한다.

O^{2}-는 oxide

2 단순 이온 화합물은 양이온 뒤에 음이온을 써서 명명한다. 양이온의 전하가 1가를 넘을 때는 전하가를 원자 이름 바로 뒤 괄호 안에 로마 숫자로 기입한다.

Cu^{2}+는 copper(Ⅱ)

3 수화물(hydrates)은 이온 화합물, 숫자 접두어, -hydrate 순으로 써서 명명한다. 숫자 접두어는 mono-(1), di-(2), tri-(3), tetra-(4), penta-(5), hexa-(6), h e p t a - (7) , octa-(8), nona-(9), deca-(10)이다.

CuSO4 · 5H2O는 "copper(Ⅱ)sulphate pentahydrate"이다.

주의: 특정 금속염의 수화물과 무수형(해당될 경우)은 "동일한 물질"로 간주된다.

4 무기 분자화합물은 각각의 성분 앞에 접두어(수화물 참조)를 붙여 명명한다. 음전하가 더 강한 성분은 -ide 접미어와 함께 마지막에 기입한다.

CO2는 carbon dioxide이고, CCl4는 carbon tetrachloride이다.

5 산(acid)은 물에서 용해될 때 형성된 음이온 이름을 따서 명명한다. 몇 가지 가능성이 있다.

a 산이 물에서 용해될 때 이름이 "x"-ide인 음이온으로 분리될 경우 그 산은 hydro-"x"-ic 산이라 명명된다.

hydrochloric acid(염화 수소산)는 chloride anion(염화 음이온)을 형성한다.

b 산이 물에서 용해될 때 이름이 "x"-ate인 음이온으로 분리될 경우 그 산은 "x"-ic 산이라 명명된다.

chloric acid(염소산)는 물에서 chlorate anions로 분리된다.

c 산이 물에서 용해될 때 이름이 "x"-ite 형태인 음이온으로 분리될 경우 그 산은 "x"-ous 산이라 명명된다.

chlorous acid(아염소산)는 chlorite anions로 분리된다.

1.2.2 광물상(相)(mineralogical phases)의 명명

일반적으로 복합 광물상은 세 가지 이상의 성분을 함께 포함하고 있다. 대다수 성분이 산소(oxygen)와 결합하고 있기 때문에 광물학자들은 확인절차를 단순화할 목적으로 보통 이러한 복합 화합물이 염기성과 산성 산화물(oxides)로 구성된 것으로 간주한다. 예를 들어 silicate

(규산염)은 여러 산화물이 합쳐진 것 또는 규산염이나 알루미노규산염으로 나타내는 것이 지금까지의 관례이다. 이에 따라 calcium orthosilicate는 개별 산화물의 결합체인 2CaO.SiO2로 나타내거나 orthosilicic acid(오르토규산) H4SiO4의 칼슘염 Ca2SiO4로 나타낼 수 있다. 그 밖의 복합 광산화물(mineral oxides) - 각각의 oxide 앞에 접두어를 붙여 명명함(예: Ca3SiO5 = Tricalcium silicate = 3CaO.SiO2) -에 대해서도 같은 방식이 적용된다. 일부 산업 부문에서는 이 화합물의 분자식을 축약하기 위해 더욱 간소한 형태가 도입되었다. 예를 들어, 포틀랜드 시멘트클링커(Portland cement clinker)의 경우 2CaO.SiO2(calcium orthosilicate 또는 dicalcium cilicate)가 C2S로 축약되었고, 여기서 C는 CaO, S는 SiO2를 가리킨다. 복합 광물상을 명명하거나 확인할 때는 표준 광물학 또는 산업용 텍스트를 참조하는 것이 좋다.

1.3 천연 생성물과 관련 구성요소

천연생성물의 계통명을 정하기 위해 IUPAC는 몇 가지 규칙을 개발했다. 간략히 말해 천연원료에서 추출된 물질의 명칭은, 가능한 모든 경우에, 그 물질이 추출된 유기체의 과, 속, 종 명칭을 기반으로 한다.

hypothetical protein(가상 단백질) *Hypothecalia Examplare*
hypothecalia와/나 examplare를 바탕으로 명칭을 정한다.
예: Horse Examplare

명칭은 가능한 한 그 천연생성물의 알려졌거나 추측되는 분포를 반영해야 한다. 적절한 경우, 관련된 과(families)가 여럿인 물질의 명칭을 정할 때는 강(綱, class)이나 목(目, order)을 바탕으로 할 수도 있다. 구조가 알려져 있지 않은 천연생성물의 명칭은 유기물 명명규칙에서 사용되는 접두어, 접미어, 삽입어를 포함해서는 안 된다.

Horse examplare의 축합물(condensation product),
N-말단에 덧붙여진 Valarine

자연적으로 발생하는 물질은 계통 구조가 잘 정의된 경우가 많다. 각각의 구조는 밀접하게 연관된 일련의 모구조(parent structures)로 특징지어질 수 있으며, 다시 말해 각 구조는 근본 구조로부터 얻어질 수 있다. 이들 자연적으로 발생하는 물질과 그 화학 유도체의 계통명은 적절한 근본 모구조의 이름에 따라 정할 수 있다.

잘 알려진 모구조에는 alkaloids, steroids, terpenoids, vitamins가 있다.

근본 모구조는 그 계통 내 대다수 물질에 공통되는 기본 골격을 반영해야 한다. 자연적으로 발생하는 물질 또는 유도체는 모구조의 이름을 따온 뒤 아래의 내용을 가리키는 접두어, 접미어, 삽입어를 첨가하여 명명된다.
- 골격 구조에의 변형
- 골격 원자의 교체

- 모구조의 이름이 나타내는 수소첨가 상태상의 변화
- 모구조의 수소원자를 대체하는 원자나 원자단
- 모구조의 이름에 나타나 있지 않거나 기존의 의미에서 변경된 배열

Thiamin chloride는 vitamin B1이라고도 알려져 있다.

천연생성물과 관련 물질의 명명에 관한 더 자세한 정보는 IUPAC에서 찾아볼 수 있다(부속서 1 참조).

1.4 IUPAC 명칭을 찾을 수 없을 때

특정 물질의 IUPAC 명칭을 찾아내는 것이 불가능할 경우 그 물질에만 적용되는 그 밖의 국제적으로 승인된 명칭을 사용할 수 있다. 그 예는 다음과 같다.

- 광물과 광석; 광물학상의 명칭;
- 석유물질
- 색지수 일반 명칭[3];
- 오일 첨가물;
- INCI(국제화장품원료명명법)[4] ;
- 계면활성제(surfactants)에 대한 SDA(비누세제협회) 명칭[5];
- 기타

2 기타 명칭

REACH 체계 하에서 등록을 할 때는 유럽시장에서 사용되고 있거나 사용될 모든 언어로 된 관련 명칭과/이나 공공 식별자(예: 상품명)를 전부다 포함시키는 것이 유용하다. 이런 명칭에는 상품명, 이명(synonyms), 약어 등이 있다.

3. http://www.colour-index.org, Colour Index International(국제 색지수), 온라인 4차 개정판
4. http://dg3.eudra.org/F3/inci/index.htm, INCI 공식 웹사이트
5. http://www.cleaning101.com, SDA 공식 웹사이트

3 EINECS, ELINCS 또는 NLP의 EC 번호(EC 목록)

EINECS, ELINCS, NLP 번호와 같은 EC-번호는 EU 내에서 물질의 공식 번호이다. EC 번호는 EINECS, ELINCS, NLP와 유럽화학물질관리청(ECA)의 공식 간행물에서 얻을 수 있다.

EC번호는 x1x2x3-x4x5x6-x7 형태의 7자리 수로 이루어진다. 첫 번째 자리는 물질이 속하는 목록에 의해 정해진다.

목록	EC번호의 첫 번째 자리
EINECS	2나 3
ELINCS	4
NLP	5

4 CAS 명칭과 CAS 번호

미국 화학학회(ACS) 산하부서인 화학물질정보서비스(CAS)는 CAS 등록 데이터베이스에 등록되는 모든 화학물질에 CAS 명칭과 CAS 번호를 부여한다. 명칭과 번호는 CAS 과학자들에 의해 확인된 고유 물질에 순차적으로 할당된다. 화학물질정보서비스에 등록된 모든 물질은 CAS 명명규칙에 의거한 명칭을 가지고 있으며, 이는 명명규칙에 관한 ACS 위원회의 권고가 있은 후 ACS에서 채택한다(부속서 1의 참고자료 참조).

4.1 CAS 명칭

CAS 명칭은 화학물질정보서비스에서 부여한 이름이며 IUPAC 명칭과는 다르다. CAS 명명규칙은 제한된 기준을 바탕으로 하고 있으므로 물질의 명칭을 이끌어내기에 불충분한 경우도 있다. 따라서 일반적으로 정확한 CAS 명칭을 얻기 위해서는 화학물질정보서비스에 연락할 것을 권장한다.

기본적 명명규칙을 간단히 요약해보면 다음과 같다.
- 물질의 “주요” 부분을 헤더(header)나 부모(parent) 역할을 하도록 선택한다.
- 치환기는 header/parent 뒤에 열거하며, 이는 역순으로 불린다.
- 치환기가 여러 개 있을 때는 알파벳순으로 나열한다(접두어 포함).

o-Xylen-3-ol은 Benzene,1,2-dimethyl,3-hydroxy이다

4.2 CAS 번호

CAS 번호는 화학물질정보서비스에서 얻을 수 있다.

CAS 번호는 최소 5자리로 구성되며, 세 부분으로 나누어 하이픈으로 연결한다. 두 번째 부분은 항상 2자리, 세 번째 부분은 1자리로 이루어진다.

$$Ni.....N_4N_3-N_2N_1-R$$

CAS 번호 점검을 위해 “검사 합계(checksum)"를 사용할 수 있다.

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

CAS 번호는 검사 합계에 따라 정확해야 한다.

4.3 물질의 CAS 등록

CAS 등록 서비스는 아래에 제시하는 유형의 화학물질에 CAS 번호를 부여한다.

- 이하의 특징을 나타내는 단일성분 물질:

    - 분자구조가 완전히 정의된 물질(물질에 결합되어 있는 모든 원자와 화학적 결합이 알려져 있음). 서로 위치가 다른 이성체, 입체화학적 이성체, 염화물도 고려대상에 속한다.
    - 물질의 화학조성을 명백히 나타내는 이름
- 염류나 축합물의 구체적 비율
- 자연적으로 발생하는 광물
- 특정 합금, 이온, 동위원소, 소립자
- 이하와 같은 복합 물질
    - 화학적으로 변형된 생물학적 물질
    - 복합 반응 생성물
    - 산업공정 생산물질

CAS 등록을 할 때는 반드시 www.cas.org에서 다운로드할 수 있는 특정 형식을 사용해야 한다. 그 형식에도 나타나 있듯이 일반적인 우선순위를 표시하여 아래 정보를 작성해야 한다.

- 잘 정의된 화합물:
    - 화학구조 도해
    - 화학 계통명
    - 일반명
    - 분자식
- 복합반응 생성물
    - 반응물 목록과 반응의 특성
    - 반응조건
    - 생성물의 일반 조성
- 식물 및 동물 생성물
    - 원료의 속/종과 기타 확실한 일반 명칭
    - 추출 방식
    - 추가 화학공정에 관한 설명
- 산업 공정에서 얻어진 물질
    - 전구물질(precursor)과 조제방식
    - 산업공정과 물질의 분리 시점을 보여주는 모형도
    - 공정에 관한 기술

      촉매 열분해(Catalytic cracking), 탈왁스(dewaxed)
    - 탄소(알킬) 범위:

      C4에서 C12까지
    - 물리적 특성:

      끓는점 범위, 점도, 고형체, 슬래그
    - 주요 화학조성
    - 원료

      석유, 석탄
- 생명공학물질
    - 서열 데이터

- 생물학적 원료 정보 (속/종 포함)
- 효소 활성

5 기타 식별 부호

그 밖에 아래와 같이 국제적으로 승인된 식별 부호도 제공될 수 있다.
- UN 번호
- 색지수 번호
- 염료 번호
- 기타

6 분자식, 구조식, SMILES

6.1 분자식

분자식은 각각의 성분을 그 화학기호로 확인하고, 물질에서 분리된 하나의 분자에서 발견되는 각 성분의 원자수를 보여준다.

분자식은 (기존의) Hill 방식과, 추가로 CAS 체계에 따라 제시되어야 한다. CAS 체계에 의한 분자식은 Hill 방식과 차이가 있다.

Hill 방식을 적용할 때는 아래 제시한 단계를 따르면 된다.

1. 성분을 확인하고 화학기호를 나열한다.
2. 성분들을 올바른 순서로 배열한다.
   a. 탄소 함유 물질:
      각각의 성분은 아래와 같은 순서의 화학기호로 불린다.
      (1) 탄소;
      (2) 수소;
      (3) 기타 성분 기호를 알파벳순으로 나열
      Pentane: C5H12
      Pentene: C5H10
      Pentene: C5H12O
   b. 탄소 비함유 물질:
      각각의 성분을 알파벳순으로 나타낸다.
      Hydrochloric acid: ClH
3. 원자수가 1을 넘는 성분에 대해서는 원자수를 화학기호 아래쪽에 써넣는다.
4. 주요 구조와 관련이 없는 정보는 점이나 쉼표로 구분하여 분자식의 맨 끝에 덧붙인다.
   Sodium benzoate는 C7H6O2, sodium salt
   Copper sulphate dihydrate는 CuO4S.2H2O

특정 물질에 Hill 방법이 적용될 수 없는 경우에는 분자식을 다른 방식으로 나타낸다. 가령

파악할 수 있는 원자와 원자의 비율을 간단하게 나타낸 실험식이나 화학물질정보서비스에서 제공하는 식을 사용할 수 있다(TGD 문서 4장 참조).

6.2 구조식

구조식은 물질 내 분자의 배열과 서로간의 관계를 시각화하는 데 필요하다. 구조식은 원자, 이온, 원자단의 위치와 이들을 묶고 있는 결합의 속성을 나타낸다. 이성(異性), 즉 시스/트랜스(cis/trans), 손대칭성/키랄성(chirality), 거울상체(enantiomers) 등 또한 이에 포함된다.

구조식은 서로 다른 형식으로 나타낼 수 있다. 분자식과/이나 구조 도해가 그것이다.

- *분자식 형태의 구조식*

1. 모든 원소 그룹을 보이는 순서에 따라 명확히 적는다.

n-pentane: CH3CH2CH2CH2CH3

2. 각각의 치환기는 괄호 안에 넣어서 연결된 원자 바로 뒤에 적는다.

2-methylbutane: CH3CH(CH2)CH2CH3

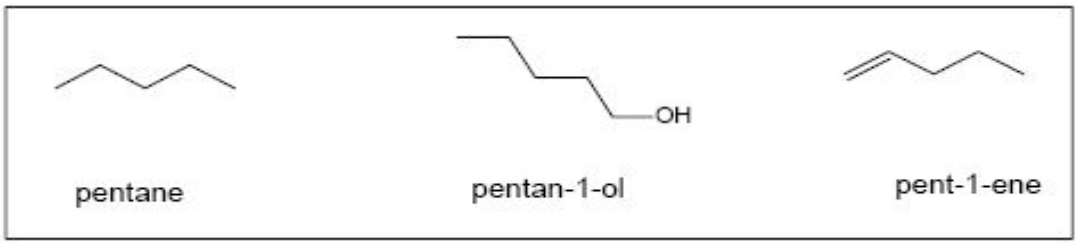
3. 이중 또는 삼중결합은 해당하는 원소 그룹 사이에 표시한다.

pent-1-ene: CH2=CHCH2CH2CH3

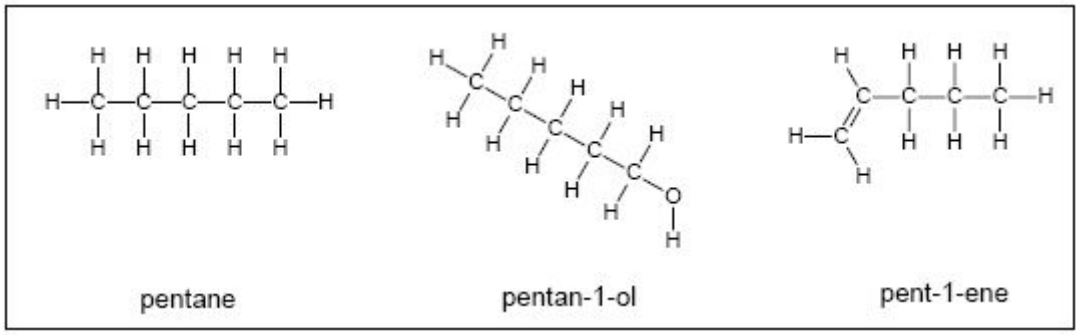
- *구조 도해 형태의 구조식*

구조 도해에서 원소와 원소 간 결합은 2D나 3D 그림으로 시각화된다. 몇 가지 기법을 소개한다.

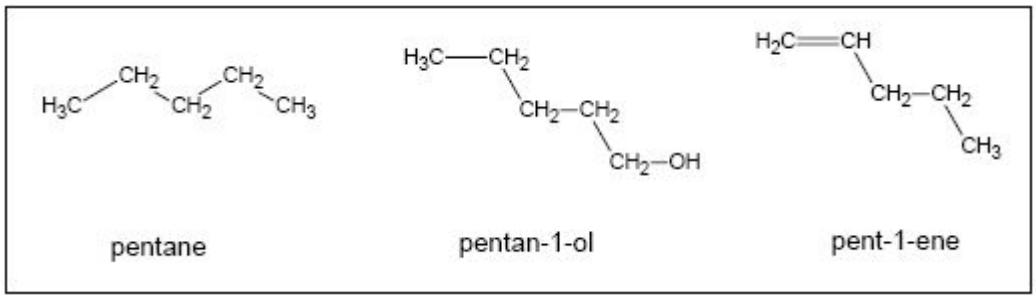
1. 모든 비탄소 원소와 비탄소 원소에 붙은 수소를 나타냄



2. 모든 원소를 이름으로 표시함



3. 탄소와 수소를 그룹으로 묶어서 표시하고(예: CH3), 모든 비탄소 원소와 탄소와 결합하지 않은 모든 수소를 표시함



6.3 SMILES 표기법

SMILES는 단순화된 분자 입력라인 기입사항(Simplified Molecular Input Line Entry Specification)의 약어이다(Weininger, 1988). 이것은 화학기호를 일렬로 늘어세우는 방식으로 분자구조를 나타내는 화학물질 표기 시스템이다. 표준 SMILES에서 분자의 이름은 그 구조와 같은 것이다. 이 시스템은 분자 구조의 평면 그림을 간접적으로 보여주기 때문이다. 이차원적 화학구조는 여러 방식으로 그릴 수 있기 때문에 하나의 분자에 대해 정확한 SMILES 표기법은 몇 가지에 이른다. SMILES의 기본은 분자의 원자가(價) 모형을 표시하는 것이다. 따라서 원자가 모형으로 나타낼 수 없는 분자를 표시하는 것은 바람직하지 않다.
SMILES 표기법은 원소기호로 나타낸 원자, 결합, 분기(branching)를 표시하는 데 사용하는 괄호, 고리 구조(cyclic structures)에 사용되는 숫자로 구성된다. SMILES 표기법은 분자 구조를 임의적인 키랄(chiral) 표시가 있는 그래프로 나타낸다. 분자구조를 결합과 원자로만 표시하는 SMILES 표기법을 일반적 SMILES라 하고, 동위원소와 키랄 원소를 나열한 SMILES 표기법을 이성체 SMILES라 부른다.

요컨대 SMILES 표기법은 몇 가지 기본 규칙을 바탕으로 하고 있다.

1. 원자는 원자 기호로 나타낸다.
2. 수소를 제외한 모든 원자는 독립적으로 표시한다.
   a. "유기적 집합(organic subset)" 내 원소 B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br, I는 괄호 안에 넣지 않고, H 수가 보이는 결합과 일치하는 최저 평균 원자가(lowest normal valence(s))를 따르는 한 H를 첨부하지 않는다.

"유기적 집합 (organic subset)" 내 원소	"최저 평균 원자가 (lowest normal valence(s))"
B	3
C	4
N	3, 5
O	2
P	3, 5
S	2, 4, 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

b. H 수가 최저 평균 원자가와 맞지 않으면 그 즉시 "유기적 집합“ 내 원소를 괄호 안에 넣어 표시한다.

Ammonium cation은 NH4+

c. "유기적 집합“ 내 원소 외의 원소들은 첨가된 수소를 나타내고 괄호 사이에 넣어 표시한다.

3. 지방성 원자는 대문자로, 방향족 원자는 소문자로 표기한다.

benzene은 c1ccccc1, cyclohexane은 C1CCCCC1

4. 수소는 다음의 경우에만 포함된다.

a. 전하를 띠는 수소, 즉 양자(proton), [H+];

b. 다른 수소와 결합된 수소, 즉 분자 수소, [H][H];

c. 다른 원자 하나 이상과 결합한 수소, 예: 가교(bridging) 수소;

d. 수소 동위원소, 예: 중수소([2H]);

e. 수소가 키랄 원자와 결합한 경우.

5. 기본 결합 네 가지는 다음과 같다.

결합 형태	SMILES 표기
단일	-표시할 필요 없음
이중	=
삼중	#
방향족	소문자로 표기

6. 치환기는 괄호 안에 넣어 함께 결합된 원자 바로 뒤에 표기한다.

2-methylbutane은 CC(C)CC

a. 치환기는 항상 관련된 원자 바로 뒤에 표시한다. 치환기에는 이중, 삼중 결합 기호를 쓸 수 없다.

Pentanoic acid는 CCCCC(=O)O

b. 치환기 내 치환기도 표시할 수 있다.

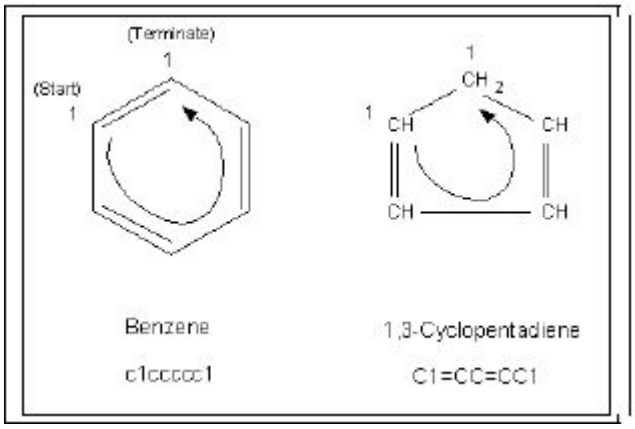
2-(1-methylethyl)butane은 CC(C(C)C)CC

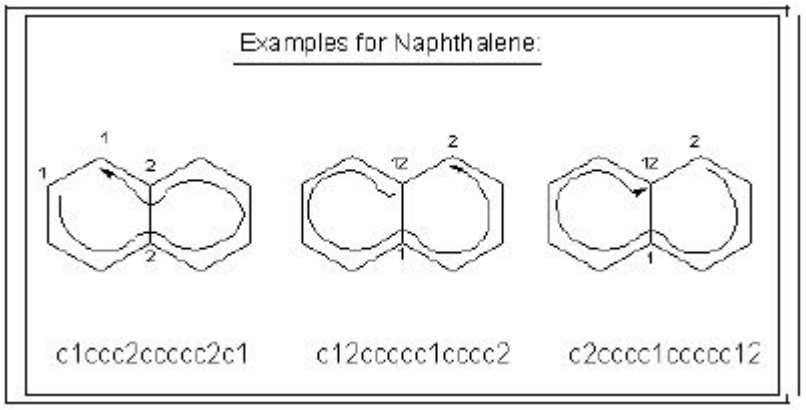
7. 고리 구조의 경우, 고리의 시작(starting) 원자와 끝(terminating) 원자를 나타내기 위해 1에서 9까지의 숫자를 사용한다.

a. 각각의 고리에서 시작 원자와 끝 원자는 같은 수로 표시한다. 시작 원자와 끝 원자는 반드시 서로 결합되어 있어야 한다.

b. 숫자는 출발 위치와 종료 위치를 가리키는 데 사용된 원자 바로 뒤에 기입한다.

c. 시작 원자나 끝 원자는 연속되는 두 숫자와 결합할 수 있다.





8. 결합되지 않은 화합물은 개별 구조나 점(".")으로 나뉜 이온으로 나타낸다. 점으로 나뉜 인접한 원자는 서로서로 직접 결합되지 않는다. 예: Van der Waals(반데르발스) 결합:

Aminopropene hydrochloride는 C=CC(N).Cl

9. 이성체 배열은 사선 모양("＼"와 "/")으로 표시한다. 이 기호들은 두 이성체 결합 간의 대응하는 방향을 나타낸다. (cis="／＼", trans="/ /"). SMILES는 로컬 키랄성(local chirality)을 사용하므로 키랄성을 완전히 명시해야 한다.

cis-1,2-dibromoethene은 Br/C=C＼Br

trans-1,2-dibromoethene은 Br/C=C/Br

10. 거울상체(enantiomers)나 키랄성(chirality)은 "@" 기호로 표시한다. "@" 기호 는 뒤이은 인접 키랄 원자들이 시계반대방향으로 나열되었음을 가리킨다. "@@" 기 호를 사용하면 원자가 시계방향으로 나열되었다는 뜻이다. 키랄 원자와 "@"는 괄 호로 묶어 표시한다.

2-chloro-2-hydroxypropanoic acid와 specified chirality는
C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)

11. 동위원소 집단은 관련된 원자질량의 구성요소와 일치하는 수를 원자기호 앞에 적어서 표시한다. 원자질량은 괄호 안에 넣어서만 표시할 수 있다.

Carbon-13은 [13C], Oxygen-18은 [18O]

SMILES 표기법을 정하는 데 사용할 수 있는 몇 가지 도구(SMILES 생성기)가 있다 (부속서 1 참조).

7 광활성도(optical activity) 관련 정보

광활성도는 비대칭 물질이 평면 편광(planar polarized light)의 정위(orientation)를 회전하는 능력을 말한다. 이러한 물질과 그 물질의 거울상을 거울상체(enantiomers)라 하고, 이들은 하나 이상의 키랄 중심(chiral centre)을 가지고 있다. 거울상체는 기하학적 배열은 달라도 동일한 화학적, 물리학적 특성을 가진다. 각 유형의 거울상체마다 편광에 다른 영향을 주기 때문에 광활성도를 이용하여 샘플 안에 어떤 거울상체가 존재하는지를 확인하고 그에 따라 물질의 순도를 알아볼 수 있다. 회전 규모는 분자의 고유 속성이다.

거울상체는 항상 반대되는 회전방향을 가지고 있다. 거울상체는 동일한 정도로 빛을 분극화하지만 그 방향은 반대이다. 따라서 거울상체 혼합물의 광활성도는 두 거울상체 간의 비율을 나타낸다. 50대 50으로 혼합된 거울상체의 광활성도는 0이다.

관측된 회전은 농도, 샘플 튜브의 길이, 온도, 광원의 파장에 따라 달라진다.

따라서 광활성도는 비대칭 물질을 확인할 수 있는 결정적 매개변수이며, 해당 물질과 물질의 거울상을 구분할 수 있는 유일한 매개변수이다. 그러므로 해당될 경우 물질의 광활성도를 제시해야 한다.

광활성도의 기준은 고유회전도(specific rotation)라고 한다. 고유회전도는 광로 길이(path length) 1 데시미터(dm), 샘플 농도 1g/ml 상태에서 5896 옹스트롬에서 관측된 광회전에 의해 정해진다. 고유회전도는 관측된 회전을 광로길이(dm)와 농도(g/ml)를 곱한 값으로 나눈 것이다.

광활성도는 몇 가지 다른 방식으로 측정할 수 있다. 그 중 가장 흔히 사용되는 방법은 다음과 같다.
- 광회전(optical rotation). 샘플을 통과하는 광선의 편광면의 회전을 측정한다.
- 원편광 2색성(circular dichroism). 샘플의 좌우 편광 흡수정도를 측정한다.

물질이 광선을 오른쪽(시계방향)으로 회전하면 이 물질을 우선성(dextrorotatory)이라 하고 + 기호를 표시한다. 물질이 광선을 왼쪽(시계반대방향)으로 회전하면 이 물질을 좌선성(laevorotatory)이라 하고 -기호를 붙인다.

8 분자량 또는 분자량 범위

분자량(molecular weight)은 원자질량 단위(amu)나 몰 질량(molar mass) (g/mole)으로 나타낸 물질 분자의 무게이다. 분자량은 물질의 분자식으로부터 계산할 수 있다. 분자량은 분자를 구성하는 원자의 원자량을 합한 것이다. 특정 단백질이나 정의되지 않은 반응 혼합물과 같은 분자의 경우, 단일 분자량은 확인할 수 없고 분자량 범위만 알 수 있다.

몇 가지 기법이 물질의 분자량 확인에 사용될 수 있다.

- 기체물질의 분자량을 측정하는 데는 아보가드로 법칙(Avogadro's law)을 사용할 수 있다. 아보가드로 법칙은 주어진 온도와 압력 조건에서 주어진 부피만큼의 모든 기체는 특정 수만큼의 기체분자를 포함한다고 명시한다.

$$PV = nRT = NkT$$

n= 몰 수
R= 이상 기체 상수= 8.3145 J/mol K
N= 분자 수
k= 볼츠만(Boltzmann) 상수 = 1.38066 x 10-23 J/K = 8.617385 x 10-5 eV/K
k=R/NA
NA = 아보가드로 수 = 6.0221 x 1023/mol

- 액체 및 고체 물질의 경우 분자량은 녹는점, 끓는점, 증기압이나 일부 용제의 삼투압에 미치는 영향에 따라 정해질 수 있다.
- 고도로 정확한 측정법인 질량 분광법(mass spectrometry)
- 단백질이나 바이러스와 같이 고분자량을 가진 복합 물질의 분자량은 초원심분리기 내 침강속도를 측정하거나 광산란 광도측정법으로 알 수 있다.
- 물질의 구조 도해나 분자식을 바탕으로 분자량을 계산할 수 있는 도구가 몇 가지 있다 (부속서 1 참조).

9 물질의 조성

각각의 물질에 있어 주성분, 첨가물, 불순물이 합쳐진 물질의 조성은 본 TGD 문서의 4장에서 기술된 규칙과 기준에 따라 신고되어야 한다.

개별 성분과 첨가물, 불순물은 아래 기준에 의해 적절히 확인되어야 한다.
- 명칭 (IUPAC 명칭이나 기타 국제적으로 수용되는 명칭)
- CAS 번호 (해당시)
- EC 번호 (해당시)

개별 성분, 첨가물, 불순물의 비율을 제시해야 한다(무게나 부피 단위가 선호됨). 가능한 경

우 상업적 물질 내 범위도 제시한다.

성분에 있어서는 일반적 상업용 단위에서 일반 순도비율과 최고, 최저 한계치를 제시한다. 첨가물과 불순물의 경우는 일반 순도비율이나 최고, 최저 한계치를 제시한다. 일반적으로는 주어진 값의 합이 100%가 되어야 한다.

10 분광 데이터

분광 데이터는 단일성분 물질의 제시된 구조를 확정하거나 반응 혼합물이 조제가 아님을 확인하는 데 필요하다. 분광(자외선, 적외선, 핵자기공명 또는 질량 분광)을 측정할 수 있는 방법에는 몇 가지가 있다. 모든 방법이 모든 유형의 물질에 적합한 것은 아니다. 가능한 경우 본 TGD는 서로 다른 물질 유형에 속하는 적절한 분광에 관한 지침을 제공할 것이다 (ECB, 2004; ECB, 2005).

몇 가지 잘 알려진 방식의 경우 아래의 정보가 분광 자체나 부속서에 표시되어야 한다.

자외선-가시광선 흡수 분광법 (Ultraviolet-Visible (UV-VIS) spectrum)
- 물질의 특성
- 용제와 농도
- 범위
- 주요 피크(peaks)의 위치 (그리고 엡실론(epsilon) 값)
- 산(acid)의 영향
- 알칼리(alkali)의 영향

적외선 분광법 (Infrared Spectroscopy (IR) spectrum)
- 물질의 특성
- 매질(medium)
- 범위
- 결과 (확인에 중요한 역할을 하는 주요 피크를 보여줌. 예: 지문 영역의 해석).

핵자기공명 분광법 (Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy (NMR) spectrum)
- 물질의 특성
- 원자핵과 주파수
- 용제
- 해당시, 내부 또는 외부 참조문헌
- 결과 (물질 확인에 중요한 신호와 용제와 불순물에 상응하는 신호를 나타냄)
- 1H NMR 분광의 경우 통합곡선(integration curve)을 제시해야 한다.
- 약한 NMR 피크의 강도는 수직으로 올리고 복합 패턴은 확대한다.

질량 분광법 (Mass Spectroscopy (MS) Spectrum)
- 물질의 특성

- 가속 전압
- 로딩(loading) 방법 (직접 삽입, GC를 통해, 등)
- 이온화 방법 (전자 충격, 화학 이온화, 장 탈착, 등)
- 분자 이온 (M)
- 물질 확인을 위한 주요 분획물
- 물질 확인에 중요한 M/z 값이나 피크 지정
- 복합 패턴은 확장해야 한다.

분광 데이터로 물질 확인을 승인할 수 있다면 그 밖의 국제적으로 승인된 방법도 사용할 수 있다(예: 내부 구조). 복합 광산화물의 성분을 확인할 수 있는 XRD와 그 화학조성을 분석하는 XRF가 그 예이다.

분광을 명확히 이해하고/거나 해석하기 위해서는 아래 일반적 요건을 염두에 둬야 한다.
- 적절한 경우 주요 파장이나 기타 데이터를 언급한다.
- 부가 정보를 제공한다. 예: 출발물질의 분광
- 몇몇 방식에 해당하는 것으로 위에 언급한 사용된 용제와/나 기타 필수 세부사항을 제시한다.
- (원본보다는) 비율이 적절히 표시된 깨끗한 사본을 제출한다.
- 사용된 물질의 농도에 관한 정보를 제공한다.
- 물질 관련 피크 중 강도가 가장 높은 것은 실물크기에 가까워야 한다.

11 고성능 액체 크로마토그래피, 가스 크로마토그래피

물질의 유형에 적합한 경우, 물질 조성을 확정하기 위해 크로마토그램을 제시해야 한다. 가령, 적절한 크로마토그램은 불순물, 첨가물의 존재여부와 반응 혼합물의 성분을 확인해 준다. 혼합물의 분리와 확인에 사용되는 가장 잘 알려진 기법 두 가지는 가스 크로마토그래피(GC)와 고성능 액체 크로마토그래피(HPLC)이다. 이 두 기법은 이동상(mobile phase)과 고정상(stationary phase) 간의 상호작용을 기반으로 하고 있으며, 혼합물의 성분을 분리시킨다.

GC/HPLC 크로마토그래피를 사용할 시에는 크로마토그램 자체와 부속서에 다음의 정보를 표시해야 한다(ECB, 2004; ECB, 2005).

- *HPLC*
    - 물질의 특성
    - 지름, 패킹, 길이 등 컬럼(column)의 속성
    - 온도, 사용된 경우 온도 범위도 기록.
    - 이동상의 조성, 사용된 경우 범위도 기록.
    - 물질의 농도범위
    - 시각화 기법, 예: UV-VIS
    - 결과 (물질 확인에 중요한 주요 피크를 나타냄)

- *GC*
  - 물질의 특성
  - 지름, 패킹, 길이 등 컬럼(column)의 속성
  - 온도, 사용된 경우 온도 범위도 기록.
  - 주입 온도
  - 운반 가스와 운반가스의 압력
  - 물질의 농도범위
  - 시각화 기법, 예: MS
  - 피크 확인
  - 결과 (물질 확인에 중요한 주요 피크를 나타냄)

12 분석기법에 대한 기술

REACH 부속서 Ⅳ에 의하면 등록자는 분석기법을 설명하고/거나 물질 확인, 그리고 해당시에는 불순물과 첨가물의 확인에 사용된 기법에 대한 참고도서를 제시해야 한다. 이 정보는 해당 기법을 재연할 수 있을 정도로 충분히 제시되어야 한다.