



Kosmetiikan turvallisuusarviointi

Laskuri epäpuhtausaltistukselle

Olli-Pekka Taivalmaa

Opinnäytetyö
Marraskuu 2013
PaTeKe
Kemiantekniikka

TIIVISTELMÄ

Tampereen ammattikorkeakoulu
Paperi-, Tekstiili- ja Kemianteeniikka
Kemianteeniikka

OLLI-PEKKA TAIIVALMAA:
Kosmetiikan turvallisuusarviointi
Laskuri epäpuhtausaltistukselle

Opinnäytetyö 54 sivua.
Marraskuu 2013

Opinnäytteen tarkoituksena on laatia Berner Oy:lle laskentatyökalu ja selvitys valmiiden kosmetiikkatuotteiden sisältämistä epäpuhtauksista ja niiden määrästä, mikä liittyy Euroopan kosmetiikkalainsäädäntöön ja kosmetiikkatuotteiden turvallisuuden arviointiin.

Työn tärkeimpänä tavoitteena on laatia Excel-pohjainen arviointityökalu siihen, onko tietty formuloitava resepti järkevä toteuttaa siinä esiintyvien epäpuhtauksien takia vai nousevatko raaka-aineista kumuloituvat epäpuhtausmäärät yli mahdollisten raja-arvojen. Työhön sisältyy myös katsaus lainsäädäntöön: mitä siihen sisältyy, miksi se on laadittu ja miten se vaikuttaa kosmetiikkaan Euroopan alueella.

Lisäksi työssä tarkastellaan tärkeimmissä raaka-aineissa ja raaka-aineryhmissä esiintyvien epäpuhtauksien vaikutusta valmiin tuotteen turvallisuuteen ja siihen, mistä nämä epäpuhtaudet tulevat raaka-aineisiin. Opinnäytteen tarkoituksena on myös selvittää ja määrittää kirjallisuuden ja erilaisten luokitusmenetelmien avulla mahdollisia raja-arvoja useimmin esiintyville epäpuhtauksille.

Työn tavoitteisiin pyrittiin luomalla Excel-ohjelmiston avulla tietokanta käytössä olevista raaka-aineista. Tässä tietokannassa raaka-aineet järjestettiin tuotenumeron mukaan ja jokaiselle raaka-aineelle etsittiin epäpuhtausmäärät raaka-aineiden dokumentaatiosta. Nämä etsityt arvot tallennettiin tietokantaan. Tästä tietokannasta laadittu laskin osaa hakea tarvittavat arvot tuotenumeron mukaan ja laskea valmiissa tuotteessa olevat epäpuhtausmassat. Varsinaisen lopputuloksen laskin antaa laskemalla epäpuhtaudelle tapahtuvan altistumisen päivässä 60 kilogrammaa painavalla ihmisellä. Altistuminen vaihtelee tuotteen käyttötarkoituksen mukaan.

Turvallisten raja-arvojen määrittämiseen käytettiin Toxtree-ohjelmistoa ja Cramer-luokitusta. Raja-arvot ja niiden määrittämiset ovat myös lainsäädännön kannalta perusteltavissa ja täten täysin päteviä sillä niiden määrittämiseen käytettiin SCCS:n suosittelemia metodeja.

Työssä saatiin selville laaditun laskentajärjestelmän avulla esimerkkiresepteissä olevat epäpuhtaudet ja pystyttiin valitsemaan kolme epäpuhtautta tai epäpuhtausryhmää lähemmän tarkastelun alle. Näitä epäpuhtauksia olivat: 1,4-dioksaani, 3-aminopropanoli ja raskasmetallit

Asiasanat: epäpuhtaudet, kosmetiikka, lainsäädäntö, cramer, luokitus, excel, laskin, toxtree, 1,4-dioxane, 3-aminopropanol, raskasmetallit

ABSTRACT

Tampereen ammattikorkeakoulu
Tampere University of Applied Sciences
Pulp and Paper, Textile and Chemical Engineering
Chemical Engineering

OLLI-PEKKA TAIVALMAA:

Safety assessment of cosmetics
Calculator for exposure to impurities

Bachelor's thesis 54 pages.

November 2013

The purpose of this thesis is to make a calculating tool for calculating impurities and to study the impurities and their corresponding amounts which are present in completed cosmetic products. This was done because of the European Cosmetics Regulation and to assess the safety of these cosmetics products.

The most important goal of this thesis is to draft an Excel based assessing tool to check if the formulated recipe is safe to produce when impurities in it are taken in account or does these impurities rise above the corresponding safety levels. Thesis also includes a review of the regulations: what it contains, why it is drafted and how it affects the cosmetics in the EU.

Additionally, a review is made in this thesis to how the impurities contained in the most important raw materials, effect the safety of the cosmetics product and from where these impurities come to the raw materials. Also the goal of this thesis is to find out and define, by the help of literature and classification methods, possible limit values for the most commonly seen impurities.

To reach the goals of this thesis, an Excel data base that contained the used raw materials, was made. In this data base the raw materials were sorted by their product numbers and values of impurities were searched for every raw material from their product documentations. These values were saved to the data base. Calculator, that was made basing on this data base, can retrieve the needed impurity values using the product numbers and calculate the impurity values that are present in the finalized cosmetic product. Calculator gives the final result of this evaluation by calculating the exposure for different impurities that 60 kg person will get in a day when using a cosmetic product.

For assessing the safe limit values, Toxtree-program and Cramer classification scheme were used. Limit values and their assessing methods can be based to the regulations and thus fully justified because to get those limit values SCCS recommended methods were used.

The impurities that were present in the exemplary recipes, were defined with the calculating tool and three impurities or impurity groups could be picked for closer review. These impurities were: 1,4-dioxane, 3-aminopropanol and heavy metals.

Key words: impurities, cosmetics, legislation, cramer, classification, excel, calculator, toxtree, 1,4-dioxane, 3-aminopropanol, heavy metals.

SISÄLLYS

| | | |
|---|---|----|
| 1 | JOHDANTO..... | 5 |
| 2 | KOSMETIIKKALAINSÄÄDÄNTÖ..... | 6 |
| | 2.1 Lainsäädäntö | 6 |
| | 2.2 Valvonta..... | 6 |
| | 2.3 Henkilöroolit..... | 7 |
| | 2.4 Asetuksen tarkoitus ja aikataulu | 8 |
| | 2.5 Tuoteturvallisuuden arviointi..... | 10 |
| | 2.6 Kosmeettisen valmisteen tuotetiedot | 12 |
| | 2.7 Kosmeettisen tuotteen epäpuhtaudet | 13 |
| 3 | EPÄPUHTAUDET JA NIIDEN RAJA-ARVOT | 15 |
| | 3.1 Cramer-luokitusjärjestelmä..... | 16 |
| | 3.2 Raja-arvot..... | 19 |
| | 3.3 Toxtree-ohjelmisto..... | 20 |
| 4 | EPÄPUHTAUSLASKURI..... | 26 |
| | 4.1 Epäpuhtauslaskuri valmiille tuotteelle..... | 26 |
| | 4.2 Tietokanta | 26 |
| | 4.3 Laskimen formulointialue sekä välitulokset | 28 |
| | 4.4 Laskimen tulosalue | 36 |
| | 4.5 Laskimen käyttöohjeet ja päivittäminen | 41 |
| 5 | KIINNOSTAVAT EPÄPUHTAUDET ESIMERKKIRESEPTEISTÄ..... | 43 |
| | 5.1 Kriteerit epäpuhtauksien tarkasteluun valinnalle..... | 43 |
| | 5.2 1,4-dioksaani..... | 43 |
| | 5.2.1 Kemiallinen koostumus ja luokitus..... | 43 |
| | 5.2.2 Vaikutukset terveyteen..... | 44 |
| | 5.2.3 Esiintyminen kosmetiikassa | 45 |
| | 5.3 3-aminopropanoli..... | 45 |
| | 5.3.1 Kemiallinen koostumus ja luokitus..... | 45 |
| | 5.3.2 Vaikutukset terveyteen..... | 46 |
| | 5.3.3 Esiintyminen kosmetiikassa | 46 |
| | 5.4 Raskasmetallit..... | 46 |
| | 5.4.1 Kemiallinen koostumus ja luokitus..... | 46 |
| | 5.4.2 Vaikutukset terveyteen..... | 47 |
| | 5.4.3 Esiintyminen kosmetiikassa | 50 |
| 6 | POHDINTA..... | 51 |
| | LÄHTEET | 53 |

1 JOHDANTO

Opinnäytetyöni tarkoituksena on laatia laskentatyökalu ja selvitys Berner Oy:lle valmiiden kosmetiikkatuotteiden epäpuhtauksista, mikä liittyy Euroopan kosmetiikkalainsäädäntöön ja kosmetiikkatuotteiden turvallisuuden arviointiin. Työn tärkeimmäksi näkökulmaksi turvallisuusarviointiin on otettu raaka-aineiden epäpuhtaudet ja niiden määrät. Työhön sisältyy myös katsaus lainsäädäntöön: mitä siihen sisältyy, miksi se on laadittu ja miten se vaikuttaa kosmetiikkatuotteisiin Euroopan alueella.

Työn tärkeimpänä tavoitteena on laatia Excel-pohjainen arviointityökalu siihen, onko tietty formuloitava resepti järkevä toteuttaa siinä esiintyvien epäpuhtauksien takia vai nousevatko raaka-aineista kumuloituvat epäpuhtausmäärät yli mahdollisten aikaisemmin määriteltyjen raja-arvojen.

Työssä keskitytään tarkemmin tärkeimmissä raaka-aineissa ja raaka-aineryhmissä esiintyvien epäpuhtauksien vaikutukseen valmiin tuotteen turvallisuusarviointiin ja siihen, mistä nämä epäpuhtaudet tulevat raaka-aineisiin. Opinnäytteen tarkoituksena on myös tutkia ja selvittää kirjallisuuden ja erilaisten luokitusmenetelmien avulla sopivia raja-arvoja tärkeimmille epäpuhtauksille. Kirjallisuuslähteinä tässä käytetään esimerkiksi SCCS:n eli Scientific Committee on Consumer Safety antamia lausuntoja ja suosituksia.

Euroopan kosmetiikkalaki itsessään ei määrittele mitään raja-arvoja epäpuhtauksille, vaikka se velvoittaa ottamaan huomioon turvallisuusarvioinnissa myös epäpuhtaudet. Työn tavoitteena on helpottaa tuoteturvallisuuden arviointia epäpuhtauksien osalta ja ottaa luotu laskentatyökalu tuotekehityskemistien käyttöön arvioitaessa Berner Oy:n kosmeettisten tuotteiden tuoteturvallisuutta.

2 KOSMETIIKKALAINSÄÄDÄNTÖ

2.1 Lainsäädäntö

Kosmetiikkalainsäädäntö määrittelee sisällään sen, minkälaisia tuotteita pidetään kosmetiikkana ja täten minkälaisia tuotteita lainsäädäntö koskee. Voimassa oleva Euroopan Unionin kosmetiikka-asetus määrittelee kosmeettisen valmisteen olevan seuraavanlainen:

Ainetta tai seosta, joka on tarkoitettu olemaan kosketuksissa ihmiskehon ulkoisten osien kanssa (iho, hiukset ja ihokarvat, kynnet, huulet ja ulkoiset sukupuolielimet) tai hampaiden ja suuontelon limakalvojen kanssa, tarkoituksena yksinomaan tai pääasiassa näiden osien puhdistaminen, tuoksun muuttaminen, niiden ulkonäön muuttaminen, niiden suojaaminen tai pitäminen hyvässä kunnossa tai hajujen poistaminen.” (1223/2009.)

Suomen omaan lakiin kosmeettisista valmisteista tämä sanamuoto on siirtynyt sanasta sanaan samanlaisena (2005/22). Kosmetiikkalaki koskee kaikkia EU:n jäsenvaltioita tasapuolisesti, sillä se on annettu asetuksena ja se on yleisesti velvoittava. Asetusta on sovellettava välittömästi kaikissa jäsenvaltioissa sen astuttua voimaan, eikä kansallisten viranomaisten tarvitse sitä erikseen panna täytäntöön. Sitä sovelletaan kuten kansallista lainsäädäntöä. (Euroopan komissio 2011.)

Lainsäädäntö vaatii, että elinkeinonharjoittajan on varmistettava olosuhteiden vaatiman huolellisuuden ja ammattitaidon edellyttämällä tavalla, että heidän tuotteensa ei aiheuta normaaleissa tai kohtuudella ennakoitavissa olosuhteissa vaaraa ihmisen terveydelle. Tähän pyritään siten, että otetaan huomioon erityisesti tuotteen ulkoasu ja esillepano, markkinointi, mahdolliset käyttöohjeet sekä muut tuotteesta annetut ohjeet ja tiedot, kun arvioidaan tuotteen turvallisuutta käyttöön. (2005/22.) (1223/2009.)

2.2 Valvonta

Lain valvonta on toteutettu siten, että elinkeinonharjoittaja itse pitää huolen tuotteensa turvallisuudesta ja testauksesta. Tätä kutsutaan markkinavalvonnaksi tai ”In-market kontrolliksi”. Tällöin kaikki lakia noudattavat tuottajat ja toimijat pystyvät tuomaan heti tuotteensa markkinoille ilman erillisiä viranomaisten suorittamia ennakkotarkastuksia.

Vain ne, jotka rikkovat käytäntöjä, joutuvat tekemisiin lakia valvovien viranomaisten kanssa. Lain noudattamiseen kannustaa myös se, että viranomaiset ja muut toimijat tai tuottajat voivat milloin tahansa testata yrityksen jo markkinoilla olevia tuotteita ostamalla myynnissä olevia tuotteita kaupasta ja tarkastamalla niitä. Tämä estää sen, että epärehellinen toimija toimittaisi ennakkotarkastukseen erilaisen erän kuin on myyntiin tarkoitettu erä. (Renner 2011, 5.)

Tällaisella lain valvonnalla on pyritty siirtämään enemmän vastuuta yrityksille heidän omista tuotteistaan ja siitä, että tuotteet ovat turvallisia. Näin saadaan vapautettua resursseja viranomaisilta etsimään lainvastaisia tuotteita kaikkien tuotteiden tarkistamisen sijaan. Kuluttajan kannalta toinen hyvä etu tällä ”In-market kontrollilla” on tuoteturvallisuuden lisäksi se, että yrityksille ei koidu tuoteturvallisuuden noudattamisesta suoria kuluja. Toisin on, jos tehtäisiin ennakkotarkastuksia tuotteille, sillä tällainen järjestelmä tulisi yrityksille kalliiksi ja maksut siirtyisivät suoraan kuluttajahintoihin. (Renner 2011, 5.)

2.3 Henkilöroolit

Viranomaisille tästä valvonnasta on vastuussa yrityksen vastuhenkilö, joka voi olla joko luonnollinen tai oikeushenkilö. Vastuhenkilö toimii myös yhteyshenkilönä viranomaisten suuntaan. Vastuhenkilön toimiin kuuluu, että EU-markkinoille saatettava kosmeettinen valmiste on turvallinen ihmisille, osoittaa tarvittaessa markkinoille saatetun tuotteen olevan kosmetiikka-asetuksen mukainen ja vastata turvallisuuden arvioijan pätevydestä. Vastuhenkilön tulee myös ylläpitää tuotetietoja eli varmistaa turvallisuusarvioinnin saatavuus sekä siihen liittyvien tietojen löytyminen tuotetiedoista ja huolehtia kosmeettisen valmisteen tietojen saatavuudesta mikäli valvovat viranomaiset näitä tiedustelevat. Tiedusteluihin tulee pyrkiä vastaamaan kohtuullisessa ajassa ja täksi aikamääreeksi Teknokemian Yhdistys ry:n toimitusjohtaja Sari Karjomaa ehdottaa pitämässään seminaarissa 72 tuntia. Käytännössä tämä vaatimus edellyttää, että pakkausmerkinnöissä tulee olla osoite, josta tuotetiedot ovat saatavilla sähköisesti tai muussa muodossa. Vastuhenkilö ylläpitää tuotetietoja eli säilyttää ja päivittää turvallisuusarvioinnin ja siihen liittyvät tiedot tuotetiedoissa, osana kosmeettisen valmisteen turvallisuus selvitystä liittyen kosmeettiseen valmisteeseen. (Karjomaa 2012, 7, 10.) (1223/2009.)

Varsinaisen työn markkinoille saatettavan tuotteen turvallisuuden arvioinnissa tekee turvallisuuden arvioija, jonka tulee olla luonnollinen henkilö. Turvallisuuden arvioijan tulee olla todistettavasti pätevä suorittamaan tätä tehtävää. Pätevyyden osoittamiseen ja hankkimiseen tarvitaan farmasian, toksikologian, lääketieteen tai vastaavan tieteenalan teoreettisten ja käytännönopintojen tutkintotodistus. Pätevyudeksi hyväksytään myös muita asiakirjoja, jotka osoittavat henkilön muodollisesti päteväksi suorittamaan tehtävää. Pätevyyden osoittamiseen käytetyn dokumentin tulee olla myönnetty korkea-asteen opinto-ohjelman tai jäsenvaltion tunnustaman kurssin suorittamisen pohjalta, mikäli kurssi on vastaava vaatimuksiltaan. Turvallisuuden arvioija kerää kaiken tarvittavan tiedon, jotta turvallisuusarviointi voitaisiin suorittaa ja dokumentoida. Hän tekee myös yhteistyötä vastuuhenkilön kanssa ja varmistaa osaltaan, että valmis turvallisuusarviointi on helposti viranomaisten saatavilla ja ajantasainen. (Karjomaa 2012, 8, 11.) (1223/2009.)

Kosmetiikka-asetuksen mukaan kosmeettisen valmisteen jakelijalla on oma tehtävänsä tuotteen valvonnassa. Jakelija vastaa siitä, että tuote on vielä kuljetusten ja varastoinnin jälkeenkin tuoteturvallisuudeltaan laillinen. Jakelija myös omalta osaltaan tekee yhteistyötä toimivaltaisen viranomaisen kanssa, jotta kosmetiikka-asetuksen vaatimuksen täytyisivät. Jakelijan tulee varmistaa, että tuotteen merkinnät ovat kunnossa, tuotetiedot löytyvät kohdemaan kielellä ja tuotteen säilyvyysaika ei ole umpeutunut. Mikäli jakelija katsoo, että kaikki tuotteelle kosmetiikka-asetuksen asettamat vaatimukset eivät täyty, ei tuotetta saa saattaa markkinoille. Tuotteen jo ollessa markkinoilla on jakelijan varmistettava, että tuotteelle tehdään tarvittavat toimenpiteet joko sen saattamiseksi asetuksen mukaiseksi tai markkinoilta poistamiseksi. (Karjomaa 2012, 12.) (1223/2009.)

2.4 Asetuksen tarkoitus ja aikataulu

Tärkeimpänä tavoitteena asetuksella on taata kosmeettisten valmisteiden turvallisuus ihmisten käyttöön. Kuten edellä on jo kerrottu, on tähän pyritty asetuksessa siirtämällä vastuu tuotevalvonnasta itse yrityksille. Tämä poistaa viranomaiset vastuusta mahdollisissa ongelmatilanteissa ja saattaa tuotteen markkinoille saattaneen yrityksen vastuuseen ongelmista, esimerkiksi tuotteessa esiintyvien ongelmien, kuten puutteellisen turvallisuuden, pakkauksen tai etiketöinnin takia. Jos selviää, että kosmetiikka-asetusta ei ole noudatettu, ongelmista vastaa vastuuhenkilö ja vastuuhenkilölle määrättävät rangaistukset vaihtelevat rikkeen mukaisesti. (Renner 2011, 4.)

Asetus myös pyrkii siihen, että tuotteiden markkinoille saattaminen olisi mahdollisimman helppoa ja yritysten kannalta kustannustehokasta. Tähän käytettäviä keinoja ovat ennakkotarkastusten puuttuminen ja markkinoilla tapahtuvan kontrollin käyttäminen. (Renner 2011, 5.)

Kosmetiikka-asetuksen käyttöönotossa noudatetaan seuraavassa taulukossa esitettyä aikataulua (Kosmetiikka-asetuksen aikataulu)

TAULUKKO 1. Kosmetiikka-asetuksen aikataulu

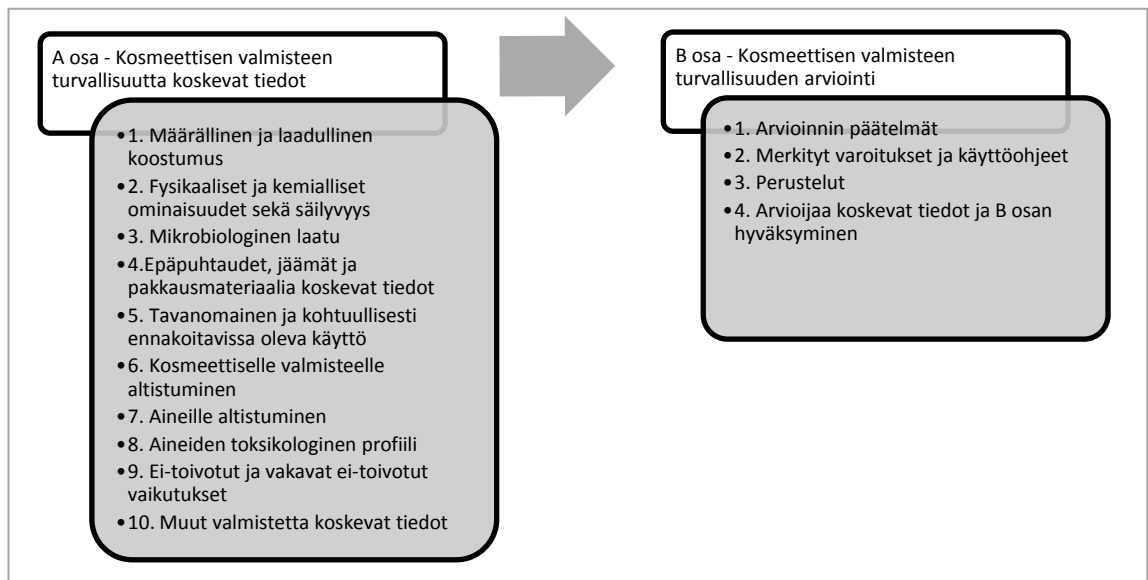
| Kosmetiikka-asetuksen aikataulu | |
|---|-----------------------|
| Menettely | Aikataulu |
| Kosmetiikka-asetus voimaan. | 11.1.2010 |
| Kosmetiikan ilmoittaminen kansallisesti kosmetiikkadirektiivin mukaan. | 11.1.2010 – 11.1.2012 |
| Ilmoittaminen komission tietokantaan mahdolliseksi uusille ja olemassa oleville tuotteille. Korvaa kansallisen ilmoituksen. | 11.1.2012 – 11.7.2013 |
| Olemassa oleville tuotteille on oltava tehtynä tuoteturvallisuusselvitys ja uusille tuotteille tehdään aina ennen markkinoille saattamista. Markkinoilla olevat tuotteet oltava ilmoitettuna tietokantaan, uudet ilmoitetaan tietokantaan sekä jakelijan ilmoitettava käänöksistä ja tuotteen saattamisesta uudelleen markkinoille. | 11.7.2013 – |

Kuten taulukosta nähdään, on kosmetiikka-asetus astunut voimaan vuonna 2010 ja siirtymäaikaa on ollut vuoden 2013 heinäkuuhun asti. Tämän siirtymäajan puitteissa on yritysten tullut laatia kaikille olemassa oleville tuotteilleen, jotka kuuluvat tämän asetuksen piiriin, uuden asetuksen mukaiset tuotetiedot tuoteturvallisuusarvioineen ja ilmoittaa tuotteet komission tietokantaan. Jatkossa formuloitaessa uusia tuotteita, tulee ne ilmoittaa komission tietokantaan ja niille tulee tehdä asetuksen mukainen turvallisuus selvitys, ennen kuin tuote saatetaan markkinoille. (1223/2009.)

Kosmetiikka-asetuksen säätämisen jälkeen on voitu unionin alueella luopua kansallisista kosmetiikkaa käsittelevistä lainsäädännöistä ja näin yhtenäistää kosmetiikan pelisääntöjä EU:n alueella. Kosmetiikka-asetuksen jälkeisessä unionissa on ideaalisesti kaikilla toimijoilla yhtenäiset säännöt ja mahdollisuudet kehittää omia tuotteitaan. (Renner 2011, 5.)

2.5 Tuoteturvallisuuden arviointi

Asetus 1223/2009 määrittelee kosmeettiselta tuotteelta vaadittavat tuotetiedot ja yksi niistä on tuotteelle tehtävä turvallisuuden arviointi. Turvallisuuden arvioinnin vaatimukset on esitetty asetuksen liitteessä 1 ja se pitää sisällään seuraavassa kuviossa esitetyt kohdat (KUVIO 1).



KUVIO 1. Kosmeettisen valmisteeseen turvallisuusselvitys (1223/2009, liite I pohjalta)

Edellä olevan kuvion esittämällä tavalla tulee turvallisuusselvityksen A osassa ensimmäisessä kohdassa esittää kosmeettisen valmisteeseen laadullinen ja määrällinen koostumus. Tähän kuuluu myös aineiden kemiallinen tunnistus ja käyttötarkoitus. Mikäli on mahdollista, tulee käyttää kemiallisena tunnistena kemiallista nimeä, INCI-, CAS-, EINEICS/ELINCS-tietuetta. Hajusteille ja aromiaineille tulee esittää ainesosan nimi, koodinumero ja toimittajan tunnistetiedot.

Toisessa kohdassa käsitellään kosmeettisen valmisteeseen fysikaalis-kemialliset ominaisuudet ja säilyvyys tavanomaisissa ja kohtuullisesti ennakoitavissa varastointiolosuhteissa.

Kolmannessa kohdassa turvallisuusselvityksessä otetaan kantaa valmisteeseen mikrobiologiseen laatuun eli bakteriologiseen säilyvyyteen. Erityistä tarkkuutta tulee noudattaa arvioitaessa tuotteita joita tullaan käyttämään silmien ympärillä, limakalvoilla tai rikkoontuneella iholla. Mikäli valmiste on tarkoitettu käytettäväksi alle kolmivuotiaiden lasten, vanhusten tai vakavia immuunireaktioita saavien henkilöiden hoidossa, tulee tuotteen kohdalla toimia erityisellä huolella arvioitaessa mikrobiologista laatua.

Selvityksen neljännessä kappaleessa käsitellään tässä työssä tärkeimmässä roolissa olleita epäpuhtauksia, jäämiä ja pakkausmateriaaleja. Tällä tähdätään siihen, että kosmeettiset aineet ja seokset ovat mahdollisimman puhtaita. Mikäli valmisteessa esiintyy kiellettyjen aineiden jäämiä, tulee turvallisuuden arvioijan esittää todisteet siitä miksi jäämiä on teknisesti mahdotonta välttää. Pakkausmateriaalista käsitellään sen puhtaus ja säilyvyys sekä muut olennaiset tiedot.

Tavanomainen ja kohtuullisesti ennakoitavissa oleva käyttö käsitellään kappaleessa viisi. Tavanomainen käyttö on oltava perusteltavissa, kun otetaan huomioon tuotemerkintöihin sisältyvät varoitukset ja muut selvitykset.

Kuudes kappale käsittelee turvallisuusselvityksessä kosmeettiselle valmisteelle altistumista. Kappaleessa käsiteltävät kohdat ovat käyttöalue tai -alueet, käyttöpinta-alan laajuus, käyttömäärä, käytön kesto ja tiheys, tavanomainen ja kohtuullisesti ennakoitavissa oleva altistumistapa sekä kohderyhmät ja mikäli on mahdollista, että jokin yksittäinen väestöryhmä altistuu tuotteelle, on tämäkin otettava huomioon. Kun lasketaan altistumista, tulee ottaa huomioon myös valmisteen mahdolliset toksikologiset vaatimukset ja kiinnitettävä huomiota muihinkin altistumisreitteihin kuin suoriin. Erityistä huomiota tulee kiinnittää hiukkaskoosta johtuvan altistumisen arviointiin. Nämä kohdassa kuusi läpi käytävät asiat esitetään asetuksen viidennessä jaksossa.

Tuoteturvallisuuden arvioijan tulee käydä läpi kappaleessa seitsemän, asetuksen jaksossa kuusi esitetyllä tarkkuudella, altistuminen kosmeettisen valmisteen sisältämille aineille toksikologisesti tutkittavien ominaisuuksien osalta.

Kaikkien kosmeettisen valmisteen sisältämien aineiden toksikologinen profiili käsitellään kappaleessa kahdeksan. Erityistä tulee painottaa paikallisen toksisuuden kuten silmä- ja ihoärsytyksen arviointia, ihon herkistymistä ja UV-absorptioon aiheuttamaa toksisuutta. Kaikki merkittävät toksikologiset absorptiotavat ja systeemiset vaikutukset on otettava huomioon ja näille laskettava turvallisuuskerroin turvallisen käytön perusteella. Mikäli tätä ei tehdä, on se perusteltava perusteellisesti. Hiukkaskoon ja nanomateriaalien, käytettyjen aineiden ja raaka-aineiden epäpuhtauksien ja aineiden keskinäisen vaikutuksen aiheuttama toksikologisen profiilin muuttuminen tulee myös ottaa huomioon. Arvioinnissa tehtävä interpolointi on perusteltava selkeästi ja arvioinnin tietolähteet on merkittävä selkeästi näkyviin.

Kappaleessa yhdeksän käydään läpi tilastotietoja myöden kyseessä olevan kosmeettisen valmisteen aiheuttamat tai sen muiden tuotteiden kanssa aiheuttamat ei-toivotut ja vakavat ei-toivotut vaikutukset.

Viimeisessä A osan kappaleessa eli kappaleessa kymmenen esitetään muut valmistetta koskevat tiedot. Näihin kuuluvat tiedot siitä onko tehty vapaaehtoisilla ihmisillä tutkimuksia ja muiden tuotteeseen liittyvien alojen tekemien riskinarviointien vahvistetut ja perustellut tulokset. (1223/2009.)

Osassa B käydään läpi A-osassa selvitetty tiedot ja tehdään päätelmät niiden pohjalta sekä hyväksytään päätelmät ja löydökset. Kappaleessa 1 laaditaan arvioinnin päätelmät ja tämä tehdään asetuksen kolmanteen artiklaan liittyvällä toteamuksella.

Toisessa kappaleessa esitetään asetuksen 19 artiklan 1 kohdan d alakohdan mukaisesti toteamus, jossa käsitellään tarvetta merkitä varoituksia ja käyttöohjeita valmisteelle.

Perustelut, miten on päädytty A osan pohjalta B osan kappaleessa yksi esitettyyn toteamukseen, esitetään kolmannessa kappaleessa. Mikäli tarvitaan, arvioidaan valmisteelle turvamarginaalit ja käsitellään niiden merkitystä. Erityisarviointi tulee tehdä, kun valmistetta tullaan käyttämään alle kolmivuotiailla lapsilla tai pelkästään ulkoisen intiimihygienian hoidossa. Valmisteen sisältämien aineiden keskinäiset vaikutukset tulee myös arvioida ja tuotteen säilyvyyden aiheuttamat vaikutukset tuotteen turvallisuuteen on otettava huomioon. Mikäli erilaisia toksikologisia profiileja otetaan huomioon tai jätetään huomiotta, on tämä ratkaisu perusteltava kunnolla.

Tuoteturvallisuuden arvioinnin lopuksi käsitellään B osan kappaleessa neljä arvioijaa koskevat tiedot ja hyväksytään B osassa esitetyt tiedot. Arvioijan tiedoista esitetään hänen nimensä ja osoitteensa sekä todistus henkilön pätevyydestä suorittaa kosmeettisen valmisteen tuoteturvallisuuden arviointi. Tuoteturvallisuuden arviointi hyväksytään arvioijan päivätyllä allekirjoituksella. (1223/2009.)

2.6 Kosmeettisen valmisteen tuotetiedot

Kosmeettisen valmisteen tuotetietojen sisällys on määrätty asetuksessa 1223/2009 kosmeettisista valmisteista. Nämä vaatimukset ovat esitetty alla olevassa taulukossa TAULUKKO 2.

| Tuotetietojen sisältö kuten EY 1223/2009 vaatii | |
|--|--|
| Kuvaus valmisteen koostumuksesta sillä tarkkuudella, että tuotetiedot sitoutuvat selkeästi kyseiseen tuotteeseen. | Kuvaus tuotteen valmistuksesta ja lausunto EY 1223/2009, 8 artiklan mukaisesta hyvästä tuotantotavasta ja sen noudattamisesta. |
| Tieto siitä, että tuotteelle on laadittu EY 1223/2009, 10 artiklan kohdan 1 mukainen kosmeettisen valmisteen turvallisuusselvitys. | Mikäli valmisteen vaikutusten kannalta on perusteltua, esitetään todisteet valmisteen väitetystä vaikutuksesta. |
| Tiedot kaikista eläinkokeista, jotka liittyvät kosmeettiseen tuotteeseen. Tähän kuuluvat valmistajan, sen edustajien ja tavarantoimittajien teettämät tutkimukset, jotka on tehty tutkittaessa valmisteen tai sen ainesosien turvallisuutta tai niiden kehittämisprosessin aikana. Myös kolmansien maiden lainsäädännön vaatimusten täyttämiseksi tehdyt kokeet tulee mainita. | |

Kuten taulukosta voidaan nähdä, tulee valmisteen koostumus eritellä sillä tarkkuudella, että tuotetiedot sitoutuvat selkeästi kosmeettiseen valmisteeseen.

Tuotetiedoissa tulee esittää myös tieto asetuksessa määritellystä turvallisuusselvityksestä ja sen suorittamisesta.

Tuotetiedoissa tulee ottaa kantaa myös tuotteen valmistuksessa käytettyihin menetelmiin ja siihen onko noudatettu hyvää tuotantotapaa.

Kun kyseessä on esim. terveys- tai muuten erityisvaikutteinen tuote, tulee esittää todisteet ja perustelut näille väitetyille vaikutuksille.

Asetuksessa myös vaaditaan esittämään tiedot eläinkokeista, jotka liittyvät kyseessä olevaan kosmeettiseen valmistamiseen. Näistä tiedoista tulee käydä ilmi kaikkien tuotteen valmistukseen liittyvien osapuolien eli valmistajan, sen edustajien ja tavarantoimittajien suorittamat eläinkokeet, jotka on tehty tuotteille tai raaka-aineille kehitettäessä niitä tai arvioitaessa niiden turvallisuutta. Mikäli on jouduttu tekemään eläinkokeita kolmansien maiden lainsäädännön vaatimuksesta, on nekin ilmoitettava tuotetiedoissa. (1223/2009.)

2.7 Kosmeettisen tuotteen epäpuhtaudet

Yhtenä asetuksessa määritellyn tuoteturvallisuuden arvioinnin vaatimuksena on selvittää lopputuotteen sisältämät epäpuhtaudet ja niiden määrät. Tarkempaa ohjeistusta tälle ei laissa kuitenkaan ole annettu vaan tulee vain käsitellä aineen ja seoksen puhtaus, epäpuhtauksien teknisesti mahdoton vältettävyyys ja pakkausmateriaalin laatu sekä puhtaus. (1223/2009).

ICCR ja SCCP ovat antaneet epäpuhtausista raportin, jossa toteavat saman asian kuin lakikin eli että suurimmalle osaa epäpuhtauksia ei ole määritelty raja-arvoja. Tällöin epäpuhtauksien turvalliset raja-arvot ovat valmistajien vastuulla tai sen henkilön vastuulla, joka saattaa valmisteen markkinoille. (ICCR 2011.) (SCCP/1171/08.)

Tätä tarkoitusta varten luotiin Berner Oy:lle laskentatyökalu, jonka avulla pystytään laskemaan ja määrittelemään epäpuhtaudet kosmetiikkavalmisteissa. Näin mahdollistetaan epäpuhtauksien käsittely tuoteturvallisuuden arvioinnissa sekä pystytään dokumentoimaan tämä prosessi.

3 EPÄPUHTAUDET JA NIIDEN RAJA-ARVOT

Edellä kuvatun takia haluttiin Berner Oy:llä työkaluja tuoteturvallisuuden arviointiin ja nimenomaan epäpuhtauksien tutkimiseen valmiissa kosmetiikkatuotteessa. Tähän tarkoitukseen loin Excel-taulukkotietokannan, jolla voidaan laskea kumulatiiviset arvot epäpuhtauksille ja nähdään suoraan kuinka paljon keskiarvokäyttäjä altistuu päivässä käyttäessään tuotteita.

Työn yhtenä tärkeänä tavoitteena oli selvittää millaisia raja-arvoja voitaisiin pitää turvallisina millekin epäpuhtaudelle. Työn edetessä löytyi Scientific Committee on Consumer Safety (SCCS) -komitean final opinion/report hyväksymä Cramerin TTC (Threshold of Toxicological Concern) perustuva luokitusjärjestelmä ja tapa millä epäpuhtauksille voidaan tätä luokitusjärjestelmää käyttää suhteellisen helposti tietyin rajoituksin. Cramer-järjestelmä jaetaan kolmeen kategoriaan aineen ihmiselle vaarallisuuden mukaan, mutta näistä kategorioista käytetään kosmeettisille valmisteille vain luokkia I ja III. Tämä johtuu siitä, että Cramer-järjestelmä ei osaa ottaa kaikkia nykytiedon mukaan tarvittavia asioita huomioon määritellessään aineen luokkaa. SCCS esittääkin, että myös luokan II aineet käsitellään luokan III aineina. Täten on turvallisinta ja selkeintä käyttää kaikille aineille luokkaa kolme ja sen raja-arvoja. Toksisuudeltaan matalia aineita (I-luokka) ei tarvitse käsitellä turvallisuusselvityksessä luokan III mukaisesti, mutta näille käytetään silti luokan III raja-arvoja selkeyden vuoksi. (SCCP/1171/08.)

SCCS on Euroopan komission alainen tieteellinen komitea, joka tarjoaa tieteellisesti tutkitun mielipiteen terveydelle ja turvallisuudelle koituvista riskeistä. Komitea keskittyy muun muassa kosmetiikkaan ja sen raaka-aineisiin sekä leluihin ja tekstiileihin. Komitea ottaa kantaa myös palveluihin kuten tatuointiin ja keuhkokuumeeseen. ”. (European Commission, Scientific Committees, SCCS.)

Raja-arvot eri epäpuhtauksille saatiin luokittelemalla epäpuhtaudet Cramer-luokituksen avulla. Tähän käytettiin Toxtree-ohjelmistoa, joka on SCCS:n hyväksymä ohjelmisto ja SCCS:n avustuksella tehty. Cramer-luokitus käydään läpi seuraavassa luvussa 3 tarkemmin, samoin kuin Toxtree-ohjelman käyttö. Varsinaisen Excel-laskentajärjestelmän luominen kaikkine välivaiheineen käydään lävitse seikkaperäisesti luvussa 4.

Työn hyödyllisyys on varmasti hyvinkin suuri, jos ja kun saadaan raaka-aineiden epäpuhtauksille määriteltyä raja-arvoja. Tämä siitä syystä, että tällaisia arvoja tai edes suositusmääriä raaka-aineiden epäpuhtauksille ei ole varsinaisesti missään määritetty kosmetiikalle, vaan käytössä on lähinnä lääke- ja elintarviketeollisuuden sekä jokaisen yrityksen itsensä määrittelemät turvallisiksi katsomansa raja-arvot. Joillekin epäpuhtautena esiintyville aineille ja yhdisteille on määritetty valmiit raja-arvot, mutta nämä aineet ovat häviävän pieni osa kaikkien muiden epäpuhtauksien joukossa.

3.1 Cramer-luokitusjärjestelmä

Järjestelmä on saanut alkunsa vuonna 1977 G. M. Cramerin, R. A. Fordin ja R. L. Hallin tutkimusten pohjalta. Heidän tarkoituksenaan oli tuoda yksinkertaisempi malli kemikaalien turvallisuuden arviointiin. Mallin avulla käyttäjän ei tarvitsisi käydä läpi suurta määrää informaatiota liittyen tietyn kemikaalin turvallisuuteen tai vaarallisuuteen. Mallissa turvallisuuden arvioijan eli toksikologin henkilökohtainen kokemuksaan ei olisi ratkaisevassa osassa, sillä malliin sisältyisi tarvittavat tiedot ja täten pystyttäisiin saamaan turvallisuuden arvioinnista luotettavaa sekä läpinäkyvää. (Cramer, Ford & Hall 1977, 255.)

Cramer-järjestelmä on yksi tunnetuimmista työkaluista tehtäessä TTC eli Threshold of Toxicological Concern -arviota. TTC pyrkii määrittämään kemikaaleille raja-arvon, jolle on vielä turvallista ihmisen altistua. TTC:tä käytetään esimerkiksi arvioitaessa ruuan lisäaineiden sekä ruuan kanssa kosketuksiin joutuvien materiaalien turvallisuutta. (IHCP, Predictive Toxicology, Threshold of Toxicological Concern.)

Luokitusjärjestelmä toimii päätöspuu-mallilla (KUVIO 2). Kysymyksiin vastataan joko "kyllä" tai "ei". Jokainen kysymys johtaa seuraavaan kysymykseen tai luokituspäätöksen tekemiseen. Päätöspuu on jaettu haaroihin kemikaalien pääasiallisten koostumusten mukaan ja sitä voidaan käyttää kaikkien kehoon joutuvien strukturoitujen orgaanisten ja metallo-orgaanisten aineiden luokittelussa. Vastaukset päätöspuun kysymyksiin riippuvat suuresti kemikaalin rakenteen ominaisuuksista sekä siitä esiintyykö kemikaalia kehossa normaalisti tai ihmisravinnossa. Osa kysymyksistä on lajittelukysymyksiä eli niiden avulla päätetään mitä puun haaraa seurataan kemikaalia luokitellessa. (Cramer ym. 1977, 255.)

Järjestelmä sisältää kolme luokkaa ja luokat eroavat toisistaan riippuen siitä, kuinka vaarallisia aineet ihmiselle ovat. Nämä luokat on esitetty seuraavassa taulukossa (TAULUKKO 3).

TAULUKKO 3. Cramer-luokat (Cramer ym. 1977, 256. pohjalta)

| Cramer-luokka | |
|---------------|--|
| Luokka | Määritelmä |
| I | Sisältää kemikaaleja joiden rakenne ja niihin liittyvä data viittaa matalaan toksisuuteen. Yhdistettynä pieneen annoskokoan, on kemikaalin lisätutkimusten tarve erityisen pieni. Mikäli annoskoko on suuri, kasvaa myös tarve kemikaalin lisätutkimuksiin. |
| II | Tähän luokkaan kuuluvia kemikaaleja voidaan kutsua tietyllä tavalla "väliinpuotoajiksi". Nämä kemikaalit ovat selkeästi vaarallisempia kuin I-luokan kemikaalit, mutta eivät ole silti selkeästi toksisia tai niistä tiedetään suhteellisen paljon verrattuna III-luokan kemikaaleihin |
| III | Kemikaalit, jotka eivät anna aihetta olettaa niiden olevan turvallisia tai jotka ovat selvästi myrkyllisiä, kuuluvat tähän luokkaan. Tällöin kemikaali on tutkittava tarkasti ja perusteltava sen käytön turvallisuus tai miksi sen esiintymistä epäpuhtautena ei voi välttää. Lisätutkimusten tarpeellisuus kasvaa suhteessa annoskokoan. |

Edellä olevasta taulukosta voidaan nähdä, millaisia eroja näiden kolmen Cramer-luokan välille on määritelty. I-luokka on vaarattomin luokka ja ne ovat toksisuudeltaan matalia. Annoskoon kasvaessa yli määriteltyjen raja-arvojen, tulee toki aineen käyttö ja esiintyminen käsitellä turvallisuusselvityksessä. Luokkaan II luokitellaan aineet, jotka ovat vaarallisempia kuin I-luokan kemikaalit, mutta eivät silti selkeän toksisia tai niistä on olemassa enemmän dataa kuin III-luokan kemikaaleista. Nämä kemikaalit tulee käsitellä turvallisuusarviossa silti luokan kolme mukaan. Kolmanteen luokkaan luokitellaan kemikaalit ja aineet, jotka ovat selkeästi turvallisuudelle vaarallisia tai joita ei voida osoittaa vaarattomiksi. Aineen kuuluessa III-luokkaan, tulee sen käyttö tai esiintyminen tuotteessa perustella selkeästi sillä nämä voidaan rinnastaa kiellettyihin tai vaarallisiin kemikaaleihin ja niiden käyttö kosmetisessa valmisteissa tulee asetuksen 1223/2009 mukaan perustella asianmukaisesti. (1223/2009.)

Alkuperäisen Cramer-järjestelmän lisäksi on olemassa päivitetty versio, joka sisältää alkuperäisten 33 kysymyksen lisäksi kysymykset 40-44. Lisäkysymyksillä päästään luotettavampaan luokitustulokseen kysymyksestä riippuvissa tilanteissa. Kysymykset 40-41 sallivat ihmisissä luontaisesti esiintyvät fosfaatit, koska ilman näitä kysymyksiä suurin osa fosfaateista luokiteltaisiin III-luokkaan vaikka yli puolessa ihmisen yhdisteistä esiintyy negatiivisesti varautuneita fosfaatteja. Kysymyksen 42 avulla tunnistetaan

yhdisteillä yhdysviiva on yksinkertainen viiva ja terpeeneillä viiva koostuu pitkistä viivoista ja pisteistä. Alifaattiryhmä ilmaistaan puolestaan viivan yhdistämällä valkoisilla ympyröillä ja aromaattisilla yhdisteillä viiva on muodostettu viivan yhdistämistä, vuorottelevista valkoisista ja mustista ympyröistä. Alisykliset yhdisteet ilmaistaan pitkillä katkoviivoilla. (Cramer ym. 1977, 257.)

3.2 Raja-arvot

Kuten edellä jo todettiin, käytettiin lähestymistapana Cramer-luokkien raja-arvojen määrittämiseen TTC:tä. TTC tulee sanoista Threshold of Toxicological Concern ja tarkoittaa terminä turvallisen altistumisrajan määrittämistä, jonka alittuessa voidaan olettaa, että kemikaalista ei aiheudu vaaraa ihmisen terveydelle syötynä. TTC-lähestymistapa on tarkoitettu seulontatyökaluksi sellaisia kemikaaleja varten, joille ei ole olemassa toksisuusdataa tai jos toksisuusdataa ei ole pakko ilmoittaa. Tällaisia kemikaaleja ovat esimerkiksi metaboliitit eli aineenvaihduntatuotteet ja hajoamistuotteet. Alkuperäisesti TTC:tä käytettiin epäsuorien ruuan lisäaineiden ja ruuan makuaineiden arvioinnissa, mutta jälkeinpäin TTC:n käyttöä on tutkittu ja suositeltu käytettäväksi monilla eri säätelyalueilla. (Lapenna & Worth 2011, 1.)

Varsinaiset raja-arvot on määritetty Munron aineiston pohjalta. Munro tutki vuonna 1996 613 orgaanista kemikaalia, joista tiedettiin 2941 NOEL-arvoa. NOEL-arvolla tarkoitetaan termiä: No Observable Effect Level. NOEL-arvo kertoo siis kemikaalimäärän, jolle voi altistua ilman havaittavaa vaikutusta. NOEL-arvot eivät liittyneet kemikaalin karsinogeenisuuteen vaan ne oli saatu kemikaalien ei-kroonisuutta, kroonisuutta ja vaikutusta lisääntymiseen ja kehittymiseen käsittelevistä, rotille ja kaneille tehdyistä, toksisuustutkimuksista. Aineiston kemikaalit jaettiin luokkiin Cramer-järjestelmän mukaisesti ja tutkimuksen tekijät ottivat jokaisesta Cramer-luokasta NOEL-arvojen jakaumasta alimman viisi prosenttia. Nämä NOEL-arvot kerrottiin 60:llä, jotta päästiin yksiköstä [$\mu\text{g}/\text{kg}$ kehonpainoa/päivä] yksikköön [$\mu\text{g}/\text{henkilö}/\text{päivä}$]. Saadut tulokset jaettiin 100:lla varomarginaalin saamiseksi. Tältä pohjalta Munro ja hänen kumppaninsa päätyivät ehdottamaan Cramer-luokkien raja-arvoiksi ei-karsinogeenisille aineille taulukossa TAULUKKO 4 esitettyjä arvoja. (Lapenna & Worth 2011, 2.)

TAULUKKO 4. Cramer-raja-arvot

| Cramer-luokka | Raja-arvo [µg/person/day] |
|---------------|------------------------------|
| I | 1800 |
| II | 540 |
| III | 90 |

Edellä esitettyjen raja-arvojen lisäksi on tutkimuksissa päädytty ehdottamaan tiukempia raja-arvoja tietyille kemikaaliryhmille eli genotoksisille kemikaaleille 0,15 µg/person/päivä ja organofosfaattisille kemikaaleille 18 µg/person/päivä. Nämä raja-arvot tulee ottaa huomioon ennen kuin Munron ehdottamat arvot. (Lapenna & Worth 2011, 2.)

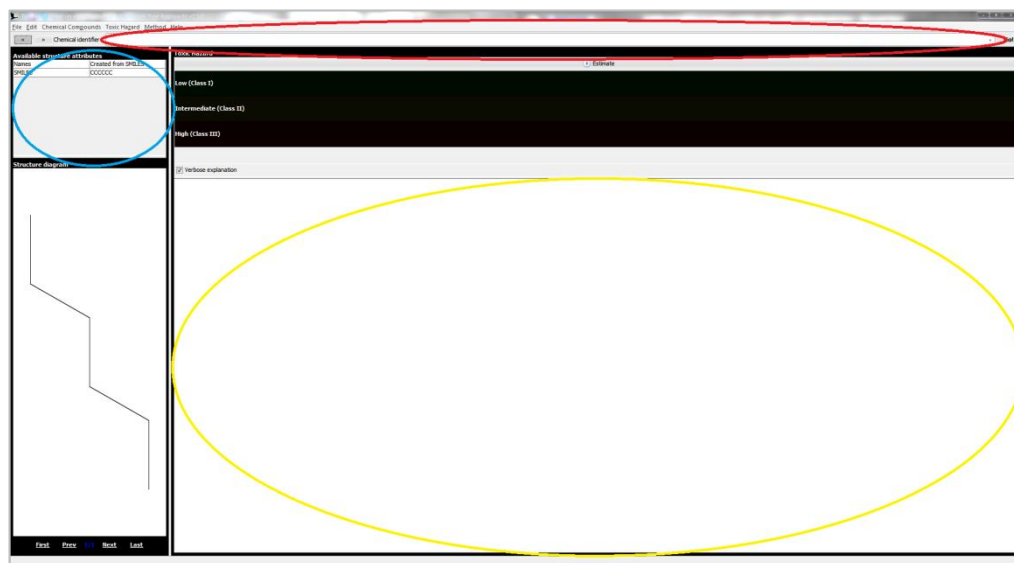
Tehdyssä epäpuhtauslaskurissa otettiin käyttöön Munron ehdottamista raja-arvoista III luokan raja-arvo 90 µg/person/day eli 1,5 µg/kg bw/day kaikkien epäpuhtauksien kohdalla. Tähän ratkaisuun päädyttiin SCCS:n suositusten pohjalta ja Gamze Atesin kanssa käydyn kirjeenvaihdon pohjalta. Hän työskentelee toksikologian laitoksella Vrijen yliopistolla tutkijana, (SCCP/1171/08.) (Ates 2012.)

3.3 Toxtree-ohjelmisto

Epäpuhtauksien luokittelu Cramer-järjestelmän mukaisesti suoritettiin käyttämällä apuna Toxtree-ohjelmistoa.

Toxtree-ohjelmisto kehitettiin helpottamaan luotettavan ja läpinäkyvän TTC-arvioinnin suorittamista. Ohjelmistolla voidaan arviointi suorittaa syöpävaarallisista ja ei-syöpävaarallisista kemikaaleista ja ei-syöpävaarallisten kemikaalien arviointiin ohjelmisto käyttää Cramer-luokittelua. Ohjelmiston kehitystyö tapahtui JRC:ssä. JRC on Euroopan komission tutkimusosasto, joka antaa riippumatonta tieteellistä ja teknistä tukea EU:n säädösten laadinnassa. Laitos työskentelee läheisesti EU:n lainsäädännön parissa, joka liittyy laitoksen toimialoihin, kuten maanviljelyyn, yrittämiseen, ympäristöön sekä terveyteen ja kuluttajan suojaan. (Lapenna & Worth 2011, 1.) (JRC FAQ 2008, What is the JRC.)

Ohjelman käyttö on yksinkertaista. Kun ohjelma avataan asentamisen jälkeen, on näkyvä kuviossa KUVIO 3 kuvatun kaltainen, lukuun ottamatta värillisiä korostuksia.



KUVIO 3. Toxtreen aloitusruutu

Punaisella ympyrällä merkattuun eli "Chemical identifier"-kenttään kirjoitetaan luokiteltava aine. Aine voidaan identifioida viidellä eri tavalla, jotta ohjelma tunnistaisi sen luokittelua varten: SMILES-koodilla, InChi:llä, IUPAC-nimellä, CAS- tai EINECS-numerolla. Internetistä löytyy monia ilmaisia tietopankkeja, joista voi hakea esimerkiksi SMILES-koodeja tai tunnistenumeroita aineen nimellä. Tällaisesta tietopankista esimerkkinä ChemSpider. Aineen määrittämisen jälkeen painetaan aineen tunnistamiseksi "GO"-näppäintä kentän oikealta puolelta tai ENTERIÄ.

Ohjelma tulostaa sinisen ympyrän merkitemään eli "Available structure attributes"-kenttään ohjelman tietämät tiedot aineesta. Näihin kuuluvat, esimerkiksi aineen nimi, SMILES-koodi, miten ohjelma on tunnistanut aineen, Cramer-luokitus luokittelemisen jälkeen sekä yhteenveto kysymyksistä ja vastauksista luokittelussa.

Sinisen kentän alla olevaan "Structure diagram"-kenttään ohjelmisto piirtää aineen rakenteen tunnistamisen onnistuttua.

Aineen luokitus aloitetaan painamalla "Estimate"-painiketta punaisen kentän alta. Luokittelun kulu ohjelma tulostaa keltaiseen kenttään. Tähän yhteenvetoon sisältyy kaikki kysymykset, joiden kautta on kuljettu päätöspuussa, jotta päästiin lopulliseen Cramer-luokkaan. Kielteisesti vastattujen kysymysten vastaus on merkitty punaisella ja myönteisesti vastattujen vihreällä. Painamalla "kiikari"-ikonia kysymyksen edessä, aukeaa kysymyksen selite, jossa kerrotaan tarkemmin mitä kysymys tarkoittaa.

Käyttäjä voi halutessaan katsoa koko päätöspuun rakenteen avaamalla päätöspuun. Tämä tehdään valitsemalla "Method"-valikosta "View decision tree". Tästä aukeaa nimenomaisen aineen seuraavassa kuviossa esitetty päätöspuu (KUVIO 4)

Decision node: Q2. Contains functional groups associated with enhanced toxicity

If 'NO' go to: Q.3

If 'YES' assign: High (Class III)

| Rule ID | Rule title |
|---------|--|
| 2 | Contains functional groups associated with enhanced toxicity |

Rule explanation

Does the substance contain any of the following functional groups: an aliphatic secondary amine or a salt thereof, cyano, N-nitroso, diazo, triazeno or quaternary nitrogen, except in any of the following forms: $>C=N+R_2$, $>C=N+H_2$ or the hydrochloride or sulphate salt of a primary or tertiary amine?

There are example molecules for each rule outcome. Select which one to display.

Yes branch No branch

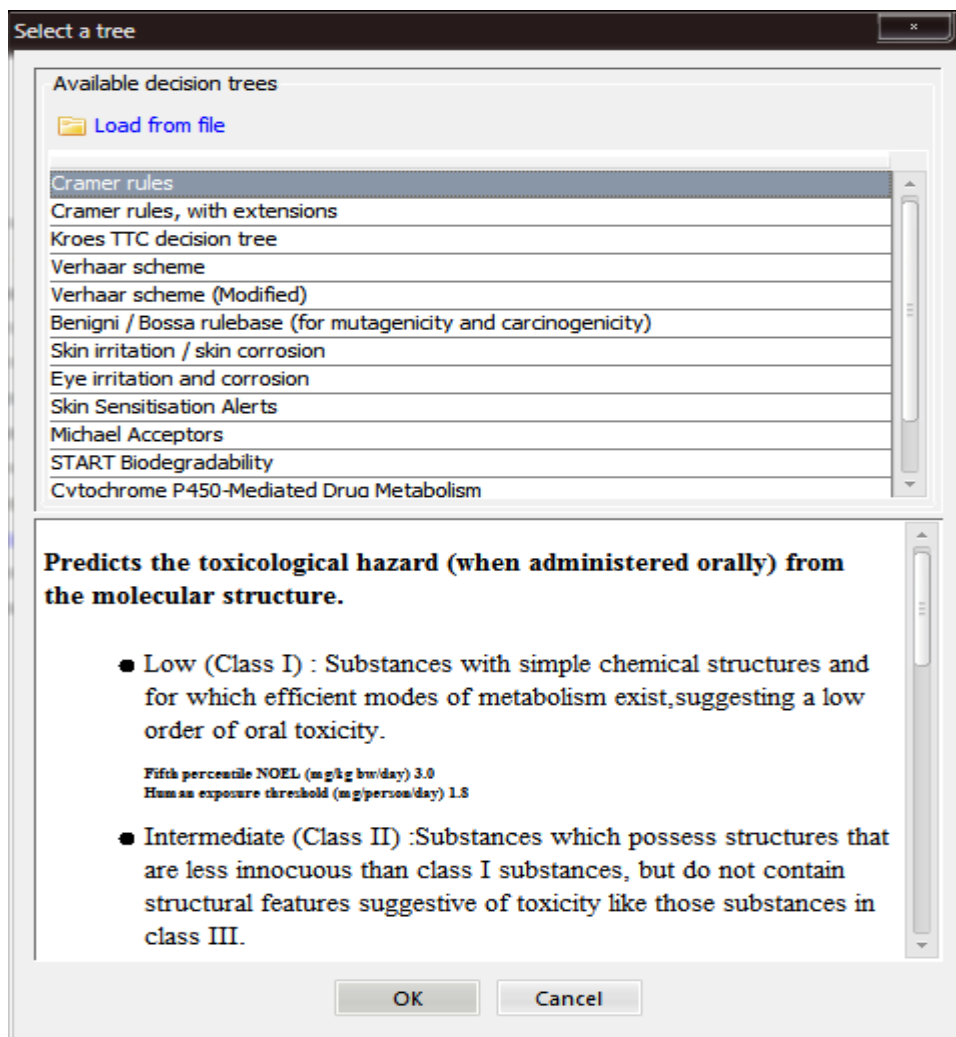
NC(=O)c1ccccc1

KUVIO 4. Päätöspuu

Päätöspuusta on kuviossa valittu kysymys 2. Ohjelma näyttää mihin kysymykseen tai luokituksen tulee siirtyä kummassakin vastauksessa ja esittää esimerkkimolekyylin sekä myönteiselle että kielteiselle vastaukselle. Samassa ikkunassa näkyy myös kokonaisuudessaan sääntö minkä pohjalta kysymykseen vastataan. Tämä ikkuna pysyy samana kaikilla aineilla, joten käyttäjän itse tulee valita aineeseen liittyvät kysymykset pystyäkseen seuraamaan päätöspuuta. Varsinainen aineen luokitus näytetään "Toxic hazard"-kentässä korostamalla luokan nimi.

Ohjelmassa voidaan valita muitakin luokittelu sääntöjä, jos halutaan luokittelu tehdä jonkun muun kuin oletuksena käytettävän Cramerin pohjalta. Näitä metodeja vaihdetaan valitsemalla "Method"-valikosta "Select a decision tree". Valinnasta aukeaa kuviossa KUVIO 5 esitetty valikko. Kuviossa näkyy mitä mahdollisia vaihtoehtoja Cramer-

järjestelmälle ohjelma sisältää. Valitsemalla metodin nimen, näyttää ohjelma lisätietoja sekä lähdetiedot.



KUVIO 5. Päätösmetodit

Kosmetiikkatuotteiden raaka-aineiden epäpuhtaudet ajettiin läpi Toxtree-ohjelmistosta käyttäen apuna SMILES-koodeja ja aineen englanninkielisiä nimiä. Metodina käytettiin Cramer-luokitusta. Esimerkkinä luokittelun kulusta otetaan 3-aminopropanol. Tälle aineelle ohjelmisto käy luokittelun aikana läpi seuraavassa esitetyt kysymykset (KUVIO 6).

| Toxic Hazard | | by Cramer rules |
|---|--|--|
| | | Estimate |
| Low (Class I) | | |
| Intermediate (Class II) | | |
| High (Class III) | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Verbose explanation | | |
| Cramer rules | | |
| <input type="checkbox"/> | Q1. Normal constituent of the body | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q2. Contains functional groups associated with enhanced toxicity | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q3. Contains elements other than C,H,O,N,divalent S | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q5. Simply branched aliphatic hydrocarbon or a common carbohydrate | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q6. Benzene derivative with certain substituents | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q7. Heterocyclic | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q16. Common terpene | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q17. Readily hydrolysed to a common terpene | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q19. Open chain | Yes 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q20. Aliphatic with some functional groups (see explanation) | Yes 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q21. 3 or more different functional groups | No 3-aminopropanol |
| <input type="checkbox"/> | Q18. One of the list (see explanation) | No Class Low (Class I) 3-aminopropanol |

KUVIO 6. 3-aminopropanolin luokittelu

3-aminopropanolin luokittelmiseksi luokkaan I, täytyi siis ohjelmiston käydä läpi 12 kysymystä. Luokitteluun johtanut kysymys on esitetty seuraavassa kuviossa (KUVIO 7).

| | |
|---|--|
| Decision node: | Q18. One of the list (see explanation) |
| If 'NO' assign | Low (Class I) |
| If 'YES' assign | Intermediate (Class II) |
| Rule ID | Rule title |
| 18 | One of the list (see explanation) |
| Rule explanation | |
| Is the substance one of the following: | |
| <ul style="list-style-type: none"> ● (a) a vicinal diketone; or a ketone or ketal of a ketone attached to a terminal vinyl group ● (b) a secondary alcohol or ester of a secondary alcohol attached to a terminal vinyl group ● (c) allyl alcohol or its acetal, ketal or ester derivative ● (cellbox) allyl mercaptan, an allyl sulphide, an allyl thioester or allyl amine ● (e) acrolein, a methacrolein or their acetals ● (f) acrylic or methacrylic acid ● (g) an acetylenic compound ● (h) an acyclic <i>aliphatic</i> (A) ketone, ketal or ketoalcohol with no other functional groups and with four or more carbons on either side of the keto group ● (i) a substance in which the <i>functional groups</i> (E) are all <i>sterically hindered</i> (J) | |
| Q18 examines the terpenes and later the open-chain and mononuclear substances by reference) to determine whether they contain certain structural features generally thought to be associated with some enhanced toxicity. | |

KUVIO 7. Cramer-järjestelmän kysymys 18.

Kaikki aikaisempien kysymyksiä vastaukset johtivat siis lopulta kysymykseen 18. Tämän kysymyksen pohjalta ohjelmisto totesi, ettei 3-aminopropanol kuulu mihinkään kysymyksessä mainittuun aineeseen tai aineryhmään eli aine sai arvon ”no”. Mikäli 3-aminopropanol olisi kuulunut johonkin kysymyksen aineista eli kysymys saanut arvon ”yes”, olisi luokan I sijaan luokitukseksi tullut luokka II.

4 EPÄPUHTAUSLASKURI

4.1 Epäpuhtauslaskuri valmiille tuotteelle

Työn varsinaisena tarkoituksena oli luoda helppokäyttöinen järjestelmä Excel-pohjalle, johon voi syöttää tuotteiden reseptejä. Näiden reseptien pohjalta laskin laskee sen, kuinka paljon mitäkin epäpuhtautta on valmiissa tuotteessa.

Laskimen vaatimuksena oli toiminnan suhteen se, että haluttu raaka-aine piti pystyä valitsemaan laskimessa alasetoalistokosta ja tämän jälkeen syöttää reseptissä tarvittava määrä raaka-ainetta. Näiden kahden tiedon pohjalta laskin osaisi laskea, paljonko mitäkin epäpuhtautta esiintyy valmiissa tuotteessa. Vertailuarvon saamiseksi tälle lopputulokselle haluttiin alasetoalistikko, josta valittaisiin tuotteen käyttötarkoitus. Laskin osaisi laskea kuinka suurelle massalle kutakin epäpuhtautta keskiverto ihminen altistuisi päivän käytön aikana.

Keskiverto ihmisen massana käytetään näissä laskutoimituksissa 60 kilogrammaa (Rogiers & Pauwels 2008, 38).

4.2 Tietokanta

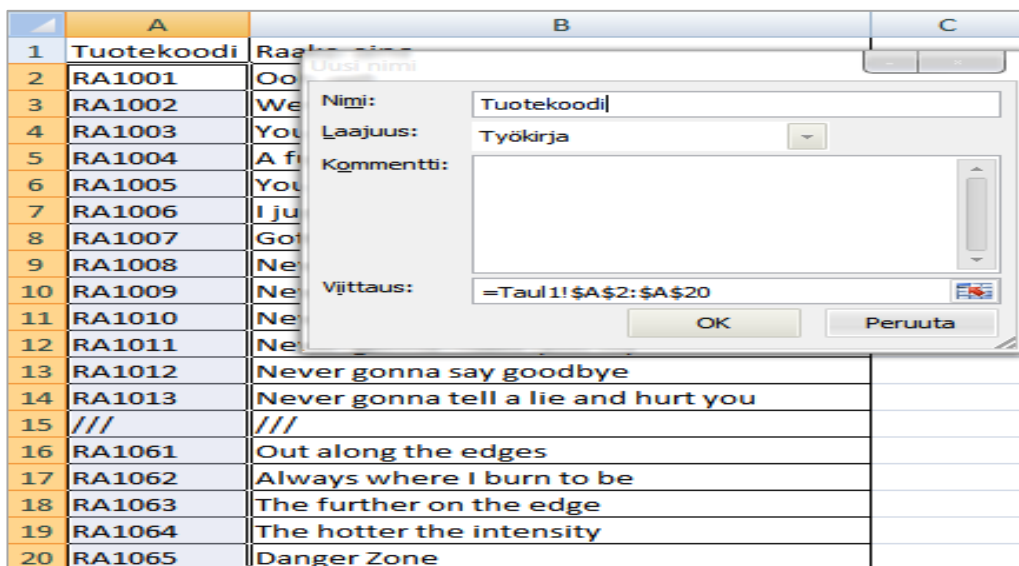
Laskimen luominen aloitettiin valitsemalla kahdeksan perustuotetta, joista saatiin selville niin kutsutut perusraaka-aineet. Nämä raaka-aineet taulukoitiin varsinaiseksi tietokannaksi, josta laskin hakee tietonsa pystyäkseen laskemaan epäpuhtausmäärät. Tietokannan lyhennetty rakenne alkutilanteessa on esitetty taulukossa TAULUKKO 5.

TAULUKKO 5. Tietokannan alkutilanne

| Tuotekoodi | Raaka-aine |
|------------|--|
| RA1001 | Ooh ooh |
| RA1002 | We're no strangers to love |
| RA1003 | You know the rules and so do I |
| RA1004 | A full commitment's what I'm thinking of |
| RA1005 | You wouldn't get this from any other guy |
| RA1006 | I just wanna tell you how I'm feeling |
| RA1007 | Gotta make you understand |
| RA1008 | Never gonna give you up |
| RA1009 | Never gonna let you down |
| RA1010 | Never gonna run around and desert you |
| RA1011 | Never gonna make you cry |
| RA1012 | Never gonna say goodbye |
| RA1013 | Never gonna tell a lie and hurt you |
| /// | /// |
| RA1061 | Out along the edges |
| RA1062 | Always where I burn to be |
| RA1063 | The further on the edge |
| RA1064 | The hotter the intensity |
| RA1065 | Danger Zone |

Saatuani selville nämä perusraaka-aineet ja laitettuani ne järjestykseen tuotekoodinsa mukaan, piti luoda nimetty taulukko eli dynaaminen alue tuotekoodeista. Tämä siitä syystä, että tulevaisuudessa pitää tietokantaan lisätä uusia raaka-aineita ja jos ei luotaisi dynaamista aluetta, ei laskimen alaseto-ohjelma, josta raaka-aine valitaan, päivittyisi sisällyttämään uusia raaka-aineita.

Varsinainen dynaamisen alueen nimeäminen on hyvin yksinkertainen toimenpide. Valitaan haluttu taulukon alue eli alue jossa tarvittavat tiedot sijaitsevat. Valittiin vain "Tuotekoodi"-sarakkeen tiedot RA1001-1065, sillä nämä tiedot esiintyisivät ensimmäisessä luodussa alaseto-ohjelmassa. Kun oli valittu tarvittavat tiedot, valittiin Excel 2007:n valikoista seuraava polku: Kaavat > Määritetyt nimet > Määritä nimi. Avautuu seuraavassa kuviossa näkyvä valikko "Uusi nimi" (KUVIO 8).



KUVIO 8. Dynaamisen alueen luonti

Valikossa määritettiin nimi alueelle ja tässä tapauksessa se oli "Tuotekoodi". Laajuudeksi valittiin työkirja, sillä halutaan käyttää tätä luotua dynaamista aluetta koko työkirjan alueella eikä vain siinä nimenomaisessa taulukossa, jossa dynaaminen alue sijaitsee.

Raaka-aineissa esiintyvät epäpuhtaudet selvitettiin raaka-ainetoimittajien dokumenteista ja merkittiin aakkosjärjestyksessä tietokantaan siten, että epäpuhtauden nimi muodosti sarakkeen otsikon. Sarakkeeseen kirjoitettiin sitten jokaisen raaka-aineen kohdalle siinä raaka-aineessa olevat määrät tiettyä epäpuhtautta. Yksikkönä tässä käytettiin ppm:ää eli parts per million, suomeksi miljoonasosaa. Vastaisuudessa voidaan tätä käyttää helposti laskuissa, sillä ppm on yhtä kuin mg/kg.

4.3 Laskimen formulointialue sekä välitulokset

Varsinaisen laskimen tekeminen aloitettiin luomalla tuotekoodeille alasvetovalikko, kun oli määritetty alasvetovalikon dynaaminen alue. Tämä tehtiin siten, että valittiin haluttu kohta "Laskin"-taulukossa, johon alasvetovalikko tulisi ja luotiin valikko seuraavan polun avulla: Tiedot > Datatyökalut > Tietojen kelpoisuuden tarkistaminen. Tämä on kuvattu seuraavassa kuviossa (KUVIO 9).



KUVIO 9. Alasvetovalikon luominen

Kuviosta KUVIO 9 nähdään myös tapa, jolla nimettyihin eli dynaamisiin alueisiin viitataan Excelissä. Tämä onnistuu kirjoittamalla nimetyn alueen nimi ja tällöin Excel osaa etsiä halutun alueen. Solua valittaessa avautuvan sanoman, joka kuviossa KUVIO 9 esiintyy harmaan keltaisena laatikkona tuotekoodi-sarakkeessa, pystyy luomaan samasta valikosta kuin alasvetovalikon. Valitaan "Asetukset" sijasta "Sanoma" ja tällä välilehdellä pystyy määrittelemään haluamansa sanoman.

Alkuperäiseen soluun luotu valikko kopioidaan sarakkeen haluttuihin soluihin valitsemalla solu ja ottamalla sitä "kulmasta kiinni". Näin toimimalla kopioituu soluun tehdyt valikot, ohjekuplat, funktiot ja ehdolliset muotoilut.

Nyt kun on luotu valikko, josta valita haluttu raaka-aine tuotekoodin perusteella, tulee luoda raaka-aine sarakkeeseen funktio, jolla laskin hakee automaattisesti tuotekoodia vastaavan nimen raaka-aineelle. Tähän käytetään PHAKU-funktiota. Ennen kuin funktiota voidaan lähteä luomaan, tulee luoda uusi dynaaminen alue. Tähän dynaamiseen alueeseen kuuluu koko luotu tietokanta, pois lukien sarakkeiden otsikot, jotta PHAKU-funktio on päivittyvä ja funktio tietää mihin alueeseen viitataan muodostetulla funktiolla. Tässä tapauksessa annettiin dynaamiselle alueelle nimeksi "Lista".

Luotu funktio näkyy kuviossa KUVIO 10 ja on avattu tarkemmin seuraavaksi.

| | A | B | C |
|---|-------------------|-------------------|-------------------|
| 1 | OHJEITA (klikkaa) | | |
| 2 | Järjestys | Tuotekoodi | Raaka-aine |
| 3 | 1. | | |
| 4 | 2. | | |
| 5 | 3. | | |
| 6 | 4. | | |
| 7 | 5. | | |

KUVIO 10. PHAKU-funktio

Kuten yllä olevasta kuvasta nähdään, on raaka-aineen nimen hakuun käytetty funktio:

=JOS(B3="";"";PHAKU(B3;Lista;2;EPÄTOSI)).

Funktio koostuu kahdesta eri funktiosta: JOS- ja PHAKU-funktiosta. Funktio toimii siten, että ensimmäiseksi JOS-funktio tarkistaa onko solussa B3 tekstiä eli onko siihen valittu haluttu raaka-aine. Jos solussa B3 ei ole tekstiä, tulostaa JOS-funktio soluun C3 "" eli tyhjän ja jos solussa B3 on tekstiä, eli on valittu haluttu raaka-aine, siirtyy JOS-funktio hakemaan PHAKU-funktiolla tuotekoodia vastaavan raaka-aineen nimen.

PHAKU-funktio jakautuu neljään määriteltävään ominaisuuteen. Ensin tulee määritellä mitä vastaavaa tietoa etsitään eli tässä tapauksessa etsitään B3-solua vastaavaa tietoa. Seuraavaksi kerrotaan funktiolle mistä sitä B3-solua vastaavaa tietoa etsitään eli kerrotaan dynaamisen alueen nimi "Lista" funktiolle. Kolmantena tulee määritellä mistä sarakkeesta annettua aluetta haluttua tietoa vastaavaa tietuetta etsitään eli tässä tapauksessa sarakkeesta kaksi. Sarakkeiden numerointi funktiolle annettulla alueella on juokseva eli ensimmäinen alueen sarake on yksi, seuraava kaksi ja niin edelleen. Neljäntenä asiana PHAKU-funktiolle määritellään hakeeko funktio täysin haluttua tietuetta vastaavan

tiedon vai parhaiten vastaavan arvon. Tässä tapauksessa tulee etsittävän tiedon olla eksaktia, joten funktion attribuutiksi on kirjoitettu "EPÄTOSI". Käytännössä PHAKU-funktio etsii halutun tiedon annetulta alueelta, siirtyy määritellylle sarakkeelle pysyen samalla rivillä lähtötiedon kanssa ja tulostaa tässä rivin ja sarakkeen risteyskohdassa sijaitsevan solun tiedon funktion soluun. Näin saadaan automaattisesti haettua tuotekoodia vastaava raaka-aineen nimi.

Tehty funktio kopioitiin tarvittaviin soluihin sarakkeessa. Funktiossa määritellyt solut päivittyvät automaattisesti viittaamaan sen kannalta relevantteihin soluihin.

Seuraavaan laskimen sarakkeeseen käyttäjä kirjoittaa reseptissä tarvittavan raaka-aineen määrän kilogrammoina. Sarakkeessa on automaattinen muotoilu sen varalta, että käyttäjän unohtuu antaa raaka-aineen määrälle raaka-aine. Tällöin tällainen solu muuttuu punaiseksi, mutta palaa siniseksi kun valitaan tuotekoodi. Tämä käy ilmi seuraavassa kuviossa (KUVIO 11).

| | A | B | C | D |
|----|-------------------|-------------------|--|-------------------|
| 1 | OHJEITA (klikkaa) | | | |
| 2 | Järjestys | Tuotekoodi | Raaka-aine | Massa [kg] |
| 3 | 1. | RA1001 | Ooh ooh | 10 |
| 4 | 2. | | | 5 |
| 5 | 3. | RA1003 | You know the rules and so do I | 15 |
| 6 | 4. | RA1004 | A full commitment's what I'm thinking of | 13,5 |
| 7 | 5. | RA1005 | You wouldn't get this from any other guy | 17 |
| 8 | 6. | RA1006 | I just wanna tell you how I'm feeling | 2,5 |
| 9 | 7. | RA1007 | Gotta make you understand | 3 |
| 10 | 8. | RA1008 | Never gonna give you up | 17 |

KUVIO 11. Massa-sarakkeen ehdollinen muotoilu

Tämä ehdollinen muotoilu toteutettiin siten, että valittiin muotoiltava solu ja avattiin seuraavan polun avulla ehdollisen muotoilun valikko: Aloitus > Ehdollinen muotoilu > Uusi sääntö > Määritä kaavan avulla, mitkä solut muotoillaan. Kuviossa KUVIO 12 nähdään valikko ja kaava, jolla muotoilu suoritetaan.

| OHJEITA (klikkaa) | | | |
|-------------------|------------|------------|------------|
| Järjestys | Tuotekoodi | Raaka-aine | Massa [kg] |
| 1. | RA1001 | Ooh ooh | 10 |
| 2. | | | |
| 3. | RA1003 | | 15 |
| 4. | RA1004 | | 13,5 |
| 5. | RA1005 | | 17 |
| 6. | RA1006 | | 2,5 |
| 7. | RA1007 | | 3 |
| 8. | RA1008 | | 17 |
| 9. | RA1009 | | 4 |
| 10. | RA1010 | | 0,25 |
| 11. | RA1011 | | 0,25 |
| 12. | RA1012 | | 5 |
| 13. | RA1013 | | 7,5 |
| 14. | | | |
| 15. | | | |
| 16. | | | |
| 17. | | | |
| 18. | | | |
| 19. | | | |
| 20. | | | |
| 21. | | | |
| 22. | | | |
| 23. | | | |
| 24. | | | |
| 25. | | | |
| 26. | | | |

Muokkaa sääntöä

Valitse säännön laji:

- ▶ Muotoile kaikki solut niiden arvojen perusteella
- ▶ Muotoile vain solut, jotka sisältävät
- ▶ Muotoile vain ensimmäiseksi tai viimeiseksi luokitellut arvot
- ▶ Muotoile vain arvot, jotka ovat keskiarvoa suurempia tai pienempiä
- ▶ Muotoile vain yksilölliset arvot tai samat arvot
- ▶ Määritä kaavan avulla, mitkä solut muotoillaan

Muokkaa säännön kuvausta:

Muotoile arvot, joissa tämä kaava on tosi:

=JA(B3="";D3<>"")

Esikatselu: AaBbCcÄäÖö Muotoile...

OK Peruuta

KUVIO 12. Ehdollinen muotoilu

Kaava, jolla määritetään mitkä solut muotoillaan massa-sarakkeessa on siis:

=JA(B3="";D3<>"").

JA-funktio on funktio, jonka kaikki argumentit tulee käydä toteen ennen kuin funktio itse saa arvon "tosi". Tässä tapauksessa tämä tarkoittaa sitä, että solun B3 tulee olla tyhjä ja D3-solu ei saa olla tyhjä. Kun nämä kaksi ehtoa käyvät toteen, muotoilee ehdollinen muotoilu solun värin punaiseksi.

Solun muotoilu kopioitiin jokaiseen tarvittavaan soluun "Massa"-sarakkeessa.

Seuraava askel laskimen luonnissa oli luoda funktio, jolla laskin hakee jokaiselle epäpuhtaudelle arvon tietokannasta ja laskee kuinka paljon nimenomaisen raaka-aineen määrä tuo epäpuhtautta valmiiseen reseptiin. Tämä toteutettiin käyttämällä PHAKU- ja JOS-funktioita sekä SARAKE-funktiota. Varsinainen funktiolauseke näkyy seuraavassa (KUVIO 13).

| OHJEITA (klikkaa) | | | | |
|-------------------|------------|--|------------|---|
| Järjestys | Tuotekoodi | Raaka-aine | Massa [kg] | |
| 1. | RA1001 | Ooh ooh | 10 | 0 |
| 2. | | | | |
| 3. | RA1003 | You know the rules and so do I | 15 | 0 |
| 4. | RA1004 | A full commitment's what I'm thinking of | 13,5 | 0 |
| 5. | RA1005 | You wouldn't get this from any other guy | 17 | 0 |
| 6. | RA1006 | I just wanna tell you how I'm feeling | 2,5 | 0 |
| 7. | RA1007 | Gotta make you understand | 3 | 0 |

KUVIO 13. Epäpuhtauden määrän haku- ja laskentafunktio

Kuten voidaan edellä olevasta kuvasta nähdä, on käytetty funktio muotoa:

```
=JOS($B3="";"";JOS($D3="";"";PHAKU($B3;Lista;SARAKE(E1)-2;EPÄTOSI)*$D3)).
```

Funktio avataan jälleen JOS-funktiolla, joka ensin katsoo onko solu B3 tyhjä ja jos on, niin tulostaa epäpuhtauden määräksi tyhjän. Jos B3 ei ole tyhjä, tarkistaa funktio onko solu D3 tyhjä. Solun D3 ollessa tyhjä, tulostuu epäpuhtauden määräksi edelleen tyhjä. Siinä tapauksessa missä solut B3 ja D3 eivät ole tyhjiä, toteutuu toisen JOS-funktion PHAKU-osuus. Tällöin funktio hakee taas rivin, jolla B3:ssa oleva tuotekoodi esiintyy dynaamisella alueella "Lista" ja lähtee etsimään täsmällistä vastinetta sille funktiossa määritellyltä sarakkeelta. Sarakkeen määrittely on tässä funktiossa hoidettu SARAKE-funktiolla eli laskemalla sarakkeen numero sille sarakkeelle missä sillä hetkellä ollaan eli E-sarakkeelle ja vähennetään saadusta numerosta kaksi. Tämän laskutoimituksen jälkeen saadaan PHAKU-funktion sarakkeeksi kolme (3), sillä E-sarakkeen arvo on viisi (5) ja tästä vähennetään kaksi (2). Sarake päädyttiin määrittelemään näin, sillä ei voitu suoraan käyttää SARAKE-funktiota, koska "Tietokannan" ja "Laskimen" sarakkeet eroavat toisistaan kahdella. Saraketta ei myöskään kannattanut antaa käsin funktiolle sillä tällöin funktio olisi pitänyt muokata jokaiselle laskimen riville ja sarakkeelle erikseen ainutlaatuisiksi. Näin toimimalla saatiin suhteellisen helposti sarakkeen arvoksi sen mukaan muuttuva numero, missä sillä hetkellä ollaan "Laskin"-taulukossa. Tämä tietokannasta haettu numeroarvo kerrottiin ennen lopullisen epäpuhtausmäärän saamista vielä rivin "Massa"-sarakkeen arvolla eli solun \$D3 arvolla. Näin saatiin selville jokaisen raaka-aineen reseptiin mukanaan tuoma epäpuhtausmäärä. Epäpuhtausmäärä ilmoitetaan mg:ssa, sillä tietokannasta saatava arvo on yksiköltään mg/kg ja kun tätä arvoa kerrotaan kg:lla, saadaan tuloksen yksiköksi mg eli milligramma.

\$-merkki funktiossa mainittavissa soluissa tarkoittaa solun lukitsemista erilaisin tavoin ja nämä lukitsemiset käydään seuraavassa läpi käyttäen esimerkkeinä edellä kuvatussa funktiossa olevia soluja.

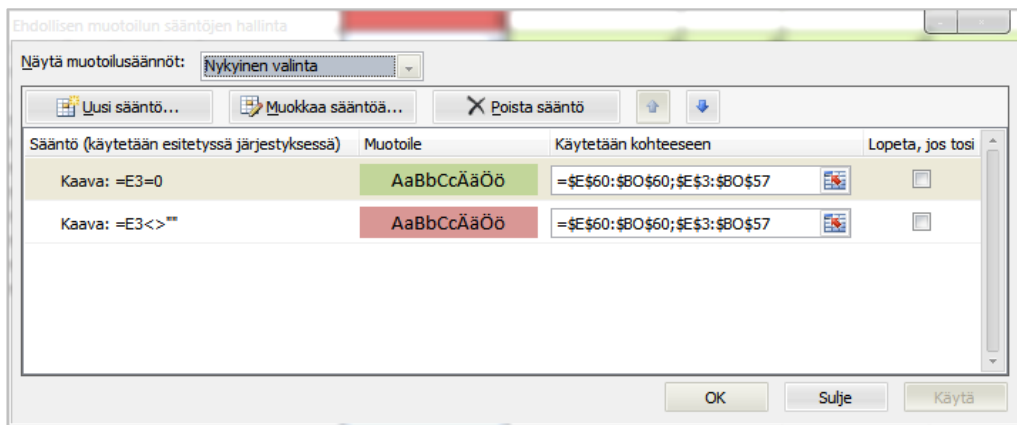
\$B3- tai \$D3-merkintä tarkoittaa sitä, että solun rivi voi muuttua, mutta sarake pysyy samana funktiota kopioitaessa. Tällöin kun funktio kopioidaan esimerkiksi yhtä riviä alemmaksi kuin alkuperäisesti ja sarakkeesta E sarakkeeseen F, vain funktion solun rivi muuttuu vastaamaan uutta sijaintia.

Merkintä B\$3 tai D\$3 taas tarkoittaa sitä, että solun merkintä muuttuu funktiossa, sitä kopioitaessa muihin soluihin, sarakkeen osalta rivin pysyessä muuttumattomana.

Kolmas lukitsemisen aste on \$B\$3 eli kopioitiin funktio, missä tämä merkintä esiintyy, mihin tahansa työkirjassa, niin soluviittaus pysyy koko ajan samana eikä muutu mitenkään.

Solun lukitsemista käytetään painamalla F4-näppäintä, kun on juuri valittu solu funktioon tai maalattu solu funktiossa. Eri lukitsemisvaihtoehdot käydään läpi painelemalla tuota näppäintä.

Epäpuhtauden määrän kertoviin soluihin tehtiin myös ehdolliset muotoilut, jotka muuttavat solun väriä siten, että aina kun solu on tyhjä, pysyy solu valkoisena, solun arvon ollessa nolla on väri vihreä ja arvon ollessa jotain muuta kuin nolla tai tyhjä, on solun väri punainen. Kuviossa KUVIO 14 näkyy "Ehdollisten muotoilun sääntöjen"-hallintaruutu, jossa näkyvät muotoilut on lisätty alun perin soluun samalla tavalla kuin edellä "Massa"-sarakkeen tapauksessa.



KUVIO 14. Ehdollisen muotoilun sääntöjen hallinta

Kun soluun oli saatu kirjoitettua funktio ja muotoilu, voitiin funktio ja muotoilu kopioida kaikkiin epäpuhtaussarakkeisiin. Näin voitiin tehdä ensimmäiset käyttötestit, joilla varmistettiin funktioiden ja muotoilujen toimivuus. Epäpuhtaussarakkeiden tulee olla laskimessa samassa järjestyksessä kuin tietokannassakin. Tällöin kaikki funktiot toimivat ja antavat oikean lopputuloksen.

Funktioiden toimivuuden toteamisen jälkeen tehtiin laskimeen funktiot, jotka laskevat formuloitavan reseptin kokonaisuusmassan ja sen kuinka paljon kumulatiivisesti tiettyä epäpuhtautta on valmiissa reseptissä. Näissä funktioissa yksikköinä massalle on kg ja epäpuhtaudelle mg.

Seuraavassa kuviossa nähdään miten reseptin kokonaismassan laskenta on suoritettu, miten laskimen tulosalue sijoittuu "Laskin"-taulukossa ja miten epäpuhtaudet ovat sijoiteltuna tietokannassa ja laskimessa (KUVIO 15).

| D60 | | fx =JOS(SUMMA(D3:D57)=0;"";SUMMA(D3:D57)) | | | | | | | | | |
|-----|-----|---|---|-----------------------------|---|-------------|-----------------|--|-------------------|-----------------|--|
| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | |
| 55 | 53. | | | | | | | | | | |
| 56 | 54. | | | | | | | | | | |
| 57 | 55. | | | | | | | | | | |
| 58 | | | | | Kokonaismäärä kutakin epäpuhtautta reseptissä [mg] | | | | | | |
| | | | | Reseptin kokonaismassa [kg] | | | | 4-Amino-5-hydroxy-2,7-naphthalenedisulfonic acid (disodium salt) | 4-Aminoazobenzene | 4-Aminobiphenyl | |
| 59 | | | | | 1,3-Diphenyltiatzen | 1,4-Dioxane | 3-Aminopropanol | | | | |
| 60 | | | | 100 | 0 | 13,5 | 0 | 0 | 0 | 0 | |

KUVIO 15. Reseptin kokonaismassa

Reseptin kokonaismassan laskentaan käytetty funktio on siis muotoa:

=JOS(SUMMA(D3:D57)=0;"";SUMMA(D3:D57))

Funktio tarkistaa ensin SUMMA-funktion avulla onko käyttäjä antanut tarvittavia tietoja millä laskea reseptin kokonaismassa ja jos ei ole annettu eli "Massa"-sarakkeen yhteen laskettu summa on nolla (0), niin tulostaa JOS-funktio soluun tyhjän eli "". Tämä tarkistus siitä syystä, että taulukkoon ei tule funktioiden virhesanomaa, vaikka funktio ei voisi toimia, sillä virhesanomien paikalle on tulostettu tyhjä.

Käyttäjän antaessa tarvittavat tiedot eli massat, siirtyy funktion JOS-lauseke laskemaan summan funktiossa määritellyltä alueelta. Tämän tekee SUMMA-funktio.

Reseptin kokonaismassa -solussa on myös ehdollinen muotoilu, joka muuttaa solun värin punaiseksi kaikissa muissa tapauksissa paitsi solun ollessa tyhjä tai saadessa arvon sata. Tämä on toteutettu edellä kuvatulla tavalla käyttäen funktioita:

=D\$60=100, vihreälle muotoilulle

=D\$60<>"", punaiselle muotoilulle

Muotoilut toimivat esitettyssä järjestyksessä, jolloin ensimmäinen muotoilu katsoo onko solun arvo sata ja jos on, niin ei ole tarvetta toiselle muotoilufunktiolle. Mikäli arvo ei ole sata, tarkistetaan onko solun arvo erisuuri kuin tyhjä. Tämän funktion ollessa tosi, saa solu punaisen värin.

Tällainen muotoilu on solussa siitä syystä, että reseptien kokonaismassa, mihin tähdätään formuloitaessa, on sata kilogrammaa. Täten voi pelkän solun värin pohjalta nähdä täsmäävätkö reseptissä annetut massat.

Laskimen laskiessa kokonaismääriä epäpuhtauksille reseptissä, on funktio muuten sama kuin kokonaismassan laskemisessa, mutta ensimmäinen SUMMA-funktio on korvattu tarkistamalla onko kokonaismassan solussa tulostettu tyhjä. Funktio on siis muotoa:

=JOS(\$D\$60="";"";SUMMA(E3:E57))

Nyt siis, jos solu D60 on tyhjä, tulostuu myös epäpuhtauksien kokonaismääräksi tyhjä. Käyttäjän määrittäessä massat lisättäville raaka-aineille, siirtyy JOS-funktio SUMMA-funktioonsa ja laskee määritetyn alueen summan. Yksikkönä näissä lukuarvoissa on mg.

Epäpuhtauden kokonaismassoille on jälleen kerran tehty ehdollinen muotoilu, joka toimii täsmälleen samoin kuin edellä on kuvattu. Solun arvon ollessa nolla on solun väri vihreä ja jos solun arvo on erisuuri kuin tyhjä niin solu on väriltään punainen. Muuten solun väri pysyy valkoisena.

Tehdyt muotoilut ja funktiot kopioidaan kaikille epäpuhtauksille siten, että lukitsemattomat solut tai alueet muuttuvat vastaamaan oikeata solua tai aluetta jokaisen epäpuhtauden kohdalla, mutta lukitut solut pysyvät samana. Vaikka ehdollisissa muotoiluissa käytetyt funktiot eivät muutu muotoilua kopioitaessa niin muotoilu silti toimii odotetulla tavalla myös kopioituissa soluissa.

Seuraavaksi laskimeen tehtiin funktiot laskutoimitukselle millä lasketaan kuinka monta milligrammaa on tiettyä epäpuhtautta milligrammassa valmista tuotetta. Kuvio KUVIO 16 näyttää miten tämä laskimen alue sijoittuu laskentataulukossa ja kuviossa näkyy myös tehty funktio, jolla laskenta suoritetaan.

| E62 | | =JOS(\$D\$60="";"";E60/\$D\$60/1000000) | | | | | |
|-----|------------------------------------|---|-------------|-----------------|--|-------------------|-----------------|
| | D | E | F | G | H | I | J |
| 58 | | Kokonaismäärä kutakin epäpuhtautta reseptissä [mg] | | | | | |
| | Reseptin kokonaismassa [kg] | | | | 4-Amino-5-hydroxy-2,7-naphthalenedisulfonic acid (disodium salt) | 4-Aminoazobenzene | 4-Aminobiphenyl |
| 59 | | 1,3-Diphenyltriazene | 1,4-Dioxane | 3-Aminopropanol | | | |
| 60 | 100 | 0 | 13,5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 61 | | Epäpuhtautta [mg/mg tuotetta] | | | | | |
| 62 | | 0 | 1,35E-07 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 63 | | Epäpuhtautta [µg/mg tuotetta] | | | | | |
| 64 | | 0 | 0,000135 | 0 | 0 | 0 | 0 |

KUVIO 16. Epäpuhtautta [mg/mg tuotetta]

Jotta päästäisiin haluttuun lopputulokseen tässä laskentatapahtumassa, on funktion oltava muodostettu seuraavanlaisesti:

=JOS(\$D\$60="";"";E60/\$D\$60/1000000)

Jälleen tulee varmistaa ensin onko kokonaismassan solu D60 tyhjä. Funktio tulostaa tyhjän, kun mainittu solu on tyhjä, mutta muuten siirtyy laskemaan epäpuhtausmäärän yksikössä mg/mg tuotetta. Tämä lasketaan jakamalla epäpuhtauden kokonaismäärä reseptin kokonaismassalla ja muuttamalla saatu tulos yksiköstä mg/kg tuotetta tarvittavaan yksikköön mg/mg tuotetta. Muutos tehdään jakamalla tulos 1000000.

Edellä laskettuja arvoja käytetään laskettaessa seuraavan funktion avulla epäpuhtauden määrää yksikössä µg/mg tuotetta. Formuloitava funktio on muotoa:

=JOS(\$D\$60="";"";E62*1000)

Tässä funktiossa tapahtuu siis ainoastaan tarkistus onko kokonaismassan solu D60 tyhjä ja jos on, niin tulostetaan tyhjä myös tästä funktiosta. Muussa tapauksessa kerrotaan edellisen funktion tulos 1000:lla. Kun kerrotaan [mg/mg tuotetta] tuhannella päästään yksikköön [µg/mg tuotetta].

Kahdessa edellisessä kappaleessa kuvattujen funktioiden lopputuloksia käytetään lähinnä vain välituloksina ja tästä syystä ei näille soluille ole ollut tarpeellista tehdä ehdollisia muotoiluja. Funktiot kopioitiin vain tarvittaviin soluihin eli kaikille epäpuhtauksille.

4.4 Laskimen tulosalue

Turvallisuusarviota varten epäpuhtauksien määrä suhteutetaan siihen määrään, jolle ihminen altistuu päivässä erilaisia kosmeettisia tuotteita. Nämä altistumismäärät on esitetty seuraavassa kuvassa (KUVA 1).

Table 3: Estimated daily exposure levels for different cosmetic product types according to Colipa data [SCCNFP/0321/02; Hall et al. 2007, 2011].

| Product type | Estimated daily amount applied | Relative amount applied (mg/kg bw/day) | Retention factor ¹ | Calculated daily exposure (g/day) | Calculated relative daily exposure (mg/kg bw/day) |
|--|--------------------------------|--|-------------------------------|-----------------------------------|---|
| Bathing, showering | | | | | |
| Shower gel | 18.67 g | 279.20 | 0.01 | 0.19 | 2.79 |
| Hand wash soap ² | 20.00 g | - | 0.01 | 0.20 ³ | 3.33 |
| Hair care | | | | | |
| Shampoo | 10.46 g | 150.49 | 0.01 | 0.11 | 1.51 |
| Hair conditioner ² | 3.92 g | - | 0.01 | 0.04 | 0.60 |
| Hair styling products | 4.00 g | 57.40 | 0.1 | 0.40 | 5.74 |
| Semi-permanent hair dyes (and lotions) ² | 35 ml (per application) | - | 0.1 | Not calculated | - |
| Oxidative/permanent hair dyes ² | 100 ml (per application) | - | 0.1 | Not calculated ⁴ | - |
| Skin care | | | | | |
| Body lotion | 7.82 g | 123.20 | 1.0 | 7.82 | 123.20 |
| Face cream | 1.54 g | 24.14 | 1.0 | 1.54 | 24.14 |
| Hand cream | 2.16 g | 32.70 | 1.0 | 2.16 | 32.70 |
| Make-up | | | | | |
| Liquid foundation | 0.51 g | 7.90 | 1.0 | 0.51 | 7.90 |
| Make-up remover ² | 5.00 g | - | 0.1 | 0.50 | 8.33 |
| Eye shadow ² | 0.02 g | - | 1.0 | 0.02 | 0.33 |
| Mascara ² | 0.025 g | - | 1.0 | 0.025 | 0.42 |
| Eyeliner ² | 0.005 g | - | 1.0 | 0.005 | 0.08 |
| Lipstick, lip salve | 0.057 g | 0.90 | 1.0 | 0.057 | 0.90 |
| Deodorant | | | | | |
| Deodorant non-spray | 1.50 g | 22.08 | 1.0 | 1.50 | 22.08 |
| Deodorant aerosol spray (ethanol-based) ⁵ | 1.43 g | 20.63 | 1.0 | 1.43 | 20.63 |
| Deodorant spray (not ethanol-based) | 0.69 g | 10.00 | 1.0 | 0.69 | 10.00 |
| Oral hygiene | | | | | |
| Toothpaste (adult) | 2.75 g | 43.29 | 0.05 | 0.138 | 2.16 |
| Mouthwash | 21.62 g | 325.40 | 0.10 | 2.16 | 32.54 |

KUVA 1. Estimated daily exposure levels for different cosmetic product types according to Colipa data [SCCNFP/0321/02; Hall et al. 2007, 2011] (Safety assessment of finished cosmetic products 2011, 62)

Kuvassa näkyvistä sarakkeista ensimmäinen ja viimeinen sarake ovat tulosten vertailun kannalta merkitseviä. "Product type" -sarake kertoo mikä on tuotteen käyttötarkoitus ja "Calculated relative daily exposure (mg/kg bw/day)" -sarake ilmaisee kuinka suurelle määrälle mitäkin tuotetta ihminen altistuu päivässä painokiloaan kohden Colipan vuonna 2011 tekemän selvityksen mukaan.

Kuvassa näkyvät tiedot siirrettiin relevanteilta osin laskimeen uudeksi tietokannaksi, joka on esitetty taulukossa TAULUKKO 6.

TAULUKKO 6. Formuloitavan tuotteen käyttötarkoitus

| Tuote | Altistusmäärä/päivä [mg/kg bw/day] |
|---|---------------------------------------|
| Deodorantti, aerosoli, Et etanolipohjainen | 10,00 |
| Deodorantti, aerosoli, etanolipohjainen | 20,63 |
| Deodorantti, Et aerosoli | 22,08 |
| Hiukset, hoitoaine | 0,60 |
| Hiukset, muotoilutuotteet | 5,74 |
| Hiukset, shampoo | 1,51 |
| Meikit, huulipuna/huulivoide | 0,90 |
| Pesu, käsisäippua | 3,33 |
| Pesu, suihkugeeli | 2,79 |
| Suu, hammastahna, aikuisella | 2,16 |
| Suu, suuvesi | 32,54 |
| Voide, kasvot | 24,14 |
| Voide, kädet | 32,70 |
| Voide, vartalo | 123,20 |

Taulukosta muodostettiin kaksi uutta dynaamista aluetta: "Käyttö" ja "Tuote". "Käyttö" sisältää vain varsinaiset käyttötarkoitukset ja "Tuote" sisältää koko taulukon. Kumpaankaan alueeseen ei tosin sisälly sarakkeiden otsikot sillä niitä ei tarvita dynaamisessa alueessa.

"Käyttö"- aluetta tarvitaan luotaessa laskimeen alasetoalikko, mistä valitaan formuloitavan reseptin käyttötarkoitus eli onko se esimerkiksi shampoo, hoitoaine vai deodorantti ja niin edelleen. Alasetoalikko on luotu edellä kuvatulla tavalla ja on esitetty seuraavassa kuviossa KUVIO 17. Kuviossa näkyy myös miten varsinainen tulosalue on sijoitettu "Laskin"-taulukossa sekä epäpuhtauden turvallisuuden arvioinnissa käytetty luokitusjärjestelmä sekä raja-arvot.

| B66 | | f ₆ | | | | |
|-----|---|---|---|---------------------------------|-------------|-----------------|
| | B | C | D | E | F | G |
| 65 | Käyttötarkoitus | Käyttäjän massa [kg] (voidaan jättää tyhjäksi) | Altistusmäärä [mg/kg bw/day] | Altistusmäärä [µg/päivä] | | |
| 66 | Deodorantti, aerosoli, Et etanolipohjainen Deodorantti, aerosoli, etanolipohjainen Deodorantti, Et aerosoli Hiukset, hoitoaine Hiukset, muotoilutuotteet Hiukset, shampoo Meikit, huulipuna/huulivoide Pesu, käsisäippua | | | | | |
| 67 | | | | 1,3-Diphenyltriazeno | 1,4-Dioxane | 3-Aminopropanol |
| 68 | | | CRAMER CLASS | III | III | I |
| 69 | | | | | | |
| 70 | Cramer-luokka | Raja-arvo [µg/person/day] | | | | |
| 71 | I | 1800 | | | | |
| 72 | II | 540 | | | | |
| 73 | III | 90 | | | | |
| 74 | Lähde: Euroopan komissio | | | | | |

KUVIO 17. Tulosalue

"Käyttötarkoitus"-otsikon alta olevasta solusta valitaan alavetovalikosta tuotteen aiottu käyttötarkoitus. Kun käyttötarkoitus on valittu, hakee "Altistumismäärä"-solun alla oleva kenttä automaattisesti altistumismäärän kyseiselle tuotteelle dynaamiselta alueelta "Tuote". Funktio, jolla tämä on toteutettu, näkyy kuviossa KUVIO 18 ja funktion toimintaperiaate on sama kuin edellä kuvatussa (s. 16) raaka-ainemen hakevassa funktiossa.

| D66 | | =JOS(\$B\$66="";"";PHAKU(\$B\$66;Tuote;2;EPÄTOSI)) | | | | |
|-----|-----------------|--|-----------------------------------|----------------------------|-------------|-----------------|
| | B | C | D | E | F | G |
| 65 | Käyttötarkoitus | Käyttäjän massa [kg] (voidaan jättää tyhjäksi) | Altistumismäärä [mg/kg bw/day] | Altistumismäärä [µg/päivä] | | |
| 66 | Voide, vartalo | | 123,20 | 0 | 0,99792 | 0 |
| 67 | | | | 1,3-Diphenyltriazene | 1,4-Dioxane | 3-Aminopropanol |
| 68 | | | CRAMER CLASS | III | III | I |

KUVIO 18. Altistumismäärä-funktio

Funktio on siis formuloitu seuraavasti:

=JOS(\$B\$66="";"";PHAKU(\$B\$66;Tuote;2;EPÄTOSI))

Solun lukitsemisia ei välttämättä tarvitse tässä tapauksessa, sillä funktiota ei todennäköisesti tulla kopioimaan mihinkään alkuperäisestä paikastaan mutta jos kopioidaan, niin silti funktio toimii kiitos lukitsemisen.

Varsinainen laskimen lopputulos lasketaan "Altistumismäärä [µg/päivä]"-alueella ja tähän käytetty funktio on formuloitu siten, että alueen voi kopioida työkirjan sisällä minne vain haluaa laskennan siitä kärsimättä. Tämä helpottaa suurimpien epäpuhtauksien erottamista lopputuloksista. Funktio on seuraavanlainen:

=JOS(Laskin!\$B\$66="";"";JOS(Laskin!E\$64="";"";JOS(Laskin!\$C\$66="";Laskin!E\$64*60*Laskin!\$D\$66;Laskin!E\$64*Laskin!\$C\$66*Laskin!\$D\$66)))

Merkintä "Laskin!" solun edessä sitoo viittauksen "Laskin"-nimiseen taulukkoon työkirjan sisällä ja tämä mahdollistaa tulosten kopioinnin käyttäjän haluamaan kohtaan. Funktion ensimmäinen toiminta tarkistaa onko solu B66 tyhjä ja jos on, tulostaa tyhjän altistumismääräksi. Käyttäjän määrittäessä käyttötarkoituksen formuloitavalle tuotteelle, tarkistaa funktio onko solu E64 tyhjä eli onko annettu aikaisemmin laskimelle tarvittavia tietoja ja jos solu on tyhjä, niin tulostuu edelleen tyhjä altistumismääräksi. Mikäli E64 on täytetty, lasketaan altistumismäärä epäpuhtauksille kaavalla:

Laskin!E\$64*60*Laskin!\$D\$66

Lasku tapahtuu kertomalla E64-solun arvo, kosmetiikka-alalla käytössä olevalla keski-vertokuluttajan massalla, 60 kg:lla ja kertomalla tuotteen altistusmäärällä eli solulla D66.

Altistumismäärän kertovalla alueella on soluissa automaattinen muotoilu, joka katsoo mihin Cramer-luokkaan epäpuhtaus kuuluu ja nouseeko epäpuhtauden altistumismäärä yli hyväksyttävän III-luokan raja-arvon. Epäpuhtauden kuuluessa Cramer-luokkaan I ja raja-arvon ylittyessä, muuttuu solun väri vihreäksi. Jos epäpuhtaus kuuluu luokkaan II ja raja-arvo ylittyy, tulee solun väriksi oranssi. Viimeisessä tapauksessa epäpuhtaus kuuluu vaarallisimpaan luokkaan eli III ja altistumismäärä on yli raja-arvon, niin tällöin solu saa punaisen huomiovärin. Luokan I muotoilufunktio ja raja-arvot ovat esitetty seuraavassa kuviossa KUVIO 19.

| Käyttötarkoitus | Käyttäjän massa [kg] (voidaan jättää tyhjäksi) | Altistusmäärä [mg/kg bw/day] | Altistusmäärä [µg/päivä] |
|-----------------|---|---------------------------------|--------------------------|
| Voide, vartalo | | 123,20 | |

| Cramer-luokka | Raja-arvo [µg/person/day] |
|---------------|------------------------------|
| I | 1800 |
| II | 540 |
| III | 90 |

Lähde: Euroopan komissio

KUVIO 19. Raja-arvot sekä altistumismäärän ehdollinen muotoilu

Muotoilussa käytetty funktio on siis muotoa:

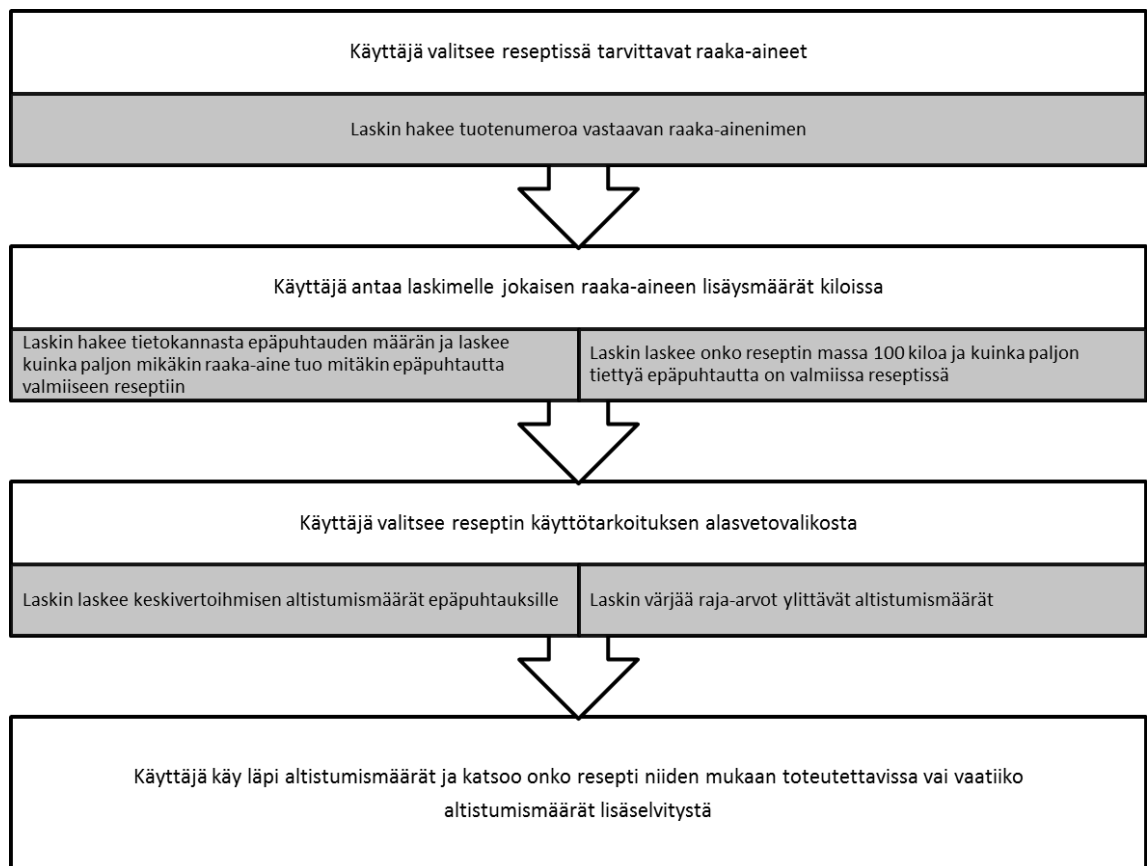
$=JA(E68="I";E66>= \$C\$73;E66<> "")$

JA-funktiossa tulee kaikkien funktion argumenttien käydä toteen, että itse funktio saa arvon tosi. Solun E68 arvon tulee siis olla "I", E66-solun arvon tulee olla suurempi tai yhtä suuri kuin luokan raja-arvon solussa C71 ja solun E66 arvon tulee olla erisuuri

kuin tyhjä. Tämä funktio on kaikilla Cramer-luokilla samanlainen, koska turvallisuuden vuoksi halutaan käyttää raja-arvona luokan III arvoa 90 µg/person/day.

4.5 Laskimen käyttöohjeet ja päivittäminen

Seuraavassa kuviossa (KUVIO 20) on esitetty tiivistettynä vuokaaviona laskimen käyttöohjeet. Laskimesta löytyy myös sisään rakennettuna ohjeita sen käyttämiseksi.



KUVIO 20. Vuokaavio laskimen käytöstä

Edellä olevasta kuviosta voidaan nähdä, että laskimen käyttö on prosessina hyvin suoraviivainen. Ensimmäisenä käyttäjä valitsee reseptin raaka-aineet. Samalla laskin hakee taustalla tuotenumeroa vastaavan raaka-ainimen.

Seuraavaksi käyttäjän tulee antaa jokaisen raaka-aineen lisäysmäärät kiloina. Laskin hakee tietokannasta epäpuhtauksien määrät ja laskee kuinka paljon epäpuhtautta raaka-aine tuo valmiiseen reseptiin sekä onko reseptin kokonaismassa 100 kg.

Kolmannessa vaiheessa käyttäjä valitsee reseptille käyttötarkoituksen. Tämän pohjalta laskin laskee keskivertoihmisen eli 60 kg painoisen ihmisen altistumismäärät epäpuhtauksille ja värjää raja-arvot ylittävät altistumismäärät.

Laskimen päivittäminen on tehty suhteellisen yksinkertaiseksi. Kun tietokantaan lisätään uusia raaka-aineita, niille tehdään uusi rivi tietokantaan tuotenumerojärjestyksen mukaiseen kohtaan ja etsitään epäpuhtausmäärät raaka-aineen dokumenteista. Mitään muuta ei käyttäjän tarvitse tässä tapauksessa tehdä. Jos tietokantaan pitää lisätä tai siitä poistaa epäpuhtaussarake, tulee se tehdä joko lisäämällä sarake "Laskimeen" samaan kohtaan kuin tietokannassa tai poistamalla haluttu sarake molemmista taulukoista. Lisäyksen yhteydessä tulee myös kopioida kaikki solut, missä "Laskimessa" tapahtuu laskutoimituksia, lisättyjen sarakkeiden oikeaan kohtaan.

5 KIINNOSTAVAT EPÄPUHTAUDET ESIMERKKIRESEPTEISTÄ

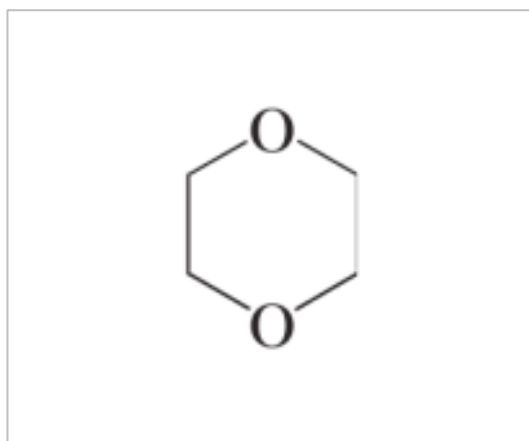
5.1 Kriteerit epäpuhtauksien tarkasteluun valinnalle

Sain Berner Oy:ltä laskimen laadintaan varten käyttööni kahdeksan yrityksen perustuotteen reseptiä, joiden raaka-aineista koottiin laskimen tietokannan alkuperäiset raaka-aineet. Näiden perustuotteiden raaka-aineet kuvasivat hyvin yrityksessä tehtävien tuotteiden yleisimpiä raaka-aineita. Laskimen ollessa valmis, ajettiin kaikki kahdeksan reseptiä läpi siitä ja yhdessä työnohjaajan kanssa päätettiin heitä kiinnostavat ja resepteissä esille nousseet epäpuhtaudet, joita halutaan tutkittavan tarkemmin. Nämä kolme raaka-ainetta ovat: 1,4-dioksaani, 3-aminopropanoli ja raskasmetallit. Näitä epäpuhtauksia käsitellään tarkemmin luvuissa 5.2, 5.3 ja 5.4.

5.2 1,4-dioksaani

5.2.1 Kemiallinen koostumus ja luokitus

1,4-dioksaanin, vaihtoehtoisilta nimiltään dietyleenieetteri, 1,4-dietyleenidioksidi, 1,4-dioksasykloheksaani, glykolietyleenieetteri, p-dioksaani, kemiallinen kaava on $C_4H_8O_2$ ja molekyylipaino 88,12 g/mol. CAS-numeroltaan aine on 123-91-1. 2D-rakennekuva 1,4-dioksaanista on esitetty kuviossa KUVIO 21. (Patnaik 2007, 492.)



KUVIO 21. 1,4-dioksaanin rakennekuva (Patnaik 2007, 492)

Aine on puhtaassa muodossaan kirkas neste, jolla on hento eetterimäinen tuoksu. Tiheys on 20 °C 1,033 ja aine kiehuu 101 °C. 1,4-dioksaani jähmettyy 10 °C ja 12 °C välillä ja sekoittuu veteen sekä useimpiin orgaanisiin liuottimiin. (Patnaik 2007, 493.)

Toxtree-ohjelmisto luokittelee 1,4-dioksaanin Cramer-järjestelmän mukaisesti luokkaan III. Tällöin Munron ehdottama raja-arvo 1,4-dioksaanille on 90 µg/päivässä.

5.2.2 Vaikutukset terveyteen

1,4-dioksaanin vaikutuksista terveyteen on tehty monia selvityksiä, jotka ovat osin ristiriidassa keskenään. Osa ristiriitaisuuksista johtuu siitä, että osassa tutkimuksissa havaittuja maksan, munuaisten, aivojen ja hengitysteiden vahinkoja ei pystytty erottelemaan alkoholin käytön aiheuttamista, kun taas toiset tutkimukset toteavat aineen olevan ihmiselle hyvin vaarallinen. (Chronic toxicity summary, 1,4-dioxane.)

Ehkä enemmän painoarvoa tulee antaa näille aineen vaarallisiksi toteaville tutkimuksille, koska Cramer-järjestelmä luokittelee aineen luokkaan III eli luokkaan, jonka aineet ovat vaarallisia ja vaativat perusteellista tutkimusta.

Ihmiselle 1,4-dioksaani on vaarallinen ja aiheuttaa vakavaa vahinkoa maksalle, munuaisille, keuhkoille, iholle ja silmille. Höyryille altistuminen ja ihon läpi imeytyminen voi aiheuttaa myrkytystilan, jonka oireita ovat väsymys, päänsärky, hengen ahdistus, pahoinvointi ja oksentelu sekä keskushermosto-ongelmat. Kuolemantapauksia höyryille altistumisessa on tapahtunut annoskoolla 500-1000 ppm. Ihmisillä yhden minuutin altistuminen aineen 5000 ppm konsentraatioisille höyryille voi aiheuttaa kyynelten epänormaalia eritysmäärää. (Patnaik 2007, 493.)

Eläimille 1,4-dioksaani on vähemmän vaarallinen ja on lievästi karsinogeeninen. Rotille määritetty LC₅₀-arvo on hengitettäessä 13000 ppm/2 h ja hiirille suun kautta 5700 mg/kg. Suun kautta otettuna juomaveden mukana 14-23 kuukauden ajan annoskoolla 7000-18000 ppm, aiheutti rotilla kasvaimia nenään ja maksaan. Marsuilla kehittyi keuhkokasvaimia. (Patnaik 2007, 493.)

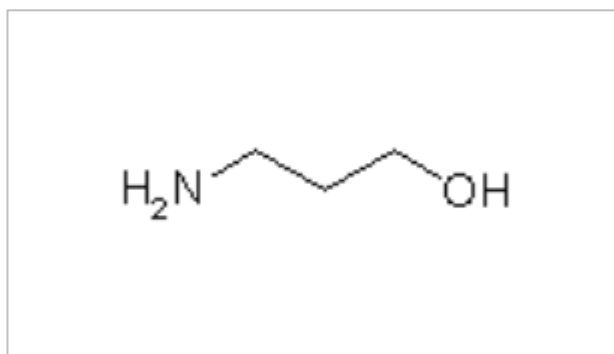
5.2.3 Esiintyminen kosmetiikassa

1,4-dioksaani joutuu epäpuhtaudeksi polyetoksyloituihin raaka-aineisiin, raaka-aineen valmistusprosessin sivutuotteena. Tällaisia raaka-aineita käytetään yleisesti kosmetiikassa emulgaattoreina, vaahdon tuottajina ja paakkuuntumisen estäjinä. Yleisimpiä raaka-aineita, joista ainetta löytyy, ovat ammoniumlauryylisulfaatti ja natriumlauryylisulfaatti. Etoksyloidut alkyyylisulfaatit on yleisin yhdisteryhmä josta 1,4-dioksaania yleensä löytyy. Polyetoksyloidut raaka-aineet tehdään polymerisoimalla etyleenioksidia, käyttäen yleensä rasva-alkoholia. Tuloksena syntyy polyetoksyloituja alkoholeja, joista voidaan syntetisoida muita tuotteita, kuten sulfaattisia pinta-aktiivisia aineita. Tämän etoksylointiprosessin sivutuotteena voi syntyä 1,4-dioksaania kun etyleenioksidi dimerisoi-
tuu. (Black, Hurley & Havery 2000, 666, 669.)

5.3 3-aminopropanoli

5.3.1 Kemiallinen koostumus ja luokitus

Synonyymejä 3-aminopropanolille ovat: propanolamine, 3-amino-1-propanoli, 3-aminopropyylialkoholi, 3-hydroksi-1-aminopropaani, 3-hydroksipropyyliamiini, 3-propanoliamiini. Aineen kemiallinen kaava on C_3H_9NO , molekyylipaino 75,1 g/mol ja CAS-numero 156-87-6. Fyysiseltä muodoltaan puhdas 3-aminopropanoli on värittömästä kellertävään oleva neste, jonka tuoksu on amiinimainen ja tiheys 0,98-0,99 (20 °C). Aine sekoittuu kaikissa suhteissa veteen ja kiehuu puhtaassa muodossaan 187-190 °C:ssa. 3-aminopropanoli sulaa 11 °C ja sen leimahduspiste on 101 °C. Varsinainen 3-aminopropanolin syttyminen tapahtuu 375 °C:ssa. 3-aminopropanolin rakennekuva on esitetty kuviossa KUVIO 22. (BASF Technical Data Sheet 2005, 1.)



KUVIO 22. 3-aminopropanolin rakenne. (BASF Technical Data Sheet 2005, 1.)

Luokitukseltaan 3-aminopropanoli on Cramer-luokkaan I kuuluva aine, jonka hyväksyttävä raja-arvo on 1800 µg/henkilöä/päivää kohden. Aine on puhtaassa muodossaan syövyttävää, mutta ei kovin vaarallista terveydelle.

5.3.2 Vaikutukset terveyteen

Aine ei myrkyllisyydeltään ole kovin vaarallista kerta-annoksena hengitettynä tai iholle joutuessaan. Syötynä kerta-annoksena on 3-aminopropanoli kohtalaisen myrkyllistä. Akuutin toksisuuden testeissä rotilla on LD50-arvoksi (Lethal Dose, 50 %) saatu suun kautta 1348 mg/kg, ihon kautta arvo >2000 mg/kg. LC50-arvo (Lethal Concentration, 50 %) eli hengitettynä on >16,4 mg/l/1 h. Iholle jäniksillä tehdyn Draize-testin mukaan aine on syövyttävää ja jänisten silmille saattaa aiheuttaa vakavia silmävaurioita. Herkistävyys on testattu iholle maalaus kokeilla, jossa marsut toimivat koe-eläiminä ja testin tulos oli negatiivinen. 3-aminopropanolista ei ole löydetty testeissä genotoksisia ominaisuuksia. (BASF Safety Data Sheet 2011, 1, 5)

5.3.3 Esiintyminen kosmetiikassa

3-aminopropanolin esiintymisestä epäpuhtautena ei välttämättä tarvitse olla huolissaan vaikkakin se puhtaassa muodossaan on syövyttävää, sillä ainetta käytetään yleisesti raaka-aineena esimerkiksi lääke-, kosmetiikka- ja elektroniikkateollisuudessa. Käyttötarkoituksista esimerkkinä liuotin, korroosionesto ja synteettinen hartsi sekä pehmitin. (BASF Technical Data Sheet 2005, 1). Kosmetiikkateollisuudessa 3-aminopropanolia käytetään esimerkiksi parantamaan muiden raaka-aineiden sekoittumista kosmeettisen valmisteen teon aikana (MannatechScience Product Ingredients 2011).

5.4 Raskasmetallit

5.4.1 Kemiallinen koostumus ja luokitus

Raskasmetallit ovat alkuaineryhmä ja täten ei voida antaa yhtä kemiallista koostumusta koko ryhmälle. Tällä hetkellä on käynnissä keskustelua siitä mitkä metallit kuuluvat varsinaisiin raskasmetalleihin ja jotkin tutkijat luokittelevat ryhmään kuuluvat metallit

atomipainon mukaan kun taas toiset suhteellisen tiheyden mukaan. Ne jotka määrittelevät raskasmetallit suhteellisen tiheyden mukaan toteavat, että tiheyden tulee olla enemmän kuin 4.0-5,0. Jotkin tutkijat jättävät aktinoidit ryhmän ulkopuolelle kun taas toiset sisällyttävät ne mukaan ryhmään. Epäpuhtauslaskimen kannalta ryhmän uusin määrittely keino eli "raskasmetalli"-termin käyttö kuvaamaan metalleja tai puolimetalleja, jotka ovat mahdollisesti ihmiselle tai ympäristölle vaarallisia, on ehkä kaikkein parhain malli. (Soghoian 2011, 1.)

Suurin osa tähän luokkaan kuuluvista tai ainakin yleisimmistä raskasmetalleista saavat luokitukseen Cramer-järjestelmän mukaan luokan III. Tämä tarkoittaa sitä, että päivässä hyväksyttävä altistumisen raja-arvo on 90 µg Munron ehdottamien rajojen mukaan. Kosmetiikkateollisuudessa on raskasmetalleille säädetty myös omia raja-arvoja ja näitä tulee noudattaa ennen Munron tutkimuksessaan ehdottamia. Kanadassa esimerkiksi on seuraaville raskasmetalleille määritetty omat raja-arvonsa ja ne ovat esitetty seuraavassa taulukossa (TAULUKKO 7).

TAULUKKO 7. Raskasmetallien raja-arvot (Report for International Cooperation on Cosmetic Regulation (ICCR) 2011, 9.)

| Raskasmetallit ja niiden raja-arvot | |
|--|-----------------|
| Raskasmetalli | Raja-arvo [ppm] |
| Lyijy | 10 |
| Arsenikki | 3 |
| Kadmium | 3 |
| Elohopea | 3 |
| Antimoni | 5 |

Taulukosta voidaan lukea, että viidelle yleisimmälle raskasmetallille on määritetty Kanadan toimesta tarkat raja-arvot, mitkä kertovat kuinka paljon saa olla valmiista tuotteesta kyseessä olevaa ainetta. Lyijylle on säädetty arvoksi 10 ppm, antimonille 5 ppm ja arsenikille, kadmiumille sekä elohopealle 3 ppm.

5.4.2 Vaikutukset terveyteen

Soghoian listaa tekstissään ihmisen ympäristössään useimmiten kohtaamia metalleja ja miten ne vaikuttavat ihmiseen akuutisti ja kroonisesti. Seuraavassa käydään työn kan-

nalta kiinnostavimmat raskasmetallit läpi ja ne ovat esitetty seuraavassa taulukossa (TAULUKKO 8).

TAULUKKO 8. Raskasmetallien terveysvaikutukset (Soghoian 2011, 2-5 pohjalta.)

| Raskasmetallien terveysvaikutukset | | |
|------------------------------------|--|---|
| Raskasmetalli | Vaikutukset | |
| | Akuutit | Krooniset |
| Arsenikki | Aiheuttaa pahoinvointia, oksentelua, ripulia, aivosairautta, sisäelinten toimintahäiriötä, pitkää QT-oireyhtymää ja kivuliasta neuropatiaa. | Aiheuttaa diabetesta, hypopigmentaatiota ja hyperkeratoosia sekä keuhko-, iho-, aivosyöpää ja virtsarakon syöpää. |
| Elohopea | Alkuainemuodossaan hengitettynä aiheuttaa ihmisessä akuutisti kuumetta, oksentelua, ripulia ja ALI:a. Epäorgaanisessa suolamuodossa aiheuttaa syövyttävää gastroenteriittiä. | Pahoinvointia, metallista makua suussa, gingivostomatitis (suusairaus, ientulehdus), tärinää, neurasteniana, Nefrootista oireyhtymää ja yliherkkyyttä sekä ihon muuttumista pinkin väriseksi. |
| Kadmium | Keuhkokudoksen tulehdus | Proteinuria, keuhkosityöpä ja osteomalasia |
| Kromi (Cr6+) | Syötynä ruuansulatuskanavan verenvuoto, hemolyysi ja akuutti munuaisten toiminnan pettäminen. | Hengitettynä pulmonaalinen fibroosi ja keuhkosityöpä. |
| Lyijy | Pahoinvointi, oksentelu ja enkefalopatia (päänsärky, kohtaukset, ataksia, mielen tylsistyminen). | Enkefalopatia, anemia, mahakivut, neuropatia ja nilkan tai ranteen liikuttamisen vaikeudet. |
| Nikkeli | Dermatiittia ja nikkelikarboonyyli muodossaan sydänlihastulehduksista, ALI ja aivosairauksia. | Keuhkofibroosia, sperman laadun heikkenemistä ja kasvaimia nenänielussa. |
| Rauta | Oksentelu, ruuansulatuselinten verenvuoto, sydämen vajaatoiminta, aineenvaihdunnan happamoituminen (metabolic acidosis). | Maksakirroosi |

Kuten edeltä olevasta taulukosta voidaan lukea, on monilla metalleilla hyvin haitallisia vaikutuksia ihmiselle, mutta yleensä vain suurina annoksina. Kaikilla raskasmetalleilla, joita tässä käsitellään, on sekä akuutteja että kroonisia vaikutuksia ja ne vaihtelevat suhteellisen harmittomista hyvinkin vaarallisiin. Arsenikin akuuteista vaikutuksista voidaan mainita oksentelu, aivosairaudet ja sisäelinten toimintahäiriöt, kun taas kroonisista vaikutuksista diabetes sekä erilaiset syövät. Elohopealla puolestaan on akuuteissa vaikutuksissa kuumetta, oksentelua sekä ripulia. Elohopean kroonisiin vaikutuksiin luetaan hyvin erilaisia vaikutuksia pahoinvoinnista suusairauksiin ja yliherkkyydestä pigmenttihäiriöihin. Kadmiumille altistuminen aiheuttaa akuuttia keuhkokudoksen tulehduksista ja kroonisesti, esim. keuhkosityöpää ja osteomalasiaa. Mikäli henkilö altistuu syödyllä kromille sen Cr⁶⁺-muodossa, esiintyy akuutisti ruuansulatuskanavan verenvuotoa, hemolyysiä ja akuuttia munuaisten pettämistä. Krooniset vaikutukset ovat hengitetylle kromille pulmonaalinen fibroosi ja keuhkosityöpä. Lyijy puolestaan aiheuttaa akuutisti pahoinvointia sekä erilaisia kohtauksia kuten päänsärkyä, ataksiaa ja mielen tylsyyttä.

Kroonisista lyijyn vaikutuksista voidaan mainita anemia, mahakivut ja erilaiset nivelten liikkumisvaikeudet. Nikkelillä on myös pahoja terveysvaikutuksia, kuten akuuttina sydänlihastulehdus, ALI ja erilaiset aivosairaudet sekä kroonisena keuhkofibroosi, sperman heikkenemistä ja kasvaimia nenässä sekä nielussa. Rautaakin voidaan pitää, tarpeeksi suurina annoksina otettuna, myrkyllisenä. Rauta aiheuttaa akuutteina oireina sydän oireita, elinten verenvuotoa ja aineenvaihdunnan happamoitumista sekä kroonisessa altistumisessa maksakirroosia.

Monia raskasmetalleiksi luokiteltavista aineista esiintyy jopa ihmiskehossa luonnostaan ja niitä tarvitaan biomekaanisissa prosesseissa. Näistä esimerkkinä koboltti, joka muodostaa B-12 vitamiinin ytimen (PubChem, Syanocobalamin) ja rauta, jota on ihmisen hemoglobiinissa.

Ihminen tarvitsee myös useita raskasmetalleja tai metalleja hivenaineina ruuassaan kuten seleeniä, kuparia, mangaania, kromia ja molybdeenia. (Eurometaux. Which metals are essential for human health?).

Lääketeollisuudella on myös käyttöä usealle raskasmetallille kuten alumiinille, vismutille, kullalle, galliumille, litiumille ja hopealle. (Soghoian 2011, 1.)

Soghoianin mukaan (2011, 1) raskasmetallien myrkyllisyys riippuukin siis hyvin paljon siitä, mikä metalli on kyseessä, kuinka suuri on annos ja onko altistuminen ollut akuuttia vai kroonista. Myös altistuneen ihmisen ikä voi vaikuttaa raskasmetallin toksisuuteen. Tästä esimerkkinä lyijy, joka on nuorille lapsille toksisempaa kuin aikuisille, sillä lapsen keho absorboi syödyistä aineista paljon suuremman osuuden kuin aikuinen. Lasten aivot ovat myös plastisemmat eli muuttuvaisemmat kuin aikuisilla ja täten lyijyaltistus saattaa vaikuttaa negatiivisesti lasten aivojen kehittymiseen. Raskasmetallien myrkyllisyyden kannalta myös altistumistie on tärkeässä roolissa. Syötynä alkuaine elohopea on suhteellisen inerttiä ruuansulatuskanavassa eikä myöskään imeydy kovin hyvin terveeseen ihon läpi, mutta jos ihminen hengittää tai verenkiertoon joutuu elohopeaa, saatavat seuraukset olla hyvin vaarallisia.

Soghoian toteaa (2011, 1-2) myös, että edellä mainittujen muuttujien lisäksi raskasmetallien myrkyllisyyteen vaikuttaa niiden kemiallinen rakenne. Esimerkiksi tästä hän ottaa bariumin kaksi eri yhdistettä: bariumsulfaatin ja bariumsuolan. Bariumsulfaatti on periaatteessa myrkytön eli vaaraton, kun taas bariumsuola on nopeasti imeytyvä yhdiste

ja aiheuttaa hypokalemiaa eli veren kaliumin vähentymistä, joka saattaa olla tappava tila.

5.4.3 Esiintyminen kosmetiikassa

Kosmetiikassa edellä käsitellyt metalleja ja raskasmetalleja voi esiintyä lähinnä kahdesta eri syystä: tarkoituksella tai epäpuhtautena. Sinkkiä esimerkiksi käytetään voiteissa raaka-aineena, hopeaa voidaan myös käyttää raaka-aineena esimerkiksi deodoranteissa antibakteeristen ominaisuuksiensa takia ja seleeniä esiintyy myös kosmeettisissa valmisteissa tarkoituksella.

Epäpuhtautena kosmeettisiin ja muihinkin valmisteisiin raskasmetallit joutuvat raaka-aineiden epäpuhtauksina tai esimerkiksi siirtymällä säilytyksen aikana tai valmistuksen yhteydessä. Epäpuhtaudet ilmoitettiin usein raaka-aineiden dokumenteissa laskennallisena lyijyn määränä tai eriteltyinä raskasmetallin mukaan. Saattoipa dokumenteissa olla mainittuna jopa pelkästään "raskasmetallit" yhtenä epäpuhtautena.

6 POHDINTA

Tämän opinnäytetyön päätarkoituksena oli luoda laskentatyökalu helpottamaan Berner Oy:n tuotekehityskemistien työtä arvioitaessa EY-asetuksen 1223/2009 mukaisesti kosmetiikka valmisteiden tuoteturvallisuutta epäpuhtauksien näkökulmasta. Jotta pystyttiin konkreettisesti selvittämään epäpuhtauksille turvalliset raja-arvot, tuli myös selvittää mitä metodia tässä voitaisiin käyttää ja mitkä tutkimukset tukisivat käyttöön otettavaa metodia. Työssä luotiin samalla katsaus siihen mitä tuoteturvallisuuden arviointi pitää sisällään ja mitä kosmetiikka valmisteissa tulee ottaa huomioon ennen markkinoille saattamista.

Työn tärkein tavoite saavutettiin aikaisessa vaiheessa sillä tehty laskentatyökalu on ollut Berner Oy:llä käytössä kosmetiikka valmisteiden tuotekehityksen ja tuoteturvallisuuden arvioinnin apuna jo kevästä 2012.

Tehtäessä tuoteturvallisuuden arviointeja nykyisille ja tuleville tuotteille, on laskimeen syötetty resepti ja tarkistettu laskimen avulla jokaisen tuotteen epäpuhtausmäärät tuoteturvallisuuden arviointia varten. Nämä saadut tulokset on pystytty suoraan liittämään osaksi tuoteturvallisuuden arviointia ja mikäli jotkin epäpuhtaudet ovat nousseet ylitse Berner Oy:llä käyttöön otettujen raja-arvojen, on ne voitu käsitellä tarkemmin turvallisuuden arvioinnissa.

Hyväksytyksi raja-arvojen määrittelyksi Berner Oy:llä otettiin Cramer-luokitus ja sen kolme luokkaa. Raja-arvoina käytetään vaarallisimman luokkan III raja-arvoja SCCP:n ja Vrijen yliopiston toksikologian laitoksen edustajan suosituksesta. Tämä suositus on siten otettu huomioon myös luokan I ja II epäpuhtauksille, sillä on haluttu saada aikaan käyttäjien ja tuoteturvallisuuden kannalta mahdollisimman turvallinen lopputulos. Nyt tuoteturvallisuuden arvioinnissa otetaan huomioon ja käsitellään myös vaarattomat ja suhteellisen vaarattomat aineet, siten kuin ne olisivat vaarallisia aineita ja näin varmistetaan, että tuoteturvallisuuden arviointi on mahdollisimman kattava ja ottaa huomioon kaikki mahdollisuudet.

Laskin on osoittautunut käytössä helppokäyttöiseksi ja yksinkertaiseksi ylläpitää. Käytön aikana eivät käyttäjät ole tarvinneet teknistä tukea kuin muutamia kertoja. Teknistä

tukea annettaessa, on samalla koulutettu käyttäjille miten he voivat itse voimia vastavissa tilanteissa ja täten edelleen vähennetty mahdollisia ongelmatilanteita.

Varsinainen laskimen käyttö on toteutettu mahdollisimman yksinkertaisesti ja laskimen toimintalogiikka on laadittu mahdollisimman automaattiseksi. Käyttäjän tarvitsee valita vain haluamansa raaka-aineet, syöttää niiden määrät ja tuotteen käyttötarkoitus. Tämän jälkeen laskin ”tulostaa” tarvittavat tiedot siitä, että tarvitseeko epäpuhtauksia ottaa tarkempaan käsittelyyn vai riittääkö toteamus siitä, että epäpuhtaudet on otettu huomioon turvallisuusselvityksessä.

Työn toimeksi antanut yritys on ollut tyytyväinen tuotettuun laskimeen ja sen toimintaan ja on käyttänyt sitä kosmetiikka valmisteidensa tuoteturvallisuuden arvioinnin apuna säännöllisesti.

Työskentelen edelleen yrityksessä ja täten on tuotteen käytössä ja päivityksessä tarvittun lähituen antaminen ollut helppoa ja yksinkertaista. Tosin kuten edellä todettiin, on laskin toiminut ilman suurempia ongelmia käyttöönotostaan asti.

Laskinta tullaan käyttämään Berner Oy:llä jatkossakin tuoteturvallisuuden arvioinnin apuna ja hyvä puoli laskimessa on sen muunneltavuus. Laskennassa käytetyt kaavat ovat helposti muutettavissa toiseen käyttötarkoitukseen ja tietokantaan syötetyt epäpuhtaustiedot vaihdettavissa toisiin tietoihin. Laskin on siis helppo muokata tulevaisuuden tarpeisiin ja näin ottaa käyttöön myös muille tuotteille tai tuoteryhmille, mikäli tarvetta ilmenee.

LÄHTEET

BASF. Safety Data Sheet. 3-Amino-1-propanol. 2011. Luettu 1.5.2012. http://worldaccount.basf.com/wa/NAFTA/Catalog/ChemicalsNAFTA/doc4/BASF/PRD/30036783/.pdf?title=&asset_type=msds/pdf&language=EN&validArea=US&urn=urn:documentum:ProductBase_EU:09007af88008f917.pdf.

BASF. Technical Data Sheet. 3-Amino-1-propanol. 2005. Luettu 1.5.2012. http://worldaccount.basf.com/wa/NAFTA/Catalog/ChemicalsNAFTA/doc4/BASF/PRD/30036783/.pdf?title=&asset_type=pds/pdf&language=EN&urn=urn:documentum:eCommerce_sol_EU:09007bb28002025f.pdf.

Black, R. E., Hurley, F. J. & Havery, D. C. 2001. Occurrence of 1,4-Dioxane in Cosmetic Raw Materials and Finished Cosmetic Products. Washington, DC: U.S. Food and Drug Administration. Luettu 4.5.2012. [http://lib3.dss.go.th/fulltext/Journal/J.AOAC%201999-2003/J.AOAC2001/v84n3\(may-jun\)/v84n3p666.pdf](http://lib3.dss.go.th/fulltext/Journal/J.AOAC%201999-2003/J.AOAC2001/v84n3(may-jun)/v84n3p666.pdf).

Chronic Toxicity Summary. 1,4-dioxane. Luettu 30.4.2012. http://www.oehha.org/air/chronic_rels/pdf/123911.pdf.

Cramer, G. M., Ford, R. A. & Hall, R. L. 1977. Estimation of Toxic Hazard - a Decision Tree Approach.

Cyanocobalamin - Substance Summary. Luettu 31.10.2013. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?sid=5771>

Eurometaux. Which metals are essential for human health? Luettu 30.10.2013. <http://www.eurometaux.org/MetalsToday/MetalsFAQs/Metalsessentialforhumanhealth.aspx>

European Commission. JRC. FAQ. What is the JRC? Luettu 24.4.2012. <http://ec.europa.eu/dgs/jrc/index.cfm?id=1940&lang=en>.

European Commission. JRC. IHCP. Toxtree. Extended Cramer scheme. Käyttöohje. Luettu 26.4.2012. http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_labs/computational_toxicology/doc/Toxtree_Cramer_extensions.pdf.

Euroopan komissio. Euroopan unionin oikeuden soveltaminen. Mikä on asetus? Luettu 21.3.2012. http://ec.europa.eu/eu_law/introduction/what_regulation_fi.htm.

ICCR. 2011. Report For International Cooperation On Cosmetic Regulation (ICCR) - Principles for the handling of traces of impurities and/or contaminants in cosmetic products. Luettu 11.5.2012. http://ec.europa.eu/consumers/sectors/cosmetics/files/pdf/iccr5_contaminants_en.pdf.

Karjomaa, S. 2012. Kosmetiikkaseminaari. 26.1.2012.

Kosmetiikka-asetus 1223/2009/EY.

Laki kosmeettisista valmisteista 21.1.2005/22.

Lapenna, S. & Worth, A. 2011. Analysis of the Cramer classification scheme for oral systemic toxicity - implications for its implementation in Toxtree.

Mannatech Science. Product Ingredients. 3-aminopropanol. 2011. Luettu 2.5.2012. <http://mannatechscience.org/home/product-ingredients>.

Patnaik, P. 2007. A Comprehensive Guide to the Hazardous Properties of Chemical Substances. John Wiley & Sons.

Renner, G. 2011. Actual legislation of cosmetics in the EU and recast. Book 1. Safety assessment of cosmetics in the EU. Training course. Universiteit Brussel.

Rogiers, V. & Pauwels, M. 2008. Safety Assessment of Cosmetics in Europe. Karger Medical and Scientific Publishers.

Safety assessment of finished cosmetic products 2011. Book 2. Safety assessment of cosmetics in the EU. Training course. Universiteit Brussel.

SCCP/1171/08. Scientific Committee on Consumer Safety (SCCS). OPINION ON - Use of the Threshold of Toxicological Concern (TTC) Approach for Human Safety Assessment of Chemical Substances with focus on Cosmetics and Consumer Products. Luettu 27.10.2013.

http://ec.europa.eu/health/scientific_committees/consumer_safety/docs/sccs_o_092.pdf

Soghoian. S. 2011. Heavy Metal Toxicity. Luettu 10.5.2012. <http://emedicine.medscape.com/article/814960-overview#showall>.