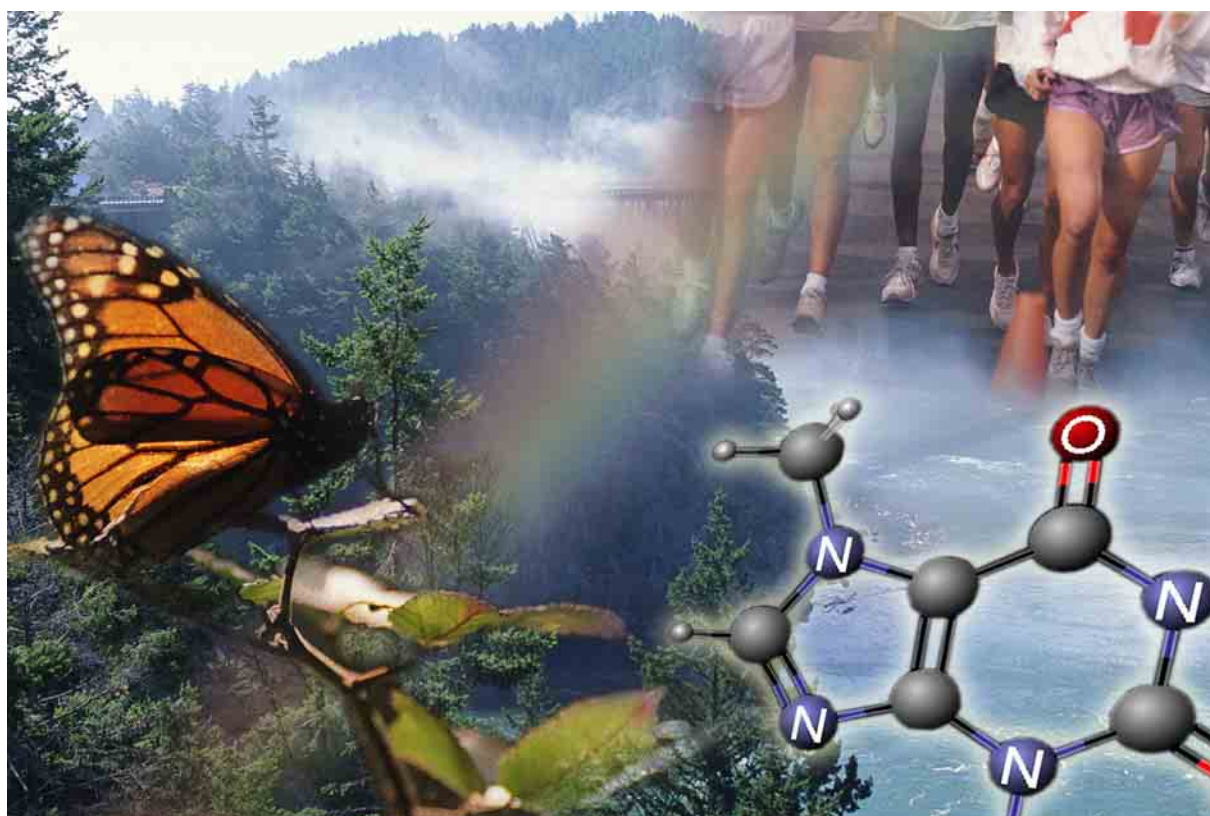

USMERNENIE PRE IDENTIFIKÁCIU A POMENOVANIE LÁTOK V RÁMCI REACH



JÚN 2007

Usmernenie pre implementáciu nariadenia REACH

PRÁVNE UPOZORNENIE

Tento dokument obsahuje usmernenie ohľadne REACH, v ktorom sa vysvetľujú povinnosti v súvislosti s REACH a spôsob, akým sa majú plniť.

Jednako, upozorňujeme užívateľov, že jediným platným právnym predpisom je nariadenie REACH a informácie obsiahnuté v tomto dokumente preto nemožno považovať za právnu radu. Európska chemická agentúra nepreberá zodpovednosť za obsah tohto dokumentu.

© Európska chemická agentúra, 2007

Vyhotovenie kópií sa povoľuje len za predpokladu, že sa uvedie zdroj.

PREDSLOV

V tomto dokumente sa opisujú spôsoby voľby názvu a identifikácie látky v rámci nariadenia REACH. Tvorí súčasť radu usmernení, ktoré majú účastníkom pomôcť pri príprave plnenia svojich povinností podľa nariadenia REACH. Tieto dokumenty obsahujú podrobné usmernenia ohľadne celého radu základných postupov REACH, ako aj ohľadne niektorých špecifických a/alebo technických metód, ktoré priemysel alebo príslušné orgány musia používať v rámci REACH.

Znenie usmernení bolo navrhnuté a prediskutované v rámci implementačných projektov REACH (RIP) pod vedením príslušných sekcií Európskej komisie za účasti všetkých účastníkov: členských štátov, priemyslu a mimovládnych organizácií. Tieto usmernenia sú prístupné na webovej stránke Európskej chemickej agentúry (http://echa.europa.eu/reach_en.html). Ďalšie usmernenia budú na tejto internetovej stránke uverejnené po ich finalizácii alebo aktualizácii.

Poznámka

Centrum pre chemické látky a prípravky pripravilo znenie tohto usmernenia v slovenskom jazyku. Ďalšie usmernenia budú uverejnené po ich finalizácii alebo aktualizácii na internetovej stránke <http://reach.ccsp.sk>

OBSAH

OBSAH	4
1.1 CIELE	7
1.2 ROZSAH PÔSOBNOSTI	7
1.3 ŠTRUKÚRA USMERNENIA	9
2 DEFINÍCIE A SKRATKY	10
2.1 SKRATKY	10
2.2 DEFINÍCIE	12
3 SPÔSOB IDENTIFIKÁCIE LÁTKY V REACH	16
3.1 DEFINÍCIA LÁTKY	16
3.2 ZOZNAM ES	16
3.2.1 Úloha zoznamu ES pri nadobudnutí účinnosti REACH	17
3.2.2 Zoznam v REACH po nadobudnutí účinnosti REACH	18
3.3 POŽIADAVKY NA IDENTIFIKÁCIU LÁTKY V REACH	18
4 NÁVOD NA IDENTIFIKÁCIU A POMENOVANIE LÁTKY V REACH	20
4.1 ÚVOD	20
4.2 LÁTKY S DOBRE DEFINOVANÝM ZLOŽENÍM	24
4.2.1 Jednozložkové látky	25
4.2.2 Viaczložkové látky	27
4.2.3 Látky definované chemickým zložením a inými hlavnými identifikátormi	31
4.3 UVCB LÁTKY	33
4.3.1 Všeobecný návod o UVCB látkach	33
4.3.2 Špecifické typy UVCB látok	43
5 KRITÉRIÁ NA OVERENIE TOHO, ČI SÚ LÁTKY TOTOŽNÉ	52
6 IDENTITA LÁTKY PRI PREDREGISTRÁCIÍ A PRESKÚMANÍ	58
6.1 PREDREGISTRÁCIA	58
6.2 PRESKÚMANIE	59

7	PRÍKLADY.....	60
7.1	DIETYL-PEROXYDIKARBONÁT	60
7.2	ZOLIMIDÍN.....	61
7.3	ZMES IZOMÉROV.....	61
7.4	VONNÁ LÁTKA (VÔŇA) AH	64
7.5	MINERÁLY	70
7.6	ESENCIÁLNY OLEJ LAVANDIN GROSSO.....	72
7.7	CHRYZANTÉMOVÝ OLEJ A Z NEHO IZOLOVANÉ IZOMÉRY	78
7.8	FENOL, IZOPROPYLOVANÝ, FOSFÁT.....	82
7.9	KVARTÉRNE AMÓNIOVÉ ZLÚČENINY	83
7.10	ROPNÉ LÁTKY.....	87
7.11	ENZÝMY	89
8	POPIS LÁTOK V PROGRAME IUCLID 5.....	92
8.1	VŠEOBECNÉ PRINCÍPY.....	92
8.2	PRÍKLADY AKO VYPĺŇAŤ IUCLID 5.....	98
8.2.1	Jednozložková látka	98
8.2.2	Viaczložková látka	100
8.2.3	Látka definovaná svojim chemickým zložením spolu s inými identifikátormi 101	
8.3	UVÁDZANIE ANALYTICKÝCH INFORMÁCIÍ.....	104
9	ODKAZY.....	105
	DODATOK I NÁSTROJE USMERNENIA	107
	DODATOK II TECHNICKÉ USMERNENIE PRE IDENTIFIKAČNÉ PARAMETRE LÁTKY 111	

1 VŠEOBECNE

Po tom, čo bol dňa 29. októbra 2003 publikovaný návrh nariadenia Európskej Komisie REACH [EC, 2003-A až EC, 2003-F], sekcie Komisie spolu s členskými štátmi začali uplatňovať “predbežnú stratégiu” zameranú na prípravu všetkých účastníkov na praktické uplatňovanie REACH.

V rámci technickej prípravy REACH Európska Komisia pre potreby REACH koordinuje vypracúvanie metodológií, nástrojov a technického usmernenia celým radom projektov na implementáciu REACH (RIPs - REACH Implementation Projects).

Toto technické usmernenie (TGD - Technical Guidance Document) RIP 3.10, ktoré síce nie je právne záväzným dokumentom, sa zaoberá metodológiou v súvislosti s identifikáciou, voľbou názvu a oznamovaním chemickej látky v rámci REACH.

Nariadenie REACH sa zameriava výlučne na “látky”. Pre zabezpečenie funkčnosti systému REACH má zásadný význam jednoznačná identifikácia látky. Toto technické usmernenie týkajúce sa identifikácie látky je určené ako pomôcka pre priemysel, členské štáty a Európsku chemickú agentúru.

Toto technické usmernenie vychádza zo skúseností s identifikáciou látky podľa predchádzajúcej chemickej legislatívy (obzvlášť smernice pre nebezpečné látky (smernica 67/548/EHS)) a inej legislatívy EÚ. Zahŕňa bežné postupy, ktoré sú v súlade s legislatívou REACH. Tam kde je to vhodné, sa vzali do úvahy aj iné metódy identifikácie chemických látok, ktoré sa používajú mimo Európskeho spoločenstva.

Zahrnuté je osobitné usmernenie pre rozdielne typy látok.

Toto technické usmernenie možno používať samostatne, tvorí však súčasť súboru technických usmernení, ktoré sú dostupné v osobitnej časti internetovej stránky Európskej chemickej agentúry: http://echa.europa.eu/reach_eu.html.

Zoznam technických usmernení pre priemysel je uvedený v **tabuľke 1.1**. Ďalšie informácie možno nájsť na internetovej stránke <http://ecb.jrc.it/REACH>.

Tabuľka 1.1 Usmernenia pre REACH (RIP 3)

RIP	Predmet
3.1	Usmernenie o registrácii Usmernenie pre medziprodukty Usmernenie pre polyméry Usmernenie pre vedecký výskum a vývoj a technologicky orientovaný výskum a vývoj
3.2	Usmernenie o Správe o chemickej bezpečnosti
3.3	Usmernenie o požiadavkách na informácie
3.4	Usmernenie o zdieľaní údajov
3.5	Usmernenie pre následných užívateľov
3.6	Usmernenie o klasifikácii, označovaní a balení
3.7	Usmernenie o žiadosti o autorizáciu
3.8	Usmernenie pre výrobky
3.9	Usmernenie o sociálno-ekonomických analýzach
3.10	Usmernenie pre identifikáciu a pomenovanie látok v REACH

1.1 CIELE

Cieľom tohto technického usmernenia (TGD) je poskytnúť výrobcovi a dovozcom jednoznačné usmernenie ohľadne zaznamenávania identity látky v kontexte REACH. Technické usmernenie poskytuje usmernenie týkajúce sa spôsobu pomenovania látky, čo predstavuje jeden z kľúčových prvkov v rámci identifikácie látky. Poskytuje aj usmernenie o tom, za akých podmienok možno pre účely REACH látky považovať za totožné. Identifikácia rovnakých látok je dôležitá vo vzťahu k procesu predregistrácie zavedených látok, zisťovaniu v súvislosti s nezavedenými látkami, zdieľaniu a spoločnému predkladaniu údajov.

Identifikáciu látok by mali vykonávať experti z oblasti priemyslu. Účastníkom v rámci priemyslu, ktorí majú len malé praktické skúsenosti s identifikáciou látky, je určený dodatok k tomuto technickému usmerneniu obsahujúci ďalšie usmernenie ohľadne identifikačných parametrov.

Okrem toho sa v tomto technickom usmernení uvádzajú odkazy na príslušné relevantné nástroje ako pomôcka pri charakterizácii a kontrole chemickej identity látky.

1.2 ROZSAH PÔSOBNOSTI

V súlade s článkom 1 REACH nariadenie sa týka výroby, dovozu, uvádzania na trh a používania látok samostatne alebo v prípravkoch a výrobkoch. Ustanovenia REACH sa nevzťahujú na prípravky a výrobky ako také.

V súlade s článkom 10 nariadenia REACH sa v rámci registrácie požaduje, aby sa identita látky zaznamenala pomocou parametrov, ktoré sú špecifikované v bode 2 prílohy VI REACH (pozri **tabuľku 3.1**). Toto technické usmernenie sa zameriava na náležitú identifikáciu látok, ktoré spadajú pod právnu definíciu látky v rámci REACH a poskytuje usmernenie o identifikačných parametroch látky, ktoré sú uvedené v bode 2 prílohy VI. Uvedené informácie postačujú na identifikáciu každej látky. Pokiaľ to nie je technicky možné, alebo pokiaľ sa z vedeckého hľadiska nezdá potrebné uvádzať požadované informácie, jeden alebo viacero identifikačných parametrov látky možno vynechať. Takéto vynechanie však treba jednoznačne zdôvodniť.

Spôsob identifikácie látky závisí od typu látky. Užívateľ tohto technického usmernenia je preto odkazovaný na jednotlivé kapitoly týkajúce sa rôznych typov látok.

ES zoznamy používané v rámci smernice 67/548/EHS (zoznamy EINECS, ELINCS a NLP) predstavujú dôležité nástroje na účel identifikácie látky. Usmernenie o úlohe týchto zoznamov v rámci REACH je uvedené v kapitole 3.2.

Látky, na ktoré sa vzťahuje REACH (a toto technické usmernenie), sú spravidla produktom chemickej reakcie vo výrobe a môžu obsahovať viacero samostatných zložiek. Látky, ako sa definujú v rámci REACH, zahŕňajú aj látky chemicky derivatizované alebo izolované z materiálov prírodného pôvodu, ktoré môžu pozostávať z jediného prvku alebo molekuly (napr. čisté kovy alebo určité druhy minerálov) alebo z viacerých zložiek (napr. éterické oleje, kovové kamienky). Jednako, látky, na ktoré sa vzťahujú ustanovenia inej legislatívy spoločenstva, sú v rámci REACH vo viacerých prípadoch vyňaté z povinnosti registrácie (pozri článok 2 REACH). Z povinnosti registrácie sú vyňaté aj látky uvedené v prílohe IV REACH a látky spĺňajúce určité kritériá, ktoré sú uvedené v prílohe V REACH. Upozorňujeme, že aj keď látka môže byť vyňatá z povinnosti registrácie, neznamená to ešte, že je vyňatá spod pôsobnosti iných hláv nariadenia (napr. hlava XI Zoznam klasifikácie a označovania).

Registrujúci by sa preto mali oboznámiť s definíciami a pravidlami upravujúcimi poskytovanie výnimiek, ktoré sa uvádzajú v REACH, aby mohli posúdiť, či sa na nich vzťahuje povinnosť registrácie alebo iné povinnosti.

Registrácia v rámci REACH sa týka len látok. Jednako, ustanovenia nariadenia sa vzťahujú na výrobu, uvádzanie na trh alebo používanie látok samostatne, v prípravkoch alebo vo výrobkoch.

Okrem toho, toto technické usmernenie neobsahuje žiadne usmernenie týkajúce sa zoskupovania štruktúrne príbuzných látok. O zoskupovaní sa pojednáva v RIP 3.3, Technické usmernenie o požiadavkách na poskytovanie informácií týkajúcich sa vnútorných vlastností látok.

Ohľadne otázok, ktorými sa toto technické usmernenie nezaoberá, čitateľ nájde odkazy na ostatné usmernenia (uvedené v tabuľke 1.1) alebo na asistenčné pracoviská príslušných orgánov.

1.3 ŠTRUKÚRA USMERNENIA

Základné informácie ako napríklad ciele a predmet tohto technického usmernenia sú uvedené v kapitole 1, zatiaľ čo skratky a definície možno nájsť v kapitole 2. Relevantné informácie o celkovom rámci identifikácie látky v REACH, napr. definícia látky a zákonom stanovené požiadavky na poskytovanie informácií, sú uvedené v kapitole 3.

Praktické usmernenie pre identifikáciu a voľbu názvu látky je uvedené v kapitole 4.

- V kapitole 4.1 sa opisuje rozdiel medzi “presne definovanými” a “nedostatočne definovanými” látkami; a v rámci týchto dvoch hlavných skupín možno rozlíšiť jednotlivé typy látok, na ktoré sa vzťahuje špecifické usmernenie pre identifikáciu látky. Diagram nasmeruje užívateľa na príslušnú kapitolu, ktorá obsahuje usmernenie pre identifikáciu špecifického typu látky.
- Nasledujúce kapitoly obsahujú špecifické usmernenie pre každý typ látky vo forme súboru pravidiel doplnených vysvetlením a príkladmi.

Kapitola 5 obsahuje usmernenie pre posudzovanie totožnosti látok. Kapitola 6 obsahuje usmernenie pre identifikáciu látky v rámci procesu predregistrácie a zisťovania.

Kapitola 7 obsahuje niekoľko podrobných príkladov z praxe, ktoré vychádzajú z praktického návodu uvedeného v kapitole 4, ktoré ilustrujú, ako môže priemysel využívať návod v tomto usmernení (TGD).

Napokon kapitola 8 obsahuje návod týkajúci sa popisu látok v programe IUCLID 5.

Dodatok I obsahuje odkazy na relevantné nástroje slúžiace ako pomôcka pri charakterizácii a kontrole chemickej identity látky.

Dodatok II poskytuje ďalšie základné informácie o jednotlivých identifikačných parametroch látky používaných v rámci procesu identifikácie látky, ako sú napríklad názvoslovné pravidlá, ES čísla, CAS čísla, spôsoby uvádzania molekulových a štruktúrnych vzorcov a analytické metódy.

2 DEFINÍCIE A SKRATKY

2.1 SKRATKY

Najdôležitejšie skratky použité v technickom usmernení sú uvedené a vysvetlené v **tabuľke 2.1**.

Tabuľka 2.1 Skratky

skratka	význam
AISE	A ssociation I nternationale de la S avonneire, de la Détergence et des Produits d'É ntretien International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products Medzinárodná asociácia pre detergenty a čistiace prostriedky
CAS	C hemical A bstracts S ervice
EC (ES)	E uropean C ommission (E urópska K omisia)
EINECS	E uropean I Nventory of E xisting Commercial C hemical S ubstances Európsky zoznam existujúcich komerčných chemických látok
ELINCS	E uropean L ist of N otified C hemical S ubstances Európsky zoznam nových chemických látok
ENCS	E xisting and N ew C hemical S ubstances (Japonsko)
ESIS	E uropean S ubstances I nformation S ystem
EU	E uropean U nion (Európska únia)
GC	G as C hromatography (Plynová chromatografia)
GHS	G lobally H armonised S ystem (Globálny harmonizovaný systém)
HPLC	H igh P erformance L iquid C hromatography Vysokoúčinná kvapalinová chromatografia
InChI	IUPAC I nternational C hemical I dentifier
INCI	I nternational N omenclature of C osmetic I ngredients Medzinárodné názvoslovie kozmetických zložiek
IR (IČ)	I nfr R ed (I nfr Č ervený)
ISO	I nternational O rganization for S tandardization Medzinárodná organizácia pre normalizáciu
IUCLID	I nternational U niform C hemical I nformation D atabase
IUBMB	I nternational U nion of B iochemistry and M olecular B iology Medzinárodná únia pre biochémiu a molekulárnu biológiu
IUPAC	I nternational U nion of P ure and A ppplied C hemistry Medzinárodná únia pre čistú a aplikovanú chémiu
MS	M ass S pectroscopy (Hmotnostná spektroskopia)
NLP	N o L onger P olymer
NMR	N uclear M agnetic R esonance (Nukleárna magnetická rezonancia)

skratka	význam
ppm	parts per million (milióntina)
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals Registrácia, hodnotenie, autorizácia a obmedzovanie chemikálií
RIP	REACH Implementation Project (Projekt na vykonanie REACH)
SIEF	Substance Information Exchange Forum Fórum NA výmenu informácií o látkach
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification
TGD	Technical Guidance Document (Technické usmernenie)
TSCA	Toxic Substances Control Act (USA)
UVCB	Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials Látky neznámeho alebo variabilného zloženia, komplexné reakčné produkty alebo biologické materiály
UV/VIS	Ultra Violet / Visible (ultrafialový/viditeľný)
w/w	weight by weight (hmotnosť/hmotnosť)
XRD	X-Ray Diffraction (Difrakcia röntgenového žiarenia)
XRF	X-Ray Fluorescence (Röntgenová fluorescencia)

2.2 DEFINÍCIE

Najdôležitejšie definície použité v tomto technickom usmernení sú uvedené a popísané v **tabuľke 2.2**.

Tieto definície zohľadňujú definície použité v nariadení REACH a v budúcom Nariadení o klasifikácii, balení a označovaní látok a zmesí. Z toho dôvodu sú niektoré výrazy definované odlišne než ako boli použité v rámci smernice 67/548/EHS.

Tabuľka 2.2 Definície

definícia	popis
Prísada (Additive)	Látka, ktorá je zámerne pridávaná na stabilizáciu látky ¹ .
Zliatina* (Alloy)	Kovový materiál homogénny na makroskopickej úrovni, ktorý pozostáva z dvoch alebo viacerých prvkov spojených tak, že sa mechanickými prostriedkami nedajú ľahko oddeliť.
Výrobok* (Article)	Predmet, ktorý počas výroby dostáva konkrétny tvar, povrch alebo prevedenie, ktoré určuje jeho funkciu vo väčšej miere ako jeho chemické zloženie.
Chromatografický záznam (Chromatographic fingerprint)	Vyjadrenie zloženia látky charakteristickou distribúciou zložiek na analytickom chromatograme.
Zložka (Component)	Látka zámerne pridávaná do prípravku.
Zložka (Constituent)	Akákoľvek zlúčenina prítomná v látke, ktorá môže byť charakterizovaná jednoznačnou chemickou identitou.
Zoznam ES (EC Inventory)	Tri európske zoznamy chemických látok z predchádzajúceho legislatívneho rámca EÚ o chemikáliách, kombinácia zoznamov EINECS, ELINCS a NLP sa nazýva zoznam ES. Zoznam ES je zdrojom čísiel ES, ktoré identifikujú látky.
Nečistota (Impurity)	Zložka neúmyselne prítomná v látke vznikajúca počas výroby. Môže pochádzať z východiskových látok alebo zo sekundárnych alebo neúplných reakcií počas výrobného procesu. Je prítomná v konečnej látke a nie je zámerne do nej pridávaná.

Tabuľka 4.2 pokračuje na ďalšej strane

¹ V iných oblastiach môže mať prígsada aj iné funkcie, napr. ako regulátor pH alebo farbivo. Avšak v nariadení REACH a v tomto usmernení je prígsada stabilizačným činidlom.

Tabuľka 4.2 pokračovanie Definícií

definícia	popis
Medziprodukt* (Intermediate)	Látka, ktorá sa vyrába pre chemické spracovanie alebo sa pri ňom spotrebúva či používa, aby sa transformovala na inú látku (ďalej len „syntéza“): a) <i>neizolovaný medziprodukt</i>: je medziprodukt, ktorý sa pri syntéze zámerne neodoberá (s výnimkou odobratia vzorky) zo zariadenia, v ktorom syntéza prebieha. Medzi takéto zariadenie patrí reakčná nádoba, jej prídavné zariadenia a akékoľvek vybavenie, cez ktoré látky prechádzajú pri kontinuálnom alebo šaržovom procese, ako aj systém potrubí na presun z jednej nádoby do druhej na účely prevedenia ďalšieho kroku reakcie; nezahŕňa však nádrže alebo iné nádoby, v ktorých sa látky po výrobe skladujú; b) <i>medziprodukt izolovaný na mieste</i>: je medziprodukt, ktorý nespĺňa kritériá neizolovaného medziproduktu a pri ktorom prebieha výroba medziproduktu a syntéza ďalších látok z tohto medziproduktu na tom istom mieste a vykonáva ju jedna alebo viac právnických osôb; c) <i>prepravovaný izolovaný medziprodukt</i>: je medziprodukt, ktorý nespĺňa kritériá neizolovaného medziproduktu a prepravuje sa alebo sa dodáva na iné miesta.
IUCLID	Databázový informačný systém určený pre správu údajov o chemických látkach.
Hlavná zložka (Main constituent)	Zložka látky, nie prísada alebo nečistota, ktorá tvorí jej významnú časť a preto sa používa pri jej pomenovaní a podrobnej identifikácii.
Výroba* (Manufacturing)	Vyrobenie alebo extrakcia látok v prírodnom stave.
Monomér* (Monomer)	Látka, ktorá je schopná vytvárať kovalentné väzby so sekvenciou ďalších rovnakých alebo rozdielných molekúl za podmienok príslušnej polymerizačnej reakcie používanej na konkrétny proces.
Jednozložková látka (Mono-constituent substance)	Všeobecne látka definovaná svojim zložením, v ktorej je hlavná zložka prítomná v koncentrácii aspoň 80 % (hmotnostných).
Viaczložková látka (Multi-constituent substance)	Všeobecne látka definovaná svojim zložením, v ktorej je viac ako jedna hlavná zložka prítomná v koncentrácii ≥ 10 % (hmotnostných) a < 80 % (hmotnostných).

Tabuľka 4.2 pokračuje na ďalšej strane

Tabuľka 4.2 pokračovanie Definícií

definícia	popis
Nezavedená látka (Non-phase-in substance)	Látka podliehajúca registrácii, u ktorej nie je možné využiť prechodný režim stanovený pre zavedené látky podľa REACH.
Chemicky nemodifikovaná látka* (Not chemically modified substance)	Látka, ktorej chemické zloženie ostáva nezmenené, aj keď prešla chemickým spracovaním alebo úpravou, alebo fyzikálnou mineralogickou transformáciou, napr. na odstránenie nečistôt.
Zavedená látka* (Phase-in substance)	Látka, ktorá spĺňa aspoň jedno z týchto kritérií: a) je uvedená v Európskom zozname existujúcich komerčných chemických látok (EINECS); b) bola vyrobená v Spoločenstve alebo v krajinách, ktoré pristúpili k Európskej únii 1. januára 1995 alebo 1. mája 2004, aspoň raz počas 15 rokov pred nadobudnutím účinnosti tohto nariadenia, ale výrobca alebo dovozca ju neuviedol na trh, za predpokladu, že výrobca alebo dovozca má o tom písomný dôkaz; c) bola pred nadobudnutím účinnosti tohto nariadenia uvedená na trh výrobcom alebo dovozcom v Spoločenstve alebo v krajinách, ktoré pristúpili k Európskej únii 1. januára 1995 alebo 1. mája 2004, a považovala sa za oznámenú v súlade s prvou zarážkou článku 8 ods. 1 smernice 67/548/EHS, ale nespĺňa definíciu polyméru vymedzenú týmto nariadením, za predpokladu, že výrobca alebo dovozca má o tom písomný dôkaz;
Prípravok* (Preparation)	Zmes alebo roztok zložený z dvoch alebo viacerých látok ² .

* definície podľa článku 3 nariadenia REACH

Tabuľka 4.2 pokračuje na ďalšej strane

² Definícia v GHS: "Zmes je zmes alebo roztok dvoch alebo viacerých látok, ktoré spolu nereagujú (zmes a prípravok sú synonymá)"
Poznámka: Zmesi/prípravky nepredstavujú to isté ako viaczložkové látky. Viaczložkové látky sú nazývané ako "reakčná zmes ...". Viaczložkové látky sú výsledkom chemickej reakcie, zatiaľ čo pri vzniku prípravku nedochádza k úmyselnej chemickej reakcii.

Tabuľka 4.2 pokračovanie Definícií

definícia	popis
Polymér* (Polymer)	Látka, ktorá sa skladá z molekúl charakterizovaných sekvenciou jedného alebo viacerých druhov monomérnych jednotiek. Takéto molekuly musia byť distribuované v určitom rozsahu molekulových hmotností, pričom rozdiely v molekulových hmotnostiach sú spôsobené najmä rozdielnym počtom monomérnych jednotiek. Polymér tvorí: a) jednoduchá hmotnostná väčšina molekúl obsahujúca najmenej tri monomérene jednotky, ktoré sú viazané kovalentnými väzbami aspoň na jednu inú monomérenú jednotku alebo inú reagujúcu zložku; b) menej ako jednoduchá hmotnostná väčšina molekúl s rovnakou molekulovou hmotnosťou. „Monoméerna jednotka“ je v zmysle tejto definície zreagovaná forma monomérenej látky v polyméri.
Látka* (Substance)	Chemický prvok a jeho zlúčeniny v prírodnom stave alebo získané akýmkoľvek výrobným postupom vrátane všetkých prísad potrebných na udržanie ich stability a všetkých nečistôt pochádzajúcich z použitého postupu, ktorá však nezahŕňa žiadne rozpúšťadlá, ktoré možno oddeliť bez ovplyvnenia stability látky alebo zmeny jej zloženia.
Látky prírodného pôvodu* (Substances which occur in nature)	Prírodne sa vyskytujúce látky ako také, nespracované alebo spracované iba manuálnym, mechanickým alebo gravitačným spôsobom, rozpustením vo vode, flotáciou, extrakciou vodou, destiláciou s vodnou parou alebo zahrievaním výlučne na účely odstránenia vody; alebo ktorá je extrahovaná zo vzduchu akýmkoľvek spôsobom

* definície podľa článku 3 nariadenia REACH

3 SPÔSOB IDENTIFIKÁCIE LÁTKY V REACH

REACH obsahuje definíciu látky (článok 3) a identifikačné parametre látky, (príloha VI, bod 2), ktoré sa použijú na identifikáciu látky pre účely registrácie.

V tejto kapitole sa opisuje definícia látky v REACH (kapitola 3.1), poskytuje sa všeobecné usmernenie o spôsobe použitia zoznamu ES z predchádzajúcej chemickej legislatívy (kapitola 3.2) ako aj ďalšie základné informácie o požiadavkách na identifikáciu látky, ktoré vyplývajú z REACH (kapitola 3.3).

3.1 DEFINÍCIA LÁTKY

Látka je definovaná v REACH takto (článok 3, definícia 1):

Látka je chemický prvok a jeho zlúčeniny v prírodnom stave alebo získané akýmkoľvek výrobným postupom vrátane všetkých prísad potrebných na udržanie ich stability a všetkých nečistôt pochádzajúcich z použitého postupu, ktorá však nezahŕňa žiadne rozpúšťadlá, ktoré možno oddeliť bez ovplyvnenia stability látky alebo zmeny jej zloženia.

Definícia látky v REACH sa zhoduje s definíciou látky, ktorá sa použila v siedmom zmenenom a doplnenom znení Smernice o nebezpečných látkach (smernica 92/32/EHS, ktorou sa mení a dopĺňa smernica 67/548/EHS). V oboch prípadoch definícia presahuje rámec čistej chemickej zlúčeniny definovanej jednou molekulovou štruktúrou. Definícia látky zahŕňa rôzne zložky ako napríklad nečistoty.

3.2 ZOZNAM ES

V rámci predchádzajúcej chemickej legislatívy existovali tri samostatné zoznamy. Boli to Európsky zoznam existujúcich komerčných chemických látok (European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances – EINECS), Európsky zoznam nových chemických látok (European List of New Chemical Substances – ELINCS) a zoznam látok, ktoré už nie sú polymérmi (No-Longer Polymers – NLP).

Látky, ktoré boli prítomné na európskom trhu v období od 1. Januára 1971 do 18. septembra 1981, sú uvedené v Európskom zozname existujúcich komerčných chemických látok (EINECS)³. Látky, ktoré boli oznámené a uvedené na trh po 18. septembri 1981, sú uvedené v Európskom zozname nových chemických látok (ELINCS).

Polyméry boli vyňaté z oznamovania do zoznamu EINECS a vzťahovali sa na ne špeciálne predpisy v rámci smernice 67/548/EHS. Výraz “polymér” bol ďalej

³ EINECS je založený na zozname European Core Inventory (ECOI), do ktorého mohol priemysel dodatočne oznamovať látky (podľa kritérií pre oznamovanie látok do zoznamu EINECS). Zoznam ECOI vznikol zlúčením rôznych zoznamov chemikálií, o ktorých sa predpokladalo, že sú prítomné na európskom trhu (napr. TSCA – Toxic Substances Control Act).

definovaný v siedmom zmenenom a doplnenom znení smernice 67/548/EHS (smernica 92/32/EHS). V dôsledku implementácie tejto smernice niektoré látky, ktoré sa považovali za polyméry podľa predpisov upravujúcich oznamovanie do zoznamu EINECS, sa podľa siedmeho zmeneného a doplneného znenia viac za polyméry nepovažovali. Vzhľadom na to, že všetky látky, ktoré nie sú uvedené v zozname EINECS podliehali oznamovacej povinnosti, všetky “látky, ktoré už nie sú polymérmi” (NLP), teoreticky mali byť oznámené. Jednako, Rada ministrov jednoznačne rozhodla, že tie látky, ktoré už nie sú polymérmi, by so spätnou účinnosťou nemali podliehať oznamovacej povinnosti. Komisia bola požiadaná, aby vypracovala zoznam látok, ktoré už nie sú polymérmi (zoznam NLP). Do tohto zoznamu boli zahrnuté látky, ktoré boli na európskom trhu v období od 18. septembra 1981 do 31. októbra 1993 a považovali sa podľa predpisov pre oznamovanie do zoznamu EINECS za polyméry, avšak viac sa za polyméry nepovažovali podľa siedmeho zmeneného a doplneného znenia. Zoznam NLP nie je vyčerpávajúci.

Tieto tri zoznamy látok, EINECS, ELINCS a NLP, sa súhrnne nazývajú zoznam ES. Každéj látke v tomto zozname Európska Komisia prideliла číslo ES (pozri podrobné informácie o čísle ES v dodatku II).

Informácie o týchto látkach možno získať prostredníctvom internetovej stránky Európskeho úradu pre chemikálie (<http://ecb.jrc.it>) v pododdiely “ESIS”. V budúcnosti bude zoznam registrovaných látok viesť a publikovať Európska chemická agentúra.

3.2.1 Úloha zoznamu ES pri nadobudnutí účinnosti REACH

Zoznam ES môžu výrobcovia a dovozcovia použiť ako nástroj na posúdenie toho, či je látka zavedená alebo nezavedená. Týmto spôsobom zoznam ES pomôže výrobcovi a dovozcom zistiť, kedy sa bude požadovať registrácia látky a či je potrebná predregistrácia alebo preskúmanie.

V prípade, že látka je uvedená v zozname EINECS alebo NLP, z pohľadu výrobcu alebo dovozcu sa považuje za zavedenú látku. Za určitých podmienok sa za zavedené môžu považovať aj látky, ktoré sa nenachádzajú v zozname EINECS alebo NLP: (1) Látka spĺňajúca kritériá NLP, ale nenachádza sa v zozname NLP; (2) Látka vyrobená v Spoločenstve alebo v krajinách prístupujúcich k Európskej únii v máji 2004, avšak neuvedená na trh výrobcovi alebo dovozcom najmenej 15 rokov pred nadobudnutím účinnosti nariadenia REACH.

V prípade, že látka bola predtým oznámená v súlade so smernicou 67/548/EHS, a nachádza sa teda v zozname ELINCS, na účel REACH sa predložené oznámenie považuje za registráciu (článok 24). Tieto látky sa považujú za už registrované príslušných výrobcovi alebo dovozcom a nevyžaduje sa od tohto výrobcu/dovozcu počiatočná registrácia. Výrobca/dovozca je ale povinný registráciu aktualizovať. Ďalší výrobcovia/dovozcovia látky uvedenej v zozname ELINCS (na ktorú sa nevzťahuje predchádzajúce oznámenie (oznámenia)), sú zodpovední za registráciu (tak ako v prípade nezavedenej látky) a majú zdieľať údaje s predchádzajúcim registrujúcim. Ďalší návod ohľadne týchto otázok možno nájsť v Usmernení o registrácii.

3.2.2 Zoznam v REACH po nadobudnutí účinnosti REACH

Po nadobudnutí účinnosti REACH Európska chemická agentúra bude viesť zoznam registrovaných látok. Každému registrujúcemu bude pridelené registračné číslo pre každú registrovanú látku. Európska chemická agentúra prideli číslo ES identifikujúce látku aj tým látkam, ktoré ešte nemajú pridelené číslo ES (číslo EINECS, ELINCS alebo NLP).

Európska chemická agentúra bude zoznam pravidelne aktualizovať. V rámci REACH sa bude rozširovať o nové látky (podľa REACH nazývané ako nezavedené látky). Proces registrácie umožňuje, aby sa v novom zozname registrovaných látok "opravili" "chyby" v súčasnom zozname EINECS⁴. Systém pridelovania ES čísiel novým látkam v rámci REACH bude s najväčšou pravdepodobnosťou vychádzať z metódy, ktorá sa použila pri zoznamoch EINECS, ELINCS a NLP.

Popis látky v zozname EINECS je niekedy relatívne rozsiahly. V takých prípadoch je registrujúci vyzvaný, aby príslušnú látku opísal presnejšie (napr. prostredníctvom názvu IUPAC alebo iných identifikátorov). Pokiaľ registrujúci chce využiť výhody vyplývajúce z pravidiel pre zavedené látky, mal by predsa len uviesť, pod ktorý záznam zoznamu EINECS látka patrí. V takých prípadoch Európska chemická agentúra rozhodne, či príslušnej látke prideli alebo neprideli nové číslo ES.

Ďalší návod o predregistrácii, o vytváraní fóra na výmenu informácií (SIEF) a o spoločnom predkladaní v súvislosti s identifikáciou látky je uvedený v RIP 3.4 Usmernenie o zdieľaní údajov.

3.3 POŽIADAVKY NA IDENTIFIKÁCIU LÁTKY V REACH

Keď sa v rámci legislatívy REACH požaduje registrácia, jej súčasťou sú aj informácie o identifikácii látky, ako je uvedené v bode 2 prílohy VI. Tieto informácie musia umožňovať dostatočnú identifikáciu každej látky. Pokiaľ poskytnutie informácií o jednom alebo viacerých identifikačných parametroch látky nie je technicky možné alebo sa z vedeckého hľadiska zdá, že ich poskytnutie je zbytočné, má sa to jednoznačne zdôvodniť [pozri poznámky v prílohe VI].

Na to, aby výrobcovia a dovozcovia mohli využiť prechodný režim a mohli pokračovať vo výrobe alebo dovoze aj v čase, keď pripravujú registráciu, sa pre zavedené látky v súlade s článkom 28 nariadenia REACH požaduje predregistrácia. Pokiaľ ide o požiadavky na identifikáciu látky v tomto štádiu, v rámci REACH sa nepožaduje úplná dokumentácia k identifikácii v súlade s bodom 2 prílohy VI, postačuje, aby potenciálny registrujúci uviedol názov látky alebo, ak je to vhodné, skupinu látok vrátane čísla ES a čísla CAS, ak existujú.

⁴ Zoznam EINECS bol publikovaný 15. júna 1990 a obsahuje viac ako 100 000 látok. Počas používania zoznamu sa zistilo viacero chýb (tlačové chyby, napr. nesprávny chemický názov, vzorec alebo CAS RN). Dňa 1. marca 2002 sa preto publikovalo korigendum. Neustále sa však zisťujú ďalšie nezrovnalosti.

Prehľad identifikačných parametrov látky v rozsahu prílohy VI REACH je uvedený v **tabuľke 3.1**.

Tabuľka 3.1 Identifikačné parametre látky v bode 2 Prílohy VI REACH

2.	IDENTIFIKÁCIA LÁTKY Informácie uvedené v tomto oddieli musia byť postačujúce na identifikáciu každej látky. Ak nemožno technicky poskytnúť informácie o jednej alebo viacerých ďalej uvedených položkách alebo ak sa z vedeckého hľadiska zdá, že ich poskytnutie je zbytočné, musia sa jasne uviesť dôvody.
2.1	Názov alebo iný identifikátor každej látky
2.1.1	<i>Názov (názvy) podľa názvoslovia IUPAC alebo iné medzinárodné chemické názvy</i>
2.1.2	<i>Iné názvy (bežný názov, obchodný názov, skratka)</i>
2.1.3	<i>Číslo EINECS alebo ELINCS (ak je dostupné a potrebné)</i>
2.1.4	<i>Názov a číslo CAS (ak sú dostupné)</i>
2.1.5	<i>Iný identifikačný kód (ak je dostupný)</i>
2.2	Informácie o molekulových a štruktúrnych vzorcoch každej látky
2.2.1	<i>Molekulový a štruktúrny vzorec (vrátane zápisu SMILES, ak je dostupný)</i>
2.2.2	<i>Informácie o optickej aktivite a typickom pomere (stereo)izomérov (ak je takáto informácia aplikovateľná a primeraná)</i>
2.2.3	<i>Molekulová hmotnosť alebo rozsah molekulových hmotností</i>
2.3	Zloženie každej látky
2.3.1	<i>Stupeň čistoty (%)</i>
2.3.2	<i>Druh znečistenia vrátane izomérov a vedľajších produktov</i>
2.3.3	<i>Percentuálny podiel (významných) hlavných nečistôt</i>
2.3.4	<i>Povaha a obsah (... ppm, ... %) každej prísady (napr. stabilizátorov alebo inhibítorov)</i>
2.3.5	<i>Spektrálne údaje (ultrafialové, infračervené, nukleárne magnetické rezonančné alebo hmotnostné spektrum)</i>
2.3.6	<i>Chromatogram z vysokoúčinnnej kvapalinovej chromatografie alebo plynovej chromatografie</i>
2.3.7	<i>Popis analytických metód alebo príslušné bibliografické odkazy k identifikácii látky a k prípadnej identifikácii nečistôt a prísad. Informácie musia byť postačujúce na to, aby bola metóda reprodukovateľná.</i>

4 NÁVOD NA IDENTIFIKÁCIU A POMENOVANIE LÁTKY V REACH

4.1 ÚVOD

Pravidlá pre identifikáciu a pomenovanie látky sa líšia v závislosti od typu látky. Toto usmernenie je z praktických dôvodov usporiadané tak, že u každého typu látky užívateľ nájde priamy odkaz na kapitolu, v ktorej sa nachádza príslušný návod. Na tento účel sa ďalej objasňujú jednotlivé typy látok a nakoniec aj schéma, pomocou ktorej možno vyhľadať príslušnú kapitolu.

Pri identifikácii látky by sa mali používať aspoň identifikačné parametre látky uvedené v bode 2 prílohy VI REACH (pozri **tabuľku 3.1**). Z toho dôvodu sa každá látka musí identifikovať kombináciou príslušných identifikačných parametrov:

- Názov IUPAC a/alebo iný názov a iné identifikátory, napr. číslo CAS, číslo ES (príloha VI, bod 2.1);
- Informácie o molekulových a štruktúrnych vzorcoch (príloha VI, bod 2.2);
- Chemické zloženie (príloha VI, bod 2.3).

Látka je kompletne identifikovaná svojim chemickým zložením, chemickou identitou a obsahom každej zložky v látke. Väčšinu látok síce možno identifikovať takýmto priamym spôsobom, u niektorých to však nie je možné alebo to nie je v rámci REACH postačujúce. V takýchto prípadoch sa na identifikáciu látky požadujú iné alebo doplnujúce informácie.

Látky teda možno rozdeliť do dvoch hlavných skupín:

1. „Dobre definované látky“: Látky s definovaným kvalitatívnym a kvantitatívnym zložením, ktoré možno dostatočne identifikovať na základe identifikačných parametrov uvedených v bode 2 prílohy VI REACH.
2. „UVCB látky“: Látky neznámeho alebo variabilného zloženia, komplexné reakčné produkty alebo biologické materiály. Tieto látky nemožno dostatočne identifikovať pomocou hore uvedených parametrov.

Variabilita zloženia dobre definovaných látok je špecifikovaná hornou a dolnou medznou hodnotou rozsahu koncentrácie (rozsahov koncentrácií) hlavnej zložky (hlavných zložiek). V prípade UVCB látok je variabilita relatívne veľká a/alebo nepredvídateľná.

Pripúšťa sa, že sa môžu vyskytnúť hraničné prípady medzi dobre definovanými látkami (reakčné produkty s viacerými zložkami, každá so širokým rozsahom koncentrácie) a UVCB látkami (reakčné produkty s variabilným a ťažko predvídateľným zložením). Za to, aby bola látka identifikovaná čo najvhodnejším spôsobom, zodpovedá registrujúci.

Pravidlá na identifikáciu a pomenovanie „dobre definovaných látok“ s jednou hlavnou zložkou sa líšia od pravidiel „dobre definovaných látok“, ktoré majú viac ako jednu hlavnú zložku. A u rôznych typov látok spoločne označovaných ako „UVCB látky“ sa popisujú odlišné pravidlá na identifikáciu a pomenovanie.

V **tabuľkách 4.1 a 4.2** sú uvedené hlavné identifikátory vo viacerých príkladoch rôznych typov látok. Tieto príklady sú zoskupené tak, že možno ľahko rozpoznať podobnosti a odlišnosti pri identifikácii látky.

Tabuľka 4.1 a 4.2 nepredstavuje úplný zoznam všetkých možných typov látok. Toto zoskupovanie látok spolu s pravidlami identifikácie a pomenovania by nemalo byť považované za oficiálny systém kategorizácie látok, ale má slúžiť ako praktická pomôcka na to, ako vhodne aplikovať špecifické pravidlá a ako nájsť príslušný návod v tomto usmernení.

Tabuľka 4.1 Skupina hlavných identifikátorov príkladov, ktoré predstavujú rôzne typy podobných dobre definovaných látok

Všeobecné znaky	Príklady alebo vzory	Hlavné identifikátory
Látky dobre definované chemickým zložením [kapitola 4.2.]	Jednozložkové látky, napr. - benzén (95 %) - nikel (99 %) [kapitola 4.2.1]	Chemické zloženie: jedna hlavná zložka $\geq 80\%$: - chemická identita hlavnej zložky (chemický názov, číslo CAS, číslo ES, atď.) - typická koncentrácia a dolná a horná hranica koncentrácie
	Viaczložkové látky, napr. také definované reakčné produkty ako: Reakčná zmes 2-, 3- a 4-chlórtoluénu (každý 30 %) [kapitola 4.2.2]	Chemické zloženie: zmes (reakčná zmes) hlavných zložiek v konc. medzi $\geq 10 - < 80\%$: - chemická identita každej hlavnej zložky - typické koncentrácie a dolná a horná hranica koncentrácie pre každú zložku a pre samotnú reakčnú zmes
	Látky definované ináč ako chemickým zložením, napr. grafit a diamant [kapitola 4.2.3]	Chemické zloženie ako pre jedno- alebo viaczložkovú látku a iné fyzikálne alebo charakteristické parametre, napr. kryštalomorfológia, (geologické) minerálne zloženie, atď.

Tabuľka 4.2 Skupina hlavných identifikátorov príkladov, ktoré predstavujú rôzne typy UVCB látok (látok neznámeho alebo variabilného zloženia, komplexných reakčných produktov alebo biologických materiálov)

Všeobecné znaky		Priklady alebo vzory	Hlavné identifikátory		
			zdroj	postup	iné identifikátory
UVCB látky (látky neznámeho alebo variabilného zloženia, komplexné reakčné produkty alebo biologické materiály) [Kapitola 4.3]	Biologické materiály (B)	Extrakt biologických materiálov napr. prírodné vône, prírodné oleje, prírodné farbivá a pigmenty	rastlinný alebo živočíšny druh a čeľaď	extrakcia frakcionácia, koncentrácia, izolácia, prečistenie, atď.	známe alebo generické zloženie chromatografické alebo iné záznamy odkaz na štandardy
		Komplexné biologické makromolekuly napr. enzýmy, bielkoviny, fragmenty DNA alebo RNA, hormóny, antibiotiká	časť rastliny / živočícha	<u>derivatizácia</u>	index farieb
		Produkty fermentácie antibiotiká, biopolyméry, zmesi enzýmov, destilačné zvyšky (produkty fermentácie cukru), atď.	živná pôda použitý mikroorganizmus	fermentácia izolácia produktov prečistovacie kroky	štandardný index enzýmov genetický kód stereo konfigurácia fyzikálne vlastnosti funkcia / aktivita štruktúra sekvencia aminokyselín
Chemické a minerálne látky so slabou definovaným, komplexným alebo variabilným zložením (UVC)		Reakčné zmesi s ťažko predpovedateľným a/alebo variabilným zložením	východiskové látky	<u>typ chemickej reakcie</u> : napr. esterifikácia, alkylácia, hydrogenácia	známe zloženie chromatografické alebo iné záznamy odkazy na štandardy
		frakcie alebo destiláty, napr. ropné látky hlinky, napr. bentonit dechty	ropa uhlie/rašelina nerasné plyny minerály	frakcionácia, destilácia konverzia frakcií fyzikálne spracovanie rezídua	rozsahy frakcie rozsah dĺžky reťazca pomer aromatickej a alifatickej časti známe zloženie štandardný index
		Koncentráty alebo taveniny, napr. kovové minerály, alebo rezíduá rôznych tavenín alebo metalurgických procesov, napr. troska	rudy	tavenie tepelné spracovanie rôzne metalurgické procesy	známe alebo generické zloženie koncentrácia kovov

* podčiarknuté postupy vyjadrujú syntézu novej molekuly

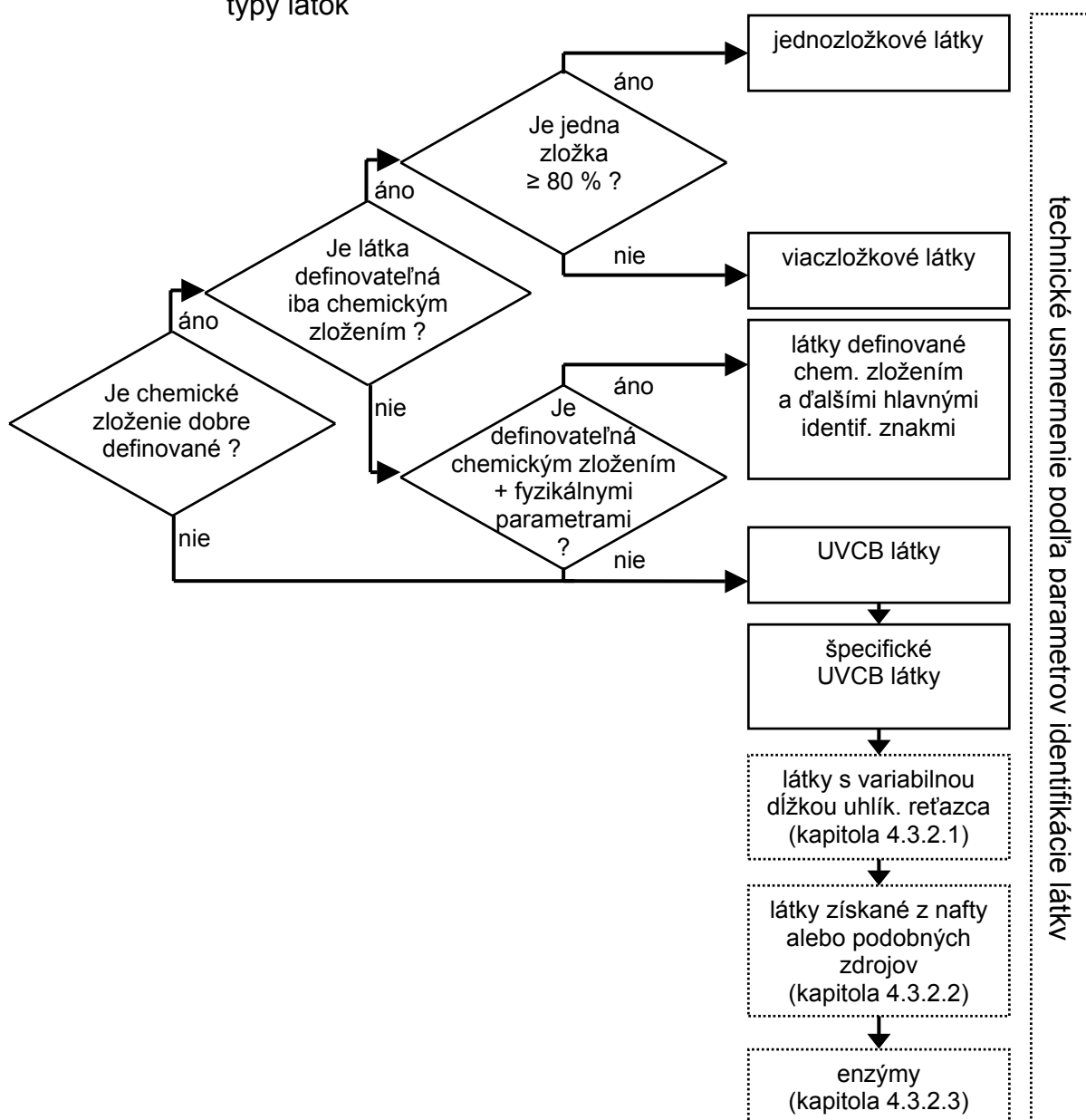
Táto kapitola je rozdelená na podkapitoly, ktoré obsahujú špecifický návod na identifikáciu rôznych typov látok. Schéma príslušných kapitol je uvedená na **obrázku 4.1**.

Schéma na **obrázku 4.1** vychádza z kritérií metódy „približných výpočtov“. Je na registrujúcom, aby si zvolil najvhodnejšiu kapitolu a identitu látky zaznamenal v súlade s pravidlami a kritériami platnými pre daný typ látky.

Základné pravidlo spočíva v tom, že látky sa v čo najväčšej možnej miere definujú chemickým zložením a identifikáciou zložiek. Iba ak to nie je technicky uskutočniteľné, použijú sa iné identifikátory, ako je špecifikované u jednotlivých typov UVCB látok.

Ak sa registrujúci od pravidiel a kritérií platných pre identifikáciu látok, ktoré sa uvádzajú v tomto technickom usmernení, odchýli, musí to zdôvodniť. Identifikácia látky by mala byť jednoznačná, zrozumiteľná a úplná.

Obrázok 4.1 Schéma kapitol a dodatkov príslušných častí usmernenia pre rôzne typy látok



Pri identifikácii látky a v prípade potreby aj pri identifikácii nečistôt a prísad sa musí uviesť prehľad analytických metód a/alebo príslušné bibliografické odkazy (body 2.3.5, 2.3.6 a 2.3.7 prílohy VI nariadenia REACH). Informácie musia byť postačujúce na to, aby bolo možné metódy reprodukovať.

4.2 LÁTKY S DOBRE DEFINOVANÝM ZLOŽENÍM

Látky s dobre definovaným zložením sa pomenúvajú podľa hlavnej zložky (hlavných zložiek). Pri niektorých typoch látok samotné chemické zloženie nepostačuje na charakterizáciu. V takýchto prípadoch sa k identifikácii látky musia doplniť niektoré ďalšie fyzikálne parametre týkajúce sa chemickej štruktúry.

Identifikácia by spravidla mala pokrývať zloženie až do 100 %, pričom každá zložka si vyžaduje úplnú chemickú špecifikáciu vrátane štruktúrnych informácií. Pre látky, ktoré sú definované svojím chemickým zložením, sa rozlišuje medzi:

- Hlavnou zložkou: Zložka, ktorá nie je prísadou ani nečistotou v látke, ktorá tvorí podstatnú časť tejto látky, a z toho dôvodu sa používa pri jej pomenovaní a detailnej identifikácii.
- Nečistotou: Zložka, ktorá nie je zámerne pridávaná a je vo vyrobenej látke prítomná. Môže pochádzať z východiskových materiálov alebo môže pochádzať zo sekundárnych alebo neúplných reakcií počas výrobného postupu. Hoci sú nečistoty sú prítomné vo finálnej látke, neboli do nej zámerne pridané.
- Prísadou: Látka, ktorá je zámerne pridávaná na stabilizáciu látky.

Všetky zložky (s výnimkou prísad), ktoré nie sú hlavnou zložkou (hlavnými zložkami) v jednozložkovej alebo viaczložkovej látke, sa považujú za nečistoty. Hoci v niektorých odvetviach sa zaužíval výraz “stopy” ([traces](#)), v tomto technickom usmernení sa používa iba výraz “nečistoty” ([impurities](#)).

Na rôzne zložky sa uplatňujú odlišné požiadavky na identifikáciu:

- Hlavné zložky sa používajú na pomenovanie látky, pričom každá hlavná zložka má byť úplne špecifikovaná všetkými relevantnými identifikátormi.
- Nečistoty neprispievajú k tvorbe názvu látky a na ich špecifikáciu postačuje názov, CAS číslo a ES číslo a/alebo molekulový vzorec.
- Prísady prispievajú k zloženiu látky (ale nie k tvorbe jej názvu) a mali by byť vždy úplne identifikované.

Na rozlíšenie medzi jednozložkovými a viaczložkovými látkami sa používa niekoľko konvencií:

- Jednozložková látka je látka, v ktorej jedna zložka je prítomná v koncentrácii aspoň 80 % hmotnostných (w/w) a ktorá obsahuje až 20 % hmotnostných (w/w) nečistôt.

Jednozložková látka sa pomenúva podľa jednej hlavnej zložky.

- Viaczložková látka je látka, ktorá pozostáva z viacerých hlavných zložiek prítomných v koncentrácii $\geq 10\%$ a $< 80\%$ hmotnostných (w/w).

Viaczložková látka sa pomenúva ako reakčná zmes dvoch alebo viacerých hlavných zložiek.

Hore uvedené pravidlá sa majú považovať za odporúčanie. Výnimka je akceptovateľná vtedy, ak sa poskytne hodnoverné zdôvodnenie.

Za normálnych okolností by sa mali špecifikovať nečistoty prítomné v koncentrácii $\geq 1\%$. Jednako, nečistoty, ktoré sú relevantné pre klasifikáciu a/alebo posúdenie PBT⁵, sa špecifikujú vždy. Informácie o zložení by v zmysle všeobecného pravidla mali byť vyplnené na 100 %.

Prísady v nariadení REACH a v tomto usmernení sú stabilizačné činidlá potrebné na zachovanie stability látky. Prísady teda predstavujú dôležitú zložku látky a berú sa do úvahy pri hmotnostnej bilancii. Jednako, mimo rámca definície REACH a tohto usmernenia výraz 'prísada' sa používa aj na označenie zámerne pridávaných látok, ktoré majú iné funkcie, napr. regulátory pH alebo farbivá (pigmenty). Tieto zámerne pridávané látky nie sú súčasťou látky ako takej a preto sa pri hmotnostnej bilancii neberú do úvahy.

Prípravky, tak ako sú definované v REACH, sú zámerne vytvorené zmesi látok a v dôsledku toho sa nepovažujú za viaczložkové látky⁶.

Špecifický návod pre jednozložkové látky možno nájsť v kapitole 4.2.1 a špecifický návod pre viaczložkové látky v kapitole 4.2.2. Návod pre látky, ktoré si vyžadujú doplňujúce informácie (napr. niektoré minerály), možno nájsť v kapitole 4.2.3.

4.2.1 Jednozložkové látky

Jednozložková látka je látka, ktorá je definovaná svojím kvantitatívnym zložením, v ktorej jedna hlavná zložka je prítomná aspoň v množstve 80 % hmotnostných (w/w).

4.2.1.1 Názvoslovná konvencia

Jednozložková látka sa pomenúva podľa hlavnej zložky. Názov sa spravidla uvádza v anglickom jazyku podľa názvoslovných pravidiel IUPAC (pozri dodatok I). Okrem toho možno uviesť aj iné medzinárodne akceptované názvy.

4.2.1.2 Identifikátory

⁵ Viac informácií o posúdení PBT a príslušných koncentračných limitov možno nájsť v usmernení RIP 3.2 o posúdení chemickej bezpečnosti, oddiel posúdenie PBT.

⁶ V rámci budúceho globálne harmonizovaného systému (GHS) klasifikácie a označovania "prípravky" sa budú nazývať "zmesi".

Jednozložková látka je identifikovaná chemickým názvom a inými identifikátormi (vrátane molekulového a štruktúrneho vzorca) hlavnej zložky a chemickou identitou nečistôt a/alebo prísad a ich typickou koncentráciou (typickými koncentraciami) a koncentračným rozsahom (rozsahmi), čo sa preukáže spektroskopickými a analytickými informáciami (údajmi).

Hlavná zložka	Obsah (%)	Nečistota	Obsah (%)	Identita látky
<i>m</i> -xylén	91	<i>o</i> -xylén	5	<i>m</i> -xylén
<i>o</i> -xylén	87	<i>m</i> -xylén	10	<i>o</i> -xylén

Za normálnych okolností je hlavná zložka prítomná v koncentrácii ≥ 80 % a mala by byť úplne špecifikovaná hore uvedenými parametrami. Nečistoty prítomné v koncentrácii ≥ 1 % by mali byť špecifikované aspoň jedným z týchto identifikátorov: chemický názov (IUPAC a/alebo CAS), CAS číslo a ES číslo a/alebo molekulový vzorec. Nečistoty, ktoré sú relevantné pre klasifikáciu a/alebo posúdenie PBT⁷ majú byť vždy špecifikované tými istými identifikátormi bez ohľadu na ich koncentráciu.

Pri správnom uplatňovaní pravidla 80 % sa pri hmotnostnej bilancii nezohľadňujú zámerne pridávané látky ako regulátory pH alebo farbivá.

“Pravidlo 80 %“ sa uplatňuje v súvislosti s oznamovaním nových látok (smernica 67/548/EHS). Možno ho považovať za pravidlo približného výpočtu. Jednako, odchýlku od tohto pravidla 80 % treba zdôvodniť. Možné príklady odôvodnenej odchýlky sú:

- Ak je koncentrácia hlavnej zložky < 80 %, pričom však možno preukázať, že látka má podobné fyzikálno-chemické vlastnosti a profil nebezpečnosti ako ostatné jednozložkové látky s tou istou identitou, ktoré spĺňajú pravidlo 80 %.
- Koncentračný rozsah hlavnej zložky a nečistôt presahuje kritérium 80 % a hlavná zložka je len zriedkavo ≤ 80 %.

Príklady									
látka	hlavná zložka	horná hranica obs.(%)	typický obsah (%)	dolná hranica obs.(%)	nečistota	horná hranica obs.(%)	typický obsah (%)	dolná hranica obs.(%)	identita látky
1	<i>o</i> -xylén	90	85	65	<i>m</i> -xylén	35	15	10	<i>o</i> -xylén
2	<i>o</i> -xylén <i>m</i> -xylén	90 35	85 15	65 10	<i>p</i> -xylén	5	4	1	<i>o</i> -xylén

Z dôvodu koncentračných rozsahov hlavnej zložky a nečistoty môže byť látka 1 a 2 považovaná za viaczložkovú látku zloženú z dvoch hlavných zložiek, *o*-xylénu a *m*-xylénu, alebo za jednozložkovú látku. Pri rozhodovaní sa v takomto prípade obidve látky považujú za jednozložkovú látku na základe skutočnosti, že *o*-xylén je väčšinou prítomný v koncentrácii > 80 %.

Usmernenie o tom, ako popisovať jednozložkové látky v programe IUCLID 5, je uvedené v kapitole 8.2.1.

⁷ Viac informácií o posúdení PBT a príslušných relevantných koncentračných limitov možno nájsť v usmernení RIP 3.2 o posúdení chemickej bezpečnosti, oddiel posúdenie PBT.

4.2.1.3 Analytické informácie

Na potvrdenie štruktúry jednodložkovej látky sú potrebné dostatočné spektrálne údaje. Možno použiť viacero vhodných spektroskopických metód, a to najmä spektroskopiю v ultrafialovej a viditeľnej oblasti (UV/VIS), infračervenú spektroskopiю (IR), spektroskopiю nukleárnej magnetickej rezonancie (NMR) a hmotnostnú spektroskopiю (MS). V prípade anorganických látok môže byť vhodnejšie použiť röntgenovú difrakciu (XRD) alebo röntgenovú fluorescenciu (XRF) alebo atómovú absorpčnú spektroskopiю (AAS).

Na potvrdenie zloženia látky je potrebné použiť chromatografické metódy, ako napríklad plynovú chromatografiю (GC) alebo vysokoúčinnú kvapalinovú chromatografiю (HPLC). Ak je to vhodné, na separáciu zložiek sa môžu použiť aj iné validované techniky.

Spektroskopické a analytické metódy sú predmetom neustálych zmien. Preto je na registrujúcom, aby predložil vhodné spektrálne a analytické údaje.

4.2.2 Viaczložkové látky

Viaczložková látka je látka definovaná svojím kvantitatívnym zložením, a jej súčasťou sú aspoň dve hlavné zložky prítomné v koncentrácii ≥ 10 % hmotnostných (w/w) a < 80 % hmotnostných (w/w). Viaczložková látka pochádza z výrobného postupu⁸.

V rámci REACH sa požaduje registrácia látky vo forme, v akej sa vyrába. Ak sa vyrába viaczložková látka, musí sa registrovať viaczložková látka^{9,10}. Rozsah, v akom sa na jednotlivé kroky výroby látky vzťahuje definícia 'výroby', sa určí z prípadu na prípad. Všetky látky, ktoré boli predtým pokryté zoznamom EINECS (napr. viaczložkové látky boli pokryté zoznamom EINECS, ak boli v tomto zozname uvedené všetky jednotlivé zložky), by mali byť považované za zavedené látky. Látka samotná sa nemusí testovať, ak profil nebezpečnosti látky možno dostatočne opísať pomocou informácií o jednotlivých zložkách.

4.2.2.1 Názvoslovná konvencia

Viaczložková látka sa pomenúva ako reakčná zmes hlavných zložiek látky samotnej, t.j. nie východiskových materiálov, ktoré sú potrebné na výrobu látky. Všeobecne zaužívaný formát má túto podobu: "reakčná zmes [názvy hlavných zložiek]". Názvy sa uvádzajú v poradí typických percentuálnych hodnôt koncentrácie, počnúc najvyššou. Na tvorbe názvu sa podieľajú len hlavné zložky, väčšinou s hodnotami

⁸ Rozdiel medzi prípravkom a viaczložkovou látkou spočíva v tom, že prípravok sa získava zmiešaním dvoch alebo viacerých látok bez chemických reakcií, zatiaľ čo viaczložková látka pochádza z chemickej reakcie.

⁹ Viaceré látky sú vyňaté z registrácie podľa REACH (napr. látky uvedené v prílohe IV).

¹⁰ Tento prístup sa nevzťahuje na viacero špecifických látok, ako sú napríklad minerály (ohľadne ďalších podrobností pozri kapitolu 7.5).

≥ 10 %. Názvy sa spravidla uvádzajú v anglickom jazyku podľa pravidiel názvoslovnia IUPAC. Okrem toho možno uviesť aj iné medzinárodne akceptované názvy.

4.2.2.2 Identifikátory

Viaczložková látka je identifikovaná chemickým názvom a identifikátormi látky samotnej, a kvantitatívnym a kvalitatívnym chemickým zložením (chemická identita, vrátane molekulového a štruktúrneho vzorca) zložiek a dokáže sa na základe analytických informácií.

Príklad				
hlavná zložka	Obsah (%)	Nečistota	Obsah (%)	Identita látky
<i>m</i> -xylén	50	<i>p</i> -xylén	5	reakčná zmes
<i>o</i> -xylén	45			<i>m</i> -xylénu a <i>o</i> -xylénu

V prípade viaczložkových látok je chemické zloženie známe, pričom pre účel identifikácie látky sú relevantné aspoň dve hlavné zložky. Okrem toho, chemické zloženie látky možno predpovedať vo forme typických hodnôt a rozsahov. Hlavné zložky sú úplne špecifikované všetkými relevantnými parametrami. Súčet typických koncentrácií hlavných zložiek (≥ 10 %) a nečistôt (< 10 %) má byť 100 %.

Pri správnom uplatňovaní pravidla 10 % a 80 % sa pri hmotnostnej bilancii nezohľadňujú zámerne pridávané látky ako regulátory pH alebo farbivá.

Nečistoty prítomné v koncentrácii ≥ 1 % by mali byť špecifikované aspoň jedným z týchto identifikátorov: chemický názov, CAS číslo a ES číslo a/alebo molekulový vzorec. Nečistoty, ktoré sú relevantné pre klasifikáciu a/alebo posúdenie PBT, majú byť vždy špecifikované tými istými identifikátormi, bez ohľadu na ich koncentráciu.

Príklad								
Hlavná zložka	Horná hranica obs. (%)	Typický obsah (%)	Dolná hranica obs. (%)	Nečis-tota	Horná hranica obs. (%)	Typický obsah (%)	Dolná hranica obs. (%)	Identita látky
anilín	90	75	65	fenantrén	5	4	1	reakčná zmes anilínu a naftalénu
naftalén	35	20	10					

Podľa pravidiel uvedených v tomto usmernení je táto látka viaczložková. Hoci rozsah jednej zložky je > 80 %, stáva sa tak len zriedkavo a typické zloženie je < 80 %.

V niektorých prípadoch je vhodné považovať látku za viaczložkovú aj vtedy, keď jedna zložka je prítomná v množstve ≥ 80 %. Látka napríklad obsahuje dve zložky, jednu v množstve 85 % a druhú v množstve 10 %, zvyšok tvoria nečistoty. Obidve zložky sa podieľajú na požadovanom technickom účinku látky a majú preň podstatný význam. V takom prípade, napriek tomu, že jedna zložka je prítomná v množstve > 80 %, látku možno popísať ako dvojzložkovú.

Návod o tom, ako popisovať viaczložkové látky v programe IUCLID 5, je uvedený v kapitole 8.2.2.

4.2.2.3 Analytické informácie

V prípade, keď spektrálne údaje poskytujú informácie o zložení viaczložkovej látky, mali by sa tieto informácie uviesť. Možno použiť viacero vhodných spektroskopických metód, a to najmä spektroskopiю v ultrafialovej a viditeľnej oblasti (UV/VIS), infračervenú spektroskopiю (IR), spektroskopiю nukleárnej magnetickej rezonancie (NMR) a hmotnostnú spektroskopiю (MS). V prípade anorganických látok môže byť vhodnejšie použiť röntgenovú difrakciu (XRD) alebo röntgenovú fluorescenciu (XRF) alebo atómovú absorpčnú spektroskopiю (AAS).

Na potvrdenie zloženia látky je potrebné použiť chromatografické metódy, ako napríklad plynovú chromatografiю (GC) alebo vysokoúčinnú kvapalinovú chromatografiю (HPLC). Ak je to vhodné, na separáciu zložiek sa môžu použiť aj iné validované techniky.

Spektroskopické a analytické metódy sú predmetom neustálych zmien. Preto je na registrujúcom, aby predložil vhodné spektrálne a analytické údaje.

4.2.2.4 Registrácia jednotlivých zložiek viaczložkovej látky

Zaznamenávanie identity látok na účely (pred)registrácie by malo spravidla nadväzovať na zásadu uplatňovanú v súvislosti s viaczložkovými látkami (t.j. registráciu viaczložkovej látky). V odôvodnených prípadoch sa možno od uplatňovania tejto zásady odchýliť a registrovať jednotlivé zložky. Možnosť odchýliť sa od štandardného prípadu identifikácie (a potenciálnej registrácie) látok na základe jej jednotlivých zložiek vzniká, keď

- nie sú zmiernené požiadavky na poskytovanie informácií;
- existujú dostatočné údaje, ktorými možno zdôvodniť registráciu jednotlivých zložiek, t.j. keď na rozdiel od uplatňovania štandardnej zásady za bežných okolností nevzniká potreba vykonať ďalšie testovanie (na stavovcoch);
- v dôsledku registrácie jednotlivých zložiek sa celý postup zefektívni (t.j. predíde sa početným registráciám látok, ktoré pozostávajú z rovnakých zložiek);
- sa poskytujú informácie o zložení jednotlivých reakčných zmesí.

Možnosť uplatňovania takejto flexibility by sa však nemala zneužívať obchádzaním požiadaviek na poskytovanie údajov. V prípade napr. ročného množstva 1 200 ton viaczložkovej látky "(C + D)", ktorá pozostáva z 50 % C a 50 % D, pri uplatnení tejto zásady by boli potrebné dve registrácie obsahujúce tieto informácie:

Látka C

- Množstvo 600 ton

- Musia byť splnené požiadavky na poskytovanie údajov vzťahujúce sa na množstvo > 1000 ton (príloha X)

Látka D

- Množstvo 600 ton
- Musia byť splnené požiadavky na poskytovanie údajov vzťahujúce sa na množstvo > 1000 ton (príloha X)

Táto zásada sa musí spojiť s požiadavkou REACH týkajúcou sa sčítania objemov tej istej látky pripadajúcich na jednu právnickú osobu. Navrhuje sa stanoviť tieto požiadavky na poskytovanie údajov:

- sčítat všetky objemy jednotlivých zložiek (podľa množstiev obsiahnutých v látke)
- vychádzať z najvyššieho objemu látky, ktorá obsahuje túto zložku.

Požiadavky na poskytovanie informácií by sa mali stanoviť na základe najvyššieho výsledku. Na účel oznamovania množstiev sa berie do úvahy výsledok sčítania množstiev každej jednotlivej zložky. Na ilustráciu praktického uplatňovania tejto zásady sú nižšie uvedené zjednodušené príklady:

Príklad 1

Viaczložková látka "C+D+E" pochádza z postupu v rámci jednej právnickej osoby, z ktorej pochádzajú rôzne látky:

Látka 1: 50 % C a 25 % D a 25 % E, 1 100 ton ročne

Látka 2: 50 % C a 50 % D, 500 ton ročne

Aj v tomto prípade je východiskovým bodom reakčný produkt: obidve látky by sa mali registrovať ako viaczložkové. Ak sa uplatní zásada registrácie jednotlivých zložiek¹¹, platí toto:

V tomto prípade by sa látka D oznámila takto:

Množstvo: $(25 \% \cdot 1100) + (50 \% \cdot 500) = 525$ ton ročne

Pri určovaní požiadaviek na poskytovanie informácií sa vychádza z najprísnejšej požiadavky. V tomto prípade: > 1 000 ton ročne, pretože celkové množstvo viaczložkovej látky "C+D+E" je väčšie ako 1 000 ton ročne.

Poznámka: v tomto prípade by sa rovnakým spôsobom mali registrovať látky C a E.

Príklad 2

¹¹ Príklad má len ilustrovať stanovenie požiadaviek na poskytovanie informácií a oznamovanie množstiev. Nie je určený na to, či je tento prístup v tomto prípade odôvodnený.

Viaczložková látka "G+H+I" pochádza z postupu v rámci jednej právnickej osoby, z ktorej pochádzajú rôzne látky:

Látka 3: 65 % G a 15 % H a 20 % I, 90 ton ročne

Látka 4: 60 % G a 40 % H, 90 ton ročne

Oznamovanie látky G:

Množstvo: $(65 \cdot 90) + (60 \% \cdot 90) = 112,5$ ton ročne

Pri určovaní požiadaviek na poskytovanie informácií sa vychádza z najprísnejšej požiadavky.

V tomto prípade: > 100 ton ročne, pretože celkové množstvo zložky G je väčšie ako 100 ton ročne.

Poznámka: v tomto príklade by sa rovnakým spôsobom mali registrovať látky H a I.

Okrem stanovenia uvedenej požiadavky na stanovovanie informácií sa berie do úvahy aj počet štúdií (na stavovcoch), ktoré treba vykonať. Skôr ako sa rozhodne o použití určitej stratégie, potenciálni registrujúci musia zvážiť, či existuje dostatok štúdií na stavovcoch a či sa v dôsledku uplatňovania navrhovanej flexibility zníži alebo zvýši potreba nového testovania (na stavovcoch). Zvoliť by sa mala stratégia, ktorá umožňuje vyhnúť sa novému testovaniu (na stavovcoch).

V prípade pochybností by sa ako štandardný postup pri uvádzaní identity látky pre účel registrácie vždy mala identifikovať látka vo forme v akej je vyrábaná.

4.2.3 Látky definované chemickým zložením a inými hlavnými identifikátormi

Na to, aby bola uznaná identifikácia látky u niektorých látok (napr. anorganických minerálov), ktoré môžu byť identifikované svojim chemickým zložením, musia byť ďalej špecifikované doplňujúcimi identifikátormi. Tieto látky môžu byť buď jednozložkové alebo viaczložkové látky, avšak okrem identifikačných parametrov látky popísaných v predchádzajúcich kapitolách, je na jasný popis identity látky potrebné uviesť aj iné hlavné identifikátory.

Príklady

Pri niektorých nekovových mineráloch (z prírodných alebo antropogénnych zdrojov) s unikátnou štruktúrou je na jednoznačnú identifikáciu potrebná aj morfológia a minerálne zloženie. Ako príklad môže slúžiť kaolín (CAS 1332-58-7) zložený z kaolinitu, biskremičitanu draselno-hlinitého, živca a kremeňa.

V dôsledku najnovšieho vývoja v nanotechnológii a poznatkov, ktoré sa získali ohľadne nebezpečných účinkov, môže v budúcnosti vzniknúť potreba ďalších informácií o látkach. Súčasný stav poznania nie je postačujúci na to, aby sa do tohto usmernenia zahrnul aj návod na identifikáciu látok vo forme nanočastíc.

4.2.3.1 Názvoslovná konvencia

V zásade sa uplatňuje tá istá názvoslovná konvencia, ako je tomu v prípade jednozložkových (pozri kapitolu 4.2.1) alebo viaczložkových látok (pozri kapitolu 4.2.2).

V prípade anorganických minerálov môžu byť pre zložky použité mineralogické názvy. Napríklad apatit je viaczložková látka pozostávajúca zo skupiny fosfátových minerálov, ktoré sa zvyčajne označujú ako hydroxyapatit, fluórapatit a chlórapatit, ktoré sú pomenované podľa vysokých koncentrácií iónov OH⁻, resp. F⁻, alebo Cl⁻ v kryštalickej mriežke. Vzorec zmesi troch najbežnejších druhov je Ca₅(PO₄)₃(OH, F, Cl). Ďalším príkladom je aragonit, jedna zo zvláštnych kryštalickej štruktúry uhličitanu vápenatého.

4.2.3.2 Identifikátory

Tieto látky sú identifikované a pomenované v súlade s pravidlami platnými pre jednozložkové (pozri kapitolu 4.2.1) alebo viaczložkové látky (pozri kapitolu 4.2.2). Ostatné špecifické hlavné identifikačné parametre sa používajú v závislosti od príslušnej látky. Ako príklady iných hlavných identifikátorov možno uviesť elementárne zloženie so spektrálnymi údajmi, kryštalická štruktúra zistená röntgenovou difrakciou (XRD), infračervené absorpčné píky, index bobtnavosti, výmenná kapacita kationov alebo iné fyzikálne a chemické vlastnosti.

V prípade minerálov je dôležité spojiť výsledky elementárneho zloženia so spektrálnymi údajmi, aby sa identifikovalo mineralogické zloženie a kryštalická štruktúra, čo sa potom potvrdí charakteristickými fyzikálno-chemickými vlastnosťami, ako je kryštalická štruktúra (zistená röntgenovou difrakciou), tvar, tvrdosť, bobtnavosť, hustota a/alebo povrchová plocha (špecifický povrch).

Príklady špecifických doplnkových hlavných identifikátorov možno uviesť pre špecifické minerály, keďže minerály majú charakteristické fyzikálno-chemické vlastnosti, ktoré umožňujú ich úplnú identifikáciu, napr.: veľmi nízka tvrdosť mastenca, bobtnavosť bentonitu, tvary diatomitu, veľmi vysoká hustota baritu a povrchová plocha (špecifický povrch) (adsorpcia dusíka).

Návod o tom, ako opisovať látky s definovaným chemickým zložením a iné hlavné identifikátory v programe IUCLID 5, je uvedený v kapitole 8.2.3.

4.2.3.3 Analytické informácie

Mali by sa uvádzať tie isté analytické informácie ako pri jednozložkových (pozri kapitolu 4.2.2) alebo viaczložkových látkach (pozri kapitolu 4.2.2). U látok, u ktorých na identifikáciu nepostačujú spektrálne údaje, chromatogramy GC alebo HPLC, sa uvedú informácie získané inými analytickými technikami, napr. röntgenovou difrakciou u minerálov, elementárnou analýzou atď. Najdôležitejšie je, aby boli poskytnuté dostatočné informácie umožňujúce potvrdiť štruktúru látky.

4.3 UVCB LÁTKY

Látky neznámeho alebo variabilného zloženia, komplexné reakčné produkty alebo biologické materiály (Substances of **U**nknown or **V**ariable composition, **C**omplex reaction products or **B**iological materials), nazývané tiež **UVCB** látky, nemôžu byť dostatočne identifikované svojím chemickým zložením, pretože:

- Počet zložiek je relatívne veľký a/alebo
- Zloženie je do značnej miery neznáme a/alebo
- Variabilita zloženia je relatívne vysoká alebo nedostatočne predvídateľná.

V dôsledku toho si UVCB látky okrem známych údajov o chemickom zložení na svoju identifikáciu vyžadujú aj iné typy informácií.

Ako vidieť v **tabuľke 4.2**, hlavné identifikátory pre rôzne typy UVCB látok súvisia so zdrojom látky a s použitým postupom; alebo patria do skupiny “iných hlavných identifikátorov” (napr. “chromatografické alebo iné záznamy”). Počet a druh identifikátorov uvedených v **tabuľke 4.2** ilustruje variabilitu typov a nemožno ich považovať za vyčerpávajúci prehľad. V prípade, keď je známe chemické zloženie napr. komplexného reakčného produktu alebo látky prírodného pôvodu, látka by sa mala identifikovať buď ako jednozložková alebo ako viaczložková. Pokiaľ sa látka definuje ako UVCB látka, možno očakávať, že akákoľvek významná zmena zdroja alebo postupu bude mať za následok vznik odlišnej látky, ktorá by sa mala opäť registrovať. Ak sa reakčná zmes identifikuje ako “viaczložková látka” látka môže pochádzať z rozdielného zdroja a/alebo je získaná pomocou iných postupov, pokiaľ zloženie konečnej látky zostane v stanovenom rozsahu. V takom prípade by sa nová registrácia nepožadovala.

Všeobecný návod pre UVCB látky možno nájsť v kapitole 4.3.1 a špecifický návod pre špecifické typy UVCB látok, ako sú látky s variabilnou dĺžkou uhlíkového reťazca, látky získané z ropy alebo podobných zdrojov a enzýmy, možno nájsť v kapitole 4.3.2.

4.3.1 Všeobecný návod o UVCB látkach

Táto kapitola usmernenia obsahuje všeobecný návod o tom, ako identifikovať UVCB látky okrem identifikačných parametrov uvedených v prílohe VI (bod 2) REACH aj pomocou iných hlavných identifikátorov.

4.3.1.1 Informácie o chemickom zložení

UVCB látky buď nemôžu byť špecifikované len pomocou IUPAC názvu zložiek, pretože nemožno identifikovať všetky zložky, alebo môžu byť špecifikované všeobecne (genericky), avšak vzhľadom na variabilitu presného zloženia s nedostatočnou presnosťou. Vzhľadom na to, že zložky nemožno dostatočne odlíšiť od nečistôt, výrazy “hlavné zložky” a “nečistoty” by sa z pohľadu UVCB látok nemali považovať za relevantné.

Jednako, chemické zloženie a identita zložiek by sa mali uvádzať, pokiaľ sú známe. Opis zloženia možno uvádzať aj vo všeobecnejšej forme, napríklad “lineárne mastné C₈-C₁₆ kyseliny” alebo “alkoholové etoxyláty s alkoholmi C₁₀-C₁₄ a 4-10 etoxylátové jednotky”. Okrem toho možno na základe známych referenčných vzoriek alebo štandardov uviesť informácie o chemickom zložení; a v mnohých prípadoch možno použiť aj indexy alebo existujúce kódy. Iné všeobecné informácie o zložení môžu pozostávať z takzvaných “odtlačkov”, t.j. napr. chromatografických alebo spektrálnych záznamov, ktoré znázorňujú charakteristickú distribúciu pík.

V prípade UVCB látok všetky známe zložky prítomné v koncentráciách $\geq 10\%$ by mali byť špecifikované aspoň názvom IUPAC v anglickom jazyku a najlepšie aj CAS číslom; uviesť by sa mali aj typické koncentrácie a rozsahy koncentrácií známych zložiek. Zložky, ktoré sú dôležité pre klasifikáciu alebo hodnotenie PBT¹² látky sa za každých okolností bez ohľadu na ich koncentráciu identifikujú pomocou tých istých identifikátorov.

Neznáme zložky sa v rámci možností identifikujú všeobecným popisom ich chemickej povahy. Prísady by sa úplne mali identifikovať podobným spôsobom, ako sa to opisuje v prípade dobre definovaných látok.

4.3.1.2 Hlavné identifikačné parametre – názov, zdroj a postup

Keďže samotné chemické zloženie na identifikáciu látky nepostačuje, látka sa spravidla identifikuje jej názvom a pôvodom alebo zdrojom a najdôležitejšími krokmi počas spracovania. Dôležitými identifikátormi môžu byť aj iné vlastnosti látky, či už ako dôležité všeobecné identifikátory (napr. teplota varu) alebo ako rozhodujúce identifikátory pre špecifické skupiny látok (napríklad katalytická aktivita enzýmov).

1. Názvoslovná konvencia

Názov UVCB látky je vo všeobecnosti kombináciou vyjadrenia zdroja a postupu, ktorý má všeobecný formát (tvar): najprv zdroj a potom postup (postupy).

- Látka získaná z biologických zdrojov je identifikovaná názvom druhu.
- Látka získaná z nebiologických zdrojov je identifikovaná východiskovými materiálmi.
- Postupy sú identifikované typom chemickej reakcie, ak zahŕňa syntézu nových molekúl, alebo ako typ rafinačného kroku, napr. extrakcia, frakcionácia, koncentrácia, alebo ako rezíduum.

Príklady	
číslo ES	názov ES
296-358-2	levanduľa, <i>Lavandula hybrida</i> , extrakty, acetylované
307-507-9	levanduľa, <i>Lavandula latifolia</i> , extrakt, sírený, soľ s paládiom

¹² Viac informácií o posúdení PBT a príslušných relevantných koncentračných limitov možno nájsť v usmernení RIP 3.2 o posúdení chemickej bezpečnosti, oddiel posúdenie PBT.

V prípade reakčných produktov sa v ES zozname použili rôzne formáty, napr.:

- EINECS: Hlavný východiskový materiál, reakčný produkt (reakčné produkty) iného východiskového materiálu (iných východiskových materiálov)
- ELINCS: Reakčný produkt (reakčné produkty) východiskového materiálu (východiskových materiálov)

Príklady	
číslo ES	názov ES
232-341-8	kyselina dusičná, reakčný produkt s hydrochloridom 4-metylbenzén-1,3-diamínu
263-151-3	masné kyseliny, kokos, reakčné produkty s dietyléntriámínom
400-160-5	reakčné produkty masných kyselín tallového oleja, dietanolamínu a kyseliny boritej
428-190-4	reakčný produkt 2,4-diamino-6-[2-(2-metyl-1 <i>H</i> -imidazol-1-yl)etyl]-1,3,5-triazínu a kyseliny kyanúrovej

V tomto usmernení má názov reakčných produktov spravidla formát (tvar) "reakčný produkt [názvy východiskových materiálov]. Názvy sa v zásade uvádzajú v anglickom jazyku podľa názvoslovných pravidiel IUPAC. Okrem toho možno uvádzať aj iné medzinárodne akceptované názvy. Slovo "reakcia" v názve sa odporúča nahradiť špecifickým typom všeobecne opísanej reakcie, napr. esterifikácia alebo tvorba soli atď. (pozri návod v štyroch špecifických UVCB podtriedach nižšie).

2. Zdroj

Zdroj možno rozdeliť do dvoch skupín:

2.1 Zdroje biologickej povahy

Látky biologického pôvodu musia byť definované rodom, druhom a čeľad'ou, napr. *Pinus cembra*, *Pinaceae* znamená *Pinus* (rod), *cembra* (druh), *Pinaceae* (čeľad'), a kmeňom alebo genetickým typom (genotypom), ak je to relevantné. Ak je to vhodné, uvádza sa aj tkanivo alebo časť organizmu, ktorá sa použila na extrakciu látky, napr. kostná dreň, pankreas; alebo byl', semená alebo korene.

Príklady	
číslo ES	názov ES
283-294-5	<i>Saccharomyces cerevisiae</i> , extrakt
	popis ES Extrakt a ich fyzikálne modifikované deriváty ako sú tinktúry, konkréty, absolúty (čistý koncentrovaný aromatický rastlinný extrakt), vonné oleje, oleoživice, terpény, bezterpénové frakcie, destiláty, zvyšky, atď., získané z <i>Saccharomyces cerevisiae</i>, <i>Saccharomycelaceae</i>.

296-350-9	<i>Arnica mexicana</i> , extrakt
	popis ES
	Extrakty a ich fyzikálne modifikované deriváty ako sú tinktúry, odparky, absolúty (čistý koncentrovaný aromatický rastlinný extrakt), esenciálne oleje, balzamy, terpény, bezterpénové frakcie, destiláty, zvyšky, a pod., získané z <i>Arnica mexicana</i> , <i>Compositae</i> .

2.2 Chemické alebo minerálne zdroje

V prípade reakčných produktov chemických reakcií sa východiskové materiály musia opísať pomocou ich názvu IUPAC v anglickom jazyku. Minerálne zdroje sa musia opísať všeobecnými výrazmi, napr. fosfátové rudy, bauxit, kaolín, zemný plyn, uhlie, rašelina.

3. Postup

Postupy sú identifikované typom chemickej reakcie, ak zahŕňa syntézu nových molekúl, alebo ako typ rafinačného kroku, napr. extrakcia, frakcionácia, koncentrácia, alebo ako rezíduum rafinácie.

V prípade niektorých látok, napr. chemických derivátov, sa postup popisuje ako kombinácia rafinácie a syntézy.

- Syntéza

Medzi východiskovými materiálmi prebieha určitá chemická alebo biochemická reakcia za vzniku látky. Napríklad Grignardova reakcia, sulfonácia, enzymatické štiepenie proteázou alebo lipázou atď. K tomuto typu patria aj mnohé derivatizačné reakcie.

V prípade novo syntetizovaných látok, u ktorých nemožno uviesť chemické zloženie, sú hlavným identifikátorom východiskové materiály spolu so špecifikáciou reakcie, t.j. typom chemickej reakcie. Typ chemickej reakcie naznačuje, ktoré molekuly môžu byť prítomné v látke. Existuje viacero typov finálnej chemickej reakcie: hydrolýza, esterifikácia, alkylácia, chlorácia atď. Keďže toto poskytuje iba všeobecné informácie o možných produkovaných látkach, v mnohých prípadoch bude na úplnú charakterizáciu a identifikáciu látky potrebný aj chromatografický záznam látky.

Príklady	
číslo ES	názov ES
294-801-4	ľanový olej, epoxidovaný, produkty reakcie s tetraetylénpentamínom
401-530-9	reakčný produkt [2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzofenónu a trietoxysilánu] s [produktmi hydrolýzy oxidu kremičitého a trimetoxymetyl)silánu]

- Rafinácia (prečisťovanie)

Rafináciu možno rozličným spôsobom použiť u látok prírodného alebo minerálneho pôvodu v prípade, keď sa nemení chemická identita zložiek, ale mení sa ich koncentrácia, napr. spracovanie rastlinného tkaniva za studena a následná extrakcia alkoholom.

Rafináciu možno ďalej definovať takými postupmi, akými je extrakcia. Identifikácia látky závisí od typu postupu:

- V prípade látok získaných fyzikálnymi metódami, napr. rafináciou alebo frakcionáciou, sa špecifikuje hraničný rozsah a parametre frakcie (napr. veľkosť molekuly, dĺžka reťazca, teplota varu, rozsah prchavosti atď.);
- V prípade látok získaných koncentrovaním, napr. produktov z metalurgických procesov, odstredených zrazenín, filtračných zvyškov atď., sa koncentračný krok špecifikuje spolu so všeobecným zložením výslednej látky v porovnaní s východiskovým materiálom.

Príklady	
číslo ES	názov ES
408-250-6	koncentrát organovolfrámových zlúčenín (reakčné produkty chloridu volfrámového s 2-metylpropán-2-olom, nonylfenolom a pentán-2,4-diólom)

- V prípade rezíduí zo špecifickej reakcie, napr. trosky, dechtov a konečných ťažkých destilačných frakcií, musí byť postup popísaný spolu so všeobecným zložením výslednej látky;

Príklady	
číslo ES	názov ES
283-659-9	cín, pretavené zvyšky
	popis ES Látka vznikajúca pri používaní a výrobe cínu a jeho zliatin získaných z primárnych a sekundárnych zdrojov včítane recyklovaných intermediátov z tovární. Primárne pozostáva zo zlúčenín cínu a môže obsahovať aj iné zvyškové neželezné kovy a ich zlúčeniny.
293-693-6	sójová múčka, zvyšok po extrakcii proteínov
	popis ES Vedľajší produkt extrakcie odtučnenej sójovej múčky etanolom, ktorý obsahuje predovšetkým sacharidy.

- V prípade extraktov sa uvedie extrakčná metóda, rozpúšťadlo použité na extrakciu a iné relevantné podmienky, napr. teplota/teplotný rozsah.
- V prípade kombinovaného spracovania sa okrem informácií o zdroji špecifikuje (všeobecným spôsobom) aj každý krok postupu. Kombinované spracovanie má mimoriadny význam v prípade chemických derivatizácií.

Príklady:

- o Rastlina sa najprv extrahuje, extrakt sa destiluje a destilačná frakcia rastlinného extraktu sa používa na chemickú derivatizáciu. Výsledná látka sa môže ďalej zbavovať nečistôt (prečisťovať). Prečistený produkt by prípadne mohol byť presne definovaný chemickým zložením, pričom nie je potrebné látku identifikovať ako UVCB látku. Pokiaľ sa má produkt predsa len považovať za UVCB látku, kombinované spracovanie možno opísať ako "prečistený chemický derivát destilovanej frakcie rastlinného extraktu".
Pokiaľ ďalšie spracovanie extraktu zahŕňa iba fyzikálnu derivatizáciu, zloženie sa zmení, ale bez úmyselnej syntézy nových molekúl. Jednako, v dôsledku zmeny zloženia vznikne odlišná látka, napr. destilát alebo zrazenina rastlinného extraktu.
- o Pri výrobe ropných produktov sa často zároveň používa chemická derivatizácia aj frakcionácia. Napríklad destiláciou a následným krakovaním ropy vzniká frakcia východiskového materiálu ako aj nové molekuly. Takže v takom prípade by sa mali identifikovať oba typy postupov, alebo by sa mal špecifikovať destilát ako východiskový materiál krakovania. Platí to najmä pre ropné deriváty, ktoré často krát vznikajú ako výsledok kombinácie postupov. Jednako, na identifikáciu ropných látok možno použiť zvláštny špecifický systém (pozri kapitolu 4.3.2.2).

Kedže chemický derivát extraktu spravidla neobsahuje tie isté zložky ako východiskový extrakt, považuje sa za odlišnú látku. V dôsledku uplatňovania tohto pravidla sa môže stať, že identifikovanie názvom a popisom sa bude líšiť od pôvodného názvu a popisu v zozname EINECS. V čase, keď sa vytváral zoznam EINECS, extrakty z rôznych postupov, rôzne rozpúšťadlá a dokonca aj fyzikálne alebo chemické deriváty často spadali pod jediný zápis. Tieto látky možno v rámci REACH registrovať ako jedinú látku za predpokladu, že nebezpečné vlastnosti nie sú odlišné a oprávňujú na rovnakú klasifikáciu. Jednako, môžu sa vyskytnúť dôvody, napr. príliš všeobecný popis látky v zozname EINECS, pre ktoré sa viacero odlišných látok identifikuje pod jedným číslom EINECS.

4. Iné identifikačné parametre látky

Okrem chemického názvu, zdroja a špecifikácie postupu by UVCB látka mala obsahovať všetky relevantné informácie, ako sa požaduje v bode 2 prílohy VI REACH.

Iné identifikačné parametre môžu byť relevantné najmä v prípade špecifických typov UVCB látok. Ďalšie identifikátory môžu byť tieto:

- Všeobecný popis chemického zloženia;
- Chromatografický záznam alebo iné typy odtlačkov;
- Referenčný materiál (napr. ISO);
- Fyzikálno-chemické parametre (napr. teplota varu);
- číslo v indexe farieb (Colour Index Number – CIN);
- číslo AISE.

Špecifický návod o tom, aké pravidlá a kritériá používať pri pomenovaní, uvádzaní informácií o zdroji a postupe pre účely identifikácie UVCB látok, je uvedený pre rôzne typy zdrojov a postupov nižšie. V nižšie uvedených odsekoch sa opisujú štyri podtypy UVCB látok ako kombinácia biologických alebo chemických/minerálnych zdrojov a postupov (syntéza alebo rafinácia).

Návod o tom, ako popisovať UVCB látky v programe IUCLID 5, je uvedený v kapitole 8.2.4.

UVCB podtyp 1, kde zdroj je biologický a postupom je syntéza

Látky biologického charakteru môžu byť modifikované pri (bio)chemickom spracovaní, pričom vznikajú zložky, ktoré neboli prítomné vo východiskovom materiáli, napr. chemické deriváty rastlinných extraktov alebo produkty enzymatického spracovania extraktov. Napríklad proteíny môžu byť hydrolyzované proteázou, pričom vznikajú oligopeptidy, alebo drevná celulóza môže byť karboxylovaná, pričom vznikne karboxymetylcelulóza (CMC).

K tomuto podtypu UVCB látok môžu patriť aj produkty fermentácie. Napríklad destilačné zvyšky získané pri fermentácii cukru obsahujú v porovnaní s cukrom mnohé odlišné zložky. Keď sa produkty fermentácie ďalej prečisťujú, látky možno napokon úplne identifikovať chemickým zložením a nemali by sa viac identifikovať ako UVCB látky.

Enzymy predstavujú špeciálnu skupinu látok, ktoré môžu byť zo zdroja biologického pôvodu získané extrakciou a ďalšou rafináciou. Aj keď zdroj a postup by sa mohli presne špecifikovať, nezískajú sa tým špecifické informácie o enzýme. Pre tieto látky sa má používať špecifický systém klasifikácie, pomenovania a identifikácie (pozri kapitolu 4.3.2.3).

Pri identifikácii látky sa uvádza konečný krok postupu a/alebo akýkoľvek iný krok, ktorý je pre identifikáciu látky relevantný.

Opis chemického postupu má byť všeobecný opis typu postupu (esterifikácia, alkalická hydrolýza, alkylácia, chlorácia, substitúcia atď.), spolu s relevantnými podmienkami pri postupe.

Opis biochemického postupu môže byť všeobecný popis katalyzovanej reakcie, spolu s názvom enzýmu, ktorý reakciu katalyzuje.

V prípade látok produkovaných fermentáciou alebo v prípade (tkanivových) kultúr jednotlivých druhov sa majú uvádzať fermentujúce druhy, typ a všeobecné podmienky fermentácie (šaržová alebo kontinuálna, aeróbna, anaeróbna, anoxická, teplota, pH atď.), spolu so všetkými ďalšími krokmi postupu, ktoré sa použili na izolovanie fermentačných produktov, napr. odstreďovanie, zrážanie, extrakcia atď. Ak sa tieto látky ďalej prečisťujú, môže vzniknúť frakcia, koncentrát alebo rezíduum. Tieto ďalej spracované látky sa identifikujú špecifikovaním ďalších krokov postupu.

UVCB podtyp 2, kde zdroj je chemický alebo minerálny a postupom je syntéza

UVCB látky získané z chemických alebo minerálnych zdrojov, získané postupom, počas ktorého prebieha syntéza nových molekúl, sú "reakčné produkty". Produktmi chemickej reakcie sú napríklad produkty esterifikácie, alkylácie alebo chlorácie. Biochemické reakcie za použitia izolovaných enzýmov predstavujú špeciálne typy

chemických reakcií. Jednako, ak sa aplikuje komplexný biochemický spôsob syntézy za použitia celých mikroorganizmov, je vhodnejšie považovať výslednú látku za produkt fermentácie a identifikovať ju podľa fermentačného postupu a fermentujúcich druhov, a nie podľa východiskových materiálov (pozri látky UVCB podtyp 4).

Ako UVCB by sa nemal automaticky špecifikovať každý reakčný produkt. Pokiaľ reakčný produkt možno dostatočne definovať chemickým zložením (vrátane určitej miery variability), radšej by sa mal identifikovať ako viaczložková látka (pozri kapitolu 4.2.2). Látka by sa mala identifikovať ako UVCB látka ("reakčný produkt") len vtedy, keď zloženie reakčného produktu nie je dostatočne známe alebo sa nedá dostatočne predpovedať. Pri identifikácii reakčného produktu sa vychádza z východiskových materiálov, ktoré sa podieľajú na chemickej reakcii a z biochemického reakčného postupu, v rámci ktorého látka vzniká.

Príklady		
číslo ES	EINECS názov	číslo CAS
294-006-2	kyselina nonándiová, reakčné produkty s 2-amino-2-metylpropán-1-olom	91672-02-5
294-148-5	formaldehyd, reakčné produkty s 2,2'-oxydietanolom a fenolom	91673-32-4

V prípade reakčných produktov sa ako hlavný identifikátor používa opis výrobného postupu. Pri identifikácii látky sa uvádza konečný alebo najvýznamnejší krok postupu. Popis chemického postupu je všeobecný popis typu postupu (napr. esterifikácia, alkalická hydrolýza, alkylácia, chlorácia, substitúcia atď.), spolu s relevantnými podmienkami pri postupe. Biochemický postup sa popisuje typom reakcie, spolu s názvom enzýmu, ktorý reakciu katalyzuje.

UVCB podtyp 3, kde zdroj je biologický a postupom je rafinácia

UVCB látkami biologického pôvodu, ktoré sú výsledkom postupu rafinácie, počas ktorého zámerne nevznikajú nové molekuly, môžu byť napr. extrakty, frakcie extraktu, koncentráty extraktu, prečistený extrakt alebo rezíduá látok biologického pôvodu pochádzajúce z postupu.

Len čo sa extrakt ďalej spracuje, látka viac nie je totožná s extraktom, ale predstavuje inú látku, ktorá patrí do iného podtypu UVCB, napr. frakcia alebo rezíduum extraktu. Tieto látky sa špecifikujú podľa ďalších parametrov spracovania. Pokiaľ sa extrakt modifikuje v rámci chemických alebo biochemických reakcií, pričom vznikajú nové molekuly (deriváty), látka sa identifikuje podľa usmernenia pre UVCB látky podtyp 2 alebo podľa kapitoly 4.2 pre dobre definované látky.

Táto diferenciácia ďalej spracovaných extraktov môže mať za následok, že nový názov alebo popis bude odlišný od tých, ktoré sú uvedené v zozname EINECS. V čase, keď sa vytváral zoznam EINECS, sa takáto diferenciácia neuplatňovala a všetky typy extraktov s odlišnými rozpúšťadlami a ďalšie kroky postupu mohli spadať pod jediný zápis (vstup).

Prvým hlavným identifikátorom pre tento podtyp UVCB látok je čeľad', rod a druh organizmu, z ktorého látka pochádza. Ak je to vhodné, uvedie sa aj tkanivo alebo časť organizmu, ktorá sa na extrakciu látky použila, napr. kostná dreň, pankreas; alebo stebľa, semená či korene. V prípade látok mikrobiologického pôvodu sa definuje kmeň a genotyp druhu.

Pokiaľ látka pochádza z viacerých druhov, považuje sa za odlišnú látku, a to aj v prípade, že chemické zloženie je podobné.

Príklady	
číslo ES	EINECS názov
290-977-1	oxidovaný extrakt kampeškovníka (<i>Haematoxylon campechianum</i>)
	popis ES
	Táto látka je identifikovaná v Indexe farieb pod identifikačným číslom Indexu farieb, C.I. 75290 oxidovaná.
282-014-9	pankreatické extrakty, zbavené proteínov

Druhým hlavným identifikátorom je spracovanie látky, napr. postup extrakcie, frakcionácie, prečistenia alebo koncentrácie alebo postup, ktorý ovplyvňuje zloženie rezídua. Takže rafináciami extraktov uskutočnených rozdielnymi postupmi napr. použitím rozdielnych rozpúšťadiel alebo rozdielnych prečisťovacích krokov, vzniknú rozdielne látky.

Čím viac krokov sa na rafináciu použije, tým ľahšie sa bude dať definovať látka podľa jej chemického zloženia. V takom prípade rozdielny zdroj druhu alebo rozdielne modifikácie postupu nemajú automaticky za následok vznik rozdielnej látky.

Hlavným identifikačným parametrom pre látky biologického pôvodu je popis relevantných postupov. V prípade extraktov sa postupu extrakcie popisuje s takou mierou podrobností, aká je relevantná pre identifikáciu látky. Prinajmenšom sa špecifikuje použité rozpúšťadlo.

Ak sa na výrobu látky použijú ďalšie kroky postupu ako napríklad frakcionácia alebo koncentrácia, opíše sa kombinácia príslušných krokov postupu, napr. kombinácia extrakcie a frakcionácie vrátane "hraničných" rozsahov.

UVCB podtyp 4, kde zdroj je chemický alebo minerálny a postupom je rafinácia

Látkami iného ako biologického pôvodu, t.j. minerály, rudy, uhlie, zemný plyn a ropa alebo iné suroviny chemického priemyslu alebo látky z nich pochádzajúce, a ktoré sú výsledkom spracovania bez zámerných chemických reakcií, môžu byť (prečistené) frakcie, koncentráty alebo rezíduá z týchto postupov.

Uhlie a ropa sa používajú v postupoch destilácie alebo splyňovania, pričom vzniká veľké množstvo rôznych látok, napr. ropné látky a palivové plyny atď., ako aj rezíduá ako napríklad dechty a troska. Destilovaný alebo iným spôsobom frakcionovaný produkt sa veľmi často okamžite ďalej spracúva a to aj za použitia chemických reakcií. V takom prípade sa látka identifikuje podľa usmernenia pre UVCB látky podtyp 2, keďže postup je dôležitejší ako zdroj.

V prípade ropných látok sa používa špeciálny systém identifikácie (pozri kapitolu 4.3.2.2). Látky, na ktoré sa tento systém vzťahuje, zahŕňajú frakcie a produkty chemických reakcií.

K UVCB látkam podtypu 4 patria okrem iných látok aj rudy, rudné koncentráty a troska obsahujúce v rôznom množstve kovy, ktoré možno extrahovať metalurgickým spracovaním.

Minerály ako napríklad bentonit alebo uhličitan vápenatý možno spracovať napr. rozpustením v kyseline a/alebo chemickým zrážaním alebo na iónovýmienných kolónach. V prípade, že chemické zloženie je úplne definované, minerály by sa mali identifikovať podľa usmernenia uvedeného v príslušnej časti kapitoly 4.2. Pokiaľ sa minerály spracúvajú len mechanickými metódami, napr. mletím, preosievaním, odstredovaním, flotáciou atď., ešte stále sa považujú za totožné s minerálmi vo forme, v akej boli vyťažené. Minerály, ktoré sa produkujú prostredníctvom výrobného postupu, možno – na účel identifikácie¹³ – považovať za rovnaké ako ich ekvivalent prírodného pôvodu za predpokladu, že majú podobné zloženie a identický toxikologický profil.

Hlavným identifikačným parametrom pre látky iného ako biologického pôvodu je popis relevantného kroku (relevantných krokov) postupu.

V prípade frakcií sa postup frakcionácie popisuje pomocou parametrov a “hraničného” rozsahu pre izolovanú frakciu, ako aj popisom predchádzajúcich krokov postupu, pokiaľ sú relevantné.

V prípade kroku koncentrácie sa uvedie typ postupu, napr. odparovanie, zrážanie atď. a okrem informácií o predchádzajúcom kroku (krokoch) spracovania sa uvedie aj pomer medzi počiatočnou a konečnou koncentráciou.

V prípade rezíduí iného ako biologického pôvodu je hlavným identifikačným parametrom popis postupu, z ktorého rezíduum pochádza. Týmto postupom môže byť akákoľvek fyzikálna reakcia, ktorá má za následok vznik rezíduí, napr. postupu prečisťovania, frakcionácie a koncentrácie.

¹³ Skutočnosť, že na identifikáciu minerálov prírodného pôvodu a chemicky vyrobených minerálov sa používa ten istý postup, ešte neznačí, že sa na ne vzťahujú aj rovnaké zákonné požiadavky (napr. výnimky z registrácie).

4.3.1.3 Analytické informácie

V prípadoch, keď spektrálne údaje obsahujú údaje o zložení UVCB látky, by sa mali tieto informácie uviesť. Pre spektrá sa používa viacero spektroskopických metód (UV/VIS, infračervené spektrum, spektrum nukleárnej magnetickej rezonancie a hmotnostné spektrum). Metódy a poznatky o spôsobe používania týchto metód sú predmetom neustálych zmien. Preto je na registrujúcom, aby predložil vhodné spektrálne údaje.

Pri charakterizácii zloženia látky sa uvádza chromatogram, ktorý možno použiť ako odtlačok (**fingerprint**). Ak je to vhodné, na separáciu zložiek sa môžu použiť aj iné validované techniky.

4.3.2 Špecifické typy UVCB látok

Tento oddiel poskytuje usmernenie pre špecifické skupiny UVCB látok: látky s variabilnou dĺžkou uhlíkového reťazca (4.3.2.1); látky získané z ropy alebo podobných zdrojov (4.3.2.2); a enzýmy (4.3.2.3).

4.3.2.1 Látky s variabilnou dĺžkou uhlíkového reťazca

Táto skupina UVCB látok zahŕňa látky s dlhým alkylovým reťazcom, s variabilnou dĺžkou uhlíkového reťazca, napr. parafíny a olefíny. Tieto látky pochádzajú buď z prírodných tukov alebo olejov alebo sa vyrábajú synteticky. Prírodné tuky pochádzajú buď z rastlín alebo živočíchov. Látky s dlhým uhlíkovým reťazcom pochádzajúce z rastlín majú za normálnych okolností iba reťazce s párnym počtom atómov uhlíka, zatiaľ čo látky s dlhými uhlíkovými reťazcami získané zo živočíšnych zdrojov obsahujú aj (niekoľko) reťazcov s nepárnym počtom atómov uhlíka. Synteticky vyrobené látky s dlhými uhlíkovými reťazcami môžu obsahovať celý rozsah uhlíkových reťazcov, s párnym aj nepárnym počtom uhlíkov.

Identifikátory a názvoslovná konvencia

Skupina pozostáva z látok, ktorých jednotlivé zložky sa vyznačujú spoločnými štruktúrnymi znakmi: Jedna alebo viac alkylových skupín s dlhým reťazcom s pripojenou funkčnou skupinou. Jednotlivé zložky sa navzájom odlišujú jednou alebo viacerými nižšie uvedenými charakteristikami skupiny alkylového reťazca:

- Dĺžka uhlíkového reťazca (počet uhlíkov)
- Nasýtenosť (saturácia)
- Štruktúra (lineárna alebo rozvetvená)
- Poloha funkčnej skupiny

Chemická identita zložiek môže byť dostatočne opísaná a systematicky pomenovaná pomocou týchto troch deskriptorov:

- **Deskriptor alkylu**, ktorý popisuje počet atómov uhlíka v uhlíkovom reťazci (uhlíkových reťazcoch) alkylovej skupiny (alkylových skupín).
- **Deskriptor funkčnej skupiny**, ktorý identifikuje funkčnú skupinu látky, napr. amín, amónium, kyselinu karboxylovú.
- **Deskriptor soli**, kation / anión akejkoľvek soli, napr. sodná soľ - natrium (Na^+), uhličitan - karbonát (CO_3^{2-}), chlorid (Cl^-).

Deskriptor alkylu

- Deskriptor alkylu C_{x-y} sa spravidla vzťahuje na nasýtené, lineárne alkylové reťazce obsahujúce všetky dĺžky reťazca od x do y, napr. C_{8-12} zodpovedá C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} a C_{12} .
- Musí sa uviesť, či sa deskriptor alkylu vzťahuje len na alkylové reťazce s párnym alebo nepárnym počtom uhlíkov, napr. C_{8-12} (párne).
- Musí sa uviesť, či sa deskriptor alkylu vzťahuje (aj) na rozvetvené alkylové reťazce, napr. C_{8-12} (rozvetvené) alebo C_{8-12} (lineárne a rozvetvené).
- Musí sa uviesť, či sa deskriptor alkylu vzťahuje (aj) na nenasýtené alkylové reťazce, napr. C_{12-22} (C_{18} nenasýtený).
- Úzky rozsah (distribúcia) dĺžok alkylového reťazca nepokrýva širší rozsah (distribúciu) a naopak, napr. C_{10-14} nezodpovedá C_{8-18} .
- Deskriptor alkylu sa môže vzťahovať aj na zdroj alkylových reťazcov, napr. kokos alebo loj. Jednako, rozsah (distribúcia) dĺžok uhlíkových reťazcov musí zodpovedať rozsahu (distribúcii) zo zdroja.

Vyššie opísaný systém by sa mal používať na popis látok s variabilnou dĺžkou uhlíkového reťazca. Nie je vhodný pre dobre definované látky, ktoré možno identifikovať presnou chemickou štruktúrou.

Informácie o deskriptore alkylu, deskriptore funkčnej skupiny a deskriptore soli predstavujú základ pre pomenovanie tohto typu UVCB látky. Na účel presnejšej identifikácie látky môžu byť okrem toho užitočné aj informácie o zdroji a postupe.

Príklady		
deskriptory		názov
deskriptor alkylu	dĺžka alkylového reťazca C_{10-18}	mastné kyseliny, C_{10-18} , kademnaté soli
deskriptor funkčnej skupiny	mastné kyseliny (karboxylové)	
deskriptor soli	kademnaté soli	

deskriptor alkylu	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl-dimetyl	di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl-
deskriptor funkčnej skupiny	amónium	dimetylamónium-
deskriptor soli	chlorid	chlorid
deskriptor alkylu	trimetyl-alkyl (alkyl je z tuku)	trimetyl-alkyl
deskriptor funkčnej skupiny	amónium	amónium-chlorid
deskriptor soli	chlorid	(alkyl je z tuku)

4.3.2.2 Látky získané z ropy alebo z podobných zdrojov

Látky získané z ropy (ropné látky) alebo z podobných zdrojov (napr. z uhlia) sú látky, ktoré majú veľmi komplexné a variabilné alebo čiastočne nedefinované zloženie. V tejto kapitole sa na príklade ropných látok ukazuje, ako identifikovať tento špecifický typ UVCB látky. Jednako, ten istý prístup by sa mohol použiť aj na iné látky, ktoré sa získavajú z podobných zdrojov, ako napríklad z uhlia.

Východiskovými materiálmi používanými v petrochemickom priemysle môžu byť ropa alebo špecifická frakcia z rafinácie získaná v rámci jedného alebo viacerých postupov. Zloženie konečných produktov závisí od ropy použitej na výrobu (keďže zloženie ropy sa mení v závislosti od miesta pôvodu) a od následných rafinačných postupov. Preto nezávisle od postupu dochádza k prirodzenej variácii v zložení ropných látok [Rasmussen et al., 1999].

1. Názvoslovná konvencia

Na identifikáciu ropných látok sa odporúča zvoliť názov v súlade so zavedeným názvoslovím [US EPA]. Tento názov zvyčajne pozostáva z rafinačného postupu, zdroja frakcie, zvyčajného zloženia alebo charakteristických vlastností. Ak látka obsahuje > 5 % hmotnostných (w/w) 4 až 6 členných kondenzovaných cyklických aromatických uhľovodíkov, tieto informácie sa zahrnú do popisu. V prípade ropných látok s číslom EINECS sa použije názov, ktorý je uvedený v zozname ES.

2. Identifikátory

Výrazy a definície používané na identifikáciu ropných látok spravidla zahŕňajú zdroj frakcie, rafinačný postup, zvyčajné zloženie, počet uhlíkov, rozsah teplôt varu a iné vhodné fyzikálne charakteristiky, a prevládajúci typ uhľovodíka [US EPA].

Mali by sa uviesť identifikačné parametre uvedené v bode 2 prílohy VI REACH. Je známe, že ropné látky sa vyrábajú skôr v závislosti od charakteristických vlastností ako od zloženia. Preto charakteristické znaky ako napríklad názov, rozsah dĺžky uhľového reťazca, teplota varu, viskozita, "hraničné" hodnoty a ďalšie fyzikálne vlastnosti sú na účel čo najjednoduchšej identifikácie ropnej látky spravidla užitočnejšie ako informácie o zložení.

Aj keď chemické zloženie nepredstavuje z pohľadu UVCB látok najdôležitejší identifikátor, uvádzajú sa známe hlavné zložky ($\geq 10\%$) a zloženie sa opíše všeobecným spôsobom, napr. rozsahom molekulových hmotností, či sú to alifatické

alebo aromatické látky, stupeň hydrogenácie a iné podstatné informácie. Okrem toho sa pomocou názvu a typickej koncentrácie identifikuje aj každá iná zložka s nižšou koncentráciou, ktorá má dopad na klasifikáciu nebezpečnosti.

4.3.2.3 Enzýmy

Enzýmy najčastejšie vznikajú fermentáciou mikroorganizmov, môžu však byť aj rastlinného alebo živočíšneho pôvodu. Kvapalný enzýmový koncentrát, ktorý je výsledkom fermentácie alebo extrakcie a následných prečisťovacích krokov, obsahuje okrem vody aktívny enzýmový proteín (bielkovinu) a iné zložky obsahujúce rezíduá z fermentácie, t.j. proteíny, peptidy, aminokyseliny, uhľovodíky, lipidy a anorganické soli.

Enzýmový proteín ako aj ostatné zložky získavané fermentáciou alebo extrakciou, avšak s výnimkou vody, ktorú možno separovať bez toho, aby sa narušila stabilita enzýmového proteínu alebo aby sa zmenilo jeho zloženie, by sa na účely identifikácie mali považovať za látku.

Enzým spravidla obsahuje 10-80 % hmotnostných (w/w) enzýmového proteínu. Percentuálne zastúpenie ostatných zložiek sa mení a závisí od použitého produkčného organizmu, fermentačného média a prevádzkových parametrov postupu fermentácie, ako aj od použitého následného prečisťovania, ale zloženie sa spravidla pohybuje v rozsahoch uvedených v nižšie uvedenej tabuľke.

aktívny enzýmový proteín	10 - 80 %
iné proteíny + peptidy a aminokyseliny	5 - 55 %
sacharidy	3 - 40 %
tuky	0 - 5 %
anorganické soli	1 - 45 %
celkovo	100 %

Enzým by sa vzhľadom na svoju variabilitu a čiastočne neznáme zloženie mal považovať za 'UVCB látku'. Enzýmový proteín by sa mal považovať za zložku UVCB látku. Vysoko prečistené enzýmy môžu byť identifikované ako látky s presne definovaným zložením (jednozložkové alebo viaczožkové) a v súlade s tým by sa mali aj identifikovať.

V zozname EINECS je pre enzýmy hlavným identifikátorom katalytická aktivita. Enzýmy sa uvádzajú vo forme všeobecných záznamov bez ďalšej špecifikácie alebo so špecifickými záznamami, ktoré udávajú zdrojový organizmus alebo substrát.

Príklady		
číslo ES	EINECS názov	číslo CAS
278-547-1	neutrálna proteináza, <i>Bacillus neutral</i>	76774-43-1
278-588-5	neutrálna proteináza, <i>Aspergillus neutral</i>	77000-13-6

254-453-6	elastáza (z prasačieho pankreasu)	39445-21-1
262-402-4	mananáza	60748-69-8

V štúdii o enzýmoch, ktorú zadala Európska Komisia [UBA, 2000] sa navrhuje, aby sa enzýmy identifikovali v súlade s medzinárodným názvoslovným systémom pre enzýmy, IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology - Medzinárodná únia pre biochémiu a molekulárnu biológiu; www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/). Tento prístup sa uplatňuje aj v tomto usmernení, čo v porovnaní so zoznamom EINECS umožní systematickejšiu, presnejšiu a vyčerpávajúcejšiu identifikáciu enzýmov.

1. Názvoslovná konvencia

Enzýmy sa pomenúvajú v súlade s názvoslovnými konvenciami [<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>].

V klasifikačnom systéme IUBMB sa každému typu enzýmu a katalytickej funkcii priraduje špecifické štvormiestne číslo (napr. 3.2.1.1 pre α -amylázu)¹⁴. Každé číslo môže obsahovať enzýmy s variabilnou sekvenciou aminokyselín a variabilným pôvodom, funkčnosť enzýmu je však identická. Na identifikáciu látky by sa mal používať názov a číslo z názvoslovia IUBMB. V názvosloví IUBMB sa enzýmy klasifikujú do šiestich hlavných skupín:

1. Oxidoreduktázy
2. Transferázy
3. Hydrolázy
4. Lyázy
5. Izomerázy
6. Ligázy

Nižšie je uvedený príklad záznamu podľa názvoslovia IUBMB:

EC 3.4.22.33

Zavedený názov: bromelaín z plodu

Reakcia: Hydrolýza proteínov so širokou špecifickosťou na peptidové väzby. Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec predstavuje dobrý syntetický substrát, ale nedochádza k žiadnemu účinku na Z-Arg-Arg-NHMec (porovnaj bromelaín zo stonky)

Iný názov (iné názvy): bromelaín zo šťavy ([juice bromelain](#)); ananáza ([ananase](#)); bromeláza ([bromelase](#)); bromelín ([bromelin](#)); extranáza ([extranase](#)); bromelaín

¹⁴ Výrazy "EC číslo" (Enzyme Commission number) a "IUBMB číslo" sa často používajú ako synonymá. V záujme toho, aby sa predišlo nedorozumeniam sa odporúča používať pre štvormiestny číselný kód z IUBMB výraz "IUBMB číslo".

zo šťavy ([juice bromelain](#)); pináza ([pinase](#)); ananášový enzým ([pineapple enzyme](#)); traumanáza ([traumanase](#)); bromelaín z plodu FA2 ([fruit bromelain FA2](#))

Poznámky: Z rastlín ananásu, *Ananas comosus*. Zriedkavo inhibovaný kuracím cystatínom. Ďalšia cysteínová endopeptidáza, s podobným účinkom na malomolekulové substráty, pinguinaín ([pinguinain](#)) (pôvodne EC 3.4.99.18), sa získava z príbuznej rastliny, *Bromelia pinguin*, od plodového bromelaínu sa však pinguinaín odlišuje v tom, že je inhibovaný kuracím cystatínom [4]. V čeľadi peptidáza C1 (čeľaď papaín). Pôvodne EC 3.4.22.5 a zahrnutý pod EC 3.4.22.4

Prepojenia na iné databázy: BRENDA, EXPASY, MEROPS, číslo CAS: 9001-00-7

Zoznam literatúry:

1. Sasaki, M., kato, T a Iida, S. Antigenic determinant common to four kinds of thiol proteases of plant origin. J. Biochem. (Tokyo) 74 (1973) 635-637. [Medline UI: 74041600]
2. Yamada, F., Takahashi, N. a Murachi, T. Purification and characterization of a proteinase from pineapple fruit, fruit bromelain FA2. J. Biochem. (Tokyo) 79 (1976) 1223-1234. [Medline UI: 76260156]
3. Ota, S., Muta, E., Katanita, Y. a Okamoto, Y. Reinvestigation of fractionation and some properties of the proteolytically active components of stem and fruit bromelains. J. Biochem. (Tokyo) 98 (1985) 219-228. [Medline UI: 86008148]
4. Rowan, A.D., Buttle, D.J. a Barrett, A.J. The cysteine proteinases of the pineapple plant. Biochem. J. 266 (1990) 869-875. [Medline UI: 90226288]

Príklady klasifikácie enzýmov podľa systému IUBMB
(<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>)

Proteázy sú číslované podľa nasledujúcich kritérií:

3. Hydrolázy

3.4 pôsobiace na peptidových väzbách (peptidázy), s podtriedami:

3.4.1 α -amino-acyl-peptidové hydrolázy (teraz v EC 3.4.11)

3.4.2 peptidyl-aminokyselinové hydrolázy (teraz v EC 3.4.17)

3.4.3 dipeptidové hydrolázy (teraz v EC 3.4.13)

3.4.4 peptidyl-peptidové hydrolázy (teraz preklasifikované v rámci EC 3.4)

3.4.11 aminopeptidázy

3.4.12 peptidyl-aminokyselinové hydrolázy alebo acyl-aminokyselinové hydrolázy (teraz preklasifikované v rámci 3.4)

3.4.13 dipeptidázy

3.4.14 dipeptidyl-peptidázy a tripeptidyl-peptidázy

3.4.15 peptidyl-dipeptidázy

3.4.16 karboxypeptidázy serínového typu

3.4.17 metalokarboxypeptidázy

3.4.18	karboxypeptidázy cysteínového typu
3.4.19	omega peptidázy
3.4.21	serín endopeptidázy
	a ďalšie, špecifické enzýmy, ktoré sú identifikované:
3.4.21.1	chymotrypsín
3.4.21.2	chymotrypsín C
3.4.21.3	metridín
3.4.21.4	trypsín
3.4.21.5	trombín
3.4.21.6	koagulačný faktor Xa
3.4.21.7	plazmín
3.4.21.8	teraz pokryté EC 3.4.21.34 a EC 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidázy
3.4.21.10	akrozín
3.4.21.11	teraz pokryté EC 3.4.21.36 a EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-lytické endopeptidázy
...	
3.4.21.105	
3.4.99	endopeptidázy s neznámym katalytickým mechanizmom

Príklady zo zoznamu EINECS s pridanými IUBMB číslami			
číslo ES	EINECS názov	číslo CAS	číslo IUBMB
278-547-1	neutrálna proteináza, <i>Bacillus neutral</i>	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	subtilizín	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	celuláza	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identifikátory

Enzýmy sú identifikované prítomným enzýmovým proteínom (názvoslovie IUBMB) a ostatnými zložkami z fermentácie. Okrem enzýmového proteínu žiadna špecifická zložka zvyčajne nie je prítomná v koncentráciách nad 1 %. Pokiaľ identity týchto špecifických zložiek nie sú známe, možno ich uviesť na základe uplatnenia metódy zoskupovania (napr. proteíny (bielkoviny), peptidy, aminokyseliny, uhľovodíky, lipidy (tuky) a anorganické soli). Jednako, zložky sa musia uviesť, pokiaľ sú známe ich identity a musia sa identifikovať, ak sú prítomné v koncentrácii vyššej ako 10 % alebo ak sú relevantné pre klasifikáciu a označovanie a/alebo hodnotenie PBT¹⁵.

¹⁵ Viac informácií o posúdení PBT a príslušných koncentračných limitoch možno nájsť v usmernení RIP 3.2 o posúdení chemickej bezpečnosti, oddiel posúdenie PBT.

Enzýmové proteíny

Enzýmové proteíny v koncentrácii by mali byť identifikované:

- IUBMB číslo
- Názvami pridelenými podľa IUBMB (systematickým názvom, názvami enzýmov, synonymami)
- Poznámkami podľa IUBMB
- Reakciou a typom reakcie
- ES číslo a názvom, ak sa to hodí
- CAS číslo a názvom, ak existuje

Mala by sa špecifikovať reakcia indukovaná enzýmom. Táto reakcia je definovaná IUBMB.

Príklad
.alfa.-amyláza: polysacharid obsahujúci glukózové jednotky viazané v polohe .alfa.- (1-4)- + H ₂ O = maltooligosacharidy; endohydrolýza 1,4-.alfa.-d-glukozidových väzieb v polysacharidoch obsahujúcich tri alebo viac d-glukózových jednotiek viazaných v polohe 1,4-.alfa.-.

Typ reakcie sa prideli v závislosti od triedy enzýmov. Môže ním byť oxidácia, redukcia, eliminácia, adícia alebo názov reakcie.

Príklad
.alfa.-amyláza: hydrolýza O-glykozylovej väzby (endohydrolýza).

Zložky iné ako enzýmový proteín

Identifikovať by sa mali byť všetky zložky ≥ 10 % hmotnostných (w/w) alebo zložky relevantné pre klasifikáciu a označovanie a/alebo hodnotenie PBT¹⁶. Identitu zložiek prítomných v množstve menšom ako 10 % možno uviesť ako chemickú skupinu. Musí sa uviesť ich typická koncentrácia (koncentrácie) alebo rozsahy koncentrácií, t.j.:

- (Glyko)proteíny
- Peptidy a aminokyseliny
- Uhlíkovodíky
- Lipidy (tuky)
- Anorganický materiál (napr. chlorid sodný alebo iné anorganické soli)

¹⁶ Viac informácií o posúdení PBT a príslušných koncentračných limitoch možno nájsť v usmernení RIP 3.2 o posúdení chemickej bezpečnosti, oddiel posúdenie PBT.

Pokiaľ sa nedajú dostatočne presne identifikovať ostatné zložky, názov produkčného organizmu (rod, kmeň alebo genotyp, pokiaľ je to relevantné) by sa mal uviesť tak, ako je tomu v prípade UVCB látok biologického pôvodu.

Pokiaľ sú k dispozícii, možno uviesť aj ďalšie parametre, napr. funkčné parametre (t.j. pH alebo teplotné optimá a rozsahy), kinetické parametre (t.j. špecifická aktivita alebo číslo premeny), ligandy, substráty a produkty a kofaktory.

5 KRITÉRIÁ NA OVERENIE TOHO, ČI SÚ LÁTKY TOTOŽNÉ

Pri posudzovaní zhodnosti látok, ktoré pochádzajú od rôznych výrobcov/dovozcov, je potrebné dodržiavať určité pravidlá. Tieto pravidlá, ktoré sa uplatnili pri vytvorení zoznamu EINECS [Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, ECB web-site; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999], treba považovať za spoločný základ pre identifikáciu a pomenovanie látky a teda aj pre nájdenie potenciálneho spoluregistrujúceho tejto konkrétnej látky. V nižšie uvedených odsekoch sa nachádza návod na identifikáciu a pomenovanie látok. Látky, ktoré sa nepovažujú za totožné, pravdaže možno aplikovaním expertného posúdenia považovať za štruktúrne príbuzné. Ak je to vedecky zdôvodniteľné, možno v prípade týchto látok zdieľať údaje. Toto nie je ale predmetom tohto usmernenia a rieši sa v usmernení RIP 3.4 o zdieľaní údajov.

- Pre jednozložkové látky by sa malo uplatňovať pravidlo “ $\geq 80\%$ “ a pre viaczložkové látky pravidlo “ $< 80\%/\geq 10\%$ “.

Nerozlišuje sa medzi stupňom čistoty látok technický, čistý alebo analyticky čistý. “Tá istá” látka môže mať v rámci výrobného procesu všetky stupne čistoty a môže obsahovať rôzne množstvá rozličných nečistôt. Jednako, dobre definované látky za bežných okolností obsahujú hlavnú zložku (zložky) a pripúšťa sa prítomnosť nečistôt, ktoré pochádzajú z výrobného procesu (ohľadne podrobností pozri kapitolu 4.2) a prídavných látok, ktoré sú potrebné na stabilizáciu látky.

Ak sa profil nečistôt dobre definovanej látky pochádzajúcej z rozdielnych výrobných zdrojov výrazne líši, o tom, či tieto rozdiely môžu ovplyvniť prípustnosť zdieľania údajov z testov pre jednu látku s inými členmi SIEF, sa bude musieť rozhodnúť na základe expertného posúdenia.

- Hydráty (hydratované formy) a anhydridy (bezvodé formy) zlúčenín sa považujú za rovnakú látku.

Príklady			
Názov a vzorec	číslo CAS	číslo ES	Pravidlo
síran meďnatý ($\text{Cu.H}_2\text{O}_4\text{S}$)	7758-98-7	231-847-6	
síran meďnatý, pentahydrát ($\text{Cu.H}_2\text{O}_4\text{S.5H}_2\text{O}$)	7758-99-8		Táto látka je pokrytá formou anhydridu (č. ES: 231-847-6).

Hydratované a bezvodé formy majú rozdielne chemické názvy a rozdielne CAS čísla. Jednako, predkladať sa musí jedna dokumentácia k registrácii. Registrovať by sa mala bezvodá forma. Hydratované formy spadajú pod túto registráciu.

- Kyseliny alebo zásady a ich soli sa považujú za rozdielne látky.

Príklady		
číslo ES	Názov	Pravidlo
201-186-8	kyselina peroxyoctová $C_2H_4O_3$	Táto látka sa nepovažuje za totožnú napr. s príslušnou sodnou soľou (EINECS 220-624-9).
220-624-9	nátrium-glykolát $C_2H_4O_3.Na$	Táto látka sa nepovažuje za totožnú napr. s príslušnou kyselinou (EINECS 201-186-8).
202-426-4	2-chlóranilín C_6H_6ClN	Táto látka sa nepovažuje za totožnú napr. s hydrobromidom 2-chlórbenzénamínu ($C_6H_6ClN.HBr$).

- Jednotlivé soli (napr. sodné alebo draselné) sa považujú za rozdielne látky.

Príklady		
číslo ES	Názov	Pravidlo
208-534-8	nátrium-benzoát $C_7H_5O_2.Na$	Táto látka sa nepovažuje za totožnú napr. s draselnou soľou (EINECS 209-481-3).
209-481-3	kálium-benzoát $C_7H_5O_2.K$	Táto látka sa nepovažuje za totožnú napr. so sodnou soľou (EINECS 208-534-8).

- Rozvetvené alebo lineárne alkylové reťazce sa považujú za rozdielne látky.

Príklady		
číslo ES	Názov	Pravidlo
295-083-5	kyselina fosforečná, dipentylester, rozvetvený a lineárny	Táto látka sa nepovažuje za totožnú s jednotlivými látkami „kyselina fosforečná, dipentylester, rozvetvený“ alebo „kyselina fosforečná, n-dipentylester“.

- Rozvetvené skupiny sa uvádzajú ako také v názve podľa IUPAC. Pokiaľ nie je špecifikované inak, látky obsahujúce alkylové skupiny bez akýchkoľvek ďalších informácií sa vzťahujú len na nerozvetvené lineárne reťazce.

Príklady		
číslo ES	Názov	Pravidlo
306-791-1	C_{12-16} -mastné kyseliny	Iba látky s lineárnymi a nerozvetvenými alkylovými skupinami sa považujú za tú istú látku.
279-420-3	C_{12-14} -alkylalkoholy	
288-454-8	C_{12-18} -alkylmetylamíny	

- Látky s alkylovými skupinami, u ktorých sa používajú výrazy ako izo, neo, rozvetvené atď., sa nepovažujú za rovnaké látky ako látky, ktoré nie sú takto špecifikované.

Príklady		
Číslo ES	Názov	Pravidlo
266-944-2	tri-C ₁₂₋₁₈ -alkylglyceridy Táto látka je identifikovaná v SDA pod názvom: C ₁₂ -C ₁₈ -trialkylglycerid a pod SDA registračným číslom 16-001-00.	Táto látka sa nepovažuje za totožnú s látkou C ₁₂₋₁₈ -izo, ktorá má nasýtené alkylové reťazce rozvetvené v ktorejkoľvek polohe.

- Pokiaľ sa výslovne nešpecifikácie inak, alkylové reťazce v kyselinách alebo alkoholoch atď. sa považujú len za nasýtené reťazce. Nenasýtené reťazce sa výslovne uvedú a považujú sa za rozdielne látky.

Príklady		
Číslo ES	Názov	Pravidlo
200-313-4	kyselina stearová, čistá C ₁₈ H ₃₆ O ₂	Táto látka sa nepovažuje za totožnú s kyselinou olejovou, čistou, C ₁₈ H ₃₄ O ₂ (EINECS 204-007-1).

- Látky s chirálnymi centrami

Látka s jedným chirálnym centrom môže existovať v ľavotočivej a pravotočivej forme (enantioméry). Pokiaľ sa neuvedie inak, predpokladá sa, že látka je (racemická) zmes obsahujúca obidve formy v rovnakom pomere.

Príklady		
Číslo ES	Názov	Pravidlo
201-154-3	2-chlórpropán-1-ol	Jednotlivé enantioméry „(R)-2-chlórpropán-1-ol“ a „(S)-2-chlórpropán-1-ol“ sa nepovažujú za zhodné s týmto záznamom.

V prípade, že kde látka bola obohatená jednou enantiomérnou formou, platia pravidlá pre viaczložkové látky.

Látky s viacerými chirálnymi centrami môžu existovať v 2ⁿ formách (kde n je počet chirálnych centier). Tieto rozdielne formy môžu mať navzájom odlišné fyzikálno-chemické, toxikologické a/alebo ekotoxikologické vlastnosti. Považujú sa za samostatné látky.

- Anorganické katalyzátory

Anorganické katalyzátory sa považujú za prípravky. Na účely identifikácie sa kovy a kovové zložky považujú za samostatné látky (bez špecifikácie použitia).

Príklady		
	Názov	Pravidlo
	oxid kobaltu – oxid hlinitý katalyzátor	Mali by byť identifikované oddelene ako: - oxid kobaltnatý - oxid kobaltitý - oxid hlinitý - zmesný oxid hliníka a kobaltu.

- Koncentráty enzýmov s rovnakým IUBMB číslom možno považovať za totožné látky, a to aj napriek tomu, že sú produkované rozdielnymi organizmami za predpokladu, že sa nebezpečné vlastnosti výrazne nelíšia a sú rovnako klasifikované.

Viaczložkové látky

Smernica 67/548/EHS upravovala uvádzanie látok na trh. Spôsob výroby látky nebol podstatný. Viaczložková látka, ktorá sa uvádzala na trh, preto spadala pod EINECS, pokiaľ každá zložka tejto látky bola uvedená v zozname EINECS, napr. izomérna zmes difluórbenzénov spadala pod záznamy v zozname EINECS pre 1,2-difluórbenzén (206-680-7), 1,3-difluórbenzén (206-746-5) a 1,4-difluórbenzén (208-742-9), hoci samotná izomérna zmes nebola v zozname EINECS uvedená.

Podľa REACH sa naopak požaduje registrácia vyrobenej látky. Každý prípad sa posudzuje osobitne, pričom sa zisťuje, do akej miery sa na jednotlivé kroky výrobného procesu látky vzťahuje definícia výrazu 'výroba' (napr. rôzne prečisťovacie a destilačné kroky). Pokiaľ sa vyrobí viaczložková látka, musí sa registrovať (a nespadá pod registráciu jednotlivých zložiek); napr. izomérna zmes difluórbenzénu sa vyrába, takže "difluórbenzén" ako izomérna zmes sa musí registrovať. Jednako, v prípade viaczložkových látok nie je potrebné testovať látku ako takú, pokiaľ možno profil nebezpečnosti látky dostatočne popísať informáciami o jednotlivých zložkách. Pokiaľ sa vyrobia samostatné izoméry 1,2-difluórbenzén, 1,3-difluórbenzén a 1,4-difluórbenzén a až potom zmiešajú, samostatné izoméry sa musia registrovať a izomérna zmes sa bude považovať za prípravok.

Viaczložková látka pozostávajúca z hlavných zložiek A, B a C sa nepovažuje za tú istú ako viaczložková látka, ktorá pozostáva z hlavných zložiek A a B, ani ako reakčná zmes pozostávajúca z A, B, C a D.

- Viaczložková látka sa nepovažuje za totožnú s látkou, ktorá obsahuje len podmnožinu jednotlivých zložiek.

Príklady		
číslo ES	Názov	Pravidlo
207-205-6	2,5-difluórtoluén	Tieto dve látky sa nepovažujú za totožné so zmesou izomérov difluórtoluénov, pretože sú iba podskupinou zo všetkých možných izomérov.
207-211-9	2,4-difluórtoluén	

- Registrácia viaczožkovej látky sa nevzťahuje na jednotlivé zložky.

Príklady		
	Názov	Pravidlo
208-747-6	1,2-dibrómetén	Táto látka vyjadruje zmes <i>cis</i> - a <i>trans</i> -isomérov. Jednotlivé látky „(1 <i>Z</i>)-1,2-dibrómetén“ a „(1 <i>E</i>)-1,2-dibrómetén“ nie sú zahrnuté záznamom tejto zmesi izomérov.

UVCB látky

- Viaczložková látka s malým počtom zložiek sa nepovažuje za totožnú s viaczožkovou látkou s veľkým počtom zložiek a opačne.

Príklady		
	Názov	Pravidlo
288-450-6	C ₁₂₋₁₈ -alkylamíny, soli s kyselinou octovou	Látky „C ₁₂₋₁₄ -alkylamíny, acetáty“ alebo „C ₁₂₋₂₀ -alkylamíny, acetáty“ alebo „dodecyl(C ₁₂ -alkyl)amíny, acetáty“ alebo látky s alkylovým reťazcom s iba párnym počtom uhlíkov sa nepovažujú za totožné s touto látkou.

- Látka, ktorá je charakterizovaná druhom/rodom sa nepovažuje za totožnú s látkou, ktorá bola izolovaná z iného druhu/rodu.

Príklady		
Číslo ES	Názov	Pravidlo
296-286-1	diglyceridy, slnečnicový olej	Táto látka sa nepovažuje za totožnú s látkou „diglyceridy, zo sóje“ (EINECS: 271-386-8), ani s látkou „diglyceridy, z loja“ (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	ľanový olej, epoxidovaný	Táto látka sa nepovažuje za totožnú s látkou „olej z ľanového semena, oxidovaný“ (EINECS: 272-038-8), ani s látkou „olej z ľanového semena, derivatizovaný kyselinou maleínovou“ (EINECS: 268-897-3), ani s látkou „ricínový olej, epoxidovaný“ (neuvedený v zozname EINECS).

- Prečistený extrakt alebo koncentrát sa považuje za rozdielnú látku ako extrakt.

Príklady		
	Názov	Pravidlo
232-299-0	repkový olej Extrakty a ich fyzikálne modifikované deriváty. Pozostávajú prevažne z glyceridov mastných kyselín (Z)-dokoz-13-énovej, linolovej a olejovej. (<i>Brassica napus</i>, <i>Cruciferae</i>).	Látka "kyselina (Z)-dokoz-13-énová (kyselina eruková)" je zložka látky "repkový olej". Kyselina eruková sa nepovažuje za totožnú s látkou repkový olej, pretože sa izoluje ako čistá látka z repkového oleja; kyselina eruková má vlastný záznam v zozname EINECS (204-011-3). Izolovaná zmes kyseliny palmitovej, kyseliny olejovej, kyseliny linolovej, kyseliny linolénovej, kyseliny erukovej a kyseliny ikozénovej sa nepovažujú za totožné s látkou repkový olej, pretože tieto zložky nepredstavujú celý olej.

6 IDENTITA LÁTKY PRI PREDREGISTRÁCI A PRESKÚMANÍ

Návod o tom, ako identifikovať a pomenúvať látky, sa nachádza v kapitole 4 tohto usmernenia. Z tohto návodu by sa malo vychádzať pri posudzovaní toho, či látky možno alebo nemožno považovať na účel REACH za totožné. Toto posudzovanie sa nižšie upresňuje pre predregistráciu zavedených látok a preskúmanie nezavedených látok.

V súlade s článkom 4 každý výrobca alebo dovozca môže pre všetky postupy uvedené v hlave III, ktoré zahŕňajú rokovania s inými výrobcami alebo dovozcami, vymenovať za svojho zástupcu tretiu stranu, pričom naďalej plne zodpovedá za dodržanie svojej povinnosti podľa nariadenia REACH. Keďže hlava III obsahuje aj pravidlá týkajúce sa nezavedených látok a zavedených látok, ktoré neboli predregistrované, ako aj pravidlá týkajúce sa zavedených látok, ktoré boli predregistrované, výraz 'potenciálny registrujúci' v tejto kapitole treba chápať ako 'potenciálny výrobca', 'potenciálny dovozca' alebo 'tretia strana vymenovaná za zástupcu potenciálneho výrobcu alebo potenciálneho dovozcu'.

6.1 PREDREGISTRÁCIA

Cieľom procesu predregistrácie je navzájom skontaktovať potenciálnych registrujúcich tej istej látky, aby sa predišlo opakovaniu štúdií, a to najmä vykonávania testov na stavovcoch. Predregistrácia sa vzťahuje len na zavedené látky.

Predregistrácia zahŕňa tieto kroky:

1. Potenciálni registrujúci musia predložiť Európskej chemickej agentúre obmedzený súbor identifikačných parametrov;
2. Vychádzajúc z tohto obmedzeného súboru identifikačných parametrov agentúra vypracuje zoznam látok a publikuje ho na svojej internetovej stránke;
3. Iní držitelia údajov môžu na základe tohto zoznamu agentúre predložiť relevantné informácie;
4. Agentúra navzájom skontaktuje potenciálnych registrujúcich látok so zhodnými identifikačnými parametrami, ktoré sú uvedené v zozname a sprostredkuje kontakt s držiteľmi údajov. Je na potenciálnych registrujúcich, aby sa uistili, či ich látku možno považovať za tú istú ako inú látku uvedenú v zozname. Postupuje sa pritom podľa pravidiel uvedených v kapitole 4 tohto usmernenia;
5. Len čo sa zhodnosť preukáže, potenciálni registrujúci, ktorí agentúre predložili informácie o tej istej látke, sa sa majú stať účastníkmi fóra SIEF (**S**ubstance **I**nformation **E**xchange **F**orum – Fórum na výmenu informácií o látke).

V rámci prvého kroku potenciálni registrujúci musia predložiť obmedzený súbor identifikačných parametrov látky (článok 28):

- ES číslo a

- CAS číslo a názov;
- chemický názov podľa názvoslovia IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov;
- iné názvy.

Predkladanie týchto informácií sa uskutoční pomocou IT systému. Prostredníctvom internetovej stránky REACH-IT je potenciálny registrujúci sprevádzaný viackrokovým systémom, v ktorom sa musia predkladať vyššie uvedené informácie o identite látky.

Tento krok nezahŕňa ďalšie informácie o identite látky (napr. identifikáciu nečistôt). Potenciálny registrujúci môže uviesť aj obmedzené súbory identifikačných parametrov pre iné látky, informácie o ktorých sú relevantné pre QSAR, pre prístup preberania údajov na základe analógie (read-across) alebo pre kategorizáciu.

Ďalšie usmernenie o predregistrácii, vytvorení fóra SIEF a spoločné predkladanie v súvislosti s identifikáciou látok je uvedené v RIP 3.4 usmernení o zdieľaní údajov.

6.2 PRESKÚMANIE

V prípade nezavedených alebo zavedených látok, ktoré neboli predregistrované, je povinný potenciálny registrujúci preskúmať ešte pred registráciou u agentúry, či na tú istú látku už bola predložená registrácia (článok 24). Toto preskúmanie zahŕňa:

- identitu potenciálneho registrujúceho, ako je to špecifikované v bode 1 prílohy IV, s výnimkou miest použitia;
- identitu látky, ako sa špecifikuje v bode 2 prílohy IV;
- ktoré požiadavky na informácie by si od potenciálneho registrujúceho vyžadovali vykonanie nových štúdií na stavovcoch;
- ktoré požiadavky na informácie by si od potenciálneho registrujúceho vyžadovali vykonanie iných nových štúdií.

Tieto informácie sa predkladajú pomocou IT systému a programu IUCLID 5. Potenciálny registrujúci uvedie identitu a názov látky v súlade s pravidlami ustanovenými v kapitole 4 tohto usmernenia.

Agentúra zistí, či tá istá látka už bola predtým registrovaná. Stane sa tak aj na základe uplatnenia pravidiel ustanovených v kapitole 4 tohto usmernenia. Výsledok sa oznámi potenciálnemu registrujúcemu a predchádzajúcemu registrujúcemu, ak existuje.

7 PRÍKLADY

Príklady uvedené na nasledujúcich stranách majú len ilustrovať, akým spôsobom môže užívateľ pracovať s návodom v tomto TGD (usmernení). Nevytvárajú žiadny precedens ohľadne povinností vyplývajúcich z REACH.

Uvádzajú sa tieto príklady:

- 'Dietyl-peroxydikarbonát' je príkladom jednozložkovej látky obsahujúcej rozpúšťadlo, ktoré pôsobí aj ako stabilizačné činidlo (pozri kapitolu 7.1);
- 'Zolimidín' je príkladom látky, ktorá by mohla byť identifikovaná ako jednozložková alebo viaczložková látka (pozri kapitolu 7.2);
- 'Zmes izomérov' vytvorená reakciou počas výroby je uvedená ako príklad viaczložkovej látky (pozri kapitolu 7.3). Táto látka predtým spadala pod záznamy pre jednotlivé izoméry v zozname EINECS;
- 'Vonná látka AH' je príkladom látky vyrábanej v rôznych kvalitách, ktorú možno opísať ako reakčnú zmes piatich zložiek s rozsahmi koncentrácií (kapitola 7.4). Ilustruje aj odôvodnené odchýlenie od pravidla 80 % a pravidla 10 %;
- Nekovové 'minerály', vrátane montmorilonitu ako príkladu dobre definovanej látky, ktorá si vyžaduje dodatočnú fyzikálnu charakterizáciu, sú uvedené v kapitole 7.5;
- 'Esenciálny olej z levandule' je príkladom UVCB látky získanej z rastlín (kapitola 7.9);
- 'Chryzantémový olej a z neho izolované izoméry' je príkladom UVCB látky biologického pôvodu, ktorá sa ďalej spracúva (kapitola 7.7);
- 'Fenol, izopropylovaný, fosfát' je príkladom UVCB látky s variabilným zložením, ktorá sa nedá úplne definovať (kapitola 7.8);
- 'Kvartérne amóniové zlúčeniny' sú príkladmi látok s variabilnou dĺžkou uhlíkového reťazca (kapitola 7.9);
- Dva príklady 'ropných látok', katalyticky reformovaný benzín a plynové oleje sú uvedené v kapitole 7.10;
- Dva príklady, ako identifikovať enzýmy, lakázu a amylázu, sú uvedené v kapitole 7.11.

7.1 DIETYL-PEROXYDIKARBONÁT

Látka 'dietyl-peroxydikarbonát' (ES 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) sa vyrába ako 18 % roztok v izododekáne (ES 250-816-8, CAS 31807-55-3). Izododekán taktiež pôsobí ako stabilizačné činidlo proti výbušnosti. Najvyššou možnou koncentráciou, ktorá zaručuje bezpečné zaobchádzanie s látkou, je 27 % roztok.

Ako sa má vyššie popísaná látka pri registrácii identifikovať a pomenovať?

V zmysle definície látky v REACH by sa rozpúšťadlá, ktoré možno separovať bez toho, aby sa narušila stabilita látky alebo aby sa zmenilo jej zloženie, mali

vylúčiť. Podobne ako vo vyššie uvedenom prípade aj izododekán pôsobí ako stabilizačné činidlo a v dôsledku výbušných vlastností látky ho nemožno úplne separovať, izododekán sa musí považovať za prísadu a nie výlučne za rozpúšťadlo. Jednako, látka by sa napriek tomu mala považovať za jednozložkovú. Z tohto dôvodu by sa mala látka registrovať ako roztok s najvyššou možnou koncentráciou, ktorá zaručuje bezpečné zaobchádzanie:

Dietyl-peroxydikarbonát (horná hranica: 27 %; typická koncentrácia: 22 %).

7.2 ZOLIMIDÍN

Vyrábaný metanolový roztok obsahuje 'zolimidín' (ES 214-947-4; CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) a 'imidazol' (ES 206-019-2; CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Po odstránení rozpúšťadla "metanolu" a optimalizácii výrobného procesu má látka ešte stále široký rozsah čistoty pri obsahu 74 – 86 % zolimidínu a 4 – 12 % imidazolu.

Ako sa má vyššie popísaná látka pri registrácii identifikovať a pomenovať?

V zmysle definície látky v REACH by sa rozpúšťadlá, ktoré možno separovať bez toho, aby sa narušila stabilita látky alebo aby sa zmenilo jej zloženie, mali vylúčiť. Ako je tomu vo vyššie uvedenom prípade, metanol možno bez problémov separovať a registrovať sa musí látka bez rozpúšťadla.

Látka sa spravidla považuje za jednozložkovú, ak je jedna hlavná zložka prítomná v množstve ≥ 80 %. Látka sa považuje za viaczložkovú, ak aspoň dve hlavné zložky sú prítomné v množstve ≥ 10 % a < 80 %. Vyššie uvedený príklad je hraničným prípadom, keďže medzné hodnoty sú prekročené / neboli dosiahnuté. Látku preto možno považovať za jednozložkovú látku "zolimidín" alebo za viaczložkovú látku, reakčnú zmes "zolimidínu" a "imidazolu".

V takomto hraničnom prípade sa na rozhodnutie o tom, ako najlepšie popísať túto látku, môže použiť typická koncentrácia hlavných zložiek látky, napr.:

- (1) Pokiaľ je typická koncentrácia pre zolimidín = 77 % a pre imidazol = 11 %, odporúča sa látku považovať za reakčnú zmes zolimidínu a imidazolu.
- (2) Pokiaľ je typická koncentrácia pre zolimidín = 85 % a pre imidazol = 5 %, odporúča sa považovať túto látku za jednozložkovú látku "zolimidín".
- (3) Pokiaľ nemôžu byť typické koncentrácie odvodené, pretože výsledkom výrobného procesu sú nekontrolovateľné široké rozsahy, odporúča sa látku považovať za viaczložkovú látku.

7.3 ZMES IZOMÉROV

Predmetná látka je zmesou (reakčnou zmesou) dvoch izomérov vytvorených počas reakcie pri výrobe. Jednotlivé izoméry boli oznámené do zoznamu EINECS. Smernica 67/548/EHS upravovala uvádzanie látok na trh. Keďže spôsob výroby nebol podstatný, zmes spadala pod záznamy oboch jednotlivých izomérov

v zozname EINECS. V rámci REACH sa požaduje registrácia vyrobených látok. Každý prípad sa posudzuje osobitne, pričom sa zisťuje, do akej miery sa na jednotlivé kroky výrobného procesu látky vzťahuje definícia výrazu 'výroba'. Pokiaľ sa zmes izomérov registruje ako viaczložková látka (podľa návodu v kapitole 4.2.2), látka ako taká sa nemusí testovať, ak jej profil nebezpečnosti možno dostatočne popísať informáciami o jednotlivých zložkách. Jednako, na účel preukázania toho, že sa jedná o zavedenú látku, by sa mal uviesť odkaz na záznamy jednotlivých izomérov v zozname EINECS.

1. Názov a iné identifikátory

Názov IUPAC alebo iný medzinárodný chem. názov (látky)	reakčná zmes 2,2'-[[[(4-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanolu a 2,2'-[[[(5-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanolu
Iné názvy (látky)	2,2'-[[[(metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol reakčná zmes etanolu, 2,2'-[[[(metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di- a vody etanol, 2,2'-[[[(metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-(9CI) izomérna zlúčenina
ES číslo (látky) ES názov ES popis	Pre zmes neexistuje číslo ES, pretože zmes nebola nahlásená do zoznamu EINECS. Avšak táto látka je zahrnutá v záznamoch zoznamu EINECS pre zložky (279-502-9, 279-501-3). Z tohto dôvodu sa zmes považuje za zavedenú látku.
CAS číslo CAS názov	nie je k dispozícii nie je k dispozícii
ES číslo (zložky A) ES názov ES popis	279-502-9 2,2'-[[[(4-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol /
ES číslo (zložky B) ES názov ES popis	279-501-3 2,2'-[[[(5-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol /
CAS číslo (zložky A) CAS názov	80584-89-0 etanol, 2,2'-[[[(4-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-
CAS číslo (zložky B) CAS názov	80584-88-9 etanol, 2,2'-[[[(5-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-
iný identifikačný kód odkaz	číslo ENCS 5-5917

2. Informácie o zložení – hlavné zložky

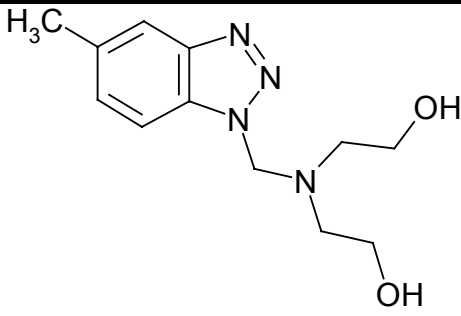
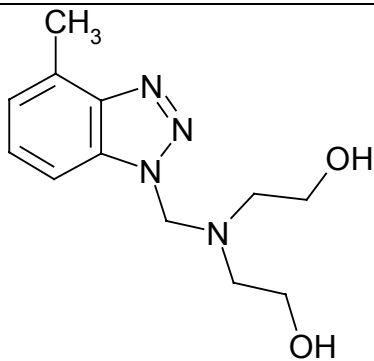
Hlavné zložky						
	Názov IUPAC	číslo CAS	číslo ES	molekulový vzorec Hillova metóda	typická konc. (hmotn.%)	rozsah konc. (hmotn.%)
A	2,2'-[[[(4-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	2,2'-[[[(5-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Hlavné zložky	
	Iné názvy:
A	2,2'-[[[(4-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol
B	2,2'-[[[(5-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol

Hlavné zložky		
	Názov ES	Popis ES
A	2,2'-[[[(4-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol	/
B	2,2'-[[[(5-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol	/

Hlavné zložky		
	Názov CAS	číslo CAS
A	etanol, 2,2'-[[[(4-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-	80584-89-0
B	etanol, 2,2'-[[[(5-metyl-1 <i>H</i> -benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-	80584-88-9

Hlavné zložky		
	Molekulový vzorec metóda CAS	Štruktúrny vzorec SMILES kód

A /		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B /		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Hlavné zložky		
	Molekulová hmotnosť [g.mol ⁻¹]	rozsah molekulovej hmotnosti
A	250	/
B	250	/

7.4 VONNÁ LÁTKA (VÔŇA) AH

Vonná látka AH pozostáva z gama(izo-alfa)-metyljonónu a jeho izomérov. Vyrába sa v troch rozdielnych stupňoch kvality (stupeň kvality A, B a C), ktoré sa líšia pomerom izomérov.

V nasledujúcej tabuľke je uvedený prehľad zloženia rôznych stupňov kvality.

Zloženie rôznych stupňov kvality vonnej látky AH

Zloženie vône AH rôznych stupňov kvality

rozsah koncentrácie [%]	kvalita A	kvalita B	kvalita C	celkové rozsahy
gama(izo-alfa)-metyljonón	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta(izo-beta)-metyljonón	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa-n-metyljonón	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gama-n-metyljonón	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
beta-n-metyljonón	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5 - 15
pseudo-metyljonóny	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Existuje viacero možností, ako látku identifikovať:

- Stupeň kvality A obsahuje najmenej 80 % izoméru gama(izo-alfa)-metyljonón a mohol by sa preto považovať za jednozložkovú látku, ktorej základ tvorí izomér gama(izo-alfa)-metyljonón, pričom ostatné izoméry sú prítomné ako nečistoty.
- Stupne kvality B a C obsahujú menej ako 80 % izoméru gama(izo-alfa)-metyljonón a ≥ 10 % iných izomérov. Mohli by sa preto považovať za viaczložkové látky.
 - Stupeň kvality B: reakčná zmes gama(izo-alfa)-metyljonónu (65-75 %) a alfa-n-metyljonónu (10-20 %), pričom ostatné izoméry sú prítomné ako nečistoty.
 - Stupeň kvality C: reakčná zmes gama(izo-alfa)-metyljonónu (50-60 %) a alfa-n-metyljonónu (20-30 %) [a prípadne aj s beta-n-metyljonónom (5-15 %)], pričom ostatné izoméry sú prítomné ako nečistoty.

Zloženie je variabilné a niekedy je izomér prítomný v koncentrácii ≥ 10 % (preto sa za normálnych okolností nazýva hlavnou zložkou) a niekedy < 10 % (preto sa za normálnych okolností nazýva nečistotou).

Bolo by možné registrovať jednotlivé stupne kvality samostatne. Znamenalo by to tri registrácie. Jednako, v odôvodnených prípadoch možno použiť aj prístup preberania údajov na základe analógie (read-across).

Alternatívne možno uvažovať aj o:

- Jednej registrácii jednozložkovej látky, ktorá má dva podstupne kvality. V tomto prípade sa podstupne kvality odchyľujú od pravidla 80 % (pozri kapitolu 4.2.1);
- Jednej registrácii definovanej reakčnej zmesi 5 izomérov (viaczložková látka). V tomto prípade sa niektoré izoméry (hlavné zložky) odchyľujú od pravidla 10 %, podľa ktorého sa rozlišuje medzi hlavnými zložkami a nečistotami (pozri kapitolu 4.2.2);
- Jednej registrácii definovanej reakčnej zmesi, v ktorej k variabilite zloženia dochádza v celom rozsahu, čo platí pre každý izomér.

Môže byť dôležité uviesť si, že

- tri stupne kvality majú rovnaké alebo veľmi podobné fyzikálno-chemické vlastnosti.
- tri stupne kvality majú podobné použitie a expozičné scenáre.
- všetky stupne kvality majú rovnakú klasifikáciu a označovanie nebezpečnosti a obsah kariet bezpečnostných údajov a správ o chemickej bezpečnosti je identický.
- dostupné údaje z testov (a ďalšie testovanie) sa vzťahuje na variabilitu všetkých troch stupňov kvality.

V tomto príklade je popísaná identifikácia látky ako definovanej reakčnej zmesi 5 izomérov (viaczložková látka). Vzhľadom na odchýlku od pravidla 80 % (pozri kapitolu 4.2.1) a pravidla 10 % (pozri kapitolu 4.2.2) je potrebné zdôvodnenie. Keďže každý stupeň kvality je vyrábaný samostatne, v dokumentácii k registrácii sa má špecifikovať zloženie každého z troch stupňov kvality. Jednako, z formálneho hľadiska by mohli byť potrebné najmenej dve registrácie: (1) gama(izo-alfa)-metyljonónu a (2) reakčnej zmesi gama(izo-alfa)-metyljonónu a alfa-n-metyljonónu.

Identifikácia látky

Vonná látka AH sa vyrába v troch rozdielnych stupňoch kvality (A, B a C) s rovnakým kvalitatívnym ale rozdielnym kvantitatívnym zložením. Všetky tri stupne kvality sú popísané v jednej dokumentácii k registrácii pre viaczložkovú látku. Aj keď z toho vyplýva, že pravidlo 80 % a pravidlo 10 % sa dôsledne neuplatňuje, registrácia jednej viaczložkovej látky je odôvodnená, keďže (1) dostupné údaje z testov pokrývajú variabilitu všetkých troch stupňov kvality, (2) všetky stupne kvality majú veľmi podobné fyzikálno-chemické vlastnosti, (3) všetky stupne kvality sa z hľadiska nebezpečnosti klasifikujú a označujú rovnako (takže karty bezpečnostných údajov sú identické) a (4) všetky tri stupne kvality majú podobné použitie a expozičné scenáre (t.j. podobné správy o chemickej bezpečnosti).

1. Názov a iné identifikátory

Názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov	reakčná zmes 3-metyl-4-(2,6,6-trimetylcyklohex-2-én-1-yl)but-3-én-2-ón; 3-metyl-4-(2,6,6-trimetylcyklohex-1-enyl)but-3-én-2-ón; [<i>R</i> -(<i>E</i>)]-1-(2,6,6-trimetylcyklohex-2-én-1-yl)pent-1-én-3-ón; 1-(6,6-dimetyl-2-metylcyklohex-1-yl)pent-1-én-3-ón; 1-(2,6,6-trimetylcyklohex-1-enyl)pent-1-én-3-ón
Iné názvy	gama-metyljonón kvalita A gama-metyljonón kvalita B gama-metyljonón kvalita C
ES číslo	nie je k dispozícii
ES názov	/
ES popis	/
CAS číslo	nie je k dispozícii
CAS názov	/

2. Informácie o zložení – hlavné zložky

Teoreticky sú možné ďalšie entioméry. Analyzované však boli tieto izoméry:

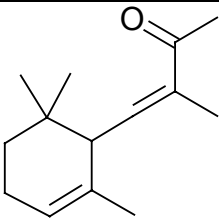
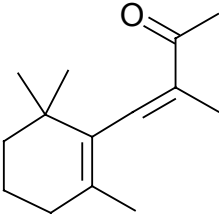
Hlavné zložky						
	Názov IUPAC	číslo CAS	číslo EC	Molekulový vzorec Hillova metóda	min. konc. (hmotn.%)	max. konc. (hmotn.%)
A	3-metyl-4-(2,6,6-trimetylcyklohex-2-én-1-yl)but-3-én-2-ón	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
B	3-metyl-4-(2,6,6-trimetylcyklohex-1-enyl)but-3-én-2-ón	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetylcyklohex-2-én-1-yl)pent-1-én-3-ón	127-42-4	204-842-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	30
D	1-(6,6-dimetyl-2-metylencyklohex-1-yl)pent-1-én-3-ón	nie je dostupné	nie je dostupné	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimetylcyklohex-1-enyl)pent-1-én-3-ón	127-43-5	204-843-7	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	15

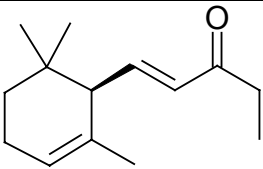
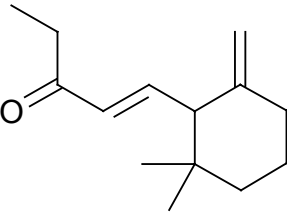
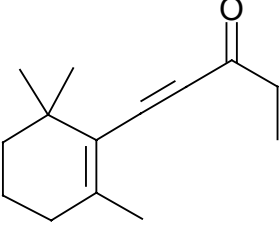
Hlavné zložky	
	Iné názvy:
A	alfa-izo-metyljonón; gama-metyljonón
B	beta-izo-metyljonón; delta-metyljonón
C	alfa-n-metyljonón
D	gama-n-metyljonón
E	beta-n-metyljonón

Hlavné zložky		
	názov ES	popis ES
A	3-metyl-4-(2,6,6-trimetylcyklohex-2-én-1-yl)but-3-én-2-ón	/
B	3-metyl-4-(2,6,6-trimetylcyklohex-1-enyl)but-3-én-2-ón	/
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetylcyklohex-2-én-1-yl)pent-1-én-3-ón	/
D	1-(6,6-dimetyl-2-metylencyklohex-1-yl)pent-1-én-3-ón	/
E	1-(2,6,6-trimetylcyklohex-1-enyl)pent-1-én-3-ón	/

Hlavné zložky		
	názov CAS	číslo CAS
A	3-butén-2-ón, 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)-	127-51-5
B	3-butén-2-ón, 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)-	79-89-0
C	1-pentén-3-ón, 1-[(1 <i>R</i>)-2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl]-, (1 <i>E</i>)-	127-42-4
D	nie je dostupný	nedostupné
E	1-pentén-3-ón, 1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)-	127-43-5

Hlavné zložky		
	ďalšie identifikačné kódy	odkaz
A	2714 07.036	FEMA EU Register vôní
B	07.041	EU Register vôní
C	2711 07.009	FEMA EU Register vôní
D	nie je dostupný	nie je dostupný
E	2712 07.010	FEMA EU Register vôní

Hlavné zložky			
	Molekulový vzorec metóda CAS	Štruktúrny vzorec	SMILES kód
A	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C
B	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C

C	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC
D	C ₁₄ H ₂₂ O		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC
E	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

Hlavné zložky		
	Molekulová hmotnosť / g.mol ⁻¹	rozsah molekulovej hmotnosti
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Informácie o zložení – nečistoty a prísady

Nečistoty						
	Názov IUPAC	číslo CAS	číslo ES	molek. vzorec	typická konc. (hmotn.%)	rozsah konc. (hmotn.%)
F						
množstvo nešpecifikovaných nečistôt:				11 (pseudo-metyljonóny)		
celková koncentrácia nešpecifikovaných nečistôt:				0,5 – 3 % (hmotnostné)		

Prísady						
	Názov IUPAC	číslo CAS	číslo ES	molek. vzorec	typická konc. (hmotn.%)	rozsah konc. (hmotn.%)
G	butylovaný hydroxytoluén (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05-0,15

4. Informácie o rôznych stupňoch kvality

Dole sú uvedené rozsahy piatich hlavných zložiek v troch odlišných stupňoch kvality:

rozsah koncentrácie [%]	kvalita A	kvalita B	kvalita C
gama(izo-alfa)-metyljonón	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta(izo-beta)-metyljonón	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alfa-n-metyljonón	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gama-n-metyljonón	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4
beta-n-metyljonón	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo-metyljonóny	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3

7.5 MINERÁLY

Minerál je definovaný ako kombinácia anorganických zložiek v podobe, v akej sa vyskytuje v zemskej kôre, s charakteristickým súborom chemických zložení, kryštalických foriem (od vysoko kryštalickej po amorfnú) a fyzikálno-chemickými vlastnosťami.

Pokiaľ minerály nie sú chemicky modifikované, sú vyňaté z povinnosti registrácie. Týka sa to minerálov, ktorých chemická štruktúra sa nemení ani po chemickom procese alebo spracovaní, ani po fyzikálnej mineralogickej transformácii, napríklad za účelom odstránenia nečistôt.

Zatiaľ čo niektoré minerály možno opísať iba ich chemickým zložením (pozri kapitolu 4.2.1 a 4.2.2 pre jednozložkové a viaczožkové látky), u iných na identifikáciu týchto látok samotné chemické zloženie nepostačuje (pozri kapitolu 4.2.3).

Na rozdiel od iných jednozložkových a viaczožkových látok sa pri identifikácii mnohých minerálov musí vychádzať z chemického zloženia a vnútornej štruktúry (napr. ako sa zistí röntgenovou difrakciou), keďže tieto spolu predstavujú základ minerálu a určujú jeho fyzikálno-chemické vlastnosti.

Podobne ako je tomu u iných viaczožkových látok, ako súčasť identifikácie sa pre minerály používa CAS číslo (t.j. kombinácia anorganických zložiek). CAS čísla anorganických zložiek (ako sú definované v systematickej mineralógii) sa používajú na opis rôznych zložiek. Pokiaľ sa vyrobí samotná anorganická zložka (jednozložková látka), na identifikáciu látky by sa malo použiť CAS číslo tejto látky. Napríklad:

- Minerál kaolín (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) pozostáva v podstate z primárnych a sekundárnych kaolinitov (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), ktorý je hydratovaným hlinito-kremičitým ílom.

V prípade, že kaolín prejde procesom rafinácie za účelom výroby jedinej zložky kaolónu (kaolínu), napr. kaolinitu, potom látke by malo byť pridelené CAS/EINECS číslo EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Minerál bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), ktorý je v zozname EINECS opísaný ako "koloidný íl pozostávajúci najmä z montmorilonitu", obsahuje vysoký podiel anorganickej zložky montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), ale aj iné zložky.

V prípade, že sa vyrobí čistý montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), potom sa na identifikáciu látky musí použiť CAS číslo montmorilonitu.

Treba zdôrazniť, že bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) a montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) sa nepovažujú za totožnú látku.

Na záver treba uviesť, že minerál sa spravidla pomenúva podľa kombinácie svojich anorganických zložiek. Možno ich považovať za jednozložkové alebo viaczložkové látky. (všeobecný návod je v kapitole 4.2.1 a 4.2.2). Niektoré minerály nemožno opísať iba ich chemickým zložením ale na ich dostatočnú identifikáciu je potrebná ďalšia fyzikálna charakterizácia alebo parametre spracovania (pozri kapitolu 4.2.3). V nasledujúcej tabuľke je uvedených niekoľko príkladov.

Príklady minerálov

Názov	CAS	EINECS	doplňujúci popis ¹⁷
kristobalit	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (kryštalická štruktúra: kubická)
kremeň	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (kryštalická štruktúra: romboedrická)
kremelina	61790-53-2	-	Známy tiež ako diatomit, Kieselgur a Celit Popis: Jemná kremičitá tuhá látka zložená zo skeletov malých predhistorických vodných rastlín. Obsahuje najmä oxid kremičitý.
dolomit	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
skupina živcových minerálov	68476-25-5	270-666-7	Anorganická látka, ktorá je reakčnou zmesou vzniknutou vysokoteplotnou kalcináciou s rôznym zastúpením oxidov bária, hliníka, horčíka, kremíka, stroncia a vápnika, ktoré vzájomnou homogénnou iónovou difúziou utvorili kryštalickú mriežku.
mastenec	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
vermikulit	1318-00-9	-	(Mg _{0.33} [Mg ₂₋₃ (Al ₀₋₁ Fe ₀₋₁) ₀₋₁](Si _{2.33-3.33} Al _{0.67-1.67})(OH) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O)

¹⁷ Definícia ako je uvedená v Smernici komisie 2001/30/ES (Ú.v. L 146, 31.05.2001, str.1)

Analytické informácie požadované pre minerály

Elementárne zloženie	Chemické zloženie poskytuje celkový prehľad o zložení minerálu bez ohľadu na počet zložiek a ich percentuálne podiely v mineráli. Na základe dohody sa chemické zloženie vyjadruje pre oxidy.
Spektrálne údaje (XRD alebo ekvivalentné)	XRD alebo iné techniky môžu identifikovať minerály na základe ich kryštalografickej štruktúry. Uvádzajú sa charakteristické XRD alebo IR píky, ktoré identifikujú minerál spolu so stručným opisom analytickej metódy alebo bibliografickým odkazom.
Typické fyzikálno-chemické vlastnosti	Minerály majú charakteristické fyzikálno-chemické vlastnosti, ktoré umožňujú ich úplnú identifikáciu, napr. - veľmi nízka tvrdosť - bobtnavosť - tvar diatomitu (optický mikroskop) - veľmi vysoká hustota - špecifický povrch (adsorpcia dusíka)

7.6 ESENCIÁLNY OLEJ LAVANDIN GROSSO

Esenciálne oleje sú látky, ktoré sa získavajú z rastlín. Z toho dôvodu sa esenciálne oleje môžu charakterizovať aj ako látky získané z rastlinného materiálu.

Látky získané z rastlinného materiálu sú spravidla komplexné prírodné látky získané spracovaním rastliny alebo jej častí postupmi ako sú extrakcia, destilácia, lisovanie, frakcionácia, prečisťovanie, koncentrácia alebo fermentácia. Zloženie týchto látok sa mení v závislosti od rodu, druhu, podmienok rastu a termínu zberu zdrojov a od použitých technológií spracovania.

Esenciálne oleje môžu byť definované svojimi hlavnými zložkami, ako je tomu zvykom u viaczložkových látok. Jednako, esenciálne oleje môžu pozostávať až z niekoľko sto zložiek, ktoré sa môžu značne meniť v závislosti od mnohých faktorov (rod, druh, podmienky rastu, termín zberu, použité postupy spracovania). Z toho dôvodu na opis týchto UVCB látok často nepostačuje opis ich hlavných zložiek. Esenciálne oleje by sa mali opisovať podľa rastlinného zdroja a postupu spracovania (úpravy), ako sa uvádza v kapitole 4.3.1 (použitím UVCB podtypu 3).

V mnohých prípadoch sú pre esenciálne oleje k dispozícii priemyselné normy (pre mnohé esenciálne oleje aj normy ISO). Na dôvažok možno poskytnúť informácie o normách. Jednako, pri identifikácii látky by sa malo vychádzať z látky v takej forme, v akej je vyrobená.

V príklade uvedenom nižšie je opísaný “esenciálny olej lavandin grosso“, pre ktorý existuje norma ISO (ISO 8902-1999).

1. Názvy a iné identifikátory

Zdroj

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

Proces

Popis procesov (bio)chemických reakcií používaných pri výrobe látky:

Destilácia kvitnúcich vňatí *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) s vodnou parou a následná separácia vodnej fázy z esenciálneho oleja;

Následná separácia je spontánny, fyzikálny proces, ktorý sa bežne uskutočňuje v separátore (nazývanom "florentská banka"), ktorý umožňuje jednoduchú izoláciu separovaného oleja. Teplota v tomto stupni separačného procesu je asi 40 °C.

Názov

názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov	Esenciálny olej <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
číslo ES názov ES popis ES	297-385-2 levanduľa, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extrakt Extrakty a ich fyzikálne modifikované deriváty ako tinktúry, odparky, absolúty (čistý koncentrovaný aromatický rastlinný extrakt), esenciálne oleje, balzamy, terpény, neterpénové frakcie, destiláty, zvyšky a pod., získané z <i>Lavandula hybrida grosso</i> , <i>Labiatae</i> ¹⁸ .
číslo CAS názov CAS	93455-97-1 levanduľa, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext.

¹⁸ "Labiatae" a "Lamiaceae" sú synonymá

2. Informácie o zložení – známe zložky

Známe zložky					
	chemický názov EC CAS IUPAC iný	číslo EC CAS	molek. vzorec Hillova metóda	typická konc. (hmotn.%)	rozsah konc. (hmotn.%)
A	EC linalyl-acetát CAS 1,6-oktadién-3-ol, 3,7-dimetyl-, acetát IUPAC 3,7-dimetylokta-1,6-dién-3-yl- acetát	EC 204-116-4 CAS 115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	33	28 - 38
B	EC linalol CAS 1,6-oktadién-3-ol, 3,7-dimetyl- IUPAC 3,7-dimetylokta-1,6-dién-3-ol	EC 201-134-4 CAS 78-70-6	$C_{19}H_{18}O$	29,5	24 - 35
C	EC bornán-2-ón CAS bicyklo[2.2.1]heptán-2-ón, 1,7,7-trimetyl- IUPAC 1,7,7-trimetylbicyklo [2.2.1]heptán-2-ón iný gáfor [camphor]	EC 200-945-0 CAS 76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	7	6 - 8

D	EC cineol CAS 2-oxabicyklo[2.2.2]oktán, 1,3,3-trimetyl- IUPAC 1,3,3-trimetyl-2-oxabicyklo [2.2.2]oktán iný 1,8-cineol [1,8-cineole]	EC 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 - 7
E	EC 4-ment-1-én-4-ol CAS 3-cyklohexén-1-ol, 4-metyl-1-(1-metyletyl)- IUPAC 1-(1-metyletyl)-4-metyl cyklohex-3-én-1-ol iný terpinén-4-ol [terpinene-4-ol]	EC 209-235-5 CAS 562-74-3	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5 - 5
F	EC 2-izopropenyl-5-metylhex-4- enyl acetát CAS 4-hexén-1-ol, 5-metyl-2-(1- metyletenyl)-, acetát IUPAC 2-(1-metyletenyl)-5-metylhex- 4-én-1-ol iný (±)-lavandulyl-acetát [(±)-lavandulol acetate]	EC 247-327-7 CAS 25905-14-0	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5 - 3

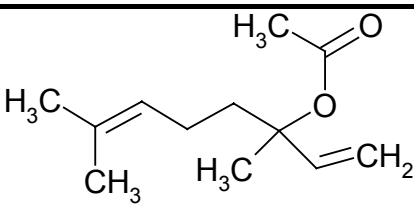
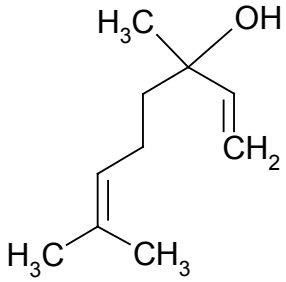
G	EC DL-borneol CAS bicyklo[2.2.1]heptán-2-ol, 1,7,7-trimetyl-, (1 <i>R</i> ,2 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)- <i>rel</i> - IUPAC (1 <i>R</i> ,2 <i>S</i> ,4 <i>R</i>)- <i>rel</i> -1,7,7-trimetyl bicyklo[2.2.1]heptán-2-ol iný borneol	EC 208-080-0 CAS 507-70-0	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5 - 3
H	EC karyofylén CAS bicyklo[7.2.0]undec-4-én, 4,11,11-trimetyl-8-metylén-, (1 <i>R</i> ,4 <i>E</i> ,9 <i>S</i>)- IUPAC (1 <i>R</i> ,4 <i>E</i> ,9 <i>S</i>)-4,11,11-trimetyl-8- metylénbicyklo[7.2.0]undec-4- én iný <i>trans</i> -beta-karyofylén [trans-beta-caryophyllene]	EC 201-746-1 CAS 87-44-5	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1 - 2,5
I	EC (<i>E</i>)-7,11-dimetyl-3-metylidén dodeka-1,6,10-trién CAS 1,6,10-dodekatrién, 7,11-dimetyl-3-metylén-, (6 <i>E</i>)- IUPAC (<i>E</i>)-7,11-dimetyl-3-metylén dodeka-1,6,10-trién iný <i>trans</i> -beta-farnesén [trans-beta-farnesene]	EC 242-582-0 CAS 18794-84-8	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2 - 2

J	EC (R)-1-metyl-4-(1-metyletenyl) cyklohexén CAS cyklohexén, 1-metyl-4-(1-metyletenyl)-, (4 <i>R</i>)- IUPAC (4 <i>R</i>)-1-metyl-4-(1-metyletenyl) cyklohexén iný limonén [limonene]	EC 227-813-5 CAS 5989-27-5	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5 - 1,5
K	EC 3,7-dimetylokta-1,3,6-trién CAS 1,3,6-oktatrién, 3,7-dimetyl- IUPAC 3,7-dimetylokta-1,3,6-trién iný <i>cis</i> -beta-ocimén [cis-beta-ocimene]	EC 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5 - 1,5

Známe zložky ≥ 10 %

Známe zložky		
	názov ES	popis ES
A	linalyl-acetát C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	linalol C ₁₀ H ₁₈ O	

Známe zložky		
	názov CAS	príslušné číslo CAS
A	1,6-oktadién-3-ol, 3,7-dimetyl-, acetát C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	1,6-oktadién-3-ol, 3,7-dimetyl- C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Známe zložky			
	Molekulový vzorec metóda CAS	Štruktúrny vzorec	SMILES kód
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Známe zložky		
	Molekulová hmotnosť	rozsah molekulovej hmotnosti
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7 CHRYZANTÉMOVÝ OLEJ A Z NEHO IZOLOVANÉ IZOMÉRY

Spoločnosť vyrába chryzantémový olej, ktorý je extrahovaný po rozdrvení kvetov a listov rastlín *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae rozpúšťadlom obsahujúcim zmes vody a etanolu (1:10). Po extrakcii sa rozpúšťadlo odstráni a "čistý" extrakt sa rafinuje v ďalších krokoch, výsledkom čoho je konečný chryzantémový olej.

Okrem toho sa z extraktu izolujú dva izoméry ako reakčná zmes:

Jasmolín I

(kyselina cyklopropánkarboxylová, 2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)-, (1S)-2-metyl-4-oxo-3-(2Z)-pent-2-enylcyklopent-2-enyl ester, (1R,3R)-; CAS číslo 4466-14-2), a

Jasmolín II

(kyselina cyklopropánkarboxylová, 3-[(1E)-3-metoxi-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl]-2,2-dimetyl-, (1S)-2-metyl-4-oxo-3-(2Z)-pent-2-enylcyklopent-2-enyl ester, (1R,3R)-; CAS číslo 1172-63-0)

Spoločnosť sa ďalej rozhodla, že bude syntetizovať aj izomérnu reakčnú zmes jasmolínu I a II.

Spoločnosť kladie tieto otázky:

1. Ako identifikovať chryzantémový olej pre účel registrácie?
2. Je reakčná zmes izolovaných izomérov Jasmolín I a II pokrytá registráciou oleja?
3. Možno syntetizovanú zmes dvoch izomérov považovať za totožnú so zmesou izomérov izolovaných z chryzantémového oleja?

1. Ako identifikovať chryzantémový olej pre účel registrácie?

Chryzantémový olej sa považuje za UVCB látku, ktorá nemôže byť dostatočne identifikovaná chemickým zložením (podrobný návod pozri v kapitole 4.3). Dôležité sú iné identifikačné parametre ako zdroj a proces. Chryzantémový olej má biologický charakter a mal by byť identifikovaný druhom a časťou organizmu, z ktorého sa získava a rafinačným procesom (extrakcia rozpúšťadlom). Jednako, malo by sa uviesť chemické zloženie a identita zložiek, pokiaľ sú tieto údaje známe.

Pre dostatočnú identifikáciu látky sa považujú za nevyhnutné nasledujúce informácie:

názov látky	Chrysanthemum cinerariaefolium, Compositae; olej získaný z rozdrvených kvetov a listov extrakciou vody s etanolom (1:10)			
zdroj				
rod, druh, poddruh	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae			
časť rastliny používaná na olej	kvety a listy			
proces				
metóda výroby	drvenie nasledované extrakciou			
rozpúšťadlo používané na extrakciu	voda:etanol (1:10)			
Informácie o zložení – známe zložky v % (hmotnostných)				
názov zložky	číslo ES	číslo CAS	min. %	max. %
Pyretrín I [Pyrethrin I]: O-[2-metyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyklopent-2-enyl]-[1R-[1α[S*(Z)],3β]]-chryzantemát	204-455-8	121-21-1	30	38

Pyretrín II [Pyrethrin II]: O-[2-metyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyklopent-2-enyl]-[1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-metoxo-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimetylcyklopropánkarboxylát	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerín I [Cinerin I]: [3-(but-2-enyl)-2-metyl-4-oxocyklopent-2-enyl]-2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerín II [Cinerin II]: O-[3-(but-2-enyl)-2-metyl-4-oxocyklopent-2-enyl]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxo-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	204-454-2	121-20-0	8	15
Jasmolín I [Jasmolin I]: 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	žiadne	4466-14-2	4	10
Jasmolín II [Jasmolin II]: 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-én-1-yl[1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxo-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	žiadne	1172-63-0	4	10
Okrem toho látka obsahuje až do 40 zložiek pod 1 %.				

Je možné uvažovať aj o identifikácii látky ako dobre definovanej viaczložkovej látky so šiestimi hlavnými zložkami (reakčná zmes pyretrínu I, pyretrínu II, cinerínu I, cinerínu II, jasmolínu I a jasmolínu II).

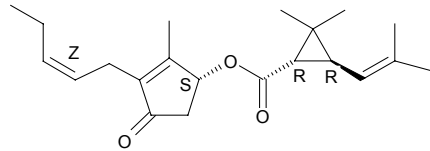
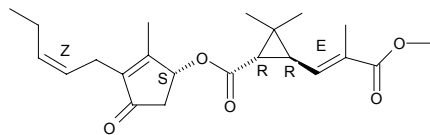
Látka sa považuje za "látku prírodného pôvodu", pokiaľ výrobný proces spočíva len v "drvení" a v takom prípade je vyňatá z povinnosti registrácie s výnimkou prípadu, keď spĺňa kritériá pre klasifikáciu ako nebezpečná podľa smernice 67/548/EHS.

2. Je reakčná zmes izolovaných izomérov Jasmolín I a II pokrytá registráciou oleja?

Na reakčnú zmes izolovaných izomérov jasmolínu I a II sa nevzťahuje registrácia oleja *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, keďže jednotlivé zložky sa neprekrývajú s celou UVCB látkou a naopak. Reakčná zmes jasmolínu I a II sa považuje za rozdielnú látku.

Reakčnú zmes jasmolínu I a jasmolínu II možno považovať za viaczložkovú látku (podrobný návod pozri v kapitole 4.2.3) s dvomi hlavnými zložkami.

Pre dostatočnú identifikáciu látky sa považujú za nevyhnutné nasledujúce informácie:

názov látky podľa IUPAC	reakčná zmes 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1 <i>R</i> -[1α[<i>S</i> [*] (<i>Z</i>)],3β]]-2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát a 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-én-1-yl[1 <i>R</i> -[1α[<i>S</i> [*] (<i>Z</i>)],3β(<i>E</i>)]]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxi-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát			
iný názov	reakčná zmes Jasmolínu I a Jasmolínu II			
čistota látky				
Informácie o zložení – hlavné zložky v % (hmotnostných)				
názov zložky	č. ES	číslo CAS	min %	max %
Jasmolín I: 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1 <i>R</i> -[1α[<i>S</i> [*] (<i>Z</i>)],3β]]-2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	žiadne	4466-14-2	40	60
molekulový vzorec štruktúrny vzorec		C ₂₁ H ₃₀ O ₃ 		
molekulová hmotnosť		M = 330 g/mol		
Jasmolín II: 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-én-1-yl[1 <i>R</i> -[1α[<i>S</i> [*] (<i>Z</i>)],3β(<i>E</i>)]]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxi-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	žiadne	1172-63-0	35	65
molekulový vzorec štruktúrny vzorec		C ₂₂ H ₃₀ O ₅ 		
molekulová hmotnosť		M = 374 g/mol		

3. Možno syntetizovanú zmes (reakčnú zmes) dvoch izomérov považovať za totožnú so zmesou izomérov izolovaných z chryzantémového oleja ?

V prípade chemicky dobre definovaných látok, ktoré sú dostatočne opísané svojimi zložkami, nezáleží na tom, či je látka izolovaná z extraktu alebo syntetizovaná chemickým procesom. Z toho dôvodu syntetizovanú reakčnú zmes jasmolínu I a II možno považovať za totožnú so zmesou izomérov izolovaných z chryzantém, a to aj vtedy, ak pochádza z rozličných výrobných procesov za predpokladu, že čistota zmesi a rozsah koncentrácií hlavných zložiek sú totožné.

4. Záver

Identifikujú sa dve látky:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; olej získaný z rozdrvených kvetov a listov extrakciou vody s etanolom (1:10)
2. Reakčná zmes izomérov jasmolínu I a jasmolínu II, nezávisle od výrobného procesu látky.

Ak by sa látky uvedené vyššie použili len v prípravkoch na ochranu rastlín a biocídnych výrobkoch, považovali by sa podľa REACH za registrované (článok 15).

7.8 FENOL, IZOPROPYLOVANÝ, FOSFÁT

Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1) je UVCB látka, u ktorej sa variabilita izopropylovej jednotky nedá úplne definovať.

1. Názov a iné identifikátory

názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov	fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1)
iné názvy	fenol, izopropylovaný, fosfát fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1) (na základe molárneho pomeru 1:1 propylénu s fenolom)
číslo ES názov ES	273-066-3 izopropylovaný fenol, ester s kyselinou fosforečnou (3:1)
popis ES	/
číslo CAS názov CAS	68937-41-7 fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1)

2. Informácie o zložení – hlavné zložky

Hlavné zložky					
Názov IUPAC	číslo CAS	číslo ES	molekulový vzorec Hillova metóda	typická konc. (hmotn.%)	rozsah konc. (hmotn.%)
izopropylovaný fenol, ester s kyselinou fosforečnou (3:1)	68937-41-7	273-066-3	nešpecifikovaný		

Hlavné zložky	
názov ES	Popis ES
izopropylovaný fenol, ester s kyselinou fosforečnou (3:1)	/
názov CAS	číslo CAS
fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1)	68937-41-7

7.9 KVARTÉRNE AMÓNIOVÉ ZLÚČENINY

Spoločnosť syntetizuje nižšie uvedené látky:

Látka A

Kvartérne amóniové zlúčeniny, di-(C₁₀₋₁₈-alkyl)dimetylamónium-chloridy

ES číslo 294-392-2

CAS číslo 91721-91-4

Rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca:

C ₁₀	10	%
C ₁₁	5,5	%
C ₁₂	12	%
C ₁₃	7,5	%
C ₁₄	18	%
C ₁₅	8	%
C ₁₆	24	%
C ₁₇	7	%
C ₁₈	8	%

Látka B

Kvartérne amóniové zlúčeniny, *N,N*-dimetyl-*N,N*-dialkyl-, alkyl je z kokosu, chloridy

ES číslo 263-087-6

CAS číslo 61789-77-3

Spoločnosť nepozná presné zloženie tejto látky.

Látka C

Didodecyldimetylamónium-bromid

Látka D

Didodecyldimetylamónium-chlorid

Látka E

Látka E sa vyrába ako reakčná zmes didodecyldimetylamónium-bromidu a didodecyldimetylamónium-chloridu (reakčná zmes látok C a D)

Látka F

Kvartérne amóniové zlúčeniny, di- C_{14-18} -alkyldimetylamónium-chloridy

ES číslo 268-072-8

CAS číslo 68002-59-5

Rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca:

C_{14}	20 %
C_{15}	10 %
C_{16}	40 %
C_{17}	10 %
C_{18}	20 %

Látka G

Kvartérne amóniové zlúčeniny, di- C_{4-22} -alkyldimetyl-chloridy

Rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca (jedna čiarka v indexe označuje dvojitú väzbu, dve čiarky v indexe označujú trojitú väzbu):

C_4	0,5 %
C_6	3,0 %
C_8	6,0 %

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

Spoločnosť na pomenovanie zatiaľ používa len látku B (kvartérne amóniové zlúčeniny, *N,N*-dimetyl-*N,N*-dialkyl, alkyl je z kokosu, chloridy, ES číslo 263-087-6, CAS číslo 61789-77-3), pretože je najvhodnejšia pre všetky látky (látky A až G). Spoločnosť by chcela vedieť, či je možné pokryť všetky látky (A až G) jednou registráciou látky B.

1. Všeobecné poznámky

Uhlíkovodíky (parafíny, olefíny) pochádzajúce z tukov a olejov alebo syntetických náhrad sa identifikujú dĺžkou uhlíkového reťazca alebo podľa pôvodu (deskriptor alkylu), podľa funkčnej skupiny (deskriptor funkčnej skupiny), napr. amónium, a podľa aniónu/katiónu (deskriptor soli), napr. chlorid. Distribúcia dĺžok uhlíkového reťazca, napr. C₈₋₁₈, sa vzťahuje na uhlíkovodíky

- nasýtené
- lineárne (nerozvetvené)
- s uvedením všetkých hodnôt počtu uhlíkov (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁, ..., C₁₈), zatiaľ čo úzky rozsah počtu uhlíkov sa neprekrýva so širším a naopak

V opačnom prípade sa uvádza takto:

- nenasýtené (C₁₆ nenasýtené)
- rozvetvené (C₁₀ rozvetvené)
- s párnym počtom uhlíkov (C₁₂₋₁₈ párne)

Uhlíkové reťazce opísané zdrojom musia pozostávať z distribúcie, ktorá sa vyskytuje v zdroji, napr. alkylamíny z loja:

Alkylamíny z loja sú z 99 % primárne, lineárne alkylamíny s lineárnym reťazcom, u ktorých je takáto distribúcia dĺžky uhlíkového reťazca (Ullmann, 1985) [jedna čiarka v indexe označuje dvojité väzby, dve čiarky v indexe označujú trojitú väzbu]:

C ₁₂	1 %
C ₁₄	3 %
C ₁₄ '	1 %
C ₁₅	0,5 %

C ₁₆	29	%
C ₁₆ [·]	3	%
C ₁₇	1	%
C ₁₈	23	%
C ₁₈ [·]	37	%
C ₁₈ ^{··}	1,5	%

2. Ako identifikovať látky pre účely registrácie?

V nasledujúcej časti sa každá látka porovnáva s látkou B (ktorá sa doteraz používala na pomenovanie), aby sa posúdilo, či obe látky možno považovať za totožné.

Porovnanie látok A a B

U látky B pochádzajúcu „z kokosu“ je distribúcia dĺžok uhlíkového reťazca takáto (Ullmann, 1985) [jedna čiarka v indexe označuje dvojitú väzbu, dve čiarky v indexe označujú trojitú väzbu]:

C ₆	0,5	%
C ₈	8	%
C ₁₀	7	%
C ₁₂	50	%
C ₁₄	18	%
C ₁₆	8	%
C ₁₈	1,5	%
C ₁₈ [·]	6	%
C ₁₈ ^{··}	1	%

Takže distribúcia dĺžok uhlíkového reťazca látky A sa líši od distribúcie dĺžok uhlíkového reťazca látky B „z kokosu“. Keďže kvalitatívne a kvantitatívne zloženie týchto dvoch látok sa výrazne líši, nemožno ich považovať za totožné.

Porovnanie látok B a C

Látka B „kvartérne amóniové zlúčeniny, *N,N*-dimetyl-*N,N*-dialkyl, alkyl je z kokosu, chloridy“ je opísaná ako zmes zložiek s rozdielnymi dĺžkami uhlíkového reťazca (C₆ až C₁₈ párne, lineárne, nasýtené a nenasýtené), zatiaľ čo látka C je opísaná len jednou zložkou s jedným definovaným a nasýteným reťazcom (C₁₂) s rozdielnym aniónom (bromid). Preto látku C nemožno považovať za totožnú s látkou B.

Porovnanie látok B a D

Látka B "kvartérne amóniové zlúčeniny, *N,N*-dimetyl-*N,N*-dialkyl, alkyl je z kokosu, chloridy" je opísaná ako zmes zložiek s rozdielnymi dĺžkami uhlíkového reťazca (C_6 až C_{18} párne, lineárne, nasýtené a nenasýtené), zatiaľ čo látka D je opísaná jednou zložkou s definovaným a nasýteným reťazcom (C_{12}) a s rovnakým aniónom (chlorid). Látky B a D majú rozdielne názvy a nemožno ich považovať za rovnakú látku, pretože látka s jednou zložkou nie je pokrytá látkou so zmesou, ktorá obsahuje aj túto zložku a naopak.

Porovnanie látok B a E

Látka E je zmesou látok C a D. Obidve majú nasýtený reťazec C_{12} , ale rozdielne anióny (bromid a chlorid). Látka B "kvartérne amóniové zlúčeniny, *N,N*-dimetyl-*N,N*-dialkyl, alkyl je z kokosu, chloridy" je opísaná ako zmes zložiek s rozdielnymi dĺžkami uhlíkového reťazca (C_6 až C_{18} párne, lineárne, nasýtené a nenasýtené) a chloridom ako aniónom. Jednako, látka E sa je opísaná len uhlíkovým reťazcom C_{12} s bromidom ako ďalším aniónom. Látky B a E preto nemožno považovať za totožné. V dôsledku toho je potrebné látku E registrovať samostatne.

Porovnanie látok B a F

Látka F "kvartérne amóniové zlúčeniny, di- C_{14-18} -alkyldimetylamónium-chloridy" je zmesou zložiek s rozdielnymi dĺžkami uhlíkového reťazca (C_{14} až C_{18} párne a nepárne, lineárne a nasýtené). Látka F sa od látky B líši zložením a distribúciou rozsahov dĺžky uhlíkového reťazca. Látka F má úzky rozsah dĺžok uhlíkového reťazca a okrem toho aj uhlíkové reťazce C_{15} a C_{17} . Látky B a F preto nemožno považovať za totožné.

Porovnanie látok B a G

Látky B a G sa zdajú byť veľmi podobné, pretože distribúcia dĺžok uhlíkového reťazca sa pohybuje takmer v rovnakom rozsahu. Jednako, v látke G sú aj uhlíkové reťazce C_4 , C_{20} a C_{22} . Látka G má širší rozsah dĺžok uhlíkového reťazca ako látka B. Látky B a G preto nemožno považovať za totožné.

3. Záver

Uhľovodíky (parafíny, olefíny) možno považovať za rovnakú látku len vtedy, keď sú všetky tri deskriptory (deskriptor alkylu, deskriptor funkčnej skupiny a deskriptor soli) rovnaké.

V príklade uvedenom vyššie sa deskriptory vždy navzájom líšia. Látky preto nemožno pokryť jednou registráciou látky B.

7.10 ROPNÉ LÁTKY

Vychádzajúc z návodu pre špecifické UVCB látky v kapitole 4.3.3.2 sa uvádzajú dva príklady.

7.10.1 Benzínová zmesná frakcia (C₄-C₁₂)

1. Názov a iné identifikátory

Názov

názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov	katalyticky reformovaný benzín (ropný)
--	--

Zdroj

Identifikácia alebo popis zdroja frakcie	ropa
--	------

Proces

popis rafinačného procesu	katalytický reformačný proces
uhlíkový rozsah	C ₄ -C ₁₂
rozsah teploty varu alebo konečná teplota varu	30 °C až 220 °C
d'alšie fyzikálne vlastnosti, napr. viskozita	pod 7 mm ² /s pri 40 °C (viskozita)
číslo ES číslo CAS názov ES / názov CAS popis ES / popis CAS	273-271-8 68955-35-1 katalyticky reformovaný benzín (ropný) Komplexná zmes uhľovodíkov získaná destiláciou produktov katalytického reformačného procesu. Pozostáva z uhľovodíkov, ktoré majú počet uhlíkov prevažne v rozmedzí od C ₄ do C ₁₂ a vrúca v rozmedzí od približne 30 °C do 220 °C (90 °F do 430 °F). Obsahuje relatívne vysoký podiel aromatických uhľovodíkov a uhľovodíkov s rozvetveným reťazcom. Tento podiel môže obsahovať 10 alebo viac objemových % benzénu.

2. Informácie o zložení

Známe zložky			
Názov IUPAC	číslo CAS	číslo ES	rozsah konc. (hmotn.%)
benzén	71-43-2	200-753-7	1 - 10
toluén	108-88-3	203-625-9	20 - 25
xylén	1330-20-7	215-535-7	15 - 20

7.10.2 Plynové oleje (ropné)

1. Názov a iné identifikátory

názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov	plynové oleje (ropné), ťažká frakcia z destilácie pri atmosferickom tlaku
--	--

Zdroj

Identifikácia alebo popis zdroja frakcie	ropa
--	------

Proces

popis rafinačného procesu	destilácia pri atmosferickom tlaku
uhlíkový rozsah	C ₇ -C ₃₅
rozsah teploty varu alebo konečná teplota varu	121 °C až 510 °C
ďalšie fyzikálne vlastnosti, napr. viskozita	20 mm ² /s pri 40 °C (viskozita)
číslo ES číslo CAS názov ES / názov CAS popis ES / popis CAS	272-184-2 68783-08-4 plynové oleje (ropa), ťažká frakcia z destilácie pri atmosferickom tlaku Komplexná zmes uhľovodíkov získaná destiláciou surového oleja. Pozostáva z uhľovodíkov s počtom uhlíkov predovšetkým v rozmedzí od C ₇ do C ₃₅ a s teplotou varu približne od 121 °C do 510 °C (od 250 °F do 950 °F).

2. Chemické zloženie

Nie sú k dispozícii žiadne informácie.

7.11 ENZÝMY

Vychádzajúc z návodu pre špecifické UVCB látky v kapitole 4.3.2.3 sa uvádzajú dva príklady pre enzýmové koncentráty: subtilizín (identifikovaný názvoslovím IUBMB + inými zložkami) a α -amyláza (identifikovaná podľa názvoslovía IUBMB + produkčným organizmom).

7.11.1 Subtilizín

<u>enzýmový proteín</u>	subtilizín
IUBMB číslo	3.4.21.62
názvy IUBMB	subtilizín;
(systematický názov, názov enzýmu, synonymá)	alkaláza; alkaláza 0.6L; alkaláza 2.5L; ALK-enzým; bacilopeptidáza A; bacilopeptidáza B; <i>Bacillus subtilis</i> alkalická proteináza; biopráza; biopráza AL 15; biopráza APL 30; kolistináza; (pozri tiež poznámky); subtilizín J; subtilizín S41; subtilizín Sendai; subtilizín GX; subtilizín E; atď.
poznámky IUBMB	Subtilizín je serínová endopeptidáza, príklad typu skupiny peptidáz S8. Neobsahuje žiadne cysteínové rezíduá (hoci tieto sa nachádzajú v homologických enzýmoch). Varianty druhov zahŕňajú subtilizín BPN (tiež subtilizín B, subtilopeptidázu B, subtilopeptidázu C, Nagarse, proteinázu Nagarse, subtilizín Novo, bakteriálnu proteinázu Novo) a subtilizín Carlsberg (subtilizín A, subtilopeptidázu A, alkalázu Novo). Pôvodne EC 3.4.4.16 a zahrnuté pod EC 3.4.21.14. Podobné enzýmy sú produkované rôznymi kmeňmi <i>Bacillus subtilis</i> a inými druhmi <i>Bacillus</i> [1,3]
reakcia	hydrolýza proteínov so širokou špecifickosťou peptidových väzieb a preferenciou pre veľké neutrálne rezíduum v P1. Hydrolyzuje peptidové amidy
reakčný typ	hydrolázy; pôsoiace na peptidové väzby (peptidázy); serínové endopeptidázy
ES číslo	232-752-2
ES názov	subtilizín
CAS číslo	9014-01-1
CAS názov	subtilizín
koncentrácia enzýmového proteínu	26 %
<u>iné zložky</u>	
iné proteíny, peptidy a aminokyseliny	39 %
uhlíhydráty	11 %
lipidy	1 %
anorganické soli	23 %
<u>doplňujúce parametre</u>	
substráty a produkty	proteíny alebo oligopeptidy, voda peptidy

7.11.2 α -amyláza

enzýmový proteín

α -amyláza

IUBMB číslo

3.2.1.1

názvy IUBMB

(systematický názov, názov enzýmu, synonymá)

1,4- α -D-glukanglukanohydroláza;
glykogenáza;
 α -amyláza;
alfa-amyláza;
endoamyláza;
taka-amyláza A

poznámky IUBMB

Občas pôsobí na škrob, glykogén a príbuzné polysacharidy a oligosacharidy; redukujúce skupiny sa uvoľňujú v α -konfigurácii. Výraz ' α ' sa vzťahuje na počiatočnú anomérnu konfiguráciu uvoľnenej voľnej skupiny cukru a nie na konfiguráciu hydrolyzovanej väzby.

reakcia

endohydrolýza 1,4- α -D-glukozidických väzieb v polysacharidoch obsahujúcich tri alebo viac D-glukózových jednotiek viazaných v polohe 1,4- α -

reakčný typ

hydrolázy;
glykozidázy;
glykozidázy, t.j. enzýmy hydrolyzujúce O- a S-glykozylové zlúčeniny

ES číslo

232-565-6

ES názov

amyláza, α -

CAS číslo

9000-90-2

súvisiace CAS čísla

9001-95-0; 9036-05-9; 9077-78-5;
135319-50-5; 106009-10-3; 70356-39-7;
144133-13-1
(všetky sú zrušené)

CAS názov

amyláza, α -

koncentrácia enzýmového proteínu

37 %

iné zložky

iné proteíny, peptidy a aminokyseliny 30 %

uhlíohydráty 19 %

anorganické soli 14 %

doplňujúce parametre

substráty a produkty

škrob; glykogén; voda;
polysacharid; oligosacharid

8 POPIS LÁTKOV V PROGRAME IUCLID 5

Tento oddiel ilustruje, ako možno v programe IUCLID 5 opísať rôzne typy látok – jednozložkové, viaczložkové, látky definované chemickým zložením a inými identifikátormi a UVCB látky.

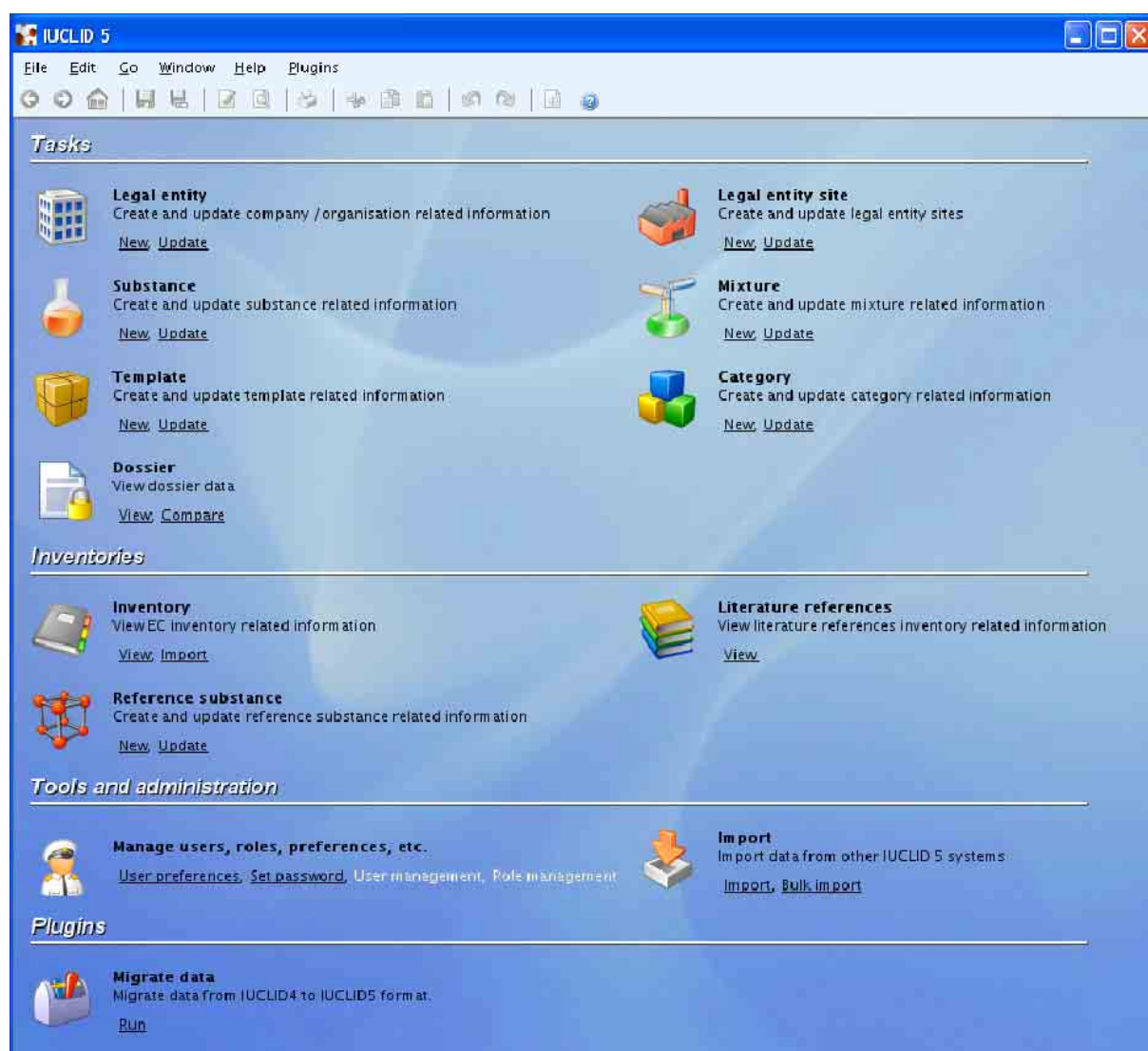
8.1 VŠEOBECNÉ PRINCÍPY

IUCLID 5 obsahuje tri dôležité časti týkajúce sa identifikácie látky:

ES zoznam¹⁹ pod “**Inventories**” (zoznamy);

zoznam „referenčných látok“ (“**Reference Substance**”) pod “Inventories” (zoznamy);

Oddieli 1.1 a 1.2 súbor údajov o látke (“**Substance**”).



¹⁹ V súčasnosti je implementovaný iba ES zoznam. V neskoršej fáze by do tohto oddielu mohli byť pridané aj iné zoznamy, napr. TSCA (Toxic Substances Control Act).

8.1.1 Zoznamy

Oddiel Zoznam obsahuje ES zoznam (ohľadne vysvetliviek pozri kapitolu 3.3), ktorý centrálnie riadi a zabezpečuje Európska Komisia / Európska chemická agentúra, a zoznam referenčných látok, ktorý je miestnym zoznamom, ktorý riadia a podľa potreby aktualizujú samotní užívatelia vo svojich vlastných inštaláciach programu.

Keď sa z ponuky zvolí ES zoznam ([ES Inventory](#)), užívateľ môže vyhľadať a zobrazíť údaje zo zoznamu (t.j. ES číslo, CAS číslo, ES názvy atď.). Tieto informácie sú určené len na čítanie.

Voľba „Referenčná látka“ ([Reference Substance](#)) umožňuje užívateľovi prístup k jeho miestnemu zoznamu zložiek, ktorý bude využívať na identifikáciu svojej látky vo forme v akej je vyrobená, t.j. vrátane nečistôt a prídavných látok.

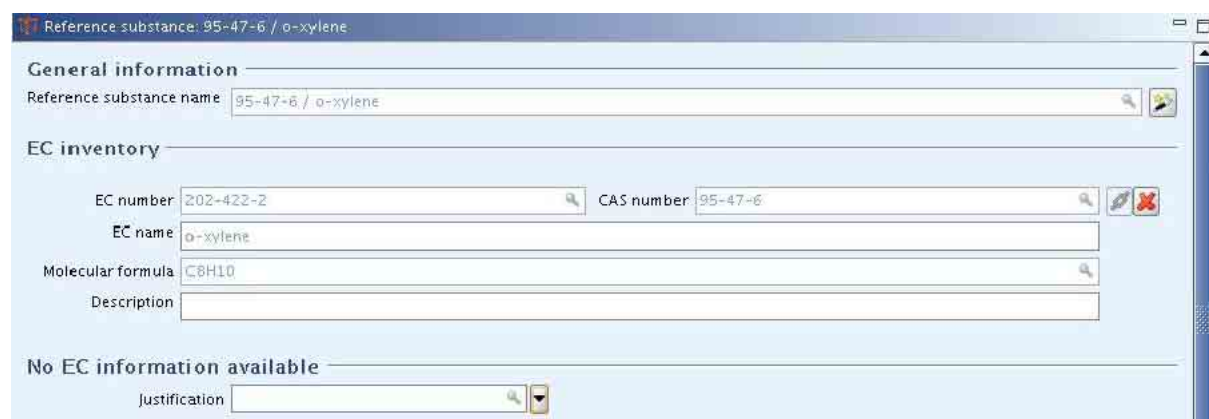
Inými slovami, v zozname referenčných látok sa vytvárajú a centrálnie uchovávajú základné prvky identifikácie látky. Referenčné látky možno v prípade potreby opakovane používať pre rôzne látky.

Príklad

Ak látka pozostáva z: 91 % 1,2-dimetylbenzenu s 5 % 1,3-dimetylbenzenu ako nečistotou, obidve zložky 1,2-dimetylbenzén aj 1,3-dimetylbenzén musia byť definované v Zozname referenčných látok. Vyplnené informácie sú potom v zozname uložené a udržiavané. V prípade, že sa tie isté zložky objavia v ďalšej látke v odlišných percentách, zobrazia sa v lokálnom zozname a informácie môžu byť ľahko znovu použité.

Oddiel „Referenčná látka“ ([Reference Substance](#)) v programe IUCLID 5 znázorňujú nižšie obrázky. Tento oddiel je tu rozdelený na samostatné obrázky, v programe IUCLID je však na jednej obrazovke.

Referenčná látka – časť I



Obrázok „Referenčná látka – časť I) obsahuje:

- názov referenčnej látky ([Reference Substance name](#))

Tento názov možno ľubovoľne zvoliť (v tomto prípade 95-47-6 / 1,2-dimetylbenzén – o-xylén).

- ES zoznam ([EC Inventory](#))

Prepojenie na ES zoznam určený len na čítanie, vrátane zakomponovaných informácií, ako napríklad ES číslo.

- nie sú k dispozícii žiadne ES informácie ([No EC information available](#))

Zoznam zvoliteľných možností ([pick up list](#)), v ktorom môže byť zdôvodnené, prečo nie sú v ES zozname uvedené žiadne informácie (napr. neuvádza sa ([not applicable](#)), zatiaľ nepridelené ([not yet assigned](#))).

Referenčná látka – časť II

CAS information

CAS number: 95-47-6

CAS name: o-Xylene

IUPAC name

1,2-dimethylbenzene

Description

Synonyms

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

Related CAS information

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

Obrázok „Referenčná látka – časť II“ obsahuje:

- CAS informácie ([CAS information](#)) (CAS číslo a CAS názov), vrátane súvisiacich CAS informácií ([Related CAS information](#))

Spravidla sa uvádza CAS číslo súvisiace s ES číslom. Pokiaľ existuje viac ako jedno CAS číslo (napr. zrušené CAS čísla alebo CAS čísla tej istej látky používané v rozdielnych legislatívnych systémoch za účelom opisu látky v súlade s požiadavkami podľa týchto systémov), uvádzajú sa ostatné CAS čísla ako súvisiace CAS čísla;

- názov IUPAC (IUPAC name);

Upozorňujeme, že v políčku “IUPAC názov” ([IUPAC name](#)) by sa mal uvádzať (chemický) názov látok v anglickom jazyku. Toto políčko by sa malo používať aj pre UVCB látky, ktoré sa opisujú prostredníctvom zdroja a procesu;

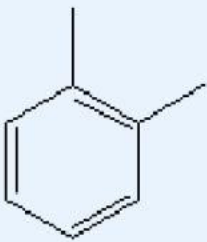
- Políčko opis ([Description](#)) pre ďalšie informácie

V tomto políčku by mali byť uvedené všetky ďalšie informácie relevantné pre opis látky; napr. pre UVCB látky alebo minerály;

- synonymá ([Synonyms](#))

Tu možno uviesť aj IUPAC názvy v iných jazykoch.

Referenčná látka – časť III

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

Obrázok “Referenčné látky – časť III” obsahuje:

- molekulový vzorec ([Molecular formula](#));
Molekulový vzorec by mal byť uvedený v súlade s Hillovou metódou.
- rozsah molekulových hmotností ([Molecular weight range](#))
- zápis SMILES ([SMILES notation](#));
- kód InCHI ([InCHI code](#))
- štruktúrny vzorec vo forme obrázku ([Structural formula](#)).

8.1.2 Súbor údajov o látke (IUCLID oddiel 1.1, 1.2, 1.3 a 1.4)

Súbor údajov v programe IUCLID 5 obsahuje všetky údaje o látke, ako napríklad uzávery záznamov štúdií, informácie o klasifikácii a označovaní a chemickej identite vrátane zloženia látky. Údaje sú zoskupené do 11 oddielov.

Súbor údajov o látke možno vytvoriť, vyhľadať, prehliadať a aktualizovať v ponuke s názvom „Látka“ (Substance).

V oddieli 1.1 a 1.2. súboru údajov „Látka“ (Substance) sú uvedené podrobné údaje o identifikácii a zložení látky.

Identifikácia látky – časť I

Navigation

Query results Section tree

Complete

0 Related Information

1 General Information

1.1 Identification

1.2 Composition

1.3 Identifiers

1.4 Analytical information

1.5 Joint submission

1.6 Sponsors

1.7 Suppliers

1.8 Recipients

1.9 Product and process oriented research

2 Classification and Labelling

3 Manufacture, use and exposure

4 Physical and chemical properties

5 Environmental fate and pathways

6 Ecotoxicological information

7 Toxicological information

8 Analytical methods

9 Residues in food and feedingstuffs

10 Effectiveness against target organisms

11 Guidance on safe use

12 Literature search

13 Assessment Reports

Substance: O-XYLENE / EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / 1st

Third party flags

Third party

Role in the supply chain

Role flags

Role: ☐ Manufacturer ☐ Importer ☐ Only representative ☐ Down

Reference substance

o-xylene / o-xylene / 95-47-6

EC number EC name

202-422-2 o-xylene

CAS number CAS name

95-47-6

IUPAC name

o-xylene

Type of substance

Composition

Origin

Trade names

Trade names flag

Name

TG OX

Ortho-X

TC OX2

Add... Edit... Delete

Oddiel 1.1 (Identifikácia látky) obsahuje:

- Referenčná látka ([Reference Substance](#))

Tu by sa malo vytvoriť prepojenie na ten záznam v zozname referenčných látok, s ktorým látka súvisí. Podľa neho je látka nazvaná.

- typ látky ([Type of Substance](#))

Zo zoznamu zvoliteľných možností sa vyberá typ látky, napr. môže byť zvolená jednozložková látka.

- obchodné názvy (**Trade names**)

Tu môžu byť uvedené všetky interné a externé názvy používané v spoločnosti.

Oddiel 1.2 (Zloženie látky) obsahuje opis zloženia látky, vrátane prepojenia na príslušné základné prvky identifikácie v záznamoch v zozname referenčných látok. Uvádzajú sa tu všetky zložky (napr. hlavné zložky, nečistoty) látok vo forme, v akej sú vyrobené, ako aj prídavné látky.

Príklady vrátane podrobného návodu, ako vyplniť oddiel 1.2 v programe IUCLID 5, sú uvedené v kapitole 8.2.

Oddiel 1.3 (Identifikátory) obsahuje informácie potrebné na identifikáciu látok z hľadiska informačných technológií (IT), napr. užívateľ môže uviesť identifikátor, ktorý používa pre tú istú látku v inom IT systéme, ako napríklad v systéme kariet bezpečnostných údajov. V dôsledku toho sa zlepší aj výmena údajov medzi programom IUCLID 5 a inými systémami. Nie je súčasťou identifikácie látok, ako sa opisuje v tomto usmernení.

Oddieli 1.3 umožňuje uchovávanie identifikačných čísiel, ktoré sa pridelujú v rámci rôznych regulačných programov (napr. registračné číslo REACH). Ani tieto informácie nie sú súčasťou identifikácie látok, ako sa opisuje v tomto usmernení.

Identifikácia látky – časť II

O-XYLENE / o-xylene / 95-47-6 / EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Ispra (VA) / Italy - IUCLID 5

File Edit Go Window Help Plugins

Navigation

Query results Section tree

Complete

0 Related Information

1 General Information

1.1 Identification

1.2 Composition

1.3 Identifiers

1.4 Analytical information

1.5 Joint submission

1.6 Sponsors

1.7 Suppliers

1.8 Recipients

1.9 Product and process oriented research

2 Classification and Labelling

3 Manufacture, use and exposure

4 Physical and chemical properties

5 Environmental fate and pathways

6 Ecotoxicological Information

7 Toxicological information

8 Analytical methods

9 Residues in food and feedingstuffs

10 Effectiveness against target organisms

11 Guidance on safe use

12 Literature search

13 Assessment Reports

Substance: O-XYLENE / EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Ispra (VA) / Italy

Analytical information

Analytical methods and spectral data

2.3.7. Description of the analytical methods or the appropriate bibliographical references for the identification of the substance and, where appropriate, for the identification of impurities and additives (room for attachments below).

MethodOfAnalysis.pdf / 1000.23 KB

Optical activity

2.2.2. Information on optical activity and typical ratio of (stereo) isomers (if applicable and appropriate)

Results of analysis

e.g. GC-MS-MS

Analysis type

e.g. GC-MS-MS

Tested substance

as described in Chapter 1.2

Method used

Refer to the method used (room for attachments below)

Results.pdf / 1000.23 KB

Remarks

Any further remark(s)

Oddiel 1.4 (Analytické informácie) obsahuje analytické informácie o látke²⁰, vrátane informácií o jej optickej aktivite.

8.2 PRÍKLADY AKO VYPÍŇAŤ IUCLID 5

Príklad vypíňania v programe IUCLID 5 pre jednozložkovú látku je uvedený v kapitole 8.2.1, príklad pre viaczožkovú látku v kapitole 8.2.2, príklad pre látku definovanú chemickým zložením a inými identifikátormi v kapitole 8.2.3 a príklad pre UVCB látku v kapitole 8.2.4.

8.2.1 Jednozložková látka

Príklad: Jednozložková látka			
Názov	1,2-dimetylbenzén		
Hlavná zložka	typický obsah (hmotn.%)	dolná hranica obsahu (hmotn.%)	horná hranica obsahu (hmotn.%)
1,2-dimetylbenzén	91	88	93
Nečistoty			
1,3-dimetylbenzén	5	2	7
1,4-dimetylbenzén	2	0,5	3
voda	2	0,5	3

V oddieli 1.1 je uvedený názov látky. Podľa tohto usmernenia ide o jednozložkovú látku s názvom “1,2-dimetylbenzén”. V programe IUCLID 5 to znamená, že súbor údajov o látke by mal byť prepojený s referenčnou látkou 1,2-dimetylbenzén v oddieli 1.1.

Navigation: Query results, Section tree, Complete

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

Substance identification

Chemical name: o-Xylene

Legal entity flags: [Flag]

Legal entity: European Chemicals Bureau / Ispra / Italy

Role in the supply chain

Role flags: [Flag]

Role: ☐ Manufacturer ☐ Importer ☐ Sole representative ☐ Downstream user

Reference substance

o-xylene / 1,2-methylbenzene / o-xylene / 95-47-6

Type of substance

Composition: mono constituent substance

Origin: [Field]

²⁰ Táto časť by mohla byť prepracovaná po vykonaní beta testu programu IUCLID 5.

V kapitole 1.2 je definované zloženie látky:

- stupeň čistoty (**Degree of purity**)

V prípade jednozložkovej látky by sa tu mal uviesť stupeň čistoty hlavnej zložky (za normálnych okolností $\geq 80\%$) (dolná a horná medzná hodnota).

- zložky (**Constituents**)

V prípade jednozložkovej látky sa tu uvádzajú chemické identifikátory (ES číslo a ES názov, CAS číslo a CAS názov, IUPAC názov). Chemická identita je definovaná prepojením na referenčnú látku.

Políčko „poznámky“ (remarks) môže byť použité pre akékoľvek ďalšie informácie. V prípade odchýlky od pravidla 80% sa použije na zdôvodnenie (pozri kapitolu 4.2.2).

The screenshot displays the REACH registration portal interface. On the left is a 'Section tree' with categories like '0 Related Information', '1 General Substance Information', '2 Manufacture, use and exposure', etc. The '1.2 Substance composition' section is highlighted. The main area shows the 'Degree of purity' section with input fields for a range (85 to 95) and a unit (% (w/w)). Below this is the 'Constituents' section, which lists 'o-xylene / 1,2-methylbenzene / o-xyelene / 95-47-6' as the reference substance. A table provides identification details: EC number (202-422-2), EC name (o-xylene), CAS number (95-47-6), CAS name (o-xyelene), and IUPAC name (1,2-methylbenzene). At the bottom of this section, there are fields for 'Proportion (typical)' (91) and 'Proportion (real)' (88 to 93), both in % (w/w). A 'Remarks' field is also present.

- nečistoty (**Impurities**)

Aspoň jedným chemickým identifikátorom (ES číslo a ES názov, CAS číslo a CAS názov, IUPAC názov) by mali byť špecifikované nečistoty v koncentrácii $\geq 1\%$ (alebo vyššej ako ktorýkoľvek dolný koncentračný limit, pokiaľ je to relevantné pre klasifikáciu látok). Chemická identita je definovaná prepojením na referenčnú látku. V prípade každej nečistoty sa v hmotnostných % (w/w) uvedie koncentrácia (typická a rozsah).

Na doplnenie celkovej koncentrácie do 100% sa uvedie počet a celková koncentrácia nešpecifikovaných nečistôt (ak je to známe).

- prídavné látky (**Additives**)

Chemickými identifikátormi (ES číslo a ES názov, CAS číslo a CAS názov, IUPAC názov) musia byť špecifikované všetky prídavné látky. Chemická identita je definovaná prepojením na referenčnú látku. V prípade každej prídavnej látky sa v hmotnostných % (w/w) uvedie koncentrácia (typická a rozsah).

8.2.2 Viaczložková látka

Príklad: Viaczložková látka			
Názov	Reakčná zmes 1,4-dimetylbenzénu, 1,2- dimetylbenzénu a 1,3- dimetylbenzénu		
Hlavné zložky	typický obsah (hmotn.%)	dolná hranica obsahu (hmotn.%)	horná hranica obsahu (hmotn.%)
1,4-dimetylbenzén	35	30	40
1,2-dimetylbenzén	30	25	35
1,3-dimetylbenzén	25	20	30
Nečistoty			
voda	10	5	12

Podľa tohto usmernenia ide o viaczložkovú látku s tromi hlavnými zložkami s názvom “reakčná zmes 1,4-dimetylbenzénu, 1,2-dimetylbenzénu a 1,3-dimetylbenzénu”. Voda predstavuje zvyšok rozpúšťadlo, ktoré z látky nemožno ďalej separovať a mala by sa považovať za nečistotu a nie za hlavnú zložku.

V programe IUCLID 5 to znamená, že súbor údajov o látke by mal byť prepojený s referenčnou látkou “reakčná zmes 1,4-dimetylbenzénu, 1,2-dimetylbenzénu a 1,3-dimetylbenzénu” (pozri oddiel 1.1).

The screenshot displays the IUCLID 5 software interface. The main window title is "Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene / Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and...". The left sidebar shows a navigation tree with categories 0 to 10. The "Substance identification" section is active, showing fields for Chemical name, Legal entity flags, Legal entity (EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Ispra (VA) / Italy), Third party flags, and Third party. The "Role in the supply chain" section shows Role flags and checkboxes for Manufacturer, Importer, Only representative, and Downstream user. The "Reference substance" section shows a table with EC number, EC name, CAS number, and CAS name. The table contains two rows: one for "215-535-7" with EC name "xylene" and CAS number "1330-20-7", and another for "1330-20-7" with an empty EC name and CAS number.

Chemická identita, typická koncentrácia a koncentračný rozsah je pre každú látku špecifikovaný v kapitole 1.2. Chemická identita je definovaná prepojením s referenčnou látkou.

Query results Section tree

Complete

0 Related Information

1 General Information

1.1 Identification

1.2 Composition

1.3 Identifiers

1.4 Analytical information

1.5 Joint submission

1.6 Sponsors

1.7 Suppliers

1.8 Recipients

1.9 Product and process oriented research

2 Classification and Labelling

3 Manufacture, use and exposure

4 Physical and chemical properties

5 Environmental fate and pathways

6 Ecotoxicological information

7 Toxicological information

8 Analytical methods

9 Residues in food and feedingstuffs

10 Effectiveness against target organisms

11 Guidance on safe use

12 Literature search

13 Assessment Reports

Constituents

30 % (w/w) o-xylene / o-xylene / 95-47-6

Reference substance o-xylene / o-xylene / 95-47-6

EC number	EC name
202-422-2	o-xylene
CAS number	CAS name
95-47-6	
IUPAC name	
o-xylene	

Typical concentration 30 % (w/w)

Concentration range > 25 < 35 % (w/w)

Remarks

p-xylene / p-xylene / 106-42-3

Reference substance p-xylene / p-xylene / 106-42-3

EC number	EC name
203-396-5	p-xylene

8.2.3 Látka definovaná svojim chemickým zložením spolu s inými identifikátormi

V niektorých prípadoch sú na jednoznačnú identifikáciu látky potrebné aj iné hlavné identifikátory (pozri kapitolu 4.2.4). Tieto doplňujúce parametre sa v rámci daného typu líšia pre každý typ látky. Jednako, doplňujúci parameter má pre identifikáciu látky zásadný význam. Napríklad v prípade minerálov je na identifikáciu mineralogického zloženia a kryštalickej štruktúry dôležité spojiť výsledky elementárneho zloženia so spektrálnymi údajmi, čo sa potom potvrdí charakteristickými fyzikálnymi a chemickými vlastnosťami (pozri tiež príklad v kapitole 7.3).

Fyzikálno-chemické vlastnosti, ako napríklad:

- kryštalická štruktúra (zistená röntgenovou difrakciou)
- tvar
- tvrdosť
- bobtnavosť
- hustota
- povrchová plocha (špecifický povrch)
- atď.

Príklad: Látky definované chemickým zložením spolu s ďalšími identifikátormi

Špecifickým minerálom môžu byť priradené špecifické doplnkové hlavné identifikátory, pretože minerály majú charakteristické fyzikálno-chemické vlastnosti ktoré umožňujú ich úplnú identifikáciu, napr.:

- veľmi nízka tvrdosť mastenca
- bobtnavosť bentonitu
- tvar diatomitu (optický mikroskop)
- veľmi vysoká hustota barytu
- špecifický povrch (adsorpcia dusíka)

Tento typ informácií by mal byť u referenčnej látky uvedený v políčku pre opis, s ktorým je prepojený súbor údajov (oddiel 1.1 programu IUCLID 5).

IUPAC name	IUPAC name of the mono or multiple constituent substance
Description	• very low hardness for talc • swelling capacity of bentonite • shapes of diatomite (optical microscope) • very high density of barite • surface area (nitrogen adsorption)

8.2.4 Látka UVCB

UVCB látky buď nemožno jednoznačne špecifikovať pomocou IUPAC názvu jednotlivých zložiek, keďže nemožno identifikovať všetky zložky; alebo ich možno špecifikovať všeobecne, ale vzhľadom na variabilitu presného zloženia s nedostatočnou presnosťou. Hlavné identifikátory UVCB látok súvisia so zdrojom látky a použitým procesom. Vzhľadom na nedostatočné rozlišovanie medzi zložkami a nečistotami v prípade UVCB látok by sa nemali používať výrazy “hlavné zložky” a “nečistoty”.

Jednako, pokiaľ je to známe, malo by sa uviesť chemické zloženie a identita zložiek. Zloženie možno opísať aj všeobecnejšie, napríklad “lineárne mastné kyseliny C₆-C₁₆” alebo “etoxyláty alkoholov s alkoholmi C₁₀-C₁₄ a 4-10 etoxylátových jednotiek”.

Na účel špecifikácie UVCB látky sa uplatňuje ten istý systém, aký už bol opísaný v prípade jednozložkových a viaczožkových látok. Samotná látka je špecifikovaná referenčnou látkou, ako aj známymi zložkami.

Je dôležité poznamenať, že pri definovaní látky ako referenčnej látky by sa mal v políčku „IUPAC názov“ (**IUPAC name**) uviesť (chemický) názov UVCB látky (hoci UVCB látka má len zriedkavo “klasický” IUPAC názov). Políčko „opis“ (**Description**) by sa malo použiť pre dodatočné informácie (napr. reakčné podmienky).

Príklad: Látka UVCB

Názov	destiláty (uholné), vysokoteplotné, benzénová frakcia
Popis	Destilát z frakčnej destilácie vysokoteplotne spracovaného uhlia s približným destilačným rozsahom od 30 °C do 180 °C (od 86 °F do 356 °F). Obsahuje hlavne od C ₄ do C ₆ alifatické a aromatické uhľovodíky s obsahom sírouhlíka, cyklopentadiénu a trochu sírovodíka.

EC inventory

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

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

Molecular formula:

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

No EC information available

Justification:

Reference substance information

CAS information

CAS number: 185323-42-6

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

IUPAC name

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

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

Description

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

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

V prípade súboru údajov o látke platí to isté ako je opísané pre jednozložkové a viaczožkové látky. Súbor údajov je prepojený s referenčnou látkou, ktorá látku definuje v oddieli 1.1.

1 General Substance Information

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

Legal entity: European Chemicals Bureau / Ispra / Italy

Role in the supply chain

Role flags:

Role: ☐ Manufacturer ☐ Importer ☐ Sole representative

Reference substance

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

Známe zložky sú definované príslušnými referenčnými látkami, ako je opísané pre jednozložkové a viaczožkové látky.

8.3 UVÁDZANIE ANALYTICKÝCH INFORMÁCIÍ

Analytické informácie sa uvádzajú v kapitole 1.4. Táto kapitola pozostáva z dvoch častí:

- Analytické informácie
- Výsledky analýz

The screenshot displays the REACH registration portal interface. On the left is a 'Navigation' pane with a 'Section tree' showing a hierarchical list of information categories. Category '1.4 Analytical information' is highlighted. The main area is titled 'Substance: O-XYLENE / o-xylene / 95-47-6 / EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Ispra (VA) / Italy'. It contains two main sections: 'Analytical information' and 'Results of analysis'. The 'Analytical information' section has two input fields: 'Analytical methods and spectral data' (containing text 2.3.7. Description of the analytical methods...) and 'Optical activity' (containing text 2.2.2. Information on optical activity...). Each field has a file upload button and a file name 'MethodOfAnalysis.pdf / 1000.23 KB'. The 'Results of analysis' section has a title bar 'e.g. GC-MS-MS' and contains fields for 'Analysis type' (e.g. GC-MS-MS), 'Tested substance' (as described in Chapter 1.2), 'Method used' (Refer to the method used...), a file upload button with 'Results.pdf / 1000.23 KB', and a 'Remarks' field with the placeholder text 'Any further remark(s)'.

Toto podrozdelenie sa priamo vzťahuje na požiadavky podľa REACH (príloha VI):

Analytické informácie:

- Analytické metódy: v tomto políčku sa uvádza opis analytických metód (REACH, príloha VI, 2.3.7). Ak je potrebný rozsiahly opis, je tu daná možnosť pripojenia dokumentov
- Optická aktivita: v tomto políčku sa uvádzajú informácie o optickej aktivite a typickom pomere (stereo)izomérov (ak je to vhodné) (REACH, príloha VI, 2.2.2).

Výsledky analýz:

Blok výsledkov analýz má užívateľovi umožniť, aby poskytol informácie o identifikácii, s ktorými súvisia výsledky analýz a pripojil položky, ako napríklad chromatogramy. Môže sa použiť na poskytnutie spektrálnych údajov (REACH, príloha VI, 2.3.5) alebo chromatografických údajov (REACH, príloha VI, 2.3.6).

1. The European Parliament and the Council of the European Union (2006) Regulation (E) No 1907/2007 of the European Parliament and of the Council concerning the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and repealing Council Regulation (EEC) No 793/93 and Commission Regulation (EC) No 1488/94 as well as Council Directive 76/769/EEC and Commission Directives 91/155/EEC, 93/67/EEC and 2000/21/EC. 18 December (2006)
2. Council of the European Union (2006) Proposal for a Regulation of the European Parliament and of the Council concerning the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 12 Juny (2006) 7524/06
3. Council of the European Union (2005) Proposal for a Regulation of the European Parliament and of the Council concerning the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 19 December (2005) 15921/05/EC
4. EC (2003-A) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003 COM (2003) 644 final: Volume I.
5. EC (2003-B) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003 COM (2003) 644 final: VOLUME II – Annexes I to IX to the Proposal for a Regulation
6. EC (2003-C) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003 COM (2003) 644 provisional version; VOLUME III - Annex X part A to the Proposal for a Regulation
7. EC (2003-D) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003 COM (2003) 644 provisional version; VOLUME IV - Annex X part B to the Proposal for a Regulation.
8. EC (2003-E) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003 COM (2003) 644 provisional version: VOLUME V - Annex X part C to the Proposal for a Regulation.
9. EC (2003-F) Proposal for the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 29 October 2003 COM (2003) 644 final: VOLUME VI – Annexes XI to XVII to the Proposal for a Regulation (contains amended Financial Statement on p. 247et seq.)
10. ECB (2003) Notification of new chemical substances in accordance with Directive 67/548/EEC on the classification, packaging and labelling of dangerous substances. No Longer Polymer List. EUR 20853 EN (available via ECB website).
11. (2005) Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/EEC (Directives 79/831/EEC and 92/32/EEC) Non-confidential version. EUR 20519 EN. Updated version of June 2005.
12. European Parliament (2005) European Parliament legislative resolution on the Proposal for a Regulation of the European Parliament and of the Council on the Registration, Evaluation and Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a and amending Directive 1999/45/EC and Regulation (EC) on Persistent Organic Pollutants. 17 November (2005) P6_TA-PROV(2005)11-17

13. Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) The EINECS Inventory of existing chemical substances on the EC market. *Tox Env Chem* Vol. 37, p. 21-33. Rasmussen K, Christ G and Davis JB (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. *Tox Env Chem* Vol. 67, pp. 251-261.
14. Rasmussen K, Christ G a Davis JB (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/458/EEC. *Tox Env Chem* Vol. 67, pp. 251-261.
15. Rasmussen K, Pettauier D, Vollmer G et al. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. *Tox Env Chem* Vol. 69, pp. 403-416.
16. US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Candidate list of chemicals substances Addendum I. Generic terms covering petroleum refinery process streams. US EPA, Office of Toxic Substances, Washington DC 20460.
17. US EPA (2005-A) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Products containing two or more substances: formulated and statutory mixtures.
[Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/mixtures.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/mixtures.txt).
18. US EPA (2005-B) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Combinations of two or more substances: complex reaction products.
[Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/rxnprods.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/rxnprods.txt).
19. US EPA (2005-C) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Certain Chemical Substances containing varying Carbon Chain Lengths (alkyl ranges using the CX-Y notation) [Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/alkyl-rg.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/alkyl-rg.txt).
20. US EPA (2005-D) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Chemical Substances of Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Materials: UVCB Substances. [Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/uvcb.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/uvcb.txt).
21. UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Collection of Information on Enzymes. Final report. Co-operation between Federal Environment Agency Austria and Inter-University Research Center for Technology, Work and Culture (IFF/IFZ). Contract No B4-3040/2000/278245/MAR/E2.
22. Vollmer et al. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. *Tox Env Chem* Vol. 65, p. 113-122.
23. Weininger (1988) SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*; 1988; 28(1); 31-36.

DODATOK I NÁSTROJE USMERNENIA

Tento dodatok obsahuje zoznam internetových stránok, databáz a príručiek, ktoré môžu byť užitočné pri vyhľadávaní vhodných IUPAC, CAS a ES názvov, CAS a ES čísiel, molekulových a štruktúrnych vzorcov, vrátane zápisu SMILES a iných parametrov, ktoré sa požadujú pri identifikácii látky. Komerčné databázy a nástroje usmernenia neboli zahrnuté.

Všeobecné		
identifikačný parameter látky	Zdroj	Popis zdroja
všeobecné	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	Databázy a nástroje určené používateľom na vyhľadávanie informácií o chemikáliách
	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	Voľne dostupná databáza štruktúrnych vzorcov, fyzikálnych vlastností a prepojenia na súvisiace informácie.
	http://www.accelrys.com/accord/productlisting.html	Chemický softvér; Accord Alphabetical Product Listing.
	http://www.syrres.com/esc/free_demos.htm	Voľne dostupné on-line vyhľadávanie v databázach: Environmental Fate Database; KOW (online Log P); PHYSPROP (fyzikálne vlastnosti).

Názov a iné identifikátory		
identifikačný parameter látky	Zdroj	Popis zdroja
názov IUPAC	http://www.iupac.org alebo špecifiknejšie: http://www.iupac.org/publications/books/series/titles/nomenclature.html#inorganic (anorganické) http://www.iupac.org/publications/books/series/titles/nomenclature.html (všeobecné)	Oficiálna internetová stránka IUPAC.
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	Chemické názvoslovie a odporúčania IUPAC (podľa IUPAC).
	Názvoslovie v organickej chémii (Modrá kniha) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Základné publikácie o názvo-sloví IUPAC, predpokladaná aktualizácia 2006.

	Príručka IUPAC názvoslovia organických zlúčenín (odporúčania 1993) (doplnok k Modrej knihe) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Základné publikácie o názvo-sloví IUPAC, predpokladaná aktualizácia 2006.
	Názvoslovie v anorganickej chémii (odporúčania 1990) (Červená kniha) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Základné publikácie o názvo-sloví IUPAC, predpokladaná aktualizácia júl 2005.

Názov a iné identifikátory		
identifikačný parameter látky	Zdroj	Popis zdroja
názov IUPAC	Názvoslovie v biochémií a súvisiace dokumenty (Biela kniha) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Základné publikácie o názvo-sloví IUPAC.
	Princípy chemického názvoslovia: Príručka odporúčaní IUPAC Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Úvodný zväzok zaoberajúci sa názvami IUPAC pre všetky druhy zlúčenín.
názov IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/name_lab	Komerčný počítačový program názvov, ktorý môže byť veľmi užitočný pri pomenúvaní stredne zložitých štruktúr. Pre malé molekuly je aj voľne dostupný (odporúčený IUPAC).
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Názvoslovie v organickej chémii podľa IUPAC (odporúčený IUPAC).
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Úplný zoznam schválených triviálnych a semisystematických koreňových názvov organických zlúčenín.
	http://www.chemexper.com/	Cieľom ChemExper Chemical Directory je vytvoriť všeobecnú a cez internet voľne dostupnú databázu chemikálií. Databáza obsahuje chemikálie s ich fyzikálnymi charakteristikami. Každý môže poskytnúť a nájsť informáciu o chemikálii pomocou internetového prehliadača názvoslovia podľa IUBMB.

názvoslovie IUBMB	http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/ http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb	IUBMB databáza názvosloví v biochémií (podľa IUBMB).
ďalšie názvy	http://www.colour-index.org	Generické názvy podľa Indexu farieb, Medzinárodný index farieb, štvrté online vydanie.
	http://pharmacos.eudra.org/F3/cosmetic/cosm_inci_index.htm	INCI (Medzinárodné názvoslovie kozmetických zložiek), oficiálna internetová stránka INCI.
ďalšie identifikátory	http://www.cenorm.be	CE normy, oficiálna Európska stránka CE (Európskej komisie pre normalizáciu).
číslo ES	http://ecb.jrc.it/	Oficiálna stránka European Chemicals Bureau: ESIS: vyhľadávanie v zozname EINECS, ELINCS, NLP a Prílohy I smernice 67/548/EHS.
číslo CAS	http://www.cas.org	Oficiálna stránka CAS registry service.
	http://www.chemistry.org	Oficiálna stránka Americkej Chemickej Spoločnosti.

Molekulový a štruktúrny vzorec

Identifikačný parameter látky	Zdroj	Popis zdroja
SMILES	http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/	Voľne dostupný program generujúci kódy SMILES.
	http://www.daylight.com/smiles/f_smiles.html	Fakty a voľne dostupný program generujúci kódy SMILES.
molekulová hmotnosť a SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, voľne dostupný softvér (aj komerčne).

niektoré fyzikálno-chemické parametre	http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/eplsuite.htm	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ je sada programov na odhad fyzikálno-chemických vlastností a environmentálneho osudu látok pomocou expertných systémov založená na Windows® a vyvinutá pobočkou EPA pre prevenciu pred znečistením toxickými chemikáliami a spoločnosťou Syracuse Research Corporation (SRC).
---------------------------------------	---	--

DODATOK II TECHNICKÉ USMERNENIE PRE IDENTIFIKAČNÉ PARAMETRE LÁTKY

Informácie v tomto dodatku sú určené pre užívateľov technického usmernenia, ktorí nie sú oboznámení s technickými pravidlami pre názvoslovie, používanie rôznych registračných čísiel a pravidiel pre tvorbu zápisu pri uvádzaní molekulových a štruktúrnych vzorcov, spektrálnych údajov atď.

Vo všeobecnom úvode sú zhrnuté hlavné zásady a užívateľ je nasmerovaný na pôvodné zdroje obsahujúce úplné informácie.

Tento prehľad je zjednodušenou verziou, neúplnou a nevyčerpávajúcou, a pre profesionálneho užívateľa nie je dostatočne podrobný. V žiadnom prípade by sa nemal považovať za ekvivalent oficiálneho zdroja.

1 Názov(-vy) v IUPAC - alebo v inom medzinárodnom názvosloví

Na účel registrácie sa musí uvádzať anglický názov podľa IUPAC alebo iný dobre definovaný medzinárodne uznávaný názov látky.

Názov podľa IUPAC vychádza z medzinárodného štandardného názvoslovie, ktoré zaviedla medzinárodná organizácia IUPAC, Medzinárodná únia pre čistú a aplikovanú chémiu ([International Union of Pure and Applied Chemistry](#)) (ohľadne vhodných odkazov pozri dodatok I). Názvoslovie podľa IUPAC predstavuje systematický spôsob pomenovania chemických látok, organických aj anorganických. V názvosloví podľa IUPAC sa na opis typu a polohy funkčných skupín v látke používajú prefixy, sufixy a infixy.

penta-1,3-dién-1-ol, v tomto príklade:

prefixom je **penta-1,3-**

infixom je **-di** a

suffixom je **-ol**

-én je základom názvu, koreňom názvu.

Súbor pravidiel bol vypracovaný počas viacerých rokov a priebežne sa mení, aby sa zohľadnili nové zložky molekulovej rozmanitosti a odstránili sa prípadné rozpory alebo neistoty, ktoré boli zistené. Pravidlá stanovené IUPAC možno použiť len pre dobre definované látky.

Nižšie sú uvedené niektoré všeobecné pravidlá o štruktúre názvu podľa IUPAC. Podrobnejšie údaje možno nájsť v návode, ktorý sa nachádza v kapitole 4 usmernenia.

1.1 Organická látka A

Krok 1 Zistíte počet atómov C v najdlhšom súvislom reťazci atómov uhlíka; Tento počet určuje prefix, prvú časť, koreňa názvu:

počet atómov uhlíka	koreň
1	met-
2	et-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	okt-
N	

Krok 2 Určíte nasýtenie reťazca; nasýtenie reťazca určuje sufix, druhú časť, koreňa názvu:

nasýtenie	väzba	prípona
nenasýtené	dvojitá	-én
	trojitá	-ín
nasýtené	-	-án

V prípade viacnásobných dvojitých alebo trojitých väzieb sa počet väzieb pred sufixom označuje pomocou 'mono', 'di', 'tri' atď.:

pentén s 2 dvojitými väzbami: pentadién

Krok 3 Skombinujte prefix, sufix a násobiace predpony ku koreňu názvu.

Upozornenie: Ako koreň názvu možno použiť aj triviálne a polosystematické názvy schválené IUPAC:

benzén, toluén, atď.

Krok 4 Použite dole uvedenú tabuľku:

- Identifikujte substituenty a/alebo funkčné skupiny: uhlíkové alebo neuhlíkové skupiny pripojené k reťazcu atómov uhlíka identifikovaných v bode 1;
- Určite poradie dôležitosti substituentov a/alebo funkčných skupín;

- Pridajte sufix pre prvý substituent/funkčnú skupinu, ako aj všetky ďalšie, v poradí dôležitosti;
- Pridajte prefix pre ostatné substituenty a funkčné skupiny, v abecednom poradí.

priorita	skupina	vzorec	prípona	predpona
1	karboxylová kyselina	R-COOH	kyselina -ová	karboxy-
2	ester	R-CO-O-R	-oát	-
3	amid	R-CONH ₂	-amid	oxykarbonyl-
4	nitril	R-CN	-nitril	kyan-
5	aldehyd	R-CHO	-ál	oxo-
6	ketón	R-CO-R	-ón	oxo-
7	alkohol	R-OH	-ol	hydroxy-
8	tiol	R-SH	-tiol	sulfanyl-
9	amín	R-NH ₂	-amín	amino-

1.2 Anorganická látka

1.2.1 Pomenovanie jednoduchých anorganických látok

Pomenovanie anorganických látok vychádza zo súboru pravidiel (červená kniha IUPAC, pozri odkaz v 7.1), z ktorých najdôležitejšie sú uvedené nižšie:

- 1 Jednoatómové anióny sú pomenované príponou –id:

O²⁻ je oxid

- 2 Jednoduché iónové zlúčeniny sa pomenúvajú pomocou katiónu, za ktorým nasleduje anión. V prípade katiónov s nábojmi > 1 sa náboje píše rímskymi číslicami v zátvorke bezprostredne za názvom prvku

Cu²⁺ je meď (II)

- 3 Hydráty sa pomenúvajú ako iónová zlúčenina, za ktorou nasleduje číselný prefix a –hydrát. Číselné prefixy sú mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, okta-, nona-, deka-:

CuSO₄ . 5H₂O je “pentahydrát síranu meďmatého“

Upozornenie: Hydráty a prípadná bezvodá forma určitej soli kovu sa považujú za rovnaké látky.

- 4 Anorganické molekulové zlúčeniny sa pred každým prvkom pomenúvajú prefixom (pozri hydráty). Elektronegatívnejší prvok sa uvedie ako posledný, so sufixom –id:

CO₂ je oxid uhličitý, a CCl₄ je chlorid uhličitý

5 Kyseliny sa pomenúvajú podľa aniónu, ktorý vzniká po rozpustení vo vode. Existuje viacero možností:

- a Ak sa po rozpustení vo vode kyselina rozloží na anión s názvom "x"-id ("x"-ide), kyselina nesie názov kyselina „x“-vodíková (hydro-"x"-ic acid):

kyselina chlorovodíková vytvára vo vode anión chloridu

- b Ak sa po rozpustení vo vode kyselina rozloží na anión s názvom "x"-ečnan ("x"-ate), kyselina nesie názov kyselina "x"-ečná ("x"-ic acid):

kyselina chlorečná vo vode disociuje na chlorečnanové anióny

- c Ak sa kyselina po rozpustení vo vode rozloží na anión s názvom vo forme "x"-itan ("x"-ite), kyselina nesie názov kyselina "x"-itá ("x"-ous acid):

kyselina chloritá disociuje na chloritanové anióny

1.2.2 Pomenovanie mineralogických fáz

Komplexné mineralogické fázy zvyčajne obsahujú kombináciu troch alebo viacerých prvkov. Väčšina prítomných prvkov je zlúčená s kyslíkom a v záujme zjednodušenia identifikácie mineralógovia zvyčajne považujú komplexné zlúčeniny za zlúčeniny, ktoré pozostávajú z oxidov, pričom niektoré z nich sú zásadité a iné kyslé. Napríklad v prípade kremičitanov sa zaužívalo označovať ich buď ako súčet množstva oxidov alebo ako soli kyseliny kremičitej alebo ako kyseliny hlinitokremičité. V súlade s tým ortokremičitan vápenatý možno označiť ako 2CaO.SiO₂, kombináciu samostatných oxidov, alebo ako Ca₂SiO₄, ako vápenatú soľ kyseliny ortokremičitej H₄SiO₄. To isté platí aj pre iné komplexné minerálne oxidy – pomenúvajú sa prefixom pred každým oxidom (napr. Ca₃SiO₅ = kremičitan trojvápenatý (tricalcium silicate) = 3CaO.SiO₂). V niektorých priemyselných sektoroch sa za účelom skrátenia vzorca zlúčeniny zaviedlo ďalšie zjednodušenie. Napríklad v prípade slinku portlandského cementu 2CaO.SiO₂ (ortokremičitan vápenatý (calcium orthosilicate) alebo kremičitan dvojvápenatý (dicalcium silicate)) sa skrakuje na C₂S, kde C = CaO a S = SiO₂. V prípade keď sa majú pomenovať alebo identifikovať komplexné mineralogické fázy, odporúča sa konzultovať štandardné mineralogické alebo priemyselné texty.

1.3 Produkty prírodného pôvodu a príbuzné zložky

Pre prírodné produkty organizácia IUPAC vypracovala niekoľko pravidiel systematického pomenovania. V stručnosti to znamená, že v prípade látok extrahovaných z prírodného zdroja, vždy keď je to možné, vychádza názov z názvu čeľade, rodu alebo druhu organizmu, z ktorého bola látka extrahovaná:

V prípade hypotetického proteínu, *Hypothecalia Exemplare* názvy vychádzajú z *hypothecalia a/alebo exemplare*, napr. *Horse Exemplare*

Ak je to možné, názov by mal vyjadrovať známu alebo pravdepodobnú distribúciu prírodného produktu. Pokiaľ je to vhodné, za základ názvu látky, ktorá sa vyskytuje vo viacerých príbuzných čeľadiach, by sa mohla použiť aj trieda alebo rad (taxón). Názov prírodných produktov neznámej štruktúry by nemal obsahovať prefixy, sufixy a/alebo infixy, ktoré sa používajú v organickom názvosloví:

Kondenzačný produkt Horse exemplare, Valarine adovaný na koncový N (dusík)

Mnohé látky prírodného pôvodu patria do dobre definovaných štruktúrnych tried, z ktorých každú možno charakterizovať súborom materských štruktúr, ktoré sú úzko príbuzné, to znamená, že každú možno odvodiť od základnej štruktúry. Systematický názov pre tieto látky prírodného pôvodu a ich deriváty môže vychádzať z názvu príslušnej materskej štruktúry:

Dobre známe materské štruktúry sú alkaloidy, steroidy, terpenoidy a vitamíny

Základná materská štruktúra by mala vyjadrovať základný skelet, ktorý je spoločný pre väčšinu látok danej triedy. Látky prírodného pôvodu alebo deriváty sa pomenúvajú podľa materskej štruktúry pridaním prefixov, sufixov alebo infixov, ktoré označujú:

- modifikácie skeletálnej štruktúry
- nahradenie atómov v skelete
- zmeny stavu hydrogenácie, ktoré vyjadruje názov materskej štruktúry
- atómy alebo skupiny, ktoré v materskej štruktúre nahrádzajú atómy vodíka
- konfigurácie, ktoré už nevyjadruje názov základnej štruktúry alebo ktoré sú oproti vyjadreným konfiguráciám zmenené

Tiamín-chlorid je známy tiež ako vitamín B1

Ohľadne podrobnejších informácií o systematickom pomenovaní prírodných produktov a príbuzných látok treba kontaktovať organizáciu IUPAC (pozri dodatok I).

1.4 Nie je možné odvodiť názov podľa IUPAC

Ak nie je možné pre určité látky odvodiť IUPAC názov, možno použiť iné medzinárodne uznávané názvoslovie špecifické pre tieto látky:

- Minerály a rudy; mineralogické názvy;
- Ropné látky;
- Generické názvy indexu farieb ([Colour Index Generic Names](#))³;
- Prídavné látky (aditíva) olejov;
- INCI ([International Nomenclature Cosmetic Ingredients](#))⁴;

- SDA ([Soap and Detergent Association](#)) názvy povrchovo aktívnych látok⁵;
- atď.

2 Iné názvy

Na účel registrácie v rámci REACH je vhodné uviesť všetky relevantné názvy a/alebo verejné identifikátory vo všetkých jazykoch, v ktorých sa látka uvádza alebo uvedie na trh v EÚ (napr. obchodné názvy). Patria sem obchodné názvy, synonymá, skratky atď.

3. <http://www.colour-index.org>, [Colour Index International](#), štvrté vydanie online
4. <http://dg3.eudra.org/F3/inci/index.htm>, oficiálna internetová stránka INCI
5. <http://www.cleaning101.com>, oficiálna internetová stránka SDA

3 Číslo ES zo zoznamu EINECS, ELINCS alebo NLP (zoznam ES)

ES číslo, t.j. EINECS, ELINCS alebo NLP číslo, predstavuje oficiálne číslo látky v rámci Európskej únie. ES číslo možno nájsť v oficiálnych publikáciách EINECS, ELINCS a NLP a oficiálnych publikáciách Európskej chemickej agentúry.

ES číslo pozostáva zo siedmich číslic typu $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$. Prvá číslica je definovaná zoznamom, do ktorého látka patrí:

zoznam	prvá číslica čísla ES
EINECS	2 alebo 3
ELINCS	4
NLP	5

4 Názov a číslo CAS

[Chemical Abstracts Service](#) (CAS), sekcia Americkej chemickej spoločnosti ([American Chemical Society](#) – ACS), pridáva CAS názov a číslo každej chemikálii, ktorá vstupuje do registračnej databázy CAS. Názvy a čísla sa pridávajú vedeckými pracovníkmi CAS vo vzostupnom poradí unikátnym identifikovaným látkam. Každá látka registrovaná v [Chemical Abstract Service](#) má názov podľa názvoslovie CAS, ktorý ACS prijíma na základe odporúčenia výboru ACS pre názvoslovie (pozri odkazy v dodatku I).

4.1 Názov CAS

CAS názov je názov pridelený [Chemical Abstracts Service](#) a je odlišný od názvu podľa IUPAC. Názvoslovie CAS vychádza z obmedzeného súboru kritérií, ktoré nie vždy postačujú na odvodenie názvu látky. Z toho dôvodu sa za účelom získania správneho názvu CAS odporúča kontaktovať [Chemical Abstracts Service](#).

Základné názvoslovné pravidlá sú v stručnosti tieto:

- Za základ sa zvolí 'hlavná' časť látky.
- Substituenty sa uvádzajú za základom, a to v opačnom poradí.

- Pokiaľ je prítomných viacero substituentov, uvádzajú sa v abecednom poradí (vrátane prefixov):

o-xylén-3-ol je benzén, 1,2-dimetyl, 3-hydroxy

4.2 Číslo CAS

CAS čísla možno získať od [Chemical Abstracts Service](#).

CAS číslo pozostáva minimálne z 5 číslic, rozdelených na tri časti, oddelených spojovníkom. Druhá časť spravidla pozostáva z dvoch číslic, tretia časť z jednej číslice:

N_i N₄ N₃ – N₂ N₁ – R

Pre kontrolu správnosti CAS čísla možno použiť kontrolný súčet (“[checksum](#)“):

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

CAS číslo musí byť správne a musí zodpovedať kontrolnému súčtu.

4.3 Registrácia látky v CAS

Registračné oddelenie CAS prideliuje CAS čísla týmto typom chemických látok:

- Jednozložkovým látkam, zastúpeným:
 - Látkami s úplne definovanými molekulovými štruktúrami (t.j. sú známe všetky atómy a chemické väzby, ktoré ich spájajú). Do úvahy sa berú aj polohové izoméry, stereochemické izoméry a solné formy;
 - Názvy, ktoré jednoznačne vyjadrujú chemické zloženie látok;
- Špecifické pomery pre soli alebo kondenzačné produkty;
- Minerály prírodného pôvodu;
- Špecifické zliatiny, ióny, izotopy a elementárne častice;
- Komplexné látky ako:
 - Chemicky modifikované biologické materiály;
 - Komplexné reakčné produkty;
 - Priemyselné procesné frakcie.

Pre účel CAS registrácie sa musí použiť špecifický formulár, ktorý sa dá stiahnuť z internetovej stránky www.cas.org. Ako sa uvádza v tomto formulári, je potrebné uviesť nižšie uvedené informácie podľa poradia dôležitosti:

- Dobre definované chemické zlúčeniny:

- Grafické zobrazenie chemickej štruktúry;
- Systematický chemický názov;
- Bežný názov (bežné názvy);
- Molekulový vzorec;
- Komplexné reakčné produkty
 - Zoznam reaktantov a charakter reakcie;
 - Reakčná schéma;
 - Typické zloženie produktu;
- Produkty rastlinného a živočíšneho pôvodu:
 - Rod/druh ako aj iné jednoznačné obecné názvy zdroja;
 - Metóda extrakcie;
 - Opis ďalšieho chemického spracovania;
- Produkty z priemyselných procesov:
 - Prekurzory a metóda prípravy;
 - Schematický diagram zobrazujúci priemyselný proces a bod, v ktorom je látka izolovaná;
 - Opis procesu:

Katalytické krakovanie, odparafínované

- Rozsah uhlíkového (alkylového) reťazca:

C4 až C12

- Fyzikálne vlastnosti:

Rozsah teploty varu, viskozita, tuhá látka, troska

- Základné chemické zloženie;
- Zdroj:

Ropa, uhlie

- Biotechnologické produkty:
 - Sekvenčné údaje;
 - Informácie o biologickom zdroji, vrátane rodu/druhu;
 - Enzymová aktivita.

5 Iné identifikačné kódy

Možno uviesť aj iné medzinárodne uznávané kódy, ako napríklad:

- UN číslo;
- číslo v indexe farieb ([Colour Index Number](#) – CIN);

- Číslo farbiva;
- atď.

6 Molekulový vzorec, štruktúrny vzorec a SMILES kód

6.1 Molekulový vzorec

Molekulový vzorec identifikuje každý typ prvku pomocou jeho chemickej značky a identifikuje počet atómov každého takého prvku v jednej diskkrétnej molekule látky

Molekulové vzorce by sa mali uvádzať podľa (tradičného) Hillovho systému a okrem toho aj v súlade s CAS systémom v prípadoch, keď sa tento odlišuje od vzorca podľa Hillovho systému.

Pri použití Hillovej metódy sa postupuje podľa týchto krokov:

1. Identifikujte prvky a uveďte ich chemické značky;
2. Prvky zoradíte v správnom poradí:

- a. Látky obsahujúce uhlík:

Uvedie sa chemická značka každého prvku v tomto poradí:

- (1) uhlík;
- (2) vodík;
- (3) iné značky prvkov v abecednom poradí:

pentán: C_5H_{12}

pentén: C_5H_{10}

pentanol: $C_5H_{12}O$

- b. Látky neobsahujúce uhlík:

Každý prvok sa uvedie v abecednom poradí:

kyselina chlorovodíková: ClH

3. V prípade každého prvku, ktorý má počet atómov >1 , uveďte počet atómov vo forme dolného indexu za chemickými značkami
4. Informácie, ktoré nesúvisia s hlavnou štruktúrou, uveďte na konci molekulového vzorca oddelené bodkou alebo čiarkou:

benzoan sodný je $C_7H_6O_2$, sodná soľ

dihydrát síranu meďnatého je $CuO_4S.2H_2O$

V prípade, že pre špecifickú látku nemožno použiť Hillovu metódu, molekulový vzorec by sa mal uviesť iným spôsobom, napríklad ako empirický vzorec, jednoduchý opis atómov a známy pomer atómov, alebo ako vzorec, ktorý udáva [Chemical Abstracts Service](#) (pozri kapitolu 4 -usmernenia).

6.2 Štruktúrny vzorec

Štruktúrny vzorec je potrebný na vizuálne znázornenie rozloženia molekúl v látke a ich vzájomných vzťahov. Štruktúrny vzorec by mal vyjadrovať polohu atómov, iónov alebo skupín a povahu väzieb, ktoré ich spájajú. Patria sem tiež izoméry, t.j. cis/trans, chiralita, enantioméry atď.

Štruktúrny vzorec možno uviesť vo viacerých formátoch: vo forme molekulového vzorca a/alebo vo forme grafického zobrazenia štruktúry:

- *Štruktúrny vzorec vo forme molekulového vzorca*

1. Zapište všetky skupiny prvkov v poradí ich výskytu:

n-pentán: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

2. Každý substituent sa zapiše do zátvoriek, bezprostredne za atóm, s ktorým je spojený:

2-metylbután: $\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$

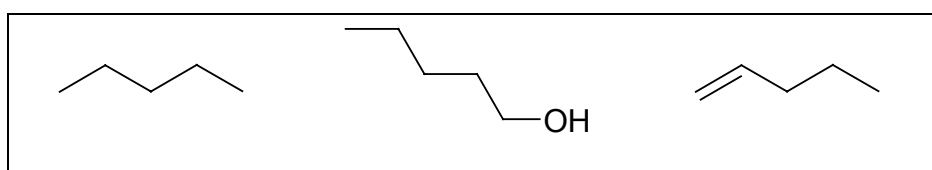
3. V prípade dvojitých alebo trojitých väzieb, zobrazte ich medzi dotknutými skupinami prvkov:

pent-1-én: $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

- *Štruktúrny vzorec vo forme grafického zobrazenia štruktúry*

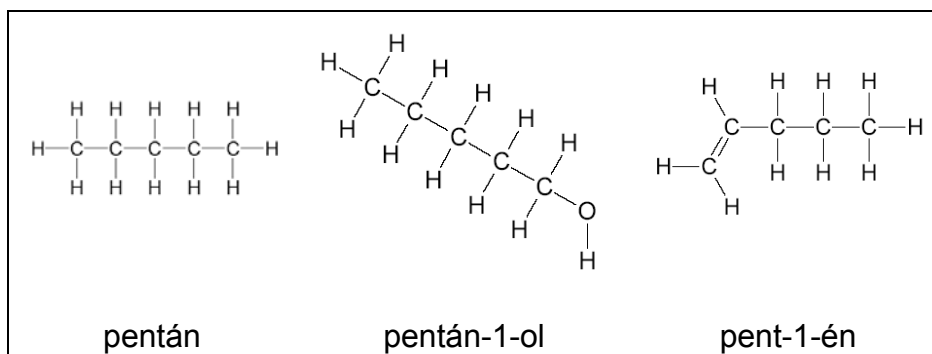
V prípade grafického zobrazenia štruktúry sa prvky a väzby medzi nimi vizuálne znázorňujú dvojrozmerným alebo trojrozmerným obrazcom. Existuje viacero metód:

1. Zobrazenie všetkých prvkov okrem uhlíka a vodíka, s výnimkou vodíka ktorý je naviazaný na iné prvky ako uhlík.

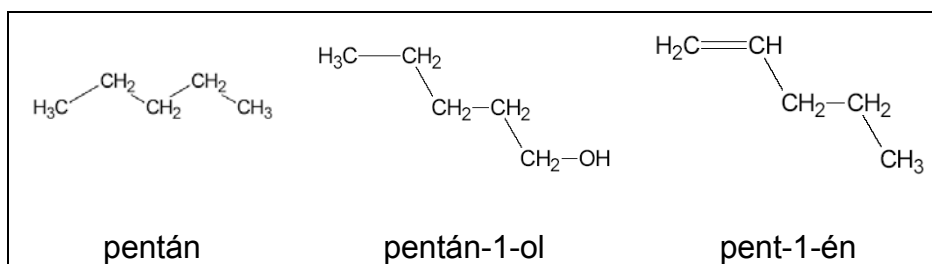


pentán	pentán-1-ol	pent-1-én
--------	-------------	-----------

2. Zobrazenie všetkých prvkov podľa názvu



3. Zobrazenie uhlíka a vodíka ako skupiny (napr. CH₃), všetkých prvkov okrem uhlíka a všetkých atómov vodíka, ktoré nie sú naviazané na uhlík.



6.3 SMILES zápis

SMILES je akronymom pre **S**implified **M**olecular **I**nterpretation **L**ine **E**nter **S**pecification (Weininger, 1988). Ide o systém chemického zápisu, ktorý sa používa na znázorňovanie molekulovej štruktúry pomocou lineárneho sledu značiek. V prípade štandardného systému SMILES je názov molekuly synonymom jej štruktúry: nepriamo predstavuje dvojrozmerný obraz molekulovej štruktúry. Keďže dvojrozmernú chemickú štruktúru možno znázorniť rôznymi spôsobmi, pre jednu molekulu existuje viacero správnych zápisov SMILES. Základom SMILES je znázornenie valenčného modelu molekuly; preto nie je vhodné opisovať molekuly, ktoré nemožno znázorniť valenčným modelom.

Zápisy SMILES pozostávajú z atómov, ktoré sú označené značkami prvkov, väzieb, zátvoriek, ktoré sa používajú na znázornenie rozvetvenia a čísiel označujúcich cyklické štruktúry. Zápis SMILES znázorňuje chemickú štruktúru vo forme grafu s voliteľným označením chiralít. Zápis SMILES, ktorý znázorňuje štruktúru len pomocou väzieb a atómov, sa nazýva všeobecným zápisom SMILES; zápis SMILES, ktorý je zapísaný pomocou izotopových a chirálnych špecifikácií je známy ako izomérny zápis SMILES.

Zápis SMILES vychádza z niekoľkých základných pravidiel:

1. Atómy sú znázornené ich atómovými symbolmi;
2. Každý atóm s výnimkou vodíka sa špecifikuje samostatne;
 - a. Prvky v "organickú podskupinu" B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br a I sa píše bez zátvoriek a bez pripojeného H, pokiaľ počet H zodpovedá najnižšiemu normálnemu mocnstvu (mocnstvám) v súlade s explicitnými väzbami:

prvok v „organickú podskupinu“	„najnižšie normálne mocnstvo(-á)“
B	3
C	4
N	3 a 5
O	2
P	3 a 5
S	2, 4 a 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Prvky v "organickú podskupinu" sa píše v zátvorkách, pokiaľ počet H nezodpovedá najnižšiemu mocnstvu:

amóniový kation je NH_4^+

- c. Prvky, ktoré nie sú obsiahnuté v "organickú podskupinu", sa píše v zátvorkách spolu s každým pripojeným vodíkom, ktorý je znázornený.
3. Alifatické atómy sa zapisujú veľkými písmenami; aromatické atómy sa zapisujú malými písmenami:

benzén je c1ccccc1 a cyklohexán je C1CCCCC1

4. Vodík sa zapisuje v týchto situáciách:
 - a. vodík s nábojom, t.j. protón, $[\text{H}^+]$;
 - b. atómy vodíka, ktoré sú viazané na iné atómy vodíka, t.j. molekulový vodík, $[\text{H}][\text{H}]$;
 - c. atómy vodíka, ktoré sú viazané na viac ako jeden atóm, napr. vodíkové mostíky;
 - d. Špecifikácie izotopového vodíka, napr. deutérium ($[\text{2H}]$);
 - e. Ak sa vodík viaže na chirálny atóm.
5. Štyri základné väzby sú tieto:

Typ väzby	SMILES zápis
jednoduchá	- (nie je nutný)
dvojitá	=
trojitá	#
aromatická	malé písmená

6. Substituenty sa znázorňujú v zátvorkách, a to bezprostredne za atómami, na ktoré sú viazané:

2-metylbután je CC(C)CC

- a. Substituenty sa vždy uvádzajú bezprostredne za príslušnými atómami; nemôžu nasledovať za znakom dvojitej alebo trojitej väzby:

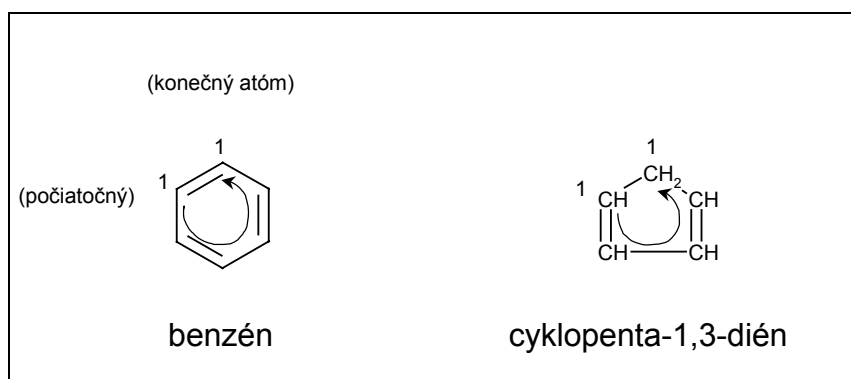
kyselina pentánová je CCCCC(=O)O

- b. Pripúšťajú sa substituenty v rámci substituentov:

2-(1-metyletyl)bután je CC(C(C)C)CC

7. V prípade cyklických štruktúr sa na označenie počiatočného a koncového atómu cyklu používajú čísllice od 1 do 9.

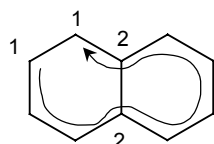
- a. V každom cykle sa na označenie počiatočného a koncového atómu používa jedno a to isté číslo. Počiatočný atóm a koncový atóm musia byť navzájom viazané.
- b. Čísla sa zapisujú bezprostredne za atómami, ktoré označujú počiatočnú a koncovú polohu.
- c. Počiatočnému a koncovému atómu môžu byť priradené dve po sebe nasledujúce čísla.



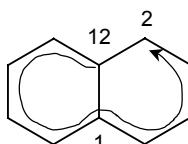
c1ccccc1

C1=CC=CC1

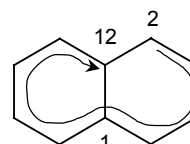
Príklady pre naftalén



c1ccc5ccccc2c1



c12ccccc1cccc2



c2ccccc1ccccc12

8. Nenaviazané zlúčeniny sa označujú ako samostatné štruktúry alebo ióny oddelené bodkou ("."). Susediace atómy oddelené bodkou (".") nie sú navzájom priamo viazané, napr. Van der Waalsova väzba:

aminopropén hydrochlorid je C=CC(N).HCl

9. Izoména konfigurácia je špecifikovaná "lomítkami" "\" a "/". Tieto znaky udávajú relatívny smer medzi dvoma izomérnymi väzbami (cis = "/ \"", trans = "/ /"). Systém SMILES používa lokálnu chiralitu, čo znamená, že chiralita musí byť úplne špecifikovaná:

cis-1,2-dibrometén je Br/C=C\Br

trans-1,2-dibrometén je Br/C=C/Br

10. Enantioméry alebo chiralita sú špecifikované symbolom "@". Symbol "@" udáva, že nasledujúci susedia chirálneho atómu sa uvádzajú proti smeru hodinových ručičiek. Ak sa použije znak "@@", atómy sa uvádzajú v smere hodinových ručičiek. Chirálny atóm a "@" sa uvádzajú v zátvorkách:

kyselina 2-chlór-2-hydroxypropánová so

špecifikovanou chiralitou je C[C@](Cl)(O)C(=O)O

11. Izotopové špecifikácie sa uvádzajú tak, že pred značku atómu sa zapíše číslo, ktoré sa rovná príslušnej celkovej atómovej hmotnosti. Atómovú hmotnosť možno špecifikovať len v zátvorkách:

uhlík-13 je [13C] a kyslík-18 je [18O]

Na stanovenie zápisu SMILES možno použiť viacero nástrojov (generátory SMILES) (pozri dodatok I).

7 Informácie o optickej aktivite

Optická aktivita je schopnosť asymetrických látok otáčať orientáciu roviny polarizovaného svetla. Takéto látky a ich zrkadlové obrazy sú známe ako enantioméry a majú jedno alebo viac chirálnych centier. Hoci sa navzájom líšia svojím geometrickým usporiadaním, enantioméry majú identické chemické a fyzikálne vlastnosti. Keďže každý typ enantioméru pôsobí na polarizované svetlo odlišne, pomocou optickej aktivity možno identifikovať, ktorý enantiomér je vo vzorke prítomný a teda aj určiť čistotu látky. Magnitúda rotácie je vnútornou vlastnosťou molekuly.

Enantioméry majú vždy opačnú rotáciu: polarizujú svetlo v rovnakej miere, ale v opačných smeroch. Optická aktivita enantiomérskej zmesi preto naznačuje pomer medzi dvomi enantiomérmi. Optická aktivita zmesi enantiomérov v pomere 50:50 sa rovná nule.

Pozorovaná rotácia závisí od koncentrácie, dĺžky vzorkovej trubice, teploty a od vlnovej dĺžky svetelného zdroja.

Optická aktivita je preto určujúcim identifikačným parametrom asymetrickej látky; predstavuje jediný parameter, ktorým možno odlíšiť látku od jej zrkadlového obrazu. Z toho dôvodu, ak je to možné, by sa optická aktivita látky mala uvádzať.

Štandard pre optickú aktivitu sa nazýva špecifická rotácia. Špecifická rotácia je definovaná ako pozorované otáčanie svetla pri hodnote 5896 angstromov, s dĺžkou dráhy 1 dm a pri koncentrácii vzorky 1 g/ml. Špecifická rotácia sa rovná podielu pozorovanej rotácie a dĺžky dráhy (dm) vynásobenému koncentráciou (g/ml).

Optická aktivita môže byť meraná viacerými rozdielnymi metódami. Najbežnejšími sú:

- Optická rotácia, pri ktorej sa otáča rovina polarizovaného svetelného lúča prechádzajúceho vzorkou;
- Cirkulárny dichroizmus, pri ktorom sa meria absorpcia pravo a ľavo polarizovaného svetla vzorkou.

Ak látka otáča svetlo doprava (v smere hodinových ručičiek), nazýva sa pravotočivou a označuje sa znakom +. Ak otáča svetlo doľava (proti smeru hodinových ručičiek), nazýva sa ľavotočivou a označuje sa znakom -.

8 Molekulová hmotnosť alebo rozsah molekulovej hmotnosti

Molekulová hmotnosť je hmotnosť molekuly látky vyjadrená atómovými hmotnostnými jednotkami (amu) alebo ako molárna hmotnosť (g/mol). Molekulovú hmotnosť možno vypočítať z molekulového vzorca látky: je to súčet atómových hmotností atómov tvoriacich molekulu. V prípade molekúl ako sú napríklad určité

proteíny alebo nedefinované reakčné zmesi, u ktorých nemožno stanoviť jediná molekulovú hmotnosť, sa môže uviesť rozsah molekulovej hmotnosti.

Na stanovenie molekulovej hmotnosti látok sa dá použiť viacero metód:

- Na stanovenie molekulovej hmotnosti plyných látok sa môže použiť Avogadrov zákon, podľa ktorého za danej teploty a tlaku daný objem plynu obsahuje špecifický počet molekúl plynu.

$$PV = nRT = NkT$$

n = počet mólov

R = univerzálna plynová konštanta = 8.3145 J/mol K

N = počet molekúl

k = Boltzmanova konštanta = 1.38066×10^{-23} J/K = 8.617385×10^{-5} eV/K

k = R/NA

NA = Avogadrovo číslo = 6.0221×10^{23} mol⁻¹

- V prípade kvapalín a tuhých látok molekulovú hmotnosť možno stanoviť tak, že sa určí ich vplyv na teplotu topenia, teplotu varu, tlak pár alebo osmotický tlak nejakého rozpúšťadla;
- Hmotnostná spektrometria, veľmi presná metóda merania;
- V prípade molekúl komplexných látok s vysokými molekulovými hmotnosťami, ako sú napríklad proteíny alebo vírusy, možno molekulovú hmotnosť stanoviť napríklad meraním rýchlosti sedimentácie v ultracentrifúge alebo fotometriou rozptylu svetla ([light-scattering photometry](#));
- Existuje viacero nástrojov, ktoré môžu vypočítať molekulovú hmotnosť na základe grafického zobrazenia štruktúry alebo molekulového vzorca látky (pozri dodatok I).

9 Zloženie látky

Pre každú látku sa v súlade s pravidlami a kritériami uvedenými v kapitole 4 usmernenia oznamuje jej zloženie ako kombinácia hlavných zložiek, prídavných látok a nečistôt.

Každá zložka, prídavná látka alebo nečistota musí byť dôkladne identifikovaná:

- Názvom (IUPAC názov alebo iný medzinárodne uznávaný názov);
- CAS číslom (pokiaľ existuje);
- ES číslom (pokiaľ existuje);

Pre každú zložku, prídavnú látku alebo nečistotu sa uvádza jej percentuálne zastúpenie (vyjadrené hmotnostnými alebo objemovými jednotkami), pričom tam, kde je to možné, sa uvedie rozsah v komerčnej látke.

Pre zložky (zložky) sa uvádza typická percentuálna čistota spolu s hornými a dolnými medznými hodnotami, ktoré sú typické pre komerčné šarže; v prípade prídavných látok a nečistôt sa uvedie typická percentuálna čistota alebo horné a dolné medzné hodnoty. Za normálnych podmienok by sa mal súčet uvedených hodnôt rovnať 100 %.

10 Spektrálne údaje

Spektrálne údaje sú potrebné na potvrdenie štruktúry danej pre jednozložkovú látku alebo na potvrdenie toho, že reakčná zmes nie je prípravkom. Pre spektrá možno použiť viacero metód (ultrafialové spektrum, infračervené spektrum, spektrum nukleárnej magnetickej rezonancie a hmotnostné spektrum). Nie všetky metódy sú vhodné pre všetky typy látok. Tam, kde je to možné, usmernenie bude obsahovať návod ohľadne vhodných spektier, ktoré sa použijú pre rôzne typy látok (ECB, 2004; ECB, 2005).

V prípade niektorých známych metód by sa na samotnom spektrograme alebo v prílohe mali uviesť tieto informácie:

Ultrafialové-viditeľné (UV-VIS) spektrum

- Identita látky;
- Rozpúšťadlo a koncentrácia;
- Rozsah;
- Poloha (a hodnoty epsilon) hlavných pík;
- Vplyv kyseliny;
- Vplyv zásady.

Infračervené (IR) spektrum

- Identita látky;
- Médium;
- Rozsah;
- Výsledky (treba označiť hlavné pre identifikáciu dôležité píky, napr. interpretáciu oblasti odtlačku (fingerprint));

Spektrum spektroskopie nukleárnej magnetickej rezonancie (NMR)

- Identita látky;
- Jadro a frekvencia;
- Rozpúšťadlo;
- Pokiaľ je to vhodné, interné alebo externé odkazy;
- Výsledky (treba označiť pre identifikáciu látky dôležité signály a signály zodpovedajúce rozpúšťadlu a nečistotám);
- V prípade ^1H NMR spektier by mala byť uvedená integračná krivka;

- Intenzita slabých NMR píkov by mala byť vertikálne zvýšená a komplexné časti spektra by mali byť rozšírené.

Spektrum hmotnostnej spektrometrie (MS)

- Identita látky;
- Urýchľovacie napätie;
- Metóda dávkovania (priame dávkovanie, pomocou GC atď.);
- Spôsob ionizácie (dopad elektrónov, chemická ionizácia, desorpcia poľa atď.);
- Molekulový ión (M);
- Fragmenty významné pre identifikáciu látky;
- Hodnoty M/z alebo priradenie pre identifikáciu štruktúry dôležitých píkov;
- Komplexné časti spektra by mali byť rozšírené.

Použiť možno aj iné medzinárodne uznávané metódy, pokiaľ spektrálne údaje potvrdia identifikáciu látky, napr. vnútornú štruktúru. Ako príklad možno uviesť XRD na identifikáciu zložiek komplexných minerálnych oxidov a XRF na analýzu ich chemického zloženia.

V záujme pochopenia a/alebo interpretácie spektier sa spravidla požaduje vykonať toto:

- Zaznamenať významné vlnové dĺžky alebo iné vhodné údaje;
- Poskytnúť ďalšie informácie, napr. spektra východiskových materiálov;
- Uviesť použité rozpúšťadlo a/alebo iné závažné údaje, ako sa u niektorých metód uvádza vyššie;
- Poskytnúť kópie (namiesto originálov) s riadne vyznačenými mierkami;
- Poskytnúť informácie o použitých koncentráciách látky;
- Zabezpečiť najintenzívnejšie píky príslušnej látky v mierke 1 : 1.

11 Vysokoúčinná kvapalinová chromatografia, plynová chromatografia

Tam kde je to vzhľadom na typ látky vhodné, je potrebné na potvrdenie jej zloženia poskytnúť chromatogram. Napríklad vhodný chromatogram potvrdí prítomnosť nečistôt, prídavných látok a zložiek v reakčnej zmesi. Dvomi najznámejšími metódami na separáciu a identifikáciu zmesí sú plynová chromatografia (GC) a vysokoúčinná kvapalinová chromatografia (HPLC). Obidve metódy sú založené na interakcii mobilnej fázy so stacionárnou fázou, čo má za následok separáciu zložiek zmesi.

V prípade GC/HPLC chromatogramov by sa na samotnom chromatograme alebo v prílohe mali uviesť tieto informácie (ECB, 2004; ECB, 2005):

- HPLC
 - Identita látky;

- Vlastnosti kolóny, napr. priemer, náplň, dĺžka;
- Teplota, tiež teplotný rozsah, pokiaľ sa používa;
- Zloženie mobilnej fázy, tiež rozsah, pokiaľ sa používa;
- Koncentračný rozsah látky;
- Detekčná metóda, napr. UV-VIS;
- Výsledky (treba označiť hlavné pre identifikáciu látky dôležité píky);
- GC
 - Identita látky;
 - Vlastnosti kolóny, napr. priemer, náplň, dĺžka;
 - Teplota, tiež teplotný rozsah, ak sa používa;
 - teplota injektora;
 - Nosný plyn a tlak nosného plynu;
 - Koncentračný rozsah látky;
 - Detekčná metóda, napr. MS;
 - Identifikácia pík;
 - Výsledky (treba označiť hlavné pre identifikáciu látky dôležité píky).

12 Popis analytických metód

V prílohe IV REACH sa od registrujúceho požaduje, aby opísal analytické metódy a/alebo uviedol bibliografické odkazy na metódy použité na identifikáciu látky a tam, kde je to vhodné, na identifikáciu nečistôt a prídavných látok. Tieto informácie by mali byť dostatočne obsiahle, aby metódy boli reprodukovateľné.