

РЪКОВОДСТВО

Ръководство за идентифициране и именуване на веществата по REACH и CLP

декември 2023 г.
Версия 3.0



ПРАВНА ИНФОРМАЦИЯ

Този документ има за цел да помага на потребителите при изпълнение на задълженията им съгласно регламентите REACH и CLP. Въпреки това напомняме на потребителите, че текстовете на Регламентите REACH и CLP са единствените автентични нормативни актове и информацията в настоящия документ не представлява правен съвет. Използването на информацията остава единствено отговорност на потребителя. Европейската агенция по химикали не поема никаква отговорност по отношение на използването на информацията, съдържаща се в този документ.

Ръководство за идентифициране и именуване на веществата по REACH и CLP

Справочен номер: ECHA-23-H-07-BG
Каталожен номер: ED-09-23-444-BG-N
ISBN: 978-92-9468-321-2
DOI: 10.2823/01155
Дата на публикуване: декември 2023 г.
Език: BG

© Европейска агенция по химикали, 2023 г.
Заглавна страница © Европейска агенция по химикали

Ако имате въпроси или коментари, свързани с настоящия документ, изпратете ги (посочете номер и дата на издаване), като използвате формуляра за искане на информация. Достъп до формуляра за искане на информация можете да получите от страницата за контакти на ЕCHA на:

<https://echa.europa.eu/contact>

Европейска агенция по химикали

Пощенски адрес: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Финландия
Адрес за посещения: Telakkakatu 6, 00150, Helsinki, Финландия

ПРЕДГОВОР

Настоящият документ описва как да именуваме и идентифицираме вещество съгласно регламентите REACH и CLP. Той е част от поредица ръководства, чиято цел е да подпомогнат всички заинтересовани страни в тяхната подготовка за изпълнение на задълженията им по регламентите REACH и CLP. Тези документи обхващат подробно ръководство за редица съществени процеси по REACH и CLP, както и за някои специфични научни и/или технически методи, които индустрията или органите трябва да използват съгласно двата регламента.

Проектите за ръководствата са изготвени и обсъдени в „Проекти за прилагане на REACH“ (RIP), ръководени от службите на Европейската комисия и включващи всички заинтересовани страни: държавите-членки, индустрията и неправителствени организации. Ръководствата са достъпни на уебсайта на Европейската агенция по химикали (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). На същия уебсайт ще бъдат публикувани допълнителни ръководства, когато бъдат завършени или актуализирани.

ИСТОРИЯ НА ДОКУМЕНТА

Версия	Коментар	Дата
Версия 1	Първо издание	юни 2007 г.
Версия 1.1	<p>Поправки във:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Позоваване на Регламента CLP (Регламент (ЕО) № 1272/2008 г. от 16 декември 2008 г.) е добавено в заглавието и в заглавията на главите. - Допълнителен текст е добавен за изясняване на обхвата на ръководството. Съкратените текстове в документа са заличени. - Позовавания на Регламента CLP са включени в целия текст по подходящ начин. - Терминът „TGD“ е заменен с „ръководство“ в целия документ. - Терминът „препарат“ е заменен със „смес“ в целия документ. - Терминът „позиция“ е заменен с „раздел“ в целия документ. - Терминът „предварителна регистрация“ е заменен с „(късна) предварителна регистрация“ в целия документ. - Съкращенията AAS и CLP са въведени и са премахнати RIP и TGD. - Описанията на Сплав, Списък на ЕС и IUCLID са изменени. Въведени са определения на ЕС номер, Номер в списъка, Смес и Нотифицирано вещество. Определението на „препарат“ е заличено. - Раздел 3.2 е преработен, за да се изясни съдържанието. - Раздел 3.3 е преработен, за да се изясни съдържанието по отношение на задълженията по CLP. - В раздел 4.2.2.1 начинът, по който се представят съставките, е променен от процент на концентрацията на азбучен ред, така че относителният състав не може да се извежда от реда в списъка. - В раздел 4.2.3.1 терминът решетка се променя на кристал. 	ноември 2011 г. (само на английски език)

	<ul style="list-style-type: none"> - Раздел 4.3.1.2.3 е преработен, за да се изясни съдържанието. - В раздел 5 е включено позоваване на Ръководствата за подаване на данни, част 18 „Как да съобщим идентичността на веществото в IUCLID 5 за регистрация по REACH“. - Раздел 5 е преработен, за да се изясни съдържанието. - В раздел 6 описанието на предварителна регистрация е заменено с (късна) предварителна регистрация. - Неработещите хиперлинкове в приложение 1 са актуализирани. - Раздел 4.3 на приложение 2 е премахнат, като неговото съдържание може да бъде намерено в съответния уебсайт. 	
Версия 1.2	<p>Поправка</p> <p>Определението на понятието „въведено вещество“ е съгласувано с определението в Регламент (ЕО) № 1907/2006, въведено с Регламент (ЕО) № 1354/2007 на Съвета и с поправка в ОВ L 36 от 5 февруари 2009 г., стр. 84 (1907/2006).</p> <p>Следва да се има предвид, че промените в двете версии на документа, 1.1 и 1.2, са събрани в един преводен текст — версия 1.2 — за езиците, различни от английски.</p>	март 2012 г.
Версия 1.3	<p>Поправка</p> <p>В глава 7.6 са добавени две липсващи структурни формули.</p>	февруари 2014 г.
Версия 1.4	<p>Поправки във:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Преформатиране на документа в съответствие с текущата корпоративна идентичност. - Заличаване на глава 8, която представя технически инструкции, базирани на остаряла версия на IUCLID. - Поправка в раздел 7.5 на описанието на кристобалит и кварц и заличаване на позоваването на Директива 2000/30/ЕО. - Заличаване на препратките към глава 8 и Ръководствата за подаване на данни и добавяне на препратки към нови ръководства на ЕСНА. 	Юни 2016 г.

	<ul style="list-style-type: none"> - Заличаване на приложение III и преместване на информацията в таблицата с история на документа. - Поправка на наработешите връзки към уебсайтове и коригиране на редакторски грешки. 	
Версия 2.0	<p>Частична актуализация, ограничена до:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Добавяне на ново приложение III с описание на понятието за профил на идентичност на веществото. - Добавяне на нов текст в глава 1 за въвеждане на новото приложение III. - Коригиране на печатни и редакторски грешки 	декември 2016 г.
Версия 2.1	<p>Поправка за коригиране на печатните грешки в текста и грешките в информацията за състава в примерите във фигура 2 от Приложение III</p>	май 2017 г.
Версия 3.0	<p>Актуализиране с цел:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Привеждане в съответствие с измененията, въведени с Регламент (ЕС) 2022/477 на Комисията от 24 март 2022 г. - Премахване на препратките към (късна) предварителна регистрация - Коригиране на печатни и редакторски грешки - Добавяне на връзки към страниците за подкрепа на ЕСНА и Въпроси и отговори - Заличаване на приложение III, параграф 5 относно прехода от IUCLID 5 към IUCLID 6 	декември 2023 г.

Съдържание

1. ОБЩИ ПОЛОЖЕНИЯ	9
1.1. Цели.....	9
1.2. Обхват.....	10
1.3. Структура на ръководството.....	11
2. ОПРЕДЕЛЕНИЯ И СЪКРАЩЕНИЯ	12
2.1. Съкращения.....	12
2.2. Определения.....	14
3. РАМКА ЗА ИДЕНТИФИЦИРАНЕ НА ВЕЩЕСТВАТА В REACH И CLP	18
3.1. Определение за вещество.....	18
3.2. Цифрови идентификатори.....	18
3.2.1. Списък на ЕС.....	18
3.2.2. Регистрационни номера.....	20
3.3. Изисквания за идентифициране на веществото в REACH и CLP.....	21
4. РЪКОВОДСТВО ЗА ИДЕНТИФИЦИРАНЕ И ИМЕНУВАНЕ НА ВЕЩЕСТВОТО ПО REACH И CLP	24
4.1. Въведение.....	24
4.2. Вещества с ясно определен състав.....	30
4.2.1. Еднокомпонентни вещества.....	31
4.2.2. Вещества, включващи повече съставки.....	34
4.2.3. Вещества с дефиниран химичен състав и други основни идентификатори.....	38
4.3. UVCB вещества.....	39
4.3.1. Основни насоки за UVCB вещества.....	40
4.3.2. Специфични типове UVCB вещества.....	50
5. КРИТЕРИИ ЗА ПРОВЕРКА ДАЛИ ВЕЩЕСТВАТА СА ЕДНАКВИ	59
6. ИДЕНТИЧНОСТ НА ВЕЩЕСТВОТО В РАМКИТЕ НА ЗАПИТВАНЕТО	67
7. ПРИМЕРИ	68
7.1. Диетил пероксидикарбонат.....	68
7.2. ЗОЛИМИДИН.....	69
7.3. Смес от изомери.....	69
7.4. Аромат АН.....	73
7.5. Минерали.....	80
7.6. Етерично масло от Lavandin grosso.....	83
7.7. Масло от хризантема и изомери, изолирани от него.....	89
7.8. Фенол, изопропилиран, фосфат.....	93

7.9. Четвъртични амониеви съединения.....	95
7.10. Петролни продукти	99
7.10.1. Бензини с добавки (C4-C12)	99
7.10.2. Газьоли (петролни продукти).....	101
7.11. Ензими	102
7.11.1. Субтилизин.....	102
7.11.2. α -Амилаза	104
ПРИЛОЖЕНИЕ I - ПОМОЩНИ МАТЕРИАЛИ	106
ПРИЛОЖЕНИЕ II – ТЕХНИЧЕСКО РЪКОВОДСТВО ЗА ПАРАМЕТЪР ЗА ИДЕНТИФИЦИРАНЕ НА ВЕЩЕСТВОТО	111
ПРИЛОЖЕНИЕ III - ИДЕНТИФИЦИРАНЕ НА ВЕЩЕСТВАТА И СЪВМЕСТНО ПОДАВАНЕ НА ДАННИ	129

Списък на таблиците

Таблица 1: Съкращения.....	12
Таблица 2: Определения	14
Таблица 3: Параметри за идентифициране на веществото в Приложение VI Раздел 2 на REACH.....	22
Таблица 4: Групиране на основните идентификатори за примери, които представляват различни видове ясно определени подобни вещества	25
Таблица 5: Групиране на основните идентификатори за примери, които представляват различни видове UVCB вещества	26

Списък на фигурите

Фигура 1: Ключ към главите и приложенията в ръководството за предоставяне на насоки за различните видове вещества	29
Фигура 2 (следващата страница): Схематичен преглед на стъпките, които потенциалните регистранти предприемат от определяне на задълженията си за регистрация (1) до дефиниране на своя SIP за единствената си идентичност на веществото (4) и накрая подаване на заявките си за регистрация при формално изпълнение на задълженията за регистриране на своите вещества (8).	136
Фигура 3: Илюстративна схема за определяне на SIP (стъпка 4 във фигура 2) за вещество тип UVCB въз основа на дескриптори на източника и процеса от описания на източника и процеса на отделния правен субект.....	139

1. Общи положения

Регламентът REACH (Регламент (ЕО) № 1907/2006) въвежда система за регистрация, оценка, разрешаване и ограничаване на химикали и създава Европейската агенция по химикали (ECHA) за прилагането на този регламент.¹

Регламентът CLP (Регламент (ЕО) № 1272/2008) е новият европейски регламент за класифициране, етикетиране и опаковане на химични вещества и смеси.² Законодателството въвежда навсякъде в ЕС нова система за класифициране и етикетиране на химикали въз основа на Глобалната хармонизирана система на Обединените нации (UN GHS).

Регламентът REACH е фокусиран върху веществата. За да се гарантира, че процесите в регламента REACH функционират добре, от съществено значение е извършването на точно и недвусмислено идентифициране на веществото. Настоящото ръководство за идентифициране и именуване на веществото е предназначено за подкрепа на индустрията, държавите-членки и Европейската агенция по химикали.

Настоящото ръководство се основава на опита в идентифицирането на веществото в рамките на предишното законодателство за химикалите (Директива 67/548/ЕИО и Директива 98/8/ЕИО). Въпреки това настоящите практики по отношение на идентичността на веществото съгласно регламента REACH и регламента за класифициране, етикетиране и опаковане на вещества и смеси (CLP) формират основата за усъвършенстване на това ръководство. В допълнение и когато е необходимо, са взети под внимание и подходи от други схеми за химикали извън Европейския съюз.

Включени са персонализирани насоки за различните видове вещества.

Настоящото ръководство трябва да се прилага за идентифициране и именуване на вещества, които са регулирани от регламентите REACH и CLP.

1.1. Цели

Ръководството има за цел да даде насоки за производителите и вносителите относно регистрирането и отчитането на идентичността на дадено вещество в контекста на регламентите REACH и CLP. Като важен ключов елемент на идентифицирането на веществото ръководството дава насоки относно начина на именуване на веществото. Освен това в него се дават указания за това дали веществата могат да се разглеждат като едни и същи в контекста на REACH и CLP и как принципът „едно вещество, една регистрация“ (OSOR) може да се приложи чрез определяне на профила на идентичността на веществото (SIP). Идентифицирането на еднакви вещества, които могат да бъдат обхванати от един и същ SIP, е важно при запитвания, при обмен на данни, при съвместно подаване на данни, при нотифициране в списъка за класификация и етикетиране и при хармонизиране на класификацията и етикетирането.

¹ Регламент (ЕО) № 1907/2006 на Европейския парламент и на Съвета от 18 декември 2006 година относно регистрацията, оценката, разрешаването и ограничаването на химикали (REACH), за създаване на Европейска агенция по химикали, за изменение на Директива 1999/45/ЕО и за отмяна на Регламент (ЕО) № 793/93 на Съвета и Регламент (ЕО) № 1488/94 на Комисията, както и на Директива 76/769/ЕО на Съвета и Директиви 91/155/ЕО, 93/67/ЕО, 93/105/ЕО и 2000/21/ЕО на Комисията.

² Регламент (ЕО) № 1272/2008 на Европейския парламент и на Съвета от 16 декември 2008 година относно класифицирането, етикетирането и опаковането на вещества и смеси, за изменение и за отмяна на Директиви 67/548/ЕО и 1999/45/ЕО и за изменение на Регламент (ЕО) № 1907/2006 (Текст от значение за ЕИП) („CLP“).

За предпочитане е идентифицирането на вещества да се извършва от експерти в бранша. За тези страни от индустрията, които имат малко опит в идентифицирането на веществото, като приложение към настоящото ръководство са включени допълнителни насоки относно параметрите на идентифициране.

В допълнение, ръководството съдържа някои връзки към съответните инструменти за подкрепа на характеризирането и проверка на химичната идентичност на дадено вещество.

По-подробни инструкции как да се попълни информацията за идентичността на веществото в IUCLID в контекста на различните процеси съгласно регламентите REACH и CLP са предоставени в ръководствата на ECHA, които се намират на адрес <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Обхват

Според член 1 на REACH, регламентът се отнася за производството, вноса, пускането на пазара и употребата на вещества в самостоятелен вид и в смеси и изделия. Смесите и изделията в самостоятелен вид не са регулирани от REACH.

В съответствие с член 10 на REACH регистрацията изисква идентичността на веществото да бъде записана с помощта на параметрите, определени в раздел 2 от Приложение VI на REACH (вж. Таблица 3). Подобни параметри (както е посочено в раздели 2.1 до 2.3.4 на Приложение VI на REACH) са необходими за регистриране на идентичността на веществото за целите на нотификацията в съответствие с член 40, параграф 1 на CLP. Ръководството се фокусира върху подходящо идентифициране на вещества, които попадат в рамките на правната дефиниция на вещество в регламентите REACH и CLP, и дава насоки за параметрите за идентифициране на веществото в раздел 2 от Приложение VI на REACH. Информацията, предоставена във връзка с идентичността на веществото, трябва да бъде достатъчна за идентифициране на всяко вещество. Един или повече параметри за идентифициране на веществото могат да бъдат изпуснати, ако не е технически възможно или ако от научна гледна точка не е необходимо да се предостави исканата информация. Причините за тези пропуски трябва ясно да се посочат и да се базират на научна обосновка.

Подходът за идентифициране на дадено вещество зависи от вида на веществото. Поради това потребителят на ръководството се насочва към конкретни глави за различните видове вещества.

Списъците на ЕС, използвани в рамките на Директива 67/548/ЕИО (EINECS, ELINCS и NLP-списък), са важни инструменти за идентифициране на веществата. Насоки за ролята на тези списъци съгласно REACH са посочени в глава 3.2.

Веществата в рамките на обхвата на регламентите REACH и CLP (и следователно на настоящото ръководство) са обикновено резултат от химични реакции като част от производството на веществото и могат да съдържат няколко отделни съставки. Веществата, така както са определени в REACH и CLP, включват също вещества, получени по химичен път или изолирани от естествени материали, които могат да се състоят от един елемент или молекула (напр. чисти метали или някои минерали) или от няколко съставки (напр. етерични масла, метални изделия, образувани при стопяването на сулфидни метални руди). Въпреки това вещества, които са регулирани от други законодателни актове на Общността, са в редица случаи освободени от регистрацията съгласно REACH (вж. член 2 на REACH). Също така вещества, изброени в Приложение IV на REACH и вещества, изпълняващи определени критерии, които са посочени в Приложение V на REACH, са освободени от регистрацията. Трябва да се отбележи, че въпреки че дадено вещество може да бъде освободено от регистрацията, това не означава

непременно, че то е освободено от останалите дялове на регламента REACH или от изискванията на регламента CLP.

REACH изисква регистрантите на едно и също вещество да се срещнат, за да се споразумеят за съвместното подаване на определена информация за веществото (принцип на OSOR)³. Прилагането на такъв принцип изисква яснота относно начина, по който регистрантът е определил обхвата на своя SIP.

1.3. Структура на ръководството

Основна информация, като например цели и обхват на настоящото ръководство, е представена в глава 1, а използваните съкращения и определения могат да бъдат намерени в глава 2. Необходимата информация за рамката за идентифициране на веществото в REACH, напр. определение на веществото и изискванията за информация в правния текст, е посочена в глава 3.

Практическите насоки за идентифициране и именуване на веществото са посочени в глава 4.

- В глава 4.1 е описано разграничението между „добре дефинирани“ и „недобре дефинирани“ вещества; а в рамките на тези две основни групи могат да бъдат разпознати различни видове вещества със собствени специфични указания за идентифициране на веществата. Представена е ключова диаграма за насочване на потребителя към подходяща глава с насоки за идентифициране за специфичен тип вещество.
- Следващите глави предоставят конкретни насоки за всеки вид вещество под формата на набор от правила с обяснения и примери.

Глава 5 дава насоки за проверка дали веществата могат или не могат да се считат за еднакви. Насоки относно идентичността на веществото в рамките на процедурата за запитване са дадени в глава 6.

Освен това, някои подробни примери в глава 7 са изготвени с помощта на практическите насоки на глава 4.

Приложение I изброява някои връзки със съответните инструменти за подкрепа на характеризирането и проверка на химичната идентичност на веществото.

Приложение II предоставя повече обща информация за параметрите за идентифициране на отделните вещества, използвани в процеса на идентифициране на веществото, като правилата на номенклатурата, ЕС номера и CAS номера, начини на записване на молекулната и структурната формула и аналитични методи.

В приложение III е дадена информация относно понятието SIP, значението му за задълженията за съвместно подаване и начина, по който то следва да се определя и докладва.

³ Подробна информация за съвместното подаване на данни за едно и също вещество е предоставена в *Ръководството за обмен на данни*.

2. Определения и съкращения

2.1. Съкращения

Основните съкращения, използвани в настоящото ръководство, са изброени и обяснени в Таблица 1.

Таблица 1: Съкращения

Съкращение	Значение
AAS	Атомно-абсорбционна спектроскопия
AISE	Международна асоциация за сапуни, детергенти и продукти за поддръжка
CAS	Служба, предоставяща обобщена информация за химичните вещества
CLP	Регламент (ЕО) № 1272/2008 относно класифицирането, етикетирането и опаковането на вещества и смеси
EINECS	Европейски списък на съществуващи търговски химични вещества
ELINCS	Европейски списък на нотифицираните химични вещества
ENCS	Съществуващи и нови химични вещества (Япония)
ESIS	Европейска информационна система за химични вещества
ЕК	Европейска комисия
GC	Газова хроматография
GHS	Глобална хармонизирана система за класифициране и етикетиране на химикали
HPLC	Високоэффективна течна хроматография
InChI	Международен химичен идентификатор на Международния съюз за чиста и приложна химия (IUPAC)
INCI	Международна класификация на козметичните съставки
ISO	Международна организация по стандартизация
IUBMB	Международен съюз по биохимия и молекулярна биология
IUCLID	Международна уеднаквена база данни за химическа информация
IUPAC	Международен съюз за чиста и приложна химия
NLP	Вещество, което вече няма свойства на полимер
ppm	Части на милион
REACH	Регистрация, оценка, разрешаване и ограничаване на химикали
SIEF	Форум за обмен на информация за веществото

SIP	Профил на идентичност на веществото
SMILES	Спецификация за опростено въвеждане на химични формули
TSCA	Закон за контрол върху токсичните вещества (САЩ)
UV/VIS	Ултравioletов/видим
UVCB	Вещества с неизвестен променлив състав, продукти от сложни реакции или биологични материали
XRD	Рентгенова дифракция
XRF	Рентгенова флуоресценция
ЕС	Европейски съюз
ИЧ/IR	Инфрачервен
МС	Масспектроскопия
т/т	Тегловен процент
ЯМР	Ядрено-магнитен резонанс

2.2. Определения

Основните определения, използвани в настоящото ръководство, са изброени и обяснени в Таблица 2.

Тези определения вземат предвид определенията, използвани в регламентите REACH и CLP. По тази причина някои условия са дефинирани по различен начин от начина, по който са използвани по силата на Директива 67/548/ЕИО.

Таблица 2: Определения

Определение	Описание
IUCLID	Международна уеднаквена база данни за химическа информация. IUCLID е база данни и управленска система за въвеждане на данните за химичните вещества.
Вещества, срещащи се в природата*	Природно срещащо се вещество, непреработено или преработено само по ръчен, механичен или гравитационен начин; чрез разтваряне във вода, чрез флотация, чрез извличане с вода, чрез парна дестилация или чрез нагриване единствено за премахване на водата, или което е извлечено по някакъв начин от въздуха.
Вещество*	Химичен елемент и неговите съединения в естественото състояние или получени чрез всеки производствен процес, включително всяка добавка, необходима за запазване на неговата стабилност, и всеки примес, извлечен от използвания процес, с изключение на всеки разтворител, който може да бъде отделен, без да се засяга стабилността на веществото или да се променя неговият състав.
Вещество, включващо повече съставки	Като общо правило, това е вещество, определено от състава си, в който присъства повече от една основна съставка в концентрация $\geq 10\%$ (т/т) и $< 80\%$ (т/т).
Добавка	Вещество, което е прибавено целенасочено, за да стабилизира веществото ⁴ .
Еднокомпонентно вещество	Като общо правило, това е вещество, определено от състава си, в който една основна съставка присъства с най-малко 80% (т/т).
ЕС номер	ЕС номерът е цифровият идентификатор за вещества в списъка на ЕС.

⁴ В други области добавката може също така да има други функции, като например регулатор на рН или оцветяващ агент. Въпреки това в регламента REACH и в настоящото техническо ръководство добавката е стабилизиращ агент.

Изделие*	Предмет, на който по време на производството му е дадена специална форма, повърхност или дизайн, които определят неговата функция в по-голяма степен от неговия химичен състав.
Компонент	Вещество, добавено целенасочено, за да се образува смес.
Междинен продукт*	Вещество, произведено за, употребено във или използвано за химическа преработка, с цел превръщането му в друго вещество (наричано по-долу <i>синтез</i>): (а) <u>неизолиран междинен продукт</u> означава междинен продукт, който по време на синтеза не се отстранява умишлено (с изключение на вземането на проби) от оборудването, в което се извършва синтезът. Това оборудване включва реакционния съд, неговото спомагателно оборудване и всяко оборудване, през което веществото(ата) преминава(т) по време на непрекъснат или периодичен процес, както и тръбопроводите за пренос от един съд в друг за следващия реакционен етап, но изключва резервоари или други съдове, в които веществото(ата) се съхранява(т) след производството; (б) <u>изолиран на площадката междинен продукт</u> означава междинен продукт, който не отговаря на критериите за неизолиран междинен продукт, и за който производството на междинния продукт и синтезът на друго(и) вещество(а) от него се осъществяват на същата площадка, която се експлоатира от едно или повече юридически лица; (в) <u>транспортиран изолиран междинен продукт</u> означава междинен продукт, който не отговаря на критериите за неизолиран междинен продукт и се транспортира между или доставя на други площадки;
Мономер*	Вещество, което може да образува ковалентни връзки с поредица от допълнителни подобни или различни молекули при условията на съответната полимеризационна реакция, използвана за конкретния процес;
Номер в списъка	Номер, определен от Агенцията. Автоматично разпределен номер, определен чрез REACH-IT. Прилага се за всички входящи валидни подавания (напр. НИРДСПП, запитвания, регистрации, нотификации за класификация и етикетиране).
Нотифицирано вещество*	Вещество, за което е подадена нотификация и което би могло да бъде пуснато на пазара в съответствие с Директива 67/548/ЕИО;
Основна съставка	Съставка, която не е добавка или примес на едно вещество и която съставлява значителна част от него и затова е определяща при определяне на наименованието на веществото и неговото подробно идентифициране.

Полимер*	<p>Вещество, съставено от молекули, характеризиращи се с последователност на една или повече видове мономерни единици. Такива молекули могат да имат вариращо молекулно тегло, при което различията в молекулното тегло се дължат предимно на различията в броя на мономерните единици. Един полимер съдържа следното:</p> <p>(а) просто тегловно мнозинство от молекули, които съдържат поне три мономерни единици, ковалентно свързани с поне една друга мономерна единица или друг реагент;</p> <p>(б) по-малко от просто тегловно мнозинство от молекули със същото молекулно тегло.</p> <p>По смисъла на това определение „мономерна единица“ означава реагиралата форма на мономерно вещество в полимер.</p>
Примес	<p>Съставка, попаднала случайно в дадено вещество по време на неговото производство. Тя може да произхожда например от суровините или да е резултат от вторични или незавършени реакции по време на производствения процес. Макар да присъства в крайното вещество, тя не е била добавена преднамерено.</p>
Производство*	<p>Производство и извличане на вещества в естествено състояние.</p>
Смес*	<p>Смес или разтвор, съставен от две или повече вещества.</p>
Списък на ЕС	<p>Въпреки че не е законово определен в регламента REACH, списъкът на ЕС е комбинация от три независими и законово одобрени европейски списъка на вещества от предходните регулаторни рамки за химикали на ЕС: EINECS, ELINCS и NLP-списък (вещества, които вече нямат свойства на полимери). Вписванията в списъка на ЕС се състоят от наименование и номер на химичното вещество (ЕС наименование и ЕС номер), CAS номер, молекулна формула (ако има такава) и описание (за някои видове вещества).</p>
Сплав*	<p>Метален материал, хомогенен в микроскопичен мащаб, съдържащ два или повече елемента, свързани по такъв начин, че не могат да бъдат лесно разделени чрез механични средства.</p> <p>Сплавите са считат за специални смеси.</p>
Съставка	<p>Всеки отделен вид, представен в едно вещество, който може да се характеризира чрез уникалната си химична идентичност.</p>
Химически немодифицирано вещество*	<p>Вещество, чиято химична структура остава непроменена, дори ако то е претърпяло химичен процес или обработка, или физическа минералогична трансформация, например за премахване на примеси.</p>

Хроматографски
отпечатък

Представяне на състава на едно вещество въз основа на
характерното разпределение на съставките му в аналитична
хроматограма.

* Определения съгласно член 3 на REACH.

3. Рамка за идентифициране на веществата в REACH и CLP

Регламентите REACH и CLP включват определение на вещество, а REACH представя списък на параметрите за идентифициране на веществото (Приложение VI, раздел 2), които трябва да бъдат включени за идентифициране на веществото за целите на регистрацията.

Тази глава описва определението за вещество в REACH и CLP (глава 3.1), предвижда общи насоки за това, как да използва списъка на ЕС от предишната регулаторна рамка за химикалите (глава 3.2) и осигурява повече основна информация относно изискванията за идентифициране на веществото, които са определени в REACH (глава 3.3).

3.1. Определение за вещество

Понятието „вещество“ се определя в (член 3, параграф 1) на регламента REACH и в (член 2, параграф 7) на регламента CLP като:

„Вещество“ означава химичен елемент и неговите съединения в естественото състояние или получени чрез всеки производствен процес, включително всяка добавка, необходима за запазване на неговата стабилност, и всеки примес, извлечен от използвания процес, с изключение на всеки разтворител, който може да бъде отделен, без да се засяга стабилността на веществото или да се променя неговият състав.

Определението на вещество в REACH и CLP е идентично с определението на веществото, използвано в 7^{-то} изменение на Директивата за опасните вещества (Директива 92/32/ЕИО за изменение на Директива 67/548/ЕИО). И в двата случая определението излиза извън рамките на едно чисто химично съединение, определено от единична молекулярна структура. Определението на веществото включва различни съставки като примеси.

3.2. Цифрови идентификатори

3.2.1. Списък на ЕС

Има три отделни списъка, установени от предишната регулаторна рамка за химикалите. Това са Европейският списък на съществуващи търговски химични вещества (EINECS), Европейският списък на нотифицираните химични вещества (ELINCS) и NLP-списъкът (вещества, които вече нямат свойства на полимери).

Веществата на европейския пазар между 1 януари 1971 г. и 18 септември 1981 г. са изброени в Европейския списък на съществуващите търговски химични вещества (EINECS)^{5, 6, 7}.

Този списък включва около 100 000 вещества, определени от химическо име (и описание на някои видове вещества), CAS номер и 7-цифрен номер, нар. EINECS номер. EINECS номерата започват винаги с 2 или 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Съобщените в EINECS вещества са преминали през проверка, която обосновава въвеждането на веществото в списъка.

Веществата, нотифицирани и пуснати на пазара след 18 септември 1981 г., са изброени в Европейския списък на новите химични вещества (ELINCS)⁶. Този списък включва всички вещества, нотифицирани до 31 май 2008 г. в съответствие с Директива 67/548/ЕИО и нейните изменения. Тези вещества са т.нар. „нови вещества“, тъй като те не са били пуснати на пазара на Общността към 18 септември 1981 г. ELINCS номер се определяше за дадено вещество от Европейската комисия след преглед от страна на компетентните органи на държавите-членки (MSCAs). За разлика от EINECS, ELINCS не включва CAS номер в своите вписвания, а нотификационния номер, определен от MSCA, търговското име (ако има такова), класифицирането и IUPAC наименованието за класифицирани вещества. ELINCS номерата са също 7-цифрени, които започват винаги с 4 (4xx-xxx-x).

Полимерите бяха изключени от докладване в EINECS и бяха предмет на специални правила в Директива 67/548/ЕИО^{8, 9}. Терминът „полимер“ беше допълнително определен в 7-ата поправка на Директива 67/548/ЕИО (Директива 92/32/ЕИО). В резултат на прилагането на това определение, някои вещества, които са считани за полимери по силата на правилата за докладване на EINECS, вече не бяха считани за полимери съгласно 7-ата поправка. Тъй като всички вещества, които не са включени в EINECS, подлежат на нотифициране, теоретично, всички „вещества, които вече нямат свойства на полимери“ (NLP) следва да бъдат нотифицирани. Съветът на министрите, обаче, ясно заяви, че веществата, които вече нямат свойства на полимери, не следва с обратна сила да станат обект на нотификация. Комисията бе помолена да състави списък на веществата, които вече нямат свойства на полимери (NLP-списък). Веществата, подлежащи на включване в този списък, са били на пазара на ЕС в периода между 18 септември 1981 г. (датата на влизане в сила на Директива 79/831/ЕИО, 6-та поправка на Директива 67/548/ЕИО), и 31 октомври 1993 г. (датата на влизане в сила на Директива 92/32/ЕИО, 7-ата поправка на Директива 67/548/ЕИО) и са удовлетворявали изискването, на чието основание са били считани за полимери по правила за докладване на EINECS, но вече нямат свойства на полимери съгласно 7-ата поправка. NLP-списъкът

⁵ EINECS се основава на Европейския основен списък (ECOIN), в който индустрията може да докладва за допълнителни вещества (в съответствие с критериите за докладване на вещества на EINECS). ECOIN е съставен чрез обединяване на различни списъци на химични вещества, за които се предполага, че са на Европейския пазар (напр. TSCA). EINECS беше публикуван на 15 юни 1990 г. и включва повече от 100 000 вещества. По време на използването на списъка са установени известен брой грешки (печатни грешки, напр. неправилно химично име, формула или CAS RN). По тази причина на 1 март 2002 г. беше публикувана поправка.

⁶ ЕЕСВ (2005) Ръководство за решенията за изпълнението на шеста и седма поправка на Директива 67/548/ЕИО (Директиви 79/831/ЕИО и 92/32/ЕИО) Неповерителна версия. EUR 20519 EN. Актуализирана версия от юни 2005 г.

⁷ Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) Списък на EINECS на съществуващите химични вещества на пазара на ЕО. Tox Env Chem Том.37, стр. 21-33.

⁸ ЕСВ (2003) Нотификацията на нови химични вещества в съответствие с Директива 67/548/ЕИО относно класифицирането, опаковането и етикетиранието на опасни вещества. Списък на вещества, които вече нямат свойства на полимери. EUR 20853 EN.

⁹ Rasmussen K, Christ G и Davis JB (1998) Регистрация на полимери в съответствие с Директива 67/548/ЕИО. Tox Env Chem Том 67, стр. 251-261.

не е изчерпателен. Веществата в NLP списъка са идентифицирани с химично име, CAS номер и 7-цифрен номер, наречен NLP номер. NLP номерът винаги започва с 5 (5xx-xxx-x).

Тези три списъка с вещества, EINECS, ELINCS и NLP-списъкът, заедно се наричат „Списък на ЕС“. Всяко вещество в този списък има ЕС номер, който му е определен от Европейската комисия (вж. подробна информация за ЕС номера в Приложение II).

Информация за тези вещества може да бъде получена чрез уебсайта на Европейската агенция по химикали (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), който също така поддържа и публикува списък на регистрираните вещества (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Списъкът на ЕС може да се използва като инструмент за производителите и вносителите, за да намерят номера на ЕС на своето вещество.

3.2.2. Регистрационни номера

При създаването на системата REACH-IT, ECHA съете, че е от полза да определи автоматично номера на веществата във всички входящи подавания, които са технически пълни (предварителни регистрации, НИРДСПП, запитвания, регистрации, нотификации за класификация и етикетиране и др.), за които не са посочени ЕС номера (вж. критериите за предоставяне на регистрационни номера по-долу). Това технически улеснява управлението, по-нататъшната обработка и идентифицирането на веществата в тези подавания. Тези т.нар. „регистрационни номера“ са с едни и същи цифров формат, като използвания за номерата на EINECS, ELINCS и NLP, но започват с различни цифри.

Регистрационните номера са с един и същи цифров формат, като използвания за номерата на EINECS, ELINCS и NLP. По-голямата част от регистрационните номера и свързаното с тях идентифициране на веществото никога не са били проверени за точност, валидност и спазване на условните обозначения, посочени в настоящото ръководство.

Трябва да се подчертае, че е възможно едно и също вещество да получи различни регистрационни номера, когато за него са използвани различни идентификатори (напр. име). В резултат на това е възможно също така да бъде определен регистрационен номер на дадено вещество, изброено в EINECS, ELINCS или NLP. Това може да се случи, ако при подаването до ECHA чрез REACH-IT се използва име на веществото, което се различава от името в списъка на ЕС.

Номерата в списъка могат да започват например с 6, 7, 8 или 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

Важно е да отбележи, че за някои EINECS вписвания описанието на дадено вещество е относително широко и потенциално би могло да се счита, че обхваща повече от една идентичност на веществото според член 3, параграф 1 на REACH. В тези случаи потенциалният регистрант е поканен да опише въпросното вещество по-точно (напр. чрез IUPAC име и други налични идентификатори). Регистрантът все пак трябва да покаже на кое EINECS вписване принадлежи веществото. В такива случаи Европейската агенция по химикали ще обмисли дали е или не е уместно да се определи регистрационен номер на въпросното вещество.

3.3. Изисквания за идентифициране на веществото в REACH и CLP

Съгласно регламента REACH, когато се изисква регистрация, тя трябва да включва информация за идентифициране на веществото, както е посочено в раздел 2 от Приложение VI. Тази информация трябва да бъде адекватна и достатъчна, за да посочи възможност за идентифициране на всяко вещество. Ако това е технически невъзможно или ако няма научнообоснована необходимост за предоставяне на информация за един или повече параметри за идентифициране на веществото, причините ясно се излагат, както е посочено в Бележка 1 на Приложение VI.

По същия начин съгласно регламента CLP, когато се изисква да бъде направена нотификация (член 40 от CLP) тя трябва да включва информация за идентифициране на веществото, както е посочено в раздел 2.1 до 2.3.4 от Приложение VI от REACH. Тази информация е достатъчна, за да посочи възможност за идентифициране на всяко вещество. Ако това е технически невъзможно или ако няма научнообоснована необходимост за предоставяне на информация за един или повече параметри за идентифициране на веществото, причините ясно се излагат, както е посочено в Бележка 1 на Приложение VI.

Преглед на параметрите за идентифициране на веществото в Приложение VI на REACH е направен в Таблица 3.

Таблица 3: Параметри за идентифициране на веществото в Приложение VI Раздел 2 на REACH

Параметри за идентифициране на веществото в Приложение VI Раздел 2 на REACH	
2.	ИДЕНТИФИЦИРАНЕ НА ВЕЩЕСТВОТО <i>Информацията, представена в този раздел за всяко вещество, е достатъчна, за да позволи идентифицирането на всяко вещество. Ако това е технически невъзможно или ако няма научнообоснована необходимост за получаване на информация за една или повече от точките по-долу, причините ясно се посочват.</i>
2.1	Наименование или друг идентификатор на всяко вещество
2.1.1	<i>Наименование(я) по номенклатурата на IUPAC. Ако няма такава(ива), друго(и) международно(и) химично(и) наименование(я)</i>
2.1.2	<i>Други наименования (обичайно, търговско, съкращение)</i>
2.1.3	<i>ЕО номер, т.е., Einescs, Elincs или NLP номер, или номерът, определен от Агенцията (ако е наличен и по целесъобразност)</i>
2.1.4	<i>CAS номер и CAS наименование (ако са налични)</i>
2.1.5	<i>Друг идентификационен код , като например митнически номер (ако е наличен)</i>
2.2	Информация, свързана с молекулната и структурната формула или кристалната структура на всяко вещество
2.2.1	<i>Молекулна и структурна формула (включително нотация по SMILES и друго представяне, ако е налично), както и описание на кристалната(ите) структура(и)</i>
2.2.2	<i>Информация за оптичната активност и характерното съотношение на (стерео) изомера (ако е приложимо и уместно)</i>
2.2.3	<i>Молекулно тегло и диапазон на молекулното тегло</i>
2.3.	Състав на всяко вещество
2.3.1	<i>Степен на чистота (%), ако е приложимо</i>

2.3.2	<p><i>Наименования на съставки и онечиствания</i></p> <p><i>В случай на вещество с неизвестен или променлив състав, сложни продукти от реакции или биологични материали (UVCB):</i></p> <ul style="list-style-type: none"><i>— наименования на съставките, които присъстват в концентрация от $\geq 10\%$;</i><i>— наименования на познати съставки, които присъстват в концентрация от $< 10\%$;</i><i>— за съставки, които не могат да бъдат идентифицирани поотделно, описание на групите съставки въз основа на химичното естество;</i><i>— описание на произхода или източника и процеса на производство</i>
2.3.3	<p><i>Типичната концентрация и границите на концентрация (в проценти) на съставки, групи съставки, които не могат да бъдат идентифицирани поотделно, и онечиствания, както е посочено в точка 2.3.2</i></p>
2.3.4	<p><i>Наименования и типична концентрация и граници на концентрация (в проценти) на добавките</i></p>
2.3.5	<p><i>Всички необходими качествени аналитични данни, специфични за идентифицирането на веществото, като например данни от ултравиолетов или инфрачервен спектрален анализ, данни от ядреномагнитен резонанс, данни за масов спектър и дифракция</i></p>
2.3.6	<p><i>Всички необходими количествени аналитични данни, специфични за идентифицирането на веществото, като хроматографски, титриметрични данни, елементен анализ или данни за дифракция</i></p>
2.3.7	<p><i>Описание на методите за анализ или подходящите библиографски източници, необходими за идентифициране на веществото (включително идентифицирането и количественото определяне на съставките му и, когато е целесъобразно, на онечистванията и добавките в него). Описанието се състои от следваните опитни протоколи и съответното тълкуване на резултатите, докладвани съгласно точки 2.3.1—2.3.6. Тази информация е достатъчна, за да позволи възпроизвеждане на методите.</i></p>
2.5	<p>Всяка друга налична информация, която е от значение за идентифициране на веществото</p>

4. Ръководство за идентифициране и именуване на веществото по REACH и CLP

4.1. Въведение

Правилата за идентификация и именуването са различни за различните видове вещества. По практически причини ръководството е структурирано по такъв начин, че за всеки тип вещество потребителят е пряко насочен към главата, в която се дават съответните указания. За тази цел по-долу са посочени обяснения за различните видове вещества, а накрая е посочен ключ за намиране на подходящата глава.

Идентифицирането на веществото трябва да се основава най-малко на параметрите за идентифициране на веществото, изброени в Приложение VI, раздел 2 на REACH (вж. Таблица 3). Следователно всяко вещество трябва да се идентифицира от комбинация от подходящите параметри за идентифициране:

- IUPAC- и/или друго наименование и други идентификатори, напр. CAS номер, EC номер (Приложение VI, раздел 2.1);
- Молекулната и структурна информация (Приложение VI, раздел 2.2);
- Химическия състав (Приложение VI, раздел 2.3);

Дадено вещество се идентифицира изцяло чрез своя качествен и количествен химичен състав, т.е. химичната си идентичност и съдържанието на всяка съставка на веществото. Въпреки че такава директна идентификация може да бъде възможна за повечето вещества, за някои тя не е възможна или не е достатъчна в обхвата на регламентите REACH и CLP. В тези случаи се изисква друга или допълнителна информация за идентифициране на веществото.

Веществата могат да бъдат разделени на две основни групи:

1. „Ясно определени вещества“ Вещества с определен качествен и количествен състав, които могат да бъдат идентифицирани въз основа на параметрите за идентификация на REACH, приложение VI, раздел 2.
2. „UVCB вещества“: вещества с неизвестен променлив състав, продукти от сложни реакции или биологични материали. Тези вещества не могат да бъдат идентифицирани в достатъчна степен от гореспоменатите параметри.

Променливостта на състава за ясно определени вещества е определен от горната и долната граница(и) на концентрацията(ите) на основната(ите) съставка(и). За UVCB вещества променливостта е сравнително голяма и/или слабо предвидима.

Трябва да се признае, че ще има гранични случаи между ясно определени вещества (реакционни продукти с много съставки, всеки в рамките на широк кръг) и UVCB вещества (реакционни продукти с променлив и слабо предвидим състав). Регистрантът носи отговорност да идентифицира дадено вещество по най-подходящия начин.

Правилата за идентифициране и именуване се различават за „ясно определени вещества“ с една основна съставка и за „ясно определени вещества“ с повече от една основна съставка. За различните видове вещества в рамките на „UVCB“ са описани различни правила за идентифициране и именуване.

В

Таблица 4 и Таблица 5 основните идентификатори са изброени за няколко примера на различни видове вещества. Тези примери са групирани по такъв начин, че приликите и разликите за идентифициране на веществото се разпознават лесно.

Таблица 4 и Таблица 5 не представляват подробен списък на всички възможни видове вещества. Това групиране на вещества с правила за идентифициране и именуване не трябва да се разглежда като официална система за категоризация на вещества, а като практическа помощ за подходящото прилагане на специфични правила и за намиране на подходящите насоки в ръководството.

Таблица 4: Групиране на основните идентификатори за примери, които представляват различни видове ясно определени подобни вещества

Общи характеристики	Примери или представители	Основни идентификатори
<p>Ясно определени вещества по химически състав [Глава 4.2.]</p>	<p>Еднокомпонентни вещества, напр. - Бензен (95 %) - Никел (99 %), [Глава 4.2.1]</p>	<p>Химичен състав: една основна съставка ≥ 80%: - Химична идентичност на основната съставка (име на химичното вещество, CAS номер, ЕС номер, т.н.) - Типични концентрация и горна и долна граница</p>
	<p>Вещества, включващи повече съставки, напр. определени реакционни продукти, като Реакционна смес от 2-, 3- и 4-хлортолуен (30% всеки) [Глава 4.2.2]</p>	<p>Химичен състав: смес (реакционна маса) от основни съставки, всяка между ≥10 - <80 %: - Химична идентичност на всяка основна съставка - Типични концентрации и горна и долна граница за всяка съставка и за самата реакционна маса</p>
	<p>Вещества, определени не само чрез химичен състав, например графит и диамант [Глава 4.2.3]</p>	<p>Химичен състав като еднокомпонентно вещество или вещество, включващо повече съставки И Други физични или характеризиращи параметри: напр. кристаломорфология, (геологичен) минерален състав, т.н.</p>

Таблица 5: Групиране на основните идентификатори за примери, които представляват различни видове UVCB вещества

Общи характеристики		Примери или представители	Основни идентификатори		
			Източник	Процес	Други идентификатори
UVCB вещества (Вещества с неизвестен променлив състав, продукти от сложни реакции или биологични материали) [Глава 4.3]	Биологични материал и (Б)	<p>Екстракти от биологични материали, напр. естествени аромати, естествени масла, естествени багрила и пигменти</p>	<p>- Растителни или животински видове и семейства - Част от растение/животно</p>	<p>- Екстракция - Фракциониране, концентриране, изолиране, пречистване, т.н. - <u>Деривация*</u></p>	<p>- Известен или генеричен състав - Хроматографски и други отпечатащи - Отнасяне към стандарти - Цветен индекс</p>
		<p>Сложни биологични макромолекули, напр. ензими, протеини, ДНК или РНК фрагменти, хормони, антибиотици</p>			<p>- Стандартен ензимен индекс - Генетичен код - Стеро конфигурация - Физични свойства - Функция/активност - Структура - Последователност на аминокиселините</p>
		<p>Ферментационни продукти антибиотици, биополимери, ензими, винаси (продукти от ферментация на захар), софоролипиди и др.</p>			<p>- Културална среда - Приложени микроорганизми</p>

	Химични и минерални вещества с лошо дефиниран, сложен или променлив състав (UVC)	Реакционни смеси с непредсказуем и/или променлив състав	Суровини (изходни материали)	<u>Тип химична реакция</u> , напр. естерификация, алкилиране, хидрогениране	- Известен състав - Хроматографски и други отпечатащи - Отнасяне към стандарти
		- Фракции или дестилати, напр. петролни вещества - Глини, напр. бентонит - Катрани	- Суров петрол - Въглища/ торф - Минерални газове - Минерали	- Фракциониране, дестилация - <u>Преобразуване на фракции</u> - Физическа обработка - Остатъчни вещества	- Гранични прагове - Диапазон на дължината на веригата - Съотношение ароматни/алифатни - Известен състав - Стандартен индекс
		Концентрати или стопилки, напр. метални минерали или остатъчни вещества от различни металургични или топилни процеси напр. шлаки	Руди	- Топене - Топлинна обработка - Различни металургични процеси	- Известен или генеричен състав - Концентрация на метали

* Подчертаните процеси показват синтез на нова молекула

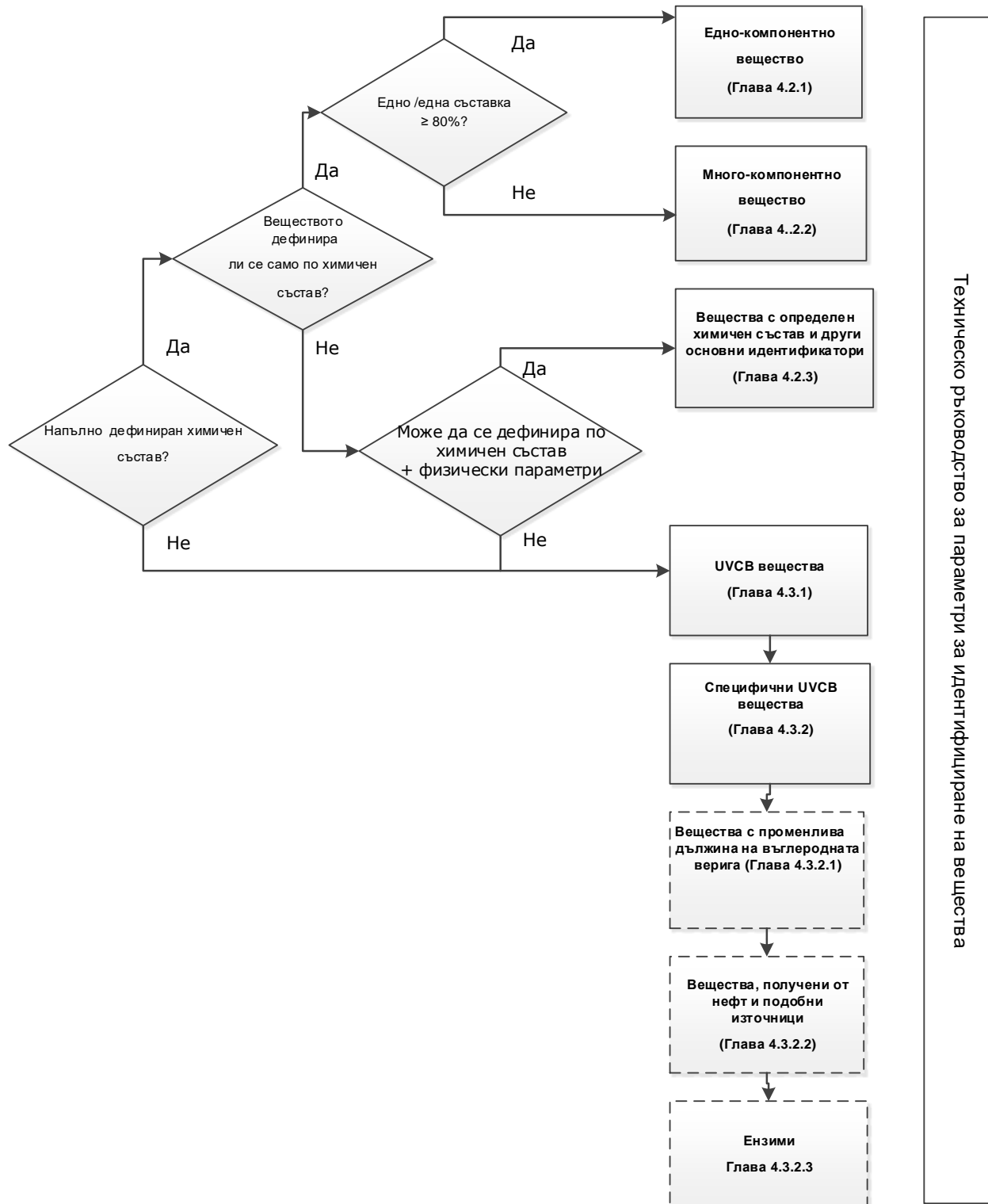
Тази глава е разделена на подглави, които съдържат конкретни насоки за идентифициране на различни типове вещества. Ключ към съответните глави е представен на Фигура 1.

Ключът от Фигура 1 се основава на критерии, които представляват „емпирични правила“. Регистрантът носи отговорност за избирането на най-подходящата глава и за записване на идентичността на веществото по най-подходящия начин, в съответствие с правилата и критериите за този тип вещество.

Основното правило е веществата да могат да се идентифицират възможно най-добре чрез химичния им състав и чрез идентифициране на съставките им. Само ако това не е технически възможно, трябва да се използват други идентификатори, както бе пояснено за различните типове UVCB вещества.

Ако регистрантът се отклони от правилата и критериите за идентифициране на веществото в това ръководство, трябва да посочи основанията си за това. Идентифицирането на веществото трябва да е направено по прозрачен и отговорен начин и да гарантира последователност.

Фигура 1: Ключ към главите и приложенията в ръководството за предоставяне на насоки за различните видове вещества



Описание на аналитичните методи и/или подходящите библиографски справки за идентифицирането на веществото и където е необходимо — за идентифициране на примесите и добавките (Приложение VI, точки 2.3.5, 2.3.6 и 2.3.7 от REACH). Тази информация трябва да е достатъчна, за да позволи възпроизвеждане на методите. Също така следва да бъдат представени типичните резултати при прилагането на аналитични техники.

4.2. Вещества с ясно определен състав

Веществата с ясно определен химичен състав се именуват според основната(ите) съставка(и). За някои типове вещества химичният състав сам по себе си не е достатъчен за характеризирането им. В такива случаи за идентифицирането на веществото трябва да се добавят някои допълнителни физични параметри за химичната структура.

Като общо правило, целта е да се обхване до 100% от състава, а всяка съставка изисква пълна химична спецификация, включваща информация за структурата. За вещества, които се дефинират чрез химичния им състав, се прави разграничение между:

- Основна съставка: Съставка, която не е добавка или примес във вещество, а представлява значителна част от него и следователно се използва при именуването и при детайлното идентифициране на веществото.
- Примес: Съставка, която непреднамерено присъства във веществото в резултат на производството му. Може да произлиза от изходните материали или да е резултат от вторични или непълни реакции по време на процеса на производство. Макар примесите да присъстват в крайното вещество, те не са добавени целенасочено.
- Добавка: Вещество, което е прибавено целенасочено, за да стабилизира веществото.

Всички съставки (с изключение на добавките), които не са основни в еднокомпонентното вещество или във веществото, включващо повече съставки, се считат за примеси. Въпреки че в някои сектори е обичайна практика да се използва терминът „следи“, в настоящото ръководство е използван единствено терминът „примеси“.

За различните съставки има различни идентификационни критерии:

- Основните съставки допринасят за наименоването на веществото и всяка основна съставка трябва да бъде точно определена;
- Примесите не участват при именуването на веществото и е нужно да бъдат специфицирани само по наименование
- Добавките взимат участие в състава на веществото (но не и в именуването му) и трябва винаги точно да се идентифицират.
- Точната идентификация на основните съставки, примеси и добавки трябва да се състои от наименование по IUPAC, химично наименование, структурна формула, ЕС номер, CAS номер, ако има такъв.

Използват се някои правила за разграничаване между еднокомпонентни и вещества, включващи повече съставки:

- Еднокомпонентно вещество е вещество, в което една съставка присъства в концентрация най-малко 80% (т/т) и което съдържа до 20% (т/т) примеси.

Еднокомпонентното вещество се именува в съответствие с основната съставка;

- Вещество, включващо повече съставки, е вещество, състоящо се от няколко основни съставки, които присъстват в концентрации най-често $\geq 10\%$ и $< 80\%$ (т/т).

Веществото, включващо повече съставки, се именува като реакционна маса от две или повече основни съставки.

Посочените по-горе правила представляват указания. Отклонения от тях се приемат, ако се посочи приемливо основание за това.

Обикновено примесите, присъстващи в концентрация $\geq 1\%$, трябва да бъдат определени. Обаче примеси, които са от значение за класифицирането и/или за PBT оценката¹⁰ трябва винаги да се посочват, независимо от концентрацията. Като общо правило информацията за състава трябва да бъде попълнена 100%.

Добавките по смисъла на регламентите REACH и CLP, както и в настоящото ръководство, се считат за агенти, необходими за запазване на стабилността на веществото. Ето защо добавките са важен компонент на веществото и се взимат предвид, когато се прави балансът на масите. Извън определението на REACH и настоящото ръководство обаче думата „добавка“ се използва също за целенасочено добавени вещества с други функции, например регулатори на pH и оцветители. Тези целенасочено добавени вещества не са част от веществото като такова и следователно не се взимат предвид при изготвяне на баланса на масите.

Смесите, така както са дефинирани в REACH, са целенасочено получени смеси от вещества и следователно не следва да се разглеждат като вещества, включващи повече съставки.

В глава 4.2.1 можете да намерите конкретни насоки за еднокомпонентните вещества, а в глава 4.2.2 — за веществата, включващи повече съставки. В глава 4.2.3 можете да намерите насоки за вещества, които изискват допълнителна информация (напр. определени минерали).

4.2.1. Еднокомпонентни вещества

Еднокомпонентно вещество е вещество, дефинирано чрез своя количествен състав, в което една основна съставка присъства поне 80% (т/т).

Конвенция за именуване

Еднокомпонентното вещество се именува съобразно основната съставка. По принцип наименованието трябва да се посочи на английски език, според правилата на номенклатурата на IUPAC (вж. Приложение I). Други международно приети наименования могат да се дадат като допълнение.

Идентификатори

Еднокомпонентното вещество се идентифицира чрез химичното наименование и всички други налични идентификатори (включително молекулна и структурна формула, или кристална структура) на основната съставка. Идентифицират се примесите и/или добавките в еднокомпонентното вещество. Трябва да се посочат типичната (ите) концентрация (и) и диапазонът (ите) на концентрация на основната съставка, примесите и/или добавките. Цялата тази информация трябва да бъде обоснована с аналитична информация.

¹⁰ Повече информация за PBT оценката и съответните критерии може да бъде намерена в Ръководството относно изискванията за информация и оценката на безопасността на химичните вещества, глава R11: PBT оценка.

Пример				
Основна съставка	Съдържание (%)	Примес	Съдържание (%)	Идентичност на веществото
m-ксилен	91	o-ксилен	5	m-ксилен
o-ксилен	87	m-ксилен	10	o-ксилен

Обикновено основната съставка е > 80% и трябва да бъде специфицирани напълно чрез всички гореспоменати параметри. Сумата от типичните концентрации за основната съставка и примесите следва да бъде 100 %. Примесите, присъстващи в концентрация > 1 %, се посочват по наименование и идентификатори. Примеси, които са необходими за класифицирането и/или PBT-оценката¹¹, винаги се специфицират чрез едни и същи идентификатори, независимо от тяхната концентрация.

За правилно прилагане на 80%-ното правило, съзнателно добавените вещества, като регулатори на рН или оцветители, не се включват в баланса на масите.

„80%-ното правило“ се прилага при нотифициране на нови вещества (Директива 67/548/ЕИО) и е приложимо в REACH. Обаче отклонението от това 80%-но правило трябва да бъде обосновано. Възможни примери за обосновано отклонение са:

- Ако основната съставка е < 80%, но може да се покаже, че веществото има подобни физико-химични свойства и същия профил на опасност като други еднокомпонентни вещества със същата идентичност, които отговарят на 80%-ното правило.
- Диапазонът от концентрации на основната съставка и на примесите се припокриват с критерия за 80%, а основната съставка само понякога е ≤ 80%.

Примери									
В-во	Основна съставка	Горна граница на състава (%)	Типичен състав (%)	Долна граница на състава (%)	Примес	Горна граница на състава (%)	Типичен състав (%)	Долна граница на състава (%)	Идентичност на веществото
1	o-ксилен	90	85	65	m-ксилен	35	15	10	o-ксилен
2	o-ксилен m-ксилен	90 35	85 15	65 10	p-ксилен	5	4	1	o-ксилен

Поради концентрационните диапазони на основната съставка и примеса, веществата 1 и 2 могат да се разглеждат като смеси на две основни съставки, o-ксилен и m-ксилен, или като еднокомпонентни вещества. Решението в подобен случай е да се разглеждат и двете като еднокомпонентно вещество, като това е предизвикано от факта, че o-ксилен присъства типично с > 80%.

¹¹ Повече информация за PBT оценката и съответните критерии може да бъде намерена в Ръководството относно изискванията за информация и оценката на безопасността на химичните вещества, глава R11: PBT оценка.

Аналитична информация

Трябва да се предоставят достатъчно качествени данни, за да се потвърди идентичността на съставките и примесите на дадено еднокомпонентно вещество. За тази цел няколко спектроскопски метода могат да бъдат подходящи, по-конкретно ултравиолетова и видима абсорбционна спектроскопия (UV/VIS), инфрачервена спектроскопия (IR), ядрено-магнитно резонансна спектроскопия (NMR) и маспектрометрия (MS). За неорганични вещества или органични и/или металоорганични вещества, откриваеми/измерими чрез кристалната структура, в повечето случаи се предпочита използването на рентгенова дифракция (XRD).

Трябва да се посочат количествени методи, например хроматографски техники като газова хроматография (GC) или високоефективна течна хроматография (HPLC), съчетани с метод за откриване, които да потвърдят състава на веществото. За неорганични вещества може да е по-подходящо използването на рентгенова дифракция (XRD), рентгенова флуоресценция (XRF), атомно-абсорбционна спектроскопия (AAS), оптична емисионна спектроскопия с индуктивно свързана плазма (ICP-OES) или маспектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP-MS). Ако са приложими, могат да се използват и други утвърдени техники за разделяне на съставките.

Описанието на аналитичните методи трябва да включва използваните експериментални протоколи и тълкуването на докладваните резултати.

Аналитичните методи са обект на непрекъснат напредък и усъвършенстване. По тази причина регистрантът носи отговорност да представи подходящи аналитични данни.

4.2.2. Вещества, включващи повече съставки

Вещество, включващо повече съставки, е вещество, дефинирано чрез своя количествен състав, в което повече от една основна съставка присъства в концентрация $\geq 10\%$ (т/т) и $< 80\%$ (т/т). Веществото, включващо повече съставки, е резултат от производствен процес¹².

REACH изисква регистрацията на веществото, така както е произведено. Ако е произведено вещество, включващо повече съставки, то трябва да се регистрира като вещество, включващо повече съставки^{13 14}. Но решение за това, до каква степен различните етапи от производството на веществото се обхващат от определението за „производство“, следва да се взема за всеки случай поотделно. Няма необходимост да се изпитва това вещество като такова, ако профилът му на опасност може достатъчно добре да се опише чрез информацията за отделните съставки.

Конвенция за именуване

Едно вещество, включващо повече съставки, се именува като реакционна маса на основните съставки на веществото, като такова, т.е. без изходните материали, необходими за производството на веществото. Общият формат е: „Реакционна маса от [наименования на основните съставки]“. Препоръчва се имената на съставките да са представени в азбучен ред и да са отделени със съюза „и“. Само основните съставки, обикновено $\geq 10\%$, участват в образуването на наименованието. По принцип наименованията трябва да се дават на английски език, според правилата на номенклатурата на IUPAC. Други международно приети наименования могат да се дадат като допълнение.

Идентификатори

Веществото с повече съставки се идентифицира чрез химичното наименование и всички други налични идентификатори на веществото като такова, както и чрез химичната идентичност на съставките (включително молекулната и структурната формула или кристалната(ите) структура(и)). Идентифицират се всички примеси и/или добавки на веществото, включващо повече съставки. Трябва да бъдат предоставени типичните концентрации и обхват(и) на концентрация на съставките, примесите и/или добавките. Цялата тази информация трябва да бъде обоснована с аналитична информация.

Пример				
Основни съставки	Съдържание (%)	Примес	Съдържание (%)	Идентичност на веществото
m-ксилен	50	p-ксилен	5	Реакционна маса на m-ксилен и o-ксилен
o-ксилен	45			

¹² Разликата между смес и вещество, включващо повече съставки, е, че сместа е получена чрез свързването на две или повече вещества без химична реакция. Веществото, включващо повече съставки, е резултат от химична реакция.

¹³ Много вещества са освободени от регистрация по REACH (напр. веществата, включени в Приложение IV).

¹⁴ Този подход не се прилага към някои определени вещества, като минералите (вж. глава 7.5 за повече подробности).

Химичният състав на веществата, включващи повече съставки, е известен и за идентифицирането на веществото има значение повече от една от основните съставки. Освен това химичният състав на веществото е предсказуем по отношение на типичните стойности и интервали. Основните съставки трябва да се определят напълно чрез всички подходящи параметри. Сумата от типичните концентрации на основните съставки ($\geq 10\%$) и примесите ($<10\%$) трябва да бъде 100% .

За правилно идентифициране на веществата, включващи повече съставки, съзнателно добавените вещества, като регулатори на рН или оцветители, не се включват в баланса на масите.

Примеси, които присъстват в концентрация $\geq 1\%$, трябва да бъдат посочени по наименование и всички налични идентификатори. Примеси, които са необходими за класифицирането и/или PBT-оценката, винаги се специфицират чрез едни и същи идентификатори, независимо от тяхната концентрация.

Пример								
Основна съставка	Горна граница на състава (%)	Типичен състав (%)	Долна граница на състава (%)	Примес	Горна граница на състава (%)	Типичен състав (%)	Долна граница на състава (%)	Идентичност на веществото
анилин	90	75	65	фенантрен	5	4	1	Реакционна маса от анилин и нафтаден
нафтаден	35	20	10					

Според правилата в настоящото ръководство, това вещество е вещество, включващо повече съставки. Въпреки че обхватът на една съставка е $> 80\%$, това се случва само понякога и типичният състав е $< 80\%$.

В случаите, когато основната съставка на вещество, включващо повече съставки, е $\geq 80\%$ или $<10\%$ (т/т), трябва да се предостави обосновка за това отклонение. Възможен пример за обосновано отклонение е:

- Съставката само понякога е $\geq 80\%$ или $<10\%$.

Например едно вещество съдържа две съставки, едната е 85% , а другата 10% , като останалото са примеси. И двете съставки допринасят и са важни за желаните технически ефекти на веществото. В този случай, въпреки че едната съставка е $> 80\%$, веществото може да се опише като двукомпонентно вещество.

Аналитична информация

Трябва да се предоставят достатъчно качествени данни, за да се потвърди идентичността на съставките и примесите на дадено вещество с повече съставки. За тази цел няколко спектроскопски метода могат да бъдат подходящи, по-конкретно ултравиолетова и видима абсорбционна спектроскопия (UV/VIS), инфрачервена спектроскопия (IR), ядрено-магнитно резонансна спектроскопия (NMR) и маспектрометрия (MS). За неорганични вещества или органични и/или металоорганични вещества, откриваеми/измерими чрез кристалната структура, в повечето случаи се предпочита използването на рентгенова дифракция (XRD).

Трябва да се посочат количествени методи, например хроматографски техники като газова хроматография (GC) или високоефективна течна хроматография (HPLC), съчетани с метод за откриване, които да потвърдят състава на веществото. За неорганични вещества може да е по-подходящо използването на рентгенова дифракция (XRD),

рентгенова флуоресценция (XRF) или атомно-абсорбционна спектроскопия (AAS), оптична емисионна спектроскопия с индуктивно свързана плазма (ICP-OES) или масспектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP-MS). Ако са приложими, трябва да се използват и други утвърдени техники за разделяне на съставките.

Описанието на аналитичните методи трябва да включва използваните експериментални протоколи и тълкуването на докладваните резултати.

Аналитичните методи са обект на непрекъснат напредък и усъвършенстване. По тази причина регистрантът носи отговорност да представи подходящи аналитични данни.

Регистриране на отделните съставки на вещество, включващо повече съставки

По принцип представянето на идентичността на веществата за целите на регистрацията трябва да следва подхода за вещества, включващи повече съставки (т.е. регистрация на вещество, включващо повече съставки). Като отклонение от този подход, ако е обосновано, могат да бъдат регистрирани отделните съставки. Дава се възможност за отклоняване от стандартния случай при идентифициране (и потенциално регистриране) на веществата чрез техните отделни съставки, когато:

- няма ограничения в информационните изисквания;
- има достатъчно съществуващи данни за обосноваване на подхода за регистриране на отделните съставки, т.е. подходът по принцип не изисква допълнителни изпитвания (върху гръбначни животни), в сравнение със стандартния подход;
- регистрирането на отделните съставки води до по-ефикасно решение (т.е. избягване на много регистрации на вещества, които имат в състава си едни и същи съставки);
- дадена е информация за състава на отделните реакционни маси.

Не бива да се злоупотребява с представената гъвкава възможност, за да се избегнат някои изисквания за данни. В случай например на вещество, включващо повече съставки „(C+D)“ със състав 50% C и 50% D, 1200 тона на година, този подход ще доведе до две регистрации със следната информация:

Вещество C

- Тонаж 600
- Да бъдат изпълнени изискванията за данни за > 1000 тона (Приложение X)

Вещество D

- Тонаж 600
- Да бъдат изпълнени изискванията за данни за > 1000 тона (Приложение X)

Този подход трябва да бъде комбиниран с изискването на REACH за сумиране на количествата на това вещество за правен субект. Предложението е да се въведат изисквания за данните, както следва:

- да се сумират всички количества/обеми на отделните съставки (съобразно количествата във веществото)
- да се обърне внимание на най-голямото количество вещество, съдържащо тази съставка

Въз основа на най-високия резултат трябва да бъдат установени изискванията за информация. При съобщаване на количествата трябва да бъде взет резултатът от сумирането на количеството за всяка отделна съставка. По-надолу са представени опростени примери за илюстриране на практическото прилагане на този подход:

Пример 1

Веществото, включващо повече съставки „C+D+E“ е получено в резултат на процес в рамките на един правен субект, при който са получени различни вещества:

- Вещество 1: 50% C, 25% D и 25% E, 1100 тона/година
- Вещество 2: 50% C и 50% D, 500 тона/година

В този случай също така реакционният продукт е изходната точка: двете вещества трябва да бъдат регистрирани като вещества, включващи повече съставки. Ако се следва подходът за регистрация на отделните съставки¹⁵, трябва да бъде приложено следното:

Съобщаването на веществото D в този случай означава:

- Тонаж: $(25\% * 1100) + (50\% * 500) = 525$ тона/година

Определянето на изискванията за информация се основава на най-строгото изискване. В конкретния случай: > 1000 тона/година, като общото количество на веществото, включващо повече съставки „C+D+E“ е около 1000 тона/година.

Бележка: В този случай, веществата C и E трябва да бъдат регистрирани съобразно с това.

Пример 2

Веществото, включващо повече съставки „G+H+I“ е получено в резултат на процес в рамките на един правен субект, при който са получени различни вещества:

- Вещество 3: 65% G, 15% H и 20% I, 90 тона/година
- Вещество 4: 60% G и 40% H, 90 тона/година

Съобщаването на вещество G:

- Тонаж: $(65\% * 90) + (60\% * 90) = 112,5$ тона/година

Определянето на изискванията за информация се основава на най-строгото изискване. В конкретния случай: > 100 тона/година, като общото количество на съставка G е около 100 тона/година.

Бележка: В този случай, веществата H и I трябва да бъдат регистрирани съобразно с това.

Освен установяването на споменатите изисквания за информация, друго съображение е броят на новите изследвания (с гръбначни животни), които е необходимо да бъдат извършени. Преди определянето на стратегия потенциалните регистранти трябва да вземат под внимание дали има достатъчно съществуващи изпитвания (с гръбначни животни) и дали предложеното гъвкаво решение ще доведе до повече или по-малко нови изследвания (с гръбначни животни). Трябва да се приложи стратегията, при която се избягват нови изследвания (с гръбначни животни).

В случай на съмнение стандартният начин за представяне идентичността на веществото за целите на регистрацията трябва винаги да бъде идентифициране на веществото така, както е произведено.

¹⁵ Примерът е предназначен единствено да илюстрира изискванията за създаването на информация и съобщаването на обемите. Той не касае това дали подходът е оправдан в този случай.

4.2.3. Вещества с дефиниран химичен състав и други основни идентификатори

Някои вещества (напр. неорганични минерали), които могат да се идентифицират чрез химичния им състав трябва да бъдат допълнително характеризирани чрез допълнителни идентификатори, за да се идентифицират принадлежащите (собствените) им вещества. Тези вещества могат да са вещества, включващи една съставка или вещества, включващи повече съставки, но за да се постигне недвусмисленото им идентифициране, те се нуждаят от други основни идентификатори за идентичност на веществото, в допълнение към параметрите за идентифициране на веществото, описани в предишните глави.

Примери

За да се идентифицира недвусмислено веществото, при някои неметални минерали (от природни източници или изкуствени) с уникална структура е необходима също така информация за морфологията и минералния им състав. Пример за това е каолин (CAS 1332-58-7), който се състои от каолинит, калиевоалуминиев силикат, фелдшпат и кварц.

Ръководство за спазване на специфичните задължения по REACH за вещества в „наноформи“ е предоставено в *Допълнение за наноформи, приложимо към Ръководството за регистрация и идентифициране на вещества*¹⁶. Предоставените становища обхващат характерни за наноматериалите въпроси, свързани с идентифицирането и характеризирането на наноформите.

Конвенция за именуване

По принцип трябва да се следват правилата за именуване на еднокомпонентни вещества (вж. глава 4.2.1) или на вещества, включващи повече съставки (вж. глава 4.2.2).

За неорганични минерали могат да се използват минералогичните наименования на съставките. Например апатит е вещество, включващо повече съставки, състоящо се от група фосфатни минерали, които обикновено се наричат хидроксилапатит, флуороапатит и хлорапатит, наречени така заради високите концентрации съответно на OH-, F- или Cl- йони, в кристалната решетка. Формулата на сместа от трите най-често срещани видове е $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$. Друг пример е арагонит, една от специалните кристални структури на калциевия карбонат.

Идентификатори

Тези вещества се идентифицират и именуваат според правилата за еднокомпонентни вещества (вж. глава 4.2.1) или за вещества, включващи повече съставки (вж. глава 4.2.2). Другите специфични основни идентификационни параметри, които трябва да се добавят, зависят от веществото. Примери за други основни идентификатори могат да са елементният състав със спектрални данни, кристалната структура, както се появява при рентгенова дифракция (XRD), инфрачервените абсорбционни пикове, индексът на набъбване, катион-обменният капацитет или други физични и химични свойства.

¹⁶ Допълнение за наноформи, приложимо за Ръководството за регистрация и идентифициране на вещества, на разположение на адрес <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

За минералите е важно да се комбинират резултатите от елементния състав със спектралните данни, за да се идентифицира минералогичният състав и кристалната структура. След това тя се потвърждава чрез характерни физико-химични свойства, като кристална структура (от рентгеновата дифракция), форма, твърдост, способност за набъбване, плътност и/или площ на повърхността.

За определени минерали могат да се дадат допълнителни специфични химични идентификатори, защото минералите имат характерни физико-химични свойства, които дават възможност за пълнота на идентифицирането им, например: много ниската твърдост на талка, способността за набъбване на бентонита, формите на диатомита, много високата плътност на барита и площта на повърхността (азотна адсорбция).

Аналитична информация

Основният критерий е, че трябва да бъде предоставена цялата необходима информация за потвърждаване на структурата на веществото. Трябва да се предостави същата аналитична информация, както за еднокомпонентни вещества (вж. глава 4.2.1) или за вещества, включващи повече съставки (вж. глава 4.2.2).

4.3. UVCB вещества

Вещества с неизвестен (**U**) или променлив (**V**) състав, продукти от сложни реакции (**C**) или биологични материали (**B**)^{17, 18, 19}, наречени още UVCB вещества, не могат да бъдат идентифицирани достатъчно добре по химичния им състав, защото:

- Броят на съставките е относително голям и/или
- Съставът е в значителна степен неизвестен и/или
- Съставът е променлив в относително голяма степен или е трудно предсказуем.

Вследствие на това, за идентифицирането на UVCB веществата се изискват други типове информация, в допълнение към онова, което се знае за химичния им състав.

От Таблица 5 може да се види, че основните идентификатори на различните типове UVCB вещества са свързани с източника на веществото и използвания процес; или принадлежат на група „други основни идентификатори“ (напр. „хроматографски или други отпечатащи“). Броят и типът на идентификаторите, посочени в Таблица 5, представляват илюстрация на разнообразието на типовете и не следва да се разглеждат като изчерпателни. Там където се знае химичният състав напр. на продукт на сложна реакция или вещество от биологичен произход, идентифицирането на веществото трябва да се направи като за еднокомпонентно вещество или като за вещество, включващо повече съставки, в зависимост от случая. Последствието от идентифициране на вещество като UVCB е, че всяка значителна промяна на източника или процеса най-вероятно би довела до различно вещество, което трябва да се регистрира отново. Ако реакционна смес се идентифицира като „вещество, включващо повече съставки“, веществото може да бъде получено от различен източник и/или чрез различни процеси, стига съставът на крайното вещество да остава същият в рамките на определения диапазон. Следователно не се изисква нова регистрация.

¹⁷ Rasmussen K, Pettau D, Vollmer G et al. (1999) Сборник, съставен от EINECS: Описания и определения, използвани за UVCB веществата. Tox Env Chem, том 69, стр. 403–416.

¹⁸ US EPA (2005-B) Закон за контрола върху токсични вещества - регистрация в списък за комбинации на две или повече вещества: продукти от сложни реакции.

¹⁹ US EPA (2005-B) Закон за контрол върху токсични вещества - регистрация в списък за химични вещества с неизвестен или променлив състав, продукти от сложни реакции и биологични материали: UVCB вещества.

В глава 4.3.1 могат да се намерят основните насоки за UVCB веществата, а в глава 4.3.2 — конкретни насоки за вещества с различни дължини на въглеродните вериги, вещества, получени от нефт или подобни източници и ензими, като специфични типове UVCB вещества.

4.3.1. Основни насоки за UVCB вещества

Тази глава на ръководството предоставя насоки за това, как да се използват някои основни идентификатори, наред с параметрите за идентифициране на веществото в REACH, Приложение VI (раздел 2), за идентифициране на UVCB вещества.

Информация за химичния състав

UVCB веществата или не могат да се конкретизират по уникален начин с IUPAC наименованията на съставките си, защото не всички съставки могат да се идентифицират, или могат да се опишат общо, но без да се конкретизират поради променливия си състав. Поради това, че при UVCB веществата няма ясно разграничаване между съставки и примеси, термините „основни съставки“ и „примеси“ не следва да се считат за уместни.

Въпреки това трябва да бъдат посочени химичният състав и идентичността на компонентите, доколкото са известни. Описанието на състава може често да се посочи по по-общ начин, например „линейни мастни киселини C8-C16“ или „алкохолни етоксилати с алкохоли C-10-C14 и 4-10 етоксилатни единици“. Освен това на базата на добре познати референтни проби или стандарти може да се посочи информация за химичния състав. В допълнение, в редица случаи могат да се използват индекси и съществуващи кодове. Друга обща информация за състава може да съдържа така наречените „отпечатьци“. Това е например хроматографски или спектрални изображения, които показват характерен пик на разпределение.

За дадено UVCB вещество, всички съставки, присъстващи в концентрации $\geq 10\%$ и всички други известни съставки, присъстващи в концентрации $< 10\%$, трябва да бъдат описани най-малко с английското наименование по IUPAC, типични концентрации и концентрационни диапазони.

Освен това, ако разполагате с такъв, трябва да предоставите за всяка съставка цифров идентификатор (CAS номер и/или EC номер или номер в списъка).

Съставките, които не могат да бъдат идентифицирани поотделно, се описват в групи въз основа на химическия характер. В този случай трябва да посочите за всяка група поне химично наименование, типична концентрация и обхват на концентрация. Освен това, ако е налична, трябва да предоставите молекулярна и структурна информация.

Съставки, които имат отношение към класифицирането и/или PBT оценката²⁰ на веществото, трябва винаги да се идентифицират със същите идентификатори, независимо от концентрацията им.

Неизвестни съставки, които не допринасят за класификацията, трябва да бъдат идентифицирани, доколкото е възможно, чрез общо описание на химичната им природа. Добавките трябва да се идентифицират напълно по начин, подобен на описания за ясно определени вещества.

²⁰ Повече информация за PBT оценката и съответните критерии може да бъде намерена в Ръководството относно изискванията за информация и оценката на безопасността на химичните вещества, глава R11: PBT оценка.

Основни идентификационни параметри — наименование, източник и процес

Поради това, че химичният състав сам по себе си не е достатъчен за идентифициране на веществото, най-общо веществото се идентифицира по наименованието си, произхода си или източника, и описание на производствения процес. Други свойства на веществото също могат да са важни идентификатори или като подходящи генерични идентификатори (напр. точка на кипене), или като решаващи идентификатори за специфични групи вещества (напр. каталитична активност при ензимите).

1. Конвенция за именуване

В общия случай наименованието на едно UVCB вещество е комбинация от източник и процес с общ формат: първо е източникът, след това е процесът(ите).

- Вещество, получено от биологични източници, се идентифицира чрез наименованието на вида.
- Вещество, получено от небиологични източници, се идентифицира чрез изходните материали.
- Процесите се идентифицират чрез типа на химичната реакция, ако се синтезират нови молекули, или като тип етап от пречистване, напр. екстракция, фракциониране, концентриране или като остатъчно вещество.

Примери	
ЕС номер	Наименование на ЕС
296-358-2	Лавандула, <i>Lavandula hybrida</i> , екстр., ацетилян
307-507-9	Лавандула, <i>Lavandula latifolia</i> , екстр., сулфуриран, паладиева сол

В списъка на ЕС са използвани различни формати в случай на реакционни продукти, например:

- EINECS: основен изходен материал, реакционен(ни) продукт(и) от друг(и) изходен(ни) материал(и)
- ELINCS: реакционен(ни) продукт(и) от изходния(те) материал(и)

Примери	
ЕС номер	Наименование на ЕС
232-341-8	Азотна киселина, реакционни продукти с 4-метил-1,3-бензендиамин хидрохлорид
263-151-3	Масни киселини, кокос, реакционни продукти с диетилен триамин
400-160-5	Реакционни продукти от масни киселини на талово масло, диетаноламин и борна киселина
428-190-4	Реакционен продукт на: 2,4-диамино-6[2-(2-метил-1H-имидазол-1-ил)етил]-1,3,5-триазин и цианурова киселина

В настоящото ръководство общият формат на наименованието на реакционния(те) продукт(и) е „Реакционен продукт на [наименованието на изходния материал]“. По принцип наименованията трябва да се дават на английски език, според правилата на номенклатурата на IUPAC. Други международно приети наименования могат да се дадат като допълнение. Препоръчва се думата „реакционен“ да се замести в наименованието със специфичния тип реакция, описана по генеричен начин, напр., естерификация или образуване на сол (вж. по-долу насоките за четири специфични UVCB подкласове).

2. Източник

Източникът може да бъде разделен на две групи:

2.1. Източници от биологично естество

Веществата от биологичен произход трябва да се дефинират по род, вид и семейство, напр. *Pinus cembra*, *Pinaceae* означава *Pinus* (род), *cembra* (вид), *Pinaceae* (семейство) и щам или генетичен тип, ако е необходимо. Ако е подходящо, тъкан или част от организъм, използвани за екстракция на веществото, напр. костен мозък, панкреас; или стъбло, семе или корени, също трябва да се посочат.

Примери	
ЕС номер	Наименование на ЕС
283-294-5	<p><i>Saccharomyces cerevisiae</i>, екстр.</p> <p>Описание на ЕС</p> <p>Екстракти и техните физично модифицирани производни като тинктури, конкрети, абсолюти, етерични масла, олеосмоли, терпени, фракции без терпени, дестилати, остатъчни вещества и т.н., получени от <i>Saccharomyces cerevisiae</i>, <i>Saccharomycelacea</i></p>
296-350-9	<p><i>Arnica mexicana</i>, екстр.</p> <p>Описание на ЕС</p> <p>Екстракти и техните физично модифицирани производни като тинктури, конкрети, абсолюти, етерични масла, олеосмоли, терпени, фракции без терпени, дестилати, остатъчни вещества и т.н., получени от <i>Arnica mexicana</i>, <i>Compositae</i>,</p>

2.2. Химични или минерални източници

При случай на реакционни продукти от химични реакции, изходните материали трябва да се опишат с тяхното IUPAC наименование на английски език. Минералните източници трябва да се опишат общо, напр. фосфатни руди, боксит, каолин, минерален газ, въглища, торф.

3. Процес

Процесите се идентифицират чрез типа на химичната реакция, ако се синтезират нови молекули, или като тип етап от пречистване, напр. екстракция, фракциониране, концентриране или като остатъчно вещество при пречистване.

За някои вещества, напр. химични производни, процесът се описват като комбинация от пречистване и синтез.

3.1 Синтез

Определена химична или биохимична реакция, която настъпва между изходните материали, в резултат на която се получава веществото. Например реакцията на Гринярд, сулфониране, ензимно разделяне с протеаза или липаза и т.н. Много реакции за получаване на производни също принадлежат към този тип.

За новосинтезирани вещества, на които не може да се посочи химичният състав, основният идентификатор са изходните материали, заедно със спецификацията на реакцията, т.е. типът химична реакция. Типът химична реакция е показателен за молекулите, които се очаква да присъстват във веществото. Има няколко типа крайна химична реакция: хидролиза, естерификация, алкилиране, хлориране и т.н. Тъй като това дава само обща информация за възможните получени вещества, в много случаи за пълно охарактеризиране и идентифициране на веществото е необходим също хроматографски „отпечатък“.

Примери	
ЕС номера	Наименование на ЕС
294-801-4	Масло от ленено семе, епоксидирано, реакционни продукти с тетраетиленпентамин
401-530-9	Реакционен продукт на (2-хидрокси-4(3-пропенокси)бензофенон и триетоксисилан) с (хидролизен продукт на кварц и метилтриметоксисилан)

3.2 Пречистване

Пречистването може да се приложи по много начини към вещества от природен или минерален произход, където химичната идентичност на съставките не се променя, но се променя концентрацията им, напр. студено обработване на растителна тъкан, последвано от екстракция с алкохол.

Пречистването може да се дефинира по-точно при процесите на екстракция. Идентифицирането на веществото зависи от типа на процеса:

- За вещества, получени чрез физични методи, напр. пречистване или фракциониране, следва да се конкретизират граничните диапазони и параметри на фракцията (напр. молекулно тегло, дължина на веригата, точка на кипене, диапазон на летливост, т.н.)
- За вещества, получени чрез концентриране, напр. продукти от металургични процеси, центрофугирани утайки, филтрирани остатъци и т.н., стъпката на концентриране се конкретизира заедно с генеричния състав на полученото вещество, в сравнение с изходния материал.

Примери

ЕС номер	Наименование на ЕС
408-250-6	Съединение концентрат на Organotungsten (реакционни продукти от волфрам, хексахлорид с 2-метилпропан-2-ол, нонилфенол и пентан-2,4 -дион)

- За остатъци от специфична реакция, напр. шлака, катран и тежки остатъци, процесът се описва заедно с генеричния състав на полученото в резултат вещество;

Примери

ЕС номер	Наименование на ЕС
283-659-9	<p>Калай, топилни остатъчни вещества</p> <p>Описание на ЕС</p> <p>Вещество, получено в резултат на употребата и производството на калай и сплавите му, получени от първични и вторични източници, и включващо рециклирани производствени междинни продукти. Състои се най-вече от съединения на калая и може да съдържа други остатъчни цветни метали и техните съединения.</p>
293-693-6	<p>Соева паста, протеинов екстракт. Остатък</p> <p>Описание на ЕС</p> <p>Страничен продукт, съдържащ основно въглехидрати, произведен от етанолова екстракция на обезмаслени соеви зърна.</p>

- За екстракти се посочват екстракционният метод, използваният разтворител за екстракцията и други условия (напр., температура/температурен диапазон).
- За комбинирано обработване, всяка стъпка от процеса се конкретизира (по общ начин), в допълнение към информацията за източника. Това комбинирано обработване е от особена важност в случая на химични производни.

Примери:

- Първо се екстрактира едно растение, екстрактът се дестилира и дестилираната фракция на растителния екстракт се използва за химични деривати. Полученото вещество може да бъде пречистено допълнително. Пречистеният продукт може евентуално да е добре дефиниран чрез химичния си състав и да не е необходимо веществото да се идентифицира като UVCB. Ако продуктът все още се разглежда като UCVB, комбинираното обработване може да бъде описано като „пречистен химичен дериват на дестилирана фракция на растителен екстракт“.
- Ако по-нататъшното обработване на екстракта включва само физични производни, съставът може да се промени, но без да има целенасочен синтез на нови молекули. Въпреки това промяната в състава води до различно вещество, напр. дестилат или преципитат на растителен екстракт.
- За получаване на петролни продукти често в комбинация се използват химична деривация и фракциониране. Например дестилацията на нефт, последвана от крекинг, генерира фракция на изходния материал, а също и нови молекули. Така в този случай трябва да се идентифицират двата типа процеси или дестилатът трябва да се опише като изходен материал за крекинг процеса. Това важи най-вече за петролните деривати, които често се получават при комбинация от процеси. За идентифициране на петролни вещества обаче може да се използва отделна специфична система (вж. глава 4.3.2.2).

Поради това, че един химичен дериват на екстракт няма да съдържа същите съставки, както изходния екстракт, той се разглежда като различно вещество. Това правило може да има последици при идентифицирането, които да доведат до отклонение на наименованието и описанието от предишното наименование и описание в EINECS. По времето на оформянето на EINECS списъка, екстракти от различни процеси, различни разтворители и дори различни физични или химични деривати често са обхващани в една единствена точка. В REACH обаче тези вещества трябва да се регистрират като отделни.

4. Други параметри за идентифициране на веществото

Освен химичното наименование, източникът и спецификацията на процеса, едно UVCB вещество трябва да включва всякаква друга важна информация, както се изисква от Приложение VI, раздел 2 на REACH.

Особено за специфичните типове UVCB вещества, може да са важни други идентификационни параметри. Допълнителните идентификатори могат да включват:

- Генерично описание на химичния състав;
- Хроматографски отпечатък или други типове отпечатъци;
- Референтен материал (напр. ISO);
- Физико-химични параметри (напр. точка на кипене);
- Номер на индекса за цвят;
- AISE номер.

Конкретни насоки за правилата и критериите, за това как да се използва информацията за наименованието, източника и процеса за идентифициране на UVCB вещества, са включени по-долу в различни типове източници и процеси. В следващите параграфи са описани четири подтипа UVCB вещества като комбинация от биологични или химични/минерални ресурси и процеси (синтез или пречистване).

UVCB от подтип 1, при които източникът е биологичен, а процесът е синтез

Вещества с биологичен произход могат да бъдат модифицирани в (био)химичен процес,

за да генерират съставки, които не са присъствали в изходния материал, напр. химични деривати на растителни екстракти или продукти на ензимно третиране на екстракти. Например, протеини могат да се хидролизират чрез протеаза, за да генерират олигопептиди, или целулоза от дървесина може да се карбоксилира, за да произведе карбоксиметил целулоза (СМС).

Към този подтип UVCB вещества могат да принадлежат и продуктите на ферментация. Например, виназата е продукт на захарната ферментация, която в сравнение със захарта съдържа много различни съставки. Когато ферментационните продукти се пречистят, веществата могат евентуално да се превърнат в такива, които се идентифицират напълно по химичен състав и не следва да се идентифицират като UVCB вещества.

Ензимите са специфична група вещества, които могат да се получат чрез екстракция и по-нататъшно пречистване от източник с биологичен произход. Въпреки че източникът и процесът могат да се конкретизират подробно, това не генерира специфичната информация за ензима. За такива вещества следва да се използва специфична система за класифициране, именуване и идентифициране (вж. глава 4.3.2.3).

За идентифициране на веществото е необходимо да се посочи и стъпката от крайния процес и/или всяка друга стъпка, която има отношение към идентифицирането на веществото.

Описанието на химичния процес е общо описание на типа на процеса (естерификация, алкална хидролиза, алкилиране, хлориране, заместване, т.н.), заедно със съответните обстоятелства по процеса.

Описание на биохимичен процес може да бъде общо описание на катализираната реакция, заедно с наименованието на ензима, катализиращ процеса.

За вещества, получени чрез ферментация или (тъканни) култури на видове, следва да се представи информация за ферментиращите видове, типа и общите условия на ферментацията (партидна или непрекъсната, аеробна, анаеробна, аноксна, температура, рН, т.н.) заедно с всички последващи стъпки на процеса, приложени за изолиране на ферментационните продукти, напр. центрофугиране, утаяване, екстракция, т.н. Ако тези вещества се рафинират допълнително, това може да доведе до получаването на фракция, на концентрат или на остатъчно вещество. Тези допълнително обработени вещества се идентифицират с допълнителна спецификация за по-нататъшните стъпки на процеса.

UVCB от подтип 2, при които източникът е химично вещество или минерал и процесът е синтез.

UVCB вещества, получени от химични или минерални източници посредством процес, при който се синтезират нови молекули, са „реакционни продукти“. Примери за химични реакционни продукти са продуктите на естерификация, алкилиране или хлориране. Биохимичните реакции с прилагане на изолирани ензими са специален тип химични реакции. Ако обаче се прилага сложен биохимичен път на синтез с използване на микроорганизми, е по-добре полученото вещество да се разглежда като ферментационен продукт и да се идентифицира по ферментационния процес и ферментационните видове, отколкото чрез изходните материали (вж. UVCB подтип 4).

Не всеки реакционен продукт трябва автоматично да се определя като UVCB. Ако един реакционен продукт може достатъчно добре да се дефинира чрез химичния състав (включително някои вариации), трябва да се предпочете идентифицирането му като вещество, включващо повече съставки (вж. глава 4.2.2). Само когато съставът на реакционния продукт е недостатъчно известен или трудно се предсказва, веществото трябва да се идентифицира като UVCB вещество („реакционен продукт“). Идентифицирането на един реакционен продукт се основава на изходните материали за реакцията и на (био)химичния реакционен процес, при който се генерира веществото.

Примери		
ЕС номер	EINECS наименование	CAS номер
294-006-2	Нонандиова киселина, реакционни продукти с 2-амино-2-метил-1-пропанол	91672-02-5
294-148-5	Формалдеhid, реакционни продукти с диетиленгликол и фенол	91673-32-4

Основен идентификатор за реакционните продукти е описанието на производствения процес. За идентифициране на веществото трябва да се посочи крайната или най-подходящата стъпка от процеса. Описанието на химичния процес е общо описание на типа процес (напр. естерификация, алкална хидролиза, алкилиране, хлориране, заместване, т.н.) заедно със съответните обстоятелства по процеса. Биохимичният процес се описва по тип реакция, заедно с наименованието на ензима, който катализира реакцията.

UVCB подтип 3, където източникът е биологичен, а процесът е пречистване

UVCB вещества от биологичен произход, получавани в резултат на процес на пречистване, при който не се генерират целенасочено нови молекули, могат да бъдат напр. екстракти, фракции на екстракт, концентрати на екстракт, пречистен екстракт или остатъчни вещества от процеса на вещества от биологичен произход.

Когато един екстракт се обработва по-нататък, веществото вече не е идентично с екстракта, а е ново вещество, което принадлежи на друг UVCB подтип, напр. фракция или остатъчно вещество от екстракт. Тези вещества трябва да се идентифицират с допълнителни параметри след обработването. Ако екстрактът се модифицира при химична или биохимична реакция и се получават нови молекули (деривати), идентифицирането на веществото се прави, следвайки насоките за UVCB подтип 2 или глава 4.2 за ясно определено вещество.

Това диференциране на допълнително обработени екстракти може да доведе до ново наименование и описание, които да се различават от тези в EINECS списъка. По времето, когато е създаден списъка, подобно диференциране не е правено и е можело всички типове екстракти с различни разтворители и допълнителни стъпки на обработване да се обхванат в една единствена точка.

Първият основен идентификатор на този подтип UVCB вещества е семейството, рода и вида на организмите, от които произхожда веществото. Ако е подходящо, трябва да се посочи тъканта или частта от организма, използвана за екстракция на веществото, напр. костен мозък, панкреас; или стъбло, семе и корени. За вещества от микробиологичен произход се дефинира щамът или генетичният тип на вида.

Ако UVCB веществото се получава от различни видове, то се разглежда като различно вещество, дори химичният състав да е подобен.

Примери	
ЕС номер	EINECS наименование
290-977-1	Окислен кампеш (<i>Haematoxylon campechianum</i>) екстракт Описание на ЕС Това вещество се идентифицира по индекса за цвят с индекс за цвят No C.I. 75290 окислено.
282-014-9	Панкреатичен екстракт, депотеинизиран

Вторият основен идентификатор е технологията на преработване на веществото, например процесът на екстракция, фракциониране, пречистване или концентриране или процесът, който оказва влияние върху състава на остатъчното вещество. По този начин пречистването на екстракти, извършено посредством различни процеси, напр. с използването на различни разтворители или различни стъпки на пречистване, води до различни вещества.

Колкото повече стъпки се прилагат при пречистването, толкова по-възможно става дефинирането на веществото чрез неговия химичен състав. В този случай различните видове източници или различните модификации на процесите не водят автоматично до различно вещество.

Основният идентификационен параметър за вещества от биологичен произход е описанието на съответния процес. За екстракти се описва процесът на екстракция със съответни подробности до степен, подходяща за идентифицирането на веществото. Трябва да се конкретизира поне използваният разтворител.

Когато се използват допълнителни стъпки при производството на веществото, като фракциониране или концентриране, се описва комбинацията на съответните стъпки от процеса, напр. комбинацията на екстракция и фракциониране, включително и граничните диапазони.

UVCB от подтип 4, при които източникът е химично вещество или минерал, а процесът е пречистване

Вещества от небиологичен произход, т.е. които са или произхождат от минерали, руди, въглища, природен газ и суров петрол, или други суровини за химичната промишленост, и са резултат от обработване без целенасочени химични реакции, могат да са (пречистени) фракции, концентрати или остатъчни вещества от тези процеси.

Въглища и суров нефт се използват в дестилационните или газифициращи процеси за получаване на голямо разнообразие от вещества, напр. нефтени продукти и горивни газове, и т.н. , а също и остатъчни вещества като катран и шлага. Много често дестилационен или по друг начин фракциониран продукт веднага претърпява по-нататъшна обработка, включително химична. В такива случаи идентифицирането на веществото следва насоките за UVCB подтип 2, тъй като процесът е по-важен от източника.

За петролни вещества се използва специална идентификационна система (вж. глава 4.3.2.2). Веществата, обхванати от тази система, включват фракции и продукти, получени при химична реакция.

Другите вещества в UVCB подтип 4 включват руди, рудни концентрати и шлаки, съдържащи различни количества метали, които могат да се екстрахират чрез

металургично обработване.

Минерали, като бентонит или калциев карбонат, могат да се обработват напр. чрез разтваряне в киселина и/или химично утаяване или в йонообменни колони. Когато химичният състав е напълно определен, минералите следва да се идентифицират, съгласно насоките в съответните части на глава 4.2. Ако минералите са обработени само чрез механични методи, напр. чрез натрошаване, пресяване, центрофугиране, флотация, и т.н., те продължават да се разглеждат като първоначалните минерали. За целите на идентифицирането²¹ минерали, получени чрез производствен процес, могат да бъдат разглеждани като еднакви на техния природно разпространен еквивалент, като се гарантира, че съставът е подобен и профилът на токсичността е идентичен.

Основният идентификационен параметър за вещества от небиологичен произход е описанието на съответния(те) процес(и).

За фракции процесът на фракциониране се описва с параметри и граничен диапазон за изолирана фракция, заедно с описание на стъпките от предишен процес, когато това е уместно.

За концентрационната стъпка се дава типът на процеса, напр. изпаряване, утаяване и т.н., и съотношението между началната и крайната концентрации на основните съставки, в допълнение към информацията за предишната(ите) стъпка(и) на процеса.

Основният идентификационен параметър за остатъчни вещества от небиологичен произход е описанието на процеса, при който се е получило остатъчното вещество. Процесът може да бъде всякаква физична реакция, която води до получаване на остатъчни вещества, напр. процес на пречистване, фракциониране, концентриране.

Аналитична информация

Веществата UVCB включват много разнообразни видове вещества, различни по параметри, като например източник и производствен процес. Следователно следва да бъдат представени подходящи аналитични методи за предоставяне на информация относно състава на веществото UVCB, които зависят от конкретния случай. Освен това познанията за това как да се използват тези методи са обект на непрекъснато развитие и подобрения. Следователно регистрантът носи отговорност за представянето на подходящи аналитични данни, за да предостави възможно най-добрата информация, която да позволи идентифицирането на веществото.

За характеризиране на UVCB веществата могат да се използват няколко качествени метода; примерите включват UV/Vis, инфрачервена и масспектрометрия, ядрено-магнитен резонанс, рентгенова дифракция.

Количествени данни, като хроматограми или данни от дифракция, които могат да се използват като пръстов отпечатък, се предоставят, за да се характеризира съставът на веществото.

Описанието на аналитичните методи трябва да включва използваните експериментални протоколи и тълкуването на докладваните резултати.

²¹ Еднаквият подход за идентификация за естествено срещащи се и химически произведени минерали не означава непременно, че законовите изисквания (напр. освобождаване от задължение за регистрация) са едни и същи.

4.3.2. Специфични типове UVCB вещества

Този раздел дава насоки за специфични групи UVCB вещества: вещества с променливи дължини на въглеродните вериги (4.3.2.1), вещества, получени от нефт или от подобни източници (4.3.2.2) и ензими (4.3.2.3).

4.3.2.1 Вещества с променливи дължини на въглеродните вериги

Тази група UVCB вещества включва дълговерижни алкилни вещества с променлива дължина на въглеродната верига, например парафини и олефини. Тези вещества се получават или от природни мазнини или масла, или се произвеждат синтетично. Природните мазнини произхождат от растения или животни. Дълговерижните алкилни вещества, извлечени от растения, обикновено имат само четен брой въглеродни атоми във веригите, докато дълговерижните алкилни вещества от животински източници включват също и (няколко) нечетен брой C-атоми във веригите. Синтетично получените дълговерижни вещества могат да съдържат цял набор от въглеродни вериги, с четен и нечетен брой въглеродни атоми.

Идентификатори и правила за именуване

Групата включва вещества, чиито отделни съставки имат обща структурна характеристика: Една или повече дълговерижна(и) алкилна(и) група(и) с прикачена функционална група. Съставките се различават една от друга по отношение на една или повече от следните характеристики на алкиловерижната група:

- Дължина на въглеродната верига (въглеродно число)
- Наситеност
- Структура (линейна или разклонена)
- Позиция на функционалната група

Химичната идентичност на съставките може да се опише задоволително и да се обозначи систематично, като се използват следните три дескриптора:

- **Алкилен дескриптор**, който описва броя на въглеродните атоми във въглеродната(ите) верига(и) на алкилната(ите) група(и).
- **Функционален дескриптор**, който идентифицира функционалната група на веществото, напр. аминогрупа, амониева, карбоксилна киселина.
- **Солеви дескриптор**, катионите/анионите във всяка сол, напр. натриев (Na^+), карбонатен (CO_3^{2-}), хлориден (Cl^-).

Алкилен дескриптор

- По принцип, алкилният дескриптор C_{x-y} се отнася за наситени, линейни алкилни вериги, обхващащ всякакви дължини на веригите от x до y, като напр. C₈₋₁₂ съответства на C₈, C₉, C₁₀, C₁₁ и C₁₂.
- Трябва да се посочи дали алкилният дескриптор се отнася само до четни или нечетни алкилни вериги, напр. C₈₋₁₂ (с четни номера)
- Трябва да се посочи дали алкилният дескриптор се отнася (също) до разклонени алкилни вериги, напр. C₈₋₁₂ (разклонени) или C₈₋₁₂ (линейни и разклонени)
- Трябва да се посочи дали алкилният дескриптор се отнася (също) до ненаситени алкилни вериги, напр. C₁₂₋₂₂ (C₁₈ ненаситени)
- Тясното разпределение на дължините на алкилните вериги не покрива по-широкото такова и обратно, напр. C₁₀₋₁₄ не съответства на C₈₋₁₈
- Алкилният дескриптор може да се отнася също до източника на алкилните вериги, напр. кокос или лой/мас. Но разпределението на дължините на въглеродните вериги трябва да отговаря на това в източника.

Посочената по-горе система трябва да се използва за описване на вещества с променливи дължини на въглеродните вериги. Не е подходяща за ясно определени вещества, които могат да се идентифицират чрез определена химична структура.

Информацията за алкилния дескриптор, функционалния дескриптор и солевия дескриптор е базата за именуване на този тип UVCB вещества. Освен това информацията за източника и процеса може да се окаже полезна за по-точното идентифициране на веществото.

Примери		
Дескриптори	Име	
Алкилен дескриптор Функционален дескриптор Солеви дескриптор	дължини на алкилните вериги C ₁₀₋₁₈ мастни киселини (карбоксилна киселина) кадмиеви соли	кадмиеви соли на мастни киселини (C ₁₀₋₁₈)
Алкилен дескриптор Функционален дескриптор Солеви дескриптор	ди-C ₁₀₋₁₈ -алкил-диметил амониев хлорид	ди-C ₁₀₋₁₈ -алкил-диметиламониев хлорид
Алкилен дескриптор Функционален дескриптор Солеви дескриптор	триметил лой-алкил амониев хлорид	триметил лой-алкил-амониев хлорид

4.3.2.2 Вещества, получени от нефт и подобни източници

Веществата, получени от нефт (петролни вещества) или подобни източници (напр. въглища) са много сложни вещества с вариращ или частично недефиниран състав. В тази глава са използвани петролни вещества за демонстриране как да се идентифицира този специфичен тип UVCB вещество. Същият подход обаче може да се приложи за други

вещества, получени от подобни източници като въглища.

Изходните материали, използвани в нефтената промишленост, може да са суров петрол или всеки специфичен продукт от пречистване, получен чрез един или повече процеси. Съставът на крайните продукти зависи от суровия петрол, използван за производството (тъй като съставът на суровия петрол варира в зависимост от произхода му), и от последващите процеси на пречистване. Следователно има естествено вариране в състава на петролните вещества¹⁷, което не зависи от процесите.

1. Конвенция за именуване

За идентифицирането на петролни вещества се препоръчва да се посочи наименование според установената номенклатурна система²². Това наименование обикновено се състои от процеса на пречистване, източника и общия състав или характеристики. Ако веществото съдържа > 5 (т/т) процента от 4- до 6-членни кондензирани пръстенни ароматни въглеводороди, то тази информация следва да се включи в описанието. За петролни вещества с EINECS номер трябва да се използва наименованието, посочено в списъка на ЕС.

2. Идентификатори

Термините и определенията за идентифициране на петролни вещества обикновено включват източника на потока, процеса на пречистване, общия състав, въглеродното число, интервала на кипене или друга подходяща физична характеристика и преобладаващия въглеводороден тип²².

Трябва да се представят идентификационните параметри по REACH, Приложение IV, раздел 2. Отчита се, че петролните вещества се произвеждат така, че да удовлетворят спецификациите за изпълнение, а не спецификациите за състава. Следователно, за да се идентифицира петролният продукт колкото е възможно по-добре, характеристики като наименование, диапазон на дължината на въглеродната верига, точка на кипене, вискозитет, гранични стойности и други физични свойства обикновено са по-полезни, отколкото информацията за състава.

Въпреки че химичният състав не е първичният идентификатор за UVCB веществата, трябва да се посочат всички съставки в концентрация $\geq 10\%$, както и познатите съставки в концентрация $< 10\%$, а съставът следва да се опише общо, напр. диапазон на молекулното тегло, алифатни или ароматни, степен на дехидрогениране и друга съществена информация. Групите съставки, които не могат да бъдат идентифицирани поотделно, също следва да бъдат описани чрез същите параметри. Освен това всяка друга съставка с по-ниска концентрация, която има значение за класифицирането на веществата за опасност, трябва да бъде идентифицирана с наименование и типична концентрация.

4.3.2.3 Ензими

Ензимите най-често се получават чрез ферментация на микроорганизми, но понякога са с растителен или животински произход. Течните ензимни концентрати, получени при ферментацията или екстракцията и последващите стъпки на пречистване, включват освен вода, активния ензимен протеин и други съставки, съдържащи остатъчни вещества от ферментацията, т.е. протеини, пептиди, аминокиселини, въглехидрати, липиди и

²² US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Списък на кандидатите за химични вещества Допълнение I. Общи условия, обхващащи технологичните потоци за петролни рафинерии. US EPA, Служба за токсични вещества, Вашингтон, окръг Колумбия, 20460.

неорганични соли.

Ензимният протеин, заедно с други съставки, получени при процеси на ферментация или екстракция, но дехидратирани, които могат да бъдат отделени, но без да се повлияе на стабилността на ензимния протеин или да се измени неговия състав, следва да бъдат разглеждани като вещества за целите на идентификацията.

Обикновено веществото-ензим съдържа 10-80% (т/т) ензимен протеин. Другите съставки процентно варират и зависят от използваните при производството организми, средата за ферментация и операционните параметри на ферментационния процес, както и от приложеното по-нататък пречистване, а съставът обикновено ще бъде в границите на посочените в следващата таблица интервали.

Активен ензимен протеин	10-80%
Други протеини + пептиди и аминокиселини	5-55 %
Въглехидрати	3-40 %
Липиди	0-5 %
Неорганични соли	1-45 %
Общо	100%

Веществото-ензим следва да бъде разглеждано като „UVCB вещество“ поради своя променлив и частично известен състав. Ензимният протеин трябва да бъде разглеждан като съставка на UVCB веществото. Пречистените (до висока степен) ензими могат да бъдат идентифицирани като вещества с добре дефиниран състав (еднокомпонентни или вещества, включващи повече съставки) и следва да бъдат идентифицирани съобразно с това.

В EINECS основният идентификатор за ензими е каталитичната активност. Ензимите са посочени там в общи точки без допълнително специфициране или в специфични точки, показващи изходния организъм или субстрата.

Примери		
ЕС номер	EINECS наименование	CAS номер
278-547-1	Протеиназа, <i>Bacillus neutral</i>	76774-43-1
278-588-5	Протеиназа, <i>Aspergillus neutral</i>	77000-13-6
254-453-6	Еластаза (свински панкреас)	39445-21-1
262-402-4	Мананаза	60748-69-8

Проучване при ензимите, извършено от Европейската комисия, предложи ензимите да се идентифицират съобразно международната система за ензимна номенклатура, IUBMB

(Международен съюз по биохимия и молекулярна биология).²³ Този подход е възприет в настоящото ръководство и ще позволи за по-систематично, подробно и разширено идентифициране на ензимите в сравнение с EINECS.

1. Конвенция за именуване

Ензимите се наименоуват в съответствие с насоките на номенклатурата на IUBMB

Класификационната система на IUBMB осигурява уникален четиризнаков номер за всеки вид ензим и каталитична функция (напр. 3.2.1.1 за α -амилаза)²⁴. Всеки номер може да съдържа ензими с различна последователност и произход на аминокиселини, но с идентична ензимна функционалност. Наименованието и номерът по номенклатурата на IUBMB следва да бъдат използвани при идентифицирането на веществото. Номенклатурата на IUBMB класифицира ензимите в шест основни групи:

- 1. Оксидоредуктази
- 2. Трансферази
- 3. Хидролази
- 4. Лиази
- 5. Изомерази
- 6. Лигази

Следващият пример се дава като илюстрация на гореописаното, в съответствие с номенклатурата на IUBMB:

ЕС 3.4.22.33

Прието наименование: плодов бромелаин

Реакция: Хидролиза на протеини с разширена специфичност при пептидните връзки. $Bz\text{-Phe-Val-Arg}^{\dagger}\text{NHMe}$ е добър синтетичен субстрат, но няма действието на $Z\text{-Arg-Arg-NHMe}$ (сравнете със ствол бромелин)

Други наименования: сок бромелин; ананаса; бромелаза; бромелин; екстраназа; сок бромелаин; пиназа; ананасов ензим; трауманаза; плодов бромелин FA2

Коментари: От растението ананас, *Ananas comosus*. Много слабо инхибиран от пилешки цистатин. Друга цистеин ендопептидаза, с подобно действие върху субстрати на молекули с малки размери, пингуинаин (преди ЕС 3.4.99.18), се получава от сродното растение, *Bromelia pinguin*, но пингуинаин се различава от плодовия бромелин по това, че се инхибира от пилешки цистатин [4].²⁵ В семейство пептидази C1²⁶ (папаиново семейство). Преди това ЕО 3.4.22.5 и включен в ЕС 3.4.22.4, CAS регистрационен номер: 9001-00-7

²³ UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Сборник информация за ензимите. Окончателен доклад. Сътрудничество между Федералната агенция за околната среда на Австрия и Междунниверситетския изследователски център за технологии, работа и култура (IFF/IFZ). Договор № В4-3040/2000/278245/MAR/E2.

²⁴ Термините „ЕС номер“ (\equiv номер Ензимната Комисия) и „IUBMB номер“ често се използват като синоними. За да се избегнат недоразуменията, е препоръчително да се използва терминът „IUBMB номер“ за четирицифрения код от IUBMB.

²⁵ Rowan, A.D., Buttle, D.J. and Barrett, A.J. Цистеиновата протеиназа от растението ананас. *Biochem. J.* 266 (1990) 869-875. [Medline UI: 90226288]

²⁶ <http://merops.sanger.ac.uk/cgi-bin/merops.cgi?id=c1>.

Връзки с други бази данни:

[BRENDA \(http://www.brenda-enzymes.org/\)](http://www.brenda-enzymes.org/)

[EXPASY \(http://enzyme.expasy.org/EC/3.4.22.33\)](http://enzyme.expasy.org/EC/3.4.22.33)

[MEROPS \(http://merops.sanger.ac.uk/index.shtml\)](http://merops.sanger.ac.uk/index.shtml)

Обща литература:

Sasaki, M., Kato, T. and Iida, S. Antigenic determinant common to four kinds of thiol proteases of plant origin. *J. Biochem. (Tokyo)* 74 (1973) 635-637. [PMID: 4127920]

Yamada, F., Takahashi, N. and Murachi, T. Purification and characterization of a proteinase from pineapple fruit, fruit bromelain FA2. *J. Biochem. (Tokyo)* 79 (1976) 1223-1234. [PMID: 956152]

Ota, S., Muta, E., Katanita, Y. and 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. [PMID: 4044551]

Примери за класифициране на ензими в съответствие със системата IUBMB
(<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>)

Протеазите са номерирани по следните критерии:

3.	Хидролази
3.4	Действащи върху пептидните връзки (пептидази), с подкласове:
3.4.1	α-амино-акил-пептид хидролази (сега в EC 3.4.11)
3.4.2	хидролази на пептидил-амино-киселини (сега в EC 3.4.17)
3.4.3	Дипептид хидролази (сега в EC 3.4.13)
3.4.4	Пептидил пептид хидролази (сега прекласифицирани в EC 3.4)
3.4.11	Аминопептидази
3.4.12	Пептидиламинокиселинни хидролази или акиламинокиселинни хидролази (сега прекласифицирани в 3.4)
3.4.13	Дипептидази
3.4.14	Дипептидил-пептидазии и трипептидил-пептидази
3.4.15	Пептидил-дипептидази
3.4.16	Серинов тип карбоксипептидази
3.4.17	Металокарбоксипептидази
3.4.18	Цистеинов тип карбоксипептидази

3.4.19	Омега пептидази
3.4.21	Серин ендопептидази
По-нататък са идентифицирани специфични ензими:	
3.4.21.1	химотрипсин
3.4.21.2	химотрипсин С
3.4.21.3	метридин
3.4.21.4	трипсин
3.4.21.5	тромбин
3.4.21.6	фактор на коагулация Ха
3.4.21.7	плазмин
3.4.21.8	сега обхванат от ЕС 3.4.21.34 и ЕС 3.4.21.35
3.4.21.9	ентеропептидаза
3.4.21.10	акрозин
3.4.21.11	сега обхванат от ЕС 3.4.21.36 и ЕС 3.4.21.37
3.4.21.12	12 а-литична ендопептидаза
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Ендопептидази с неизвестен каталитичен механизъм

Примери от EINECS с добавен IUBMB номер

ЕС номер	EINECS наименование	CAS номер	IUBMB номер
278-547-1	Протеиназа, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Субтилизин	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Целулаза	9012-54-8	3.2.1.4

2. Идентификатори

Ензимните вещества се идентифицират по съдържанието на ензимен протеин (IUBMB номенклатура) и другите съставки от ферментацията. Освен ензимния протеин, обикновено всички специфични съставки присъстват в концентрации, ненадвишаващи 1%. Ако не е известна идентичността на всички тези съставки, те могат да бъдат показани по групов подход (т.е. протеини, пептиди, аминокиселини, въглеhidрати, липиди и неорганични соли). Въпреки това отделните съставки трябва да бъдат посочени, ако идентичността им е известна или ако техните концентрации се равняват на или надвишават 10%, или ако са подходящи за класификацията и етикетирването и/или PBT оценка²⁷.

Ензимни протеини

Ензимните протеини в концентрата трябва да бъдат идентифицирани чрез:

- IUBMB номер
- Наименования по IUBMB (систематично наименование, ензимни наименования, синоними)
- Коментари на IUBMB
- Реакция и тип на реакцията
- ЕС номер и наименование, ако е подходящо
- CAS номер и наименование, ако има налично

Трябва да бъде конкретизирана реакцията, предизвикана от ензима. Тази реакция е дефинирана от IUBMB.

Пример

'алфа'-амилаза: Полизахарид, съдържащ .алфа.-(1-4)-свързани глюкозни единици + H₂O = малтоолигозахариди; ендохидролиза на 1,4-.алфа.-d-глюкозидни връзки в полизахариди, съдържащи три или повече 1,4-.алфа.-свързани d-глюкозни единици.

Съгласно ензимния клас, трябва да бъде определен типът на реакцията. Тя може да бъде наименована като оксидиране, редукция, изхвърляне, добавяне или взаимодействие.

Пример

'алфа'-амилаза: O-гликозилна връзка при хидролиза (ендохидролиза).

Съставки, различни от ензимния протеин

Всички съставни части $\geq 10\%$ (т/т) или подходящи за класифицирането и етикетирването и/или за PBT оценката²⁸ трябва да бъдат идентифицирани. Идентичността на съставките, по-малки от 10%, може да бъде посочена като химична група. Тяхната(Техните) типична(и) концентрация(и) или концентрационни диапазони трябва също да бъдат

²⁷ Повече информация за PBT оценката и съответните критерии може да бъде намерена в Ръководството относно изискванията за информация и оценката на безопасността на химичните вещества, глава R11: PBT оценка.

²⁸ Повече информация за PBT оценка и съответните концентрационни диапазони може да бъде намерена в RIP 3.2 Ръководство за оценка на безопасността на химичното вещество, раздела за PBT оценка.

представени, т.е.:

- (Глико)протеини
- Пептиди и аминокиселини
- Въглехидрати
- Липиди
- Неорганични материали (напр. натриев хлорид или други неорганични соли)

Ако идентифицирането в достатъчна степен на другите съставки на един ензимен концентрат не е възможно, трябва да бъде посочено наименованието на организма за производството му (род и вид или генетичен тип, ако е подходящ), както при другите UVCB вещества с биологичен произход.

Ако са налични могат да се дадат допълнителни параметри, напр. функционални параметри (т.е. рН или оптимална температура и диапазони), кинетични параметри (т.е. специфична дейност или номер на оборот), лиганди, субстрати и продукти и ко-фактори.

5. Критерии за проверка дали веществата са еднакви

Когато се проверява дали веществата от различни производители/вносители могат да бъдат разглеждани като едни и същи, трябва да се спазват някои правила. Тези правила, които са приложени за създаване на EINECS, следва да се разглеждат като една обща база за идентифициране и именуване на вещество и по този начин за намиране на потенциални сърегистранти на това конкретно вещество^{5, 6, 16, 29, 30}. Вещества, които не се разглеждат като еднакви, обаче, могат да се считат за структурно свързани с прилагането на експертна оценка. Обменът на данни за тези вещества е възможен, ако това се обоснове научно. Това обаче не е обект на настоящото ръководство, а ще бъде разгледано в *Ръководството за обмен на данни*.

- Трябва да се прилага правилото " $\geq 80\%$ " за еднокомпонентни вещества, както и определението за вещества, включващи повече съставки.

Не се прави разграничение между технически, чисти или чисти за анализ вещества. Това означава, че „едно и също“ вещество може да има различна чистота/профил на примесите в зависимост от класа си. Ясно определените вещества обикновено съдържат основната(ите) съставка(и), единствено позволените примеси, получени при производствения процес (за подробности вж. глава 4.2), и добавки, които са необходими за стабилизиране на веществото.

- Хидратите и безводните форми (анхидритите) на съединения се разглеждат като едно и също вещество.

Примери			
Име и формула	CAS номер	ЕС номер	Правило
Меден сулфат (Cu·H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Медна (2+) сол на сяряната киселина (1:1), пентахидрат (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Това вещество е обхванато от регистрацията на неговата анхидридна форма (ЕС номер: 231-847-6)

Хидратните и анхидритни форми имат различни химични наименования и различни CAS номера.

- Киселините или основите и техните соли следва да се разглеждат като различни вещества.

²⁹ Vollmer et al. (1998) Сборник, съставен от EINECS: Описания и определения, използвани за вещества, примеси и смеси. Tox Env Chem Том 65, стр. 113-122.

³⁰ Наръчник на решения, критерии за отчитане на вещества за EINECS, уебсайт на ECB; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
201-186-8	Пероцетна киселина $C_2H_4O_3$	Това вещество не трябва да се разглежда като едно и също, напр. с неговата натриева сол (EINECS 220-624-9)
220-624-9	Натриев гликолат $C_2H_4O_3 \cdot Na$	Това вещество не трябва да се разглежда като едно и също със съответната му киселина (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-хлоранилин C_6H_6ClN	Това вещество не трябва да се разглежда като едно и също, напр. с бензенамин, 2-хлоранилин, хидробромид (1:1) ($C_6H_6ClN \cdot HBr$)

- Отделните соли (напр. на натрия или калия) се разглеждат като различни вещества.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
208-534-8	Натриев бензоат $C_7H_5O_2 \cdot Na$	Това вещество не трябва да се разглежда като едно и също, напр. с калиевата сол (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Калиев бензоат $C_7H_5O_2 \cdot K$	Това вещество не трябва да се разглежда като едно и също, напр. с натриевата сол (EINECS 208-534-8)

- Разклонени или линейни алкилни вериги се разглеждат като различни вещества.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
295-083-5	Фосфорна киселина, дипентилев естер, разклонен и линеен	Това вещество не трябва да се разглежда като едно и също с отделните вещества фосфорна киселина, дипентилев естер, разклонен или фосфорна киселина, n-дипентилев естер, линеен

- Разклонените групи следва да се споменават като такива в наименованието. Вещества, съдържащи алкилни групи без всякаква допълнителна информация обхващат само неразклонени линейни вериги, освен ако не е упоменато друго.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
306-791-1	Масни киселини, C12-16	Само вещества с линейни и неразклонени алкилни групи се разглеждат като едно и също вещество
279-420-3	Алкохоли, C12-14	
288-454-8	Амини, C12-18-алкилметил	

- Вещества с алкилни групи, които използват допълнителни термини като изо-, нео-, разклонени, и т.н., не се разглеждат като едни и същи с веществата без тази специфика.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
266-944-2	Глицериди, C ₁₂₋₁₈ Това вещество е идентифицирано от Асоциацията на производителите на детергенти и повърхностноактивни вещества (SDA) под наименование: C12-18 триалкил глицерид и SDA отчетен номер : 16-001-00	Това вещество не трябва да се счита за същото като C _{12-18-iso} Вещество с наситени алкилни вериги, което е разклонено на всяка позиция

- Ако не е посочено изрично, алкилните вериги в киселини или алкохоли и т.н. се разглеждат като представящи само наситените вериги. Ненаситените вериги следва да се определят като такива и да се разглеждат като различни вещества.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
200-313-4	Стеаринова киселина, чиста C18H36O2	Това вещество не трябва да се разглежда като едно и също с олеинова киселина, чиста C18H34O2 (EINECS 204-007-1)

- Вещества с хирални центрове

Вещество с един стереоцентър може да съществува в ляво- и дясно-въртяща форма (енантиомери). Ако не е посочено обратното се приема, че веществото е равна (рацемична) смес от двете форми.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
201-154-3	2-хлоропропан-1-ол	Отделният енантиомер (R)-2-хлоропропан-1-ол и (S)-2-хлоропропан-1-ол не се разглеждат като еднакви с това вписване.

Рацематите се считат за вещества, включващи повече съставки. Когато веществото е обогатено с една енантиомерна форма, за него се прилагат правилата за еднокомпонентни вещества или за вещества, включващи повече съставки, т.е. в зависимост от концентрационните диапазони на изомерите, веществото е еднокомпонентно или с повече съставки.

Вещества с множество стереоцентрове могат да съществуват в 2^n форми (където n е броят на стереоцентровете). Тези различни форми могат да се различават помежду си по физико-химични, токсикологични и/или екотоксикологични свойства. Те следва да се разглеждат като различни вещества.

- Неорганични катализатори

Неорганичните катализатори се разглеждат като смеси. За целите на идентифицирането, металните съставки или металните съединения трябва да бъдат разглеждани като отделни вещества (без спецификация за употреба).

Примери		
	Име	Правило
	Катализатор кобалтов оксид-алуминиев оксид	Трябва да са идентифицирани самостоятелно като: - Кобалт II оксид - Кобалт III оксид - Алуминиев оксид - Алуминиевокобалтов оксид

- Ензимните концентрати с един и същи IUBMB номер може да се считат за едно и също вещество, въпреки използването на различен произвеждащ организъм, при условие, че опасните свойства не се различават значително и гарантират същата класификация.

Вещества, включващи повече съставки

Директива 67/548/ЕИО регулира пускането на вещества на пазара. Начинът на производство на веществото не се разглежда. Следователно едно търговско вещество, включващо повече съставки, се обхваща от EINECS, ако *всички* отделни съставки са в списъка EINECS; напр. изомерната смес на дифлуорбензени се обхваща от вписванията в EINECS за 1,2-дифлуорбензен (206-680-7), 1,3-дифлуорбензен (206-746-5) и 1,4-дифлуорбензен (208-742-9), въпреки че самата изомерна смес не е включена в списъка EINECS.

Вместо това REACH изисква регистрацията на произведените вещества. Установяването до каква степен различните стъпки на производство на веществото са обхванати от определението за „произвеждане“ (напр. различните стъпки на пречистване или дестилация) е решение, което се взема за всеки отделен случай. Ако е произведено вещество, включващо повече съставки, то трябва да се регистрира (освен ако не е обхванато от регистрацията на отделните съставки, вж. глава 4.2.2.4); напр. произведена е изомерна смес на дифлуорбензен, следователно „дифлуорбензенът“ като изомерна смес трябва да се регистрира. За вещества, включващи повече съставки, обаче няма нужда да се изпитва веществото като такова, ако профилът на опасност на веществото може да бъде достатъчно добре описан от информацията за отделните съставки. Ако са произведени отделно изомерите 1,2-дифлуорбензен, 1,3-дифлуорбензен и 1,4-дифлуорбензен и след това са смесени, отделните изомери трябва да се регистрират, а изомерната смес се разглежда като смес.

Едно вещество, включващо повече съставки, с основни съставки А, В и С не се разглежда като идентично с вещество, включващо повече съставки, с основни съставки А и В или като смес от А, В, С и D.

- Едно вещество, включващо повече съставки, не се разглежда като еднакво с вещество, само с един подклас от отделни съставки.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
207-205-6	2,5-дифлуорбензен	Тези две вещества не се разглеждат като еднакви с изомерната смес на дифлуорбензени, защото двете вещества са само подклас на всички възможни изомери.
207-211-9	2,4-дифлуорбензен	

- Регистрацията на едно вещество, включващо повече съставки, не обхваща отделните съставки.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
208-747-6	1,2-диброметилен	Това вещество описва смес от цис- и транс- изомери. Отделните вещества (1Z)-1,2-диброметен и (1E)-1,2-диброметен не са обхванати от регистрацията на тази изомерна смес.

UVCB вещества

- UVCB вещество с тесен диапазон на разпределение на съставките не се разглежда като идентично с вещество, включващо повече съставки, с по-широк диапазон на състава и обратно.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
288-450-6	Амини, C12-18-алкил, ацетати	Веществата „амини, C12-14-алкил, ацетати“ или „амини, C12-20-алкил, ацетати“ или „амини, додецил (C12-алкил), ацетати“ или вещества само с четен брой въглеродни атоми в алкилните вериги не се разглеждат като идентични с това вещество

- Вещество, характеризирано по вид/род, не се разглежда като идентично с вещество, изолирано от други видове/родове.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
296-286-1	Глицериди, слънчогледово масло ди-	Това вещество не се разглежда като едно и също с Глицериди, соя ди- (EINECS: 271-386-8), нито като едно и също с Глицериди, лой ди- (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Ленено масло, епоксидирано	Това вещество не се разглежда като едно и също с ленено масло, окислено (EINECS: 272-038-8), нито като едно и също с ленено масло, малеатирано (EINECS: 268-897-3), нито като рициново масло, епоксидирано (не е посочено в EINECS).

- Пречистеният екстракт или концентрат се разглежда като вещество, различно от екстракта.

Примери		
ЕС номер	Име	Правило
232-299-0	Рапично масло Екстракти и физично модифицирани производни. Състои се най- вече от глицериди на мастните киселини: ерусова, линолова и олеинова. (<i>Brassica napus</i> , <i>Cruciferae</i>)	Веществото „(Z)-докос-13-енова киселина (ерусова киселина)“ е съставка на веществото „рапично масло“. Ерусовата киселина не се счита за идентична с рапичното масло, защото е изолирана като чисто вещество от рапично масло. Тя си има свой номер в EINECS (204-011-3). Изолирана смес от палмитинова киселина, олеинова киселина, линолова киселина, линоленова киселина, ерусова киселина и ейкосенова киселина, не се разглежда като идентична с рапичното масло, защото съставките не представляват цялото масло.

6. Идентичност на веществото в рамките на запитването

Насоки за това, как да се идентифицират и именуват веществата, са посочени в глава 4 на настоящото ръководство. Настоящото ръководство трябва да бъде следвано при определянето дали веществата могат да се разглеждат като идентични за целите на REACH и CLP. Тази тема е допълнително развита по-надолу при запитването за вещества.

Съгласно член 4 всеки производител или вносител може, запазвайки пълна отговорност по отношение изпълнение на задълженията си по Регламента REACH, да наеме представител (трета страна) за всички процедури по раздел III, включително обсъждането с други производители или вносители.

За всички вещества потенциалният регистрант има задължението да проучи в Агенцията преди регистрацията дали има вече подадена регистрация за същото вещество (член 26 на REACH). Това запитване съдържа:

- идентичност на потенциалния регистрант, както е посочено в раздел 1 на Приложение VI на Регламента REACH, с изключение на местата за употреба;
- идентичността на веществото, както е посочено в раздел 2 от Приложение IV на Регламента REACH;
- кое от изискванията за информация ще изисква нови изследвания върху гръбначни животни, които потенциалният регистрант да извърши;
- кое от изискванията за информация ще изисква други нови изследвания, които потенциалният регистрант да извърши.

Потенциалният регистрант подава информация за идентичността и наименованието на веществата в съответствие с правилата, посочени в глава 4 на настоящото ръководство.

Агенцията трябва да установи дали същото вещество е било регистрирано преди. Това също се прави като се прилагат правилата, посочени в глава 4 на настоящото ръководство. Резултатът се съобщава на потенциалния регистрант и на предишния или други потенциални регистранти.

Повече информация относно процеса на запитване може да бъде намерена в *Ръководство за обмен на данни* и на специализираната уеб страница на ECHA:

<https://www.echa.europa.eu/web/guest/regulations/reach/registration/data-sharing/inquiry>.

7. Примери

Примерите, посочени на следващите страници, имат за цел единствено да илюстрират как потребителят може да работи с насоките, посочени в настоящото ръководство. Те не представляват прецедент, касаещ задълженията по REACH.

Включени са следните примери:

- „Диетил пероксидикарбонат“ е пример за еднокомпонентно вещество, което включва разтворител, който служи също и като стабилизиращ агент (вж. глава 7.1);
- „Золимидин“ е пример за вещество, което може да се идентифицира като еднокомпонентно или вещество, включващо повече съставки (вж. глава 7.2);
- „Смес от изомери“, образувана по време на производствена реакция, е включена като пример за вещество, включващо повече съставки (вж. глава 7.3). Това вещество преди бе обхванато от вписвания в EINECS на отделни изомери;
- „Аромат АН“ е пример за вещество, произведено в различни количества, което може да се опише чрез смес от пет съставки с концентрационни интервали (вж. глава 7.4). Това също е пример за обосновано отклонение от праговете за „80%“ и „10%“;
- Неметални „минерали“, включително монтморилонит като пример за ясно определено вещество, което изисква допълнително физично характеризирание, са включени в глава 7.5;
- „Етерично масло от лавандула“ е пример за UVCB вещество, получено от растения (глава 7.6);
- „Масло от хризантема и изомери, изолирани от него“ е пример за UVCB вещество от биологичен произход, което се обработва по-нататък (глава 7.7);
- „Фенол, изопропилиран, фосфат“ е пример за променливо UVCB вещество, което не може да бъде дефинирано напълно (глава 7.8);
- „Четвъртични амониеви съединения“ са примери за вещества с променлива дължина на въглеродната верига (глава 7.9);
- Два примера за „петролни вещества“, бензин с добавки и газьол, са включени в глава 7.10;
- Два примера за това, как се идентифицират ензими, лаказа и амилаза, са посочени в глава 7.11.

7.1. Диетил пероксидикарбонат

Веществото „диетил пероксидикарбонат“ (ЕС 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) се получава като 18% разтвор в изододекан (ЕС 250-816-8, CAS 31807-55-3). Изододеканът действа също и като стабилизиращ агент срещу експлозивните му свойства. Най-високата възможна концентрация, която гарантира безопасна работа с веществото, е 27% разтвор.

Как трябва гореописаното вещество да се идентифицира и именува за целите на регистрацията?

Според определението за вещество в REACH, се изключат разтворителите, които могат да се отделят, без да се промени стабилността или състава на веществото. Поради това, че в посочения случай изододеканът действа също и като стабилизиращ агент и не може напълно да се отдели поради експлозивността на веществото, той следва да се разглежда като добавка, а не само като разтворител. Веществото обаче следва да се разглежда като еднокомпонентно. Следователно веществото трябва да се регистрира като разтвор с най-високата възможна концентрация, която гарантира безопасно боравене:

Диетил пероксикарбонат (горна пределна концентрация: 27%). Изододеканът трябва да бъде посочен в „Добавки“ и трябва да бъде уточнена стабилизиращата му функция.

7.2. ЗОЛИМИДИН

Произвежданият метанолов разтвор съдържа „золиимидин“ (ЕС 214-947-4; CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) и „имидазол“ (ЕС 206-019-2; CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). След отстраняване на разтворителя „метанол“ и оптимизиране на производствения процес, веществото все още е в диапазон на чистота 74-86% золиимидин и 4-12% имидазол.

Как трябва гореописаното вещество да се идентифицира и именува за целите на регистрацията?

Според определението за вещество в REACH, се изключат разтворителите, които могат да се отделят, без да се промени стабилността или състава на веществото. Както в горепосочения пример, метанолът може да се отдели без никакви трудности; веществото без разтворителя следва да се регистрира.

Най-общо едно вещество се счита за еднокомпонентно, ако една основна съставка присъства в количество $\geq 80\%$. Едно вещество се счита за вещество, включващо повече съставки, ако повече от една основна съставка е $\geq 10\%$ и $< 80\%$. Горният пример е граничен случай, защото праговите стойности са кръстосани. Следователно веществото може да се разглежда като еднокомпонентно - „золиимидин“ или като вещество, включващо повече съставки — смес от „золиимидин“ и „имидазол“.

При такъв граничен случай могат да се използват типичните концентрации на основните съставки на веществото, за да се реши как най-добре да се опише то, както следва:

- (1) Ако типичната концентрация на „золиимидин“ е 77%, а на имидазол — 11%, препоръчва се веществото да се разглежда като смес от золиимидин и имидазол;
- (2) Ако типичната концентрация на „золиимидин“ е 85%, а на имидазол — 5%, препоръчва се веществото да се разглежда като еднокомпонентно вещество „золиимидин“;

7.3. Смес от изомери

Веществото е смес (реакционна маса) от два изомера, образувани при производствена реакция. Отделните изомери са отчетени за EINECS. Директива 67/548/ЕИО регулира пускането на вещества на пазара. Поради това че начинът на производство на веществото не е от значение, сместа е обхваната в EINECS от вписванията на двата отделни изомера. REACH изисква регистрацията на произведените вещества. Но решение за това, до каква степен различните етапи от производството на веществото се обхващат от определението за „производство“ следва да се взима за всеки отделен случай. Ако изомерната смес е регистрирана като вещество, включващо повече съставки (следвайки насоките на глава 4.2.2), няма нужда да се изпитва веществото като такова при условие, че профилът на риска му може достатъчно добре да се опише чрез информацията за отделните съставки.

1. Наименование и други идентификатори

Примери	
IUPAC наименование или други международни химични наименования (на веществото)	Реакционна маса от 2,2'-[[[4-метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол и 2,2'-[[[5-метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол
Други наименования (на веществото)	2,2'-[[[метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол Реакционна маса от етанол, 2,2'-[[[метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино] бис- и вода Етанол, 2,2'-[[[метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бис- (9CI) изомерно съединение
ЕС номер (на веществото) Наименование на ЕС Описание на ЕС	Не съществува ЕС номер за веществото, тъй като сместа от изомери не е докладвана за EINECS. Но веществото е било обхванато от EINECS посредством съставките (279-502-9, 279-501-3).
CAS номер (на веществото) CAS наименование	Не е налично Не е налично
ЕС номер (съставка А) Наименование на ЕС Описание на ЕС	279-502-9 2,2'-[[[4-метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол /
ЕС номер (съставка В) Наименование на ЕС Описание на ЕС	279-501-3 2,2'-[[[5-метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол /
CAS номер (съставка А) CAS наименование	80584-89-0 Етанол, 2,2'-[[[4-метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бис-
CAS-номер (съставка В) CAS наименование	80584-88-9 Етанол, 2,2'-[[[5-метил-1H-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бис-
Друг идентификационен код Литература	ENCS номер 5-5917

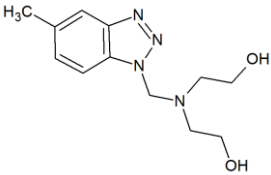
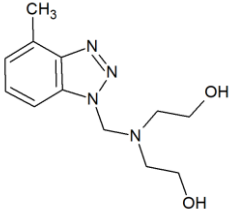
2. Информация за състава — основни съставки

Основни съставки						
	Наименование по IUPAC	CAS номер	ЕС номер	Молекулна формула Метод на Хил	Типична концентр. (% т/т)	Концентр. диапазон (%т/т)
A	Етанол, 2,2'-[[[4-метил-1Н-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бис-	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	Етанол, 2,2'-[[[5-метил-1Н-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бис-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Основни съставки	
	Други наименования
A	2,2'-[[[4-метил-1Н-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол
B	2,2'-[[[5-метил-1Н-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол

Основни съставки		
	Наименование на ЕС	Описание на ЕС
A	2,2'-[[[4-метил-1Н-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол	/
B	2,2'-[[[5-метил-1Н-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бисетанол	/

Основни съставки		
	CAS наименование	CAS номер
A	Етанол, 2,2'-[[[4-метил-1Н-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бис-	80584-89-0
B	Етанол, 2,2'-[[[4-метил-1Н-бензотриазол-1-ил)метил]имино]бис-	80584-88-9

Основни съставки			
	Молекулната формула при CAS метод	Структурна формула	SMILES код
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Основни съставки		
	Молекулно тегло [g mol ⁻¹]	Диапазон на молекулното тегло
A	250	/
B	250	/

7.4. Аромат АН

Аромат АН се състои от гама (изо-алфа) метил йонон и неговите изомери. Произвежда се в три различни качества (качество А, В и С), които се различават по съотношението на изомерите.

Следващата таблица дава представа за състава на различните качества.

Състав на различните качества на аромат АН				
Концентрационен диапазон [%]	Качество А	Качество В	Качество С	Общи диапазони
гама (изо-алфа) метил йонон	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
делта (изо-бета) метил йонон	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
алфа п-метил йонон	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
гама п-метил йонон	0,5 – 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 – 4
бета п-метил йонон	0,5 – 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5 - 15
псевдо метил йонони	0,5 – 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 – 3

Има няколко възможности за идентифициране на веществото:

- Качество А съдържа най-малко 80 % от гама (изо-алфа) метил йонон изомер и следователно може да се разглежда като еднокомпонентно вещество, основано на гама (изо-алфа) метил йонон изомер, а другите изомери са примеси.
- Качества В и С съдържат по-малко от 80 % гама (изо-алфа) метил йонон изомер и $\geq 10\%$ други изомери. Следователно могат да се разглеждат като вещества, включващи повече съставки, :
 - Качество В: е реакционна маса от гама (изоалфа) метил йонон (65-75 %) и алфа-п-метил йонон (10-20 %), а другите изомери са примеси.
 - Качество С: е реакционна маса от гама (изоалфа) метил йонон (50-60 %) и алфа-п-метил йонон (20-30 %), а другите изомери са примеси.

Съставът варира и понякога един изомер присъства в количество $\geq 10\%$ (следователно се нарича основна съставка), а понякога $< 10\%$ (следователно обикновено се нарича примес).

Възможно е различните качества да се регистрират поотделно. Това означава три регистрации. Но може да се обоснове регистрацията тип „read-across“ на данни.

Като алтернатива може да се прецени следното:

- Една регистрация като еднокомпонентно вещество с две подкачества. В този случай подкачествата се отклоняват от правилото за 80 % (вж. глава 4.2.1);
- Една регистрация като дефинирана реакционна смес от 5 изомера (вещество, включващо повече съставки,). В този случай някои изомери (основни съставки) се отклоняват от прага за 10 %, което разграничава основните съставки от примесите (вж. глава 4.2.2).
- Една регистрация като дефинирана реакционна смес, където променливостта на състава е обхваната от пълния интервал за всеки изомер.

Може да е важно да се отбележи, че:

- Трите качества имат еднакви или много подобни физико-химични характеристики.
- Трите качества имат подобна употреба и сценарии на експозиция.
- Всички качества имат еднакво класифициране и етикетиране за опасност, а съдържанията на информационните листове за безопасност и докладите за безопасност са идентични.
- Наличните данни от изпитванията (и бъдещите изпитвания) покриват променливостта на трите качества.

В този пример е описано идентифицирането на веществото като дефинирана реакционна смес от 5 изомера (вещество, включващо повече съставки,). Необходима е обосновка, защото има отклонение от прага за 80 % (вж. глава 4.2.1) и от прага за 10 % (определение за вещество с повече съставки, вж. глава 4.2.2). Поради това, че всяко качество се произвежда като такова, в регистрационното досие следва да се конкретизира съставът на всяко от трите качества. В нормално състояние обаче може да са необходими поне две регистрации: (1) гама (изо-алфа) метил йонон и (2) реакционна маса от гама (изо-алфа) метил йонон и алфа-п-метил йонон.

Идентифициране на веществото

Аромат АН се произвежда в три различни качества (А, В и С) с еднакъв качествен, но различен количествен състав. И трите качества се описват в едно регистрационно досие за вещество, включващо повече съставки. Въпреки че това означава, че определението не се прилага строго, регистрацията като вещество, включващо повече съставки, е обоснована, защото (1) наличните данни от изпитвания покриват променливостта на трите качества, (2) трите качества имат много подобни физико-химични характеристики, (3) всички качества имат едно и същ класифициране и етикетиране за опасност (следователно информационните листове за безопасност са идентични) и (4) трите качества имат подобна употреба и сценарии на експозиция (следователно и подобни доклади за химична безопасност).

1. Наименование и други идентификатори

Наименование по IUPAC или друго международно химично наименование	Реакционна маса на 3-метил-4-(2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил)бут-3-ен-2-он; 3-метил-4-(2,6,6-триметил-1-циклохексен-1-ил)бут-3-ен-2-он; [R-(E)]-1-(2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил)пент-1-ен-3-он; 1-(6,6-метил-2-метиленциклохекс-1-ил)пент-1-ен-3-он; 1-(2,6,6-триметил-1-циклохексен-1-ил)пент-1-ен-3-он;
Други наименования	Метил йонон гама качество А Метил йонон гама качество В Метил йонон гама качество С
ЕС номер Наименование на ЕС Описание на ЕС	Не е налично / /
CAS номер CAS наименование	Не е налично /

2. Информация за състава — основни съставки

На теория са възможни допълнителни енантиомери. Въпреки това обаче са анализирани следните изомери:

Основни съставки						
	Наименование по IUPAC	CAS номер	ЕС номер	Молекулна формула Метод на Хил	Макс концентр. (%т/т)	Макс концентр. (% т/т)
А.	3-метил-4-(2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил)бут-3-ен-2-он	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
Б.	3-метил-4-(2,6,6-триметил-1-циклохексен-1-ил)бут-3-ен-2-он;	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10

В.	[R-(E)]-1-(2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил)пент-1-ен-3-он	127-42-4	204-842-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	30
Г.	1-(6,6-метил-2-метиленциклохекс-1-ил)пент-1-ен-3-он	Не е налично	Не е налично	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	4
Д.	1-(2,6,6-триметил-1-циклохексен-1-ил)пент-1-ен-3-он	127-43-5	204-843-7	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	15

Основни съставки

Други наименования

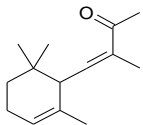
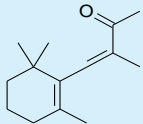
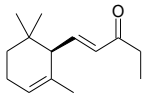
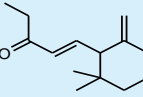
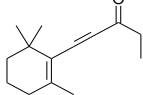
А.	алфа-изо-метил йонон; гама метил йонон
Б.	бета-изо-метил йонон; делта метил йонон
В.	алфа-п-метил йонон
Г.	гама-п-метил йонон
Д.	бета-п-метил йонон

Основни съставки

Наименование на ЕС		Описание на ЕС
А.	3-метил-4-(2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил)-3-бутен-2-он	/
Б.	3-метил-4-(2,6,6-триметил-1-циклохексен-1-ил)-3-бутен-2-он	/
В.	[R-(E)]-1-(2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил)пент-1-ен-3-он	/
Г.	1-(2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил)пент-1-ен-3-он	/
Д.	1-(2,6,6-триметил-1-циклохексен-1-ил)пент-1-ен-3-он	/

Основни съставки		
	CAS наименование	CAS номер
А.	3-бутен-2-он, 3-метил-4-(2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил)-	127-51-5
Б.	3-бутен-2-он, 3-метил-4-(2,6,6-триметил-1-циклохексен-1-ил)-	79-89-0
В.	1-пентен-3-он, 1-[(1R)-2,6,6-триметил-2-циклохексен-1-ил]-, (1E)-	127-42-4
Г.	Не е налично	Не е налично
Д.	1-пентен-3-он, 1-(2,6,6-триметил-1-циклохексен-1-ил)-	127-43-5

Основни съставки		
	Друг идентификационен код	Литература
А.	2714 07.036	FEMA Регистър на аромати на ЕС
Б.	07.041	Регистър на аромати на ЕС
В.	2711 07.009	FEMA Регистър на аромати на ЕС
Г.	Не е налично	Не е налично
Д.	2712 07.010	FEMA Регистър на аромати на ЕС

Основни съставки			
	Молекулна формула CAS метод	Структурна формула	SMILES код
А.	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
Б.	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
В.	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>
Г.	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem>
Д.	C ₁₄ H ₂₂ O		<chem>O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>

Основни съставки		
	Молекулно тегло /gmol ⁻¹	Диапазон на молекулното тегло
А.	206,33	/
Б.	206,33	/
В.	206,33	/
Г.	206,33	/
Д.	206,33	/

3. Информация за състава – примеси и добавки

Примеси						
	Наименование по IUPAC	CAS номер	ЕС номер	Молекулна формула	Типична концентр. (% т/т)	Концентр. диапазон (%т/т)
Е.						
брой неспецифицирани примеси: обща концентрация на неспецифицираните примеси:				11 (псевдо метил йони) 0,5 – 3 % т/т		
Добавки						
	Наименование по IUPAC	CAS номер	ЕС номер	Молекулна формула	Типична концентр. (% т/т)	Концентр. диапазон (%т/т)
Ж.	Бутилатен хидрокситолуен (ВНТ)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05 – 0,15

4. Информация за различните качества

По-долу са посочени интервалите на петте основни съставки на трите качества:

Концентрационен диапазон [%]	Качество А	Качество В	Качество С
гама (изо-алфа) метил йон	80 - 85	65 - 75	50 - 60
делта (изо-бета) метил йон	6 - 10	3 - 7	3 - 7
алфа п-метил йон	3 - 11	10 - 20	20 - 30
гама п-метил йон	0,5 – 1,5	2 - 4	2 - 4
бета п-метил йон	0,5 – 1,5	4 - 6	5 - 15
псевдо метил йони	0,5 – 1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Минерали

Един минерал се дефинира като комбинация от неорганични съставки така, както е намерен в земната кора, с характерен набор от химични състави, кристални форми (от силно изразена кристална структура до аморфна) и физико-химични свойства.

Минералите са освободени от регистрацията, ако отговарят на определението на вещество, което се среща в природата (*член 3, параграф 39* на REACH) и ако не са химически модифицирани (*член 3, параграф 40* на REACH). Това важи за минерали, химичната структура на които остава непроменена, дори ако е претърпяла химичен процес или обработка, или физична минералогична трансформация, например за отстраняване на примеси.

Докато някои минерали могат да се опишат по уникален начин чрез химичния им състав (вж. глава 4.2.1 и глава 4.2.2 за еднокомпонентни и вещества, включващи повече съставки), за други само химичният състав не е достатъчен, за да се идентифицират по уникален начин (вж. глава 4.2.3).

За разлика от други еднокомпонентни вещества или вещества, включващи повече съставки, идентифицирането на минералите трябва да се основава на химичния състав и на вътрешната структура (напр. както показва рентгеновата дифракция), защото те двете заедно представляват същността на минерала и определят неговите физико-химични свойства.

Подобно на другите вещества, включващи повече съставки, CAS номерът за минерали се използва като част от идентифицирането (т.е. комбинацията от неорганични съставки). CAS номерата на неорганичните съставки (така, както са дефинирани от систематичната минералогия) се използват за описване на различните съставки. Ако е била получена една отделна неорганична съставка (еднокомпонентно вещество), за идентифицирането на неорганичното вещество следва да се използва CAS номерът на това вещество. Например:

- Минералът Каолин (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) в основни линии е съставен от първични и вторични каолинити (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), което е хидратирана алуминосиликатна глина.

В случай че към каолинът се приложи процес на пречистване за получаване на отделен съставка на Каолон, напр. каолинити, то CAS-/EINECS номерът за веществото за регистриране е EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Минералът Бентонит (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), който е описан в EINECS като „Колоидна глина. Състои се главно от монтморилонит“, съдържа в голям процент от случаите неорганична съставка Монтморилонит (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), но не само.

В случай, че ще се произвежда чист Монтморилонит (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), то CAS номерът, който ще се използва за идентифициране на веществото, е на Монтморилонит.

Трябва да се подчертае, че Бентонит (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) и Монтморилонит (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), не се разглеждат като едно и също вещество.

В заключение, един минерал обикновено се именува според неговата неорганична съставка(и) в комбинация. Те могат да се разглеждат като еднокомпонентни или вещества, включващи повече съставки (общи насоки в глава 4.2.1 и 4.2.2). Някои минерали не могат да се опишат по уникален начин чрез химичния си състав, а изискват допълнително физическо характеризирание или параметри на обработване, за да бъдат идентифицирани достатъчно добре (вж. глава 4.2.3). В следващата таблица са посочени някои примери.

Примери за минерали

Име	CAS	EINECS	Допълнително описание
Кристобалит	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (кристална система: кубична/тетрагонална)
Кварц	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (кристална система: тригонална/хексагонална)
Кизелгур	61790-53-2	-	Познат също като диатомит, кизелгур и целит Описание: Меко силициево вещество в твърдо агрегатно състояние, съставено от скелети на малки праисторически водни растения. Съдържа най-вече силициев диоксид.
Доломит	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Минерали от фелдспаровата група	68476-25-5	270-666-7	Неорганично вещество, реакционен продукт на високотемпературно калциране, при което алуминиев оксид, бариев оксид, калциев оксид, магнезиев оксид, силициев оксид и стронциев оксид във вариращи количества са хомогенно и йонно дифундирани, за да образуват кристална матрица.
Талк	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Вермикулит	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)

Аналитична информация, изисквана за минералите

Елементен състав	Химичният състав дава обща представа за състава на минерала, независимо от броя на съставките и съотношенията им в него. По правило химичният състав се представя за оксиди.
Спектрални данни (XRD или еквивалентни)	XRD или други техники могат да идентифицират минерали по тяхната кристалографска структура. Характерните XRD или подходящите алтернативни данни, характеризиращи минерала, трябва да се дават заедно с кратко описание на аналитичния метод или библиографска справка.
Характерни физико-химични свойства	Минералите имат характерни физико-химични свойства, които дават възможност за пълното им идентифициране, например: <ul style="list-style-type: none">- Много ниска твърдост- Способност да набъбват- Форми на диатомит (оптичен микроскоп)- Много висока плътност- Площ на повърхността (азотна адсорбция)

7.6. Етерично масло от *Lavandin grosso*

Етеричните масла са вещества, които се получават от растения. Следователно етеричните масла могат също да се характеризират като ботанически получени вещества.

Ботанически получените вещества са сложни природни вещества, получени от обработка на растение или негови части посредством третиране, като екстракция, дестилация, пресоване, фракциониране, пречистване, концентрация или ферментация. Съставът на тези вещества варира в зависимост от рода, вида, условията на растеж и периода на реколтата на източниците и от приложените техники на обработка.

Етеричните масла могат да се идентифицират чрез основните си съставки, както е практиката за вещества, включващи повече съставки. Етеричните масла обаче могат да се състоят от няколко хиляди съставки, които могат да варират значително, в зависимост от редица фактори (например род, вид, условия на растеж, период на реколтата, използвана обработка). Следователно описанието само на основните съставки често не е достатъчно, за да се опишат тези UVCB вещества. Етеричните масла трябва да бъдат описвани чрез растението-източник и процеса на обработка, както е посочено в глава 4.3.1 (като се използва UVCB подтип 3).

В много случаи има промишлени стандарти за етерични масла (а за много от тях има и ISO-стандарти). Информацията за стандартите може да се посочи в допълнение. Но идентифицирането на веществото трябва да се основава на веществото, както е произведено.

Примерът, показан по-долу, описва „етерично масло от *Lavandin grosso*“, за което има ISO стандарт (ISO 8902-1999).

1. Наименования и други идентификатори

Източник

Видове	<i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
--------	---

Процес

Описание на (био)химичните реакционни процеси, използвани за производство на веществото:

Дестилация с водна пара на цветните връхчета от *Lavandula hybrida grosso* (Lamiaceae) и последващо отделяне на водата от етеричното масло;
Последващото отделяне е спонтанен физичен процес, който обикновено се извършва в сепаратор (т.н. „флорентинска колба“) и дава възможност за лесно изолиране на отделеното масло. Температурата при този етап на дестилационния процес е около 40°C.

Име

Наименование по IUPAC или друго международно химично наименование	Етерично масло от <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
ЕС номер Наименование на ЕС Описание на ЕС	297-385-2 Лавандула, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , екст. Екстракти и други физично модифицирани деривати като тинктури, конкрети, абсолюти, етерични масла, олеосмоли, терпени, фракции без терпени, дестилати, остатъци, и т.н., получени от <i>Lavandula hybrida grosso</i> Labiatae ³¹ .
CAS номер CAS наименование	93455-97-1 Лавандула, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , екст.

³¹ „Labiatae“ и „Lamiaceae“ са синоними.

2. Информация за състава – познати съставки

Известни съставки					
	Химично наименование ЕК CAS IUPAC други	Номер ЕК CAS	Мол. Формула Метод на Хил	Типична концентр. % (т/т)	Концентр. диапазон % (т/т)
A.	ЕК линалил ацетат CAS 1,6-октадиен-3-ол,3,7- диметил-, ацетат IUPAC 3,7-диметил окта-1,6-диен- 3-ил ацетат	ЕК 204-116-4 CAS 115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	33	28 – 38
Б.	ЕК линалил CAS 1,6-октадиен-3-ол,3,7- диметил- IUPAC 3,7-диметил окта-1,6-диен- 3-ол	ЕК 201-134-4 CAS 78-70-6	$C_{10}H_{18}O$	29,5	24 – 35
В.	ЕК Борнан-2-он CAS Бицикло[2.2.1]хептан-2-он, 1,7,7-Триметил- IUPAC 1,7,7- триметилбицикло[2,2,1]-2- хептанон Други камфор	ЕК 200-945-0 CAS 76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	7	6 – 8
Г.	ЕК Цинеол CAS 2-оксабицикло[2.2.2]октан, 1,3,3-триметил- IUPAC 1,3,3-триметил-2- оксабицикло[2.2.2]октан Други 1,8-цинеол	ЕК 207-431-5 CAS 470-82-6	$C_{10}H_{18}O$	5,5	4 – 7

Д.	<p>ЕС Р-мент-1-ен-4-ол</p> <p>CAS 3-циклохексен-1-ол, 4-метил- 1-(1-метилетил)-</p> <p>IUPAC 1-(1-метилетил)-4-метил-3-циклохексен-1-ол</p> <p>Други терпинен-4-ол</p>	<p>ЕК 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5–5
Е.	<p>ЕС 2-изопропенил-5-метилхекс-4-енил ацетат</p> <p>CAS4-хексен-1-ол, 5-метил-2-(1-метилетенил)-, ацетат</p> <p>IUPAC 2-(1-метилетенил)-5-метилхекс-4-ен-1-ол</p> <p>Друго (±)-лавандулол ацетат</p>	<p>ЕК 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5– 3
Ж.	<p>ЕС DL-борнеол</p> <p>CAS Бицикло[2.2.1]хептан-2-ол, 1,7,7-триметил-, (1R,2S,4R)-рел-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-рел-1,7,7-триметил бицикло[2.2.1]хептан-2-ол</p> <p>Други борнеол</p>	<p>ЕС 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5– 3
З.	<p>ЕС Кариофилен</p> <p>CAS Бицикло[7.2.0]ундек-4-ен,4,11,11-триметил-8-метилен-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-триметил-8-метилен бицикло[7.2.0]ундек-4-ен</p> <p>Друго Транс-бета-кариофилен</p>	<p>ЕС 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1– 2,5

И.	ЕС (E)-7,11-диметил-3-метилендодека-1,6,10-триен CAS 1,6,10-додекатриен,7,11-диметил-3-метилен-, (6E) IUPAC (E)-7,11-диметил-3-метилен-1,6,10-додекатриен Друго транс-бета-фарнесен	ЕС 242-582-0 CAS 18794-84-8	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2– 2
И.	ЕС (R)-p-мента-1,8-диен CAS Циклохексен, 1-метил-4-(1-метилетенил)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-метил-4-(1-метилетенил)циклохексен Друго лимонен	ЕК 227-813-5 CAS 5989-27-5	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5– 1,5
К.	ЕС 3,7-диметилוקта-1,3,6-триен CAS 1,3,6-октатриен,3,7-диметил- IUPAC 3,7-диметилукта-1,3,6-триен Друго Цис-бета-оцимен	ЕС 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5– 1,5

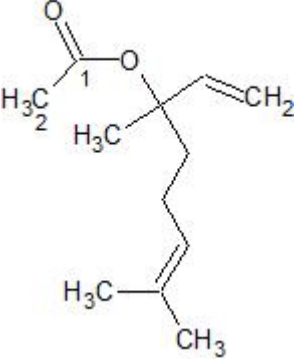
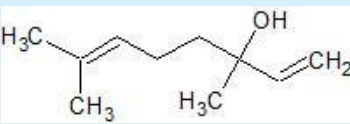
Известни съставки ≥ 10 %

Известни съставки		
	Наименование на ЕС	Описание на ЕС
А.	линалилов ацетат C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
Б.	линалил C ₁₀ H ₁₈ O	

Известни съставки

	CAS наименование	Свързани CAS номера
А.	линалилов ацетат C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
Б.	линалил C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Известни съставки

	Молекулна формула CAS метод	Структурна формула	SMILES код
А.	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
Б.	C ₁₀ H ₁₈ O		

Известни съставки

	Молекулно тегло	Диапазон на молекулното тегло
А.	196,2888	/
Б.	154,2516	/

7.7. Масло от хризантема и изомери, изолирани от него

Едно предприятие произвежда масло от хризантема, което се екстрактира след смачкване на цветове и листа от *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae (сложноцветно растение) с разтворител, съдържащ смес от вода/етанол (1:10). След екстракцията разтворителят се отстранява, и „чистият“ екстракт се пречиства, като в резултат се получава масло от хризантема.

В допълнение от екстракта са изолирани два изомера като реакционна маса от:

Жасмолин I

(Циклопропанкарбоксилна киселина, 2,2-диметил-3-(2-метил-1-пропенил)-, (1S)-2-метил-4-оксо-3-(2Z)-2-пентенил-2-циклопентен-1-ил естер, (1R,3R)-; CAS-номер 4466-14-2, и

Жасмолин II

(Циклопропанкарбоксилна киселина, 3-[(1E)-3- метокси-2-метил-3-оксо-1-пропенил]-2,2-диметил-,(1S)-2-метил-4-оксо-3-(2Z)-2-пентенил-2-циклопентен-1-ил естер, (1R,3R)-; CAS-номер 1172-63-0

Предприятието допълнително решава да синтезира също изомерната реакционна маса на жасмолин I и II.

Предприятието задава следните въпроси:

1. Как да идентифицира масло от хризантема за целите на регистрацията?
2. Реакционната маса от изолираните изомери жасмолин I и II обхваната ли е от регистрацията на маслото?
3. Може ли синтезираната смес от двата изомера да се разглежда като идентична със сместа от изомери, изолирани от маслото на хризантема?

1. Как да идентифицира масло от хризантема за целите на регистрацията?

Маслото от хризантема се разглежда като UVCB вещество, което не може да бъде достатъчно добре идентифицирано чрез химичния си състав (за подробни указания вж. глава 4.3). Важни са други идентификационни параметри като източник и процес. Маслото от хризантема е с биологична природа и следва да се идентифицира чрез вида и частта от организма, от който е получено, както и чрез процеса на пречистване (екстракция с разтворител). Въпреки това химичният състав и идентичност на съставките трябва да се посочат, доколкото са известни.

Следната информация се счита за необходима за идентифициране на веществото в достатъчна степен:

Наименование на веществото	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i>, Compositae; масло, получено от смачкани цветове и листа чрез екстракция с вода:етанол (1:10)
Източник	
Род, вид, подвид	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae

Части от растението, използвани за масло	Цветове и листа			
Процес				
Начин на производство	Смачкване, последвано от екстракция			
Използван разтворител за екстракцията	Вода:етанол (1:10)			
Информация за състава - известни съставки в % (т/т)				
Наименование на съставката	ЕС номер	CAS номер	Мин. %	Макс. %
Пиретрин I: 2-метил-4-оксо-3-(пента-2,4-диенил) циклопент-2-енил [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-хризантемат	204-455-8	121-21-1	30	38
Пиретрин II: 2-метил-4-оксо-3-(пента-2,4-диенил) циклопент-2-енил [1R-[1 α [S*(Z)], 3 β]]-3-(3-метокси-2-метил-3-оксопроп-1-енил) -2,2-диметилциклопропанкарбоксилат	204-462-6	121-29-9	27	35
Жасмолин I: 3-(бут-2-енил)-2-метил-4-оксоциклопент-2-енил 2,2-диметил-3-(2-метилпроп-1-енил) циклопропанкарбоксилат	246-948-0	25402-06-6	5	10
Цинерин II: 3-(бут-2-енил)-2-метил-4-оксоциклопент-2-енил-2,2-диметил-3-(3-метокси-2-метил-3-оксопроп-1-енил)циклопропан карбоксилат	204-454-2	121-20-0	8	15
Жасмолин I: 2-метил-4-оксо-3-(пент-2-енил)циклопент-2-енил [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-диметил-3-(2-метилпроп-1-енил)циклопропанкарбоксилат	няма	4466-14-2	4	10

Жасмолин II: 2-метил-4-оксо-3-(пент-2-енил)циклопент-2-ен-1-ил [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]- 2,2-диметил-3-(3-метокси-2-метил-3-оксопроп-1-енил)циклопропанкарбоксилат	няма	1172-63-0	4	10
Освен това веществото съдържа до 40 съставки в концентрации под 1 %.				

Някой може да реши да идентифицира веществото като добре дефинирано вещество, включващо повече съставки, със шест основни съставки (смес от пиретрин I, пиретрин II, цинерин I, цинерин II, жасмолин I и жасмолин II).

Веществото следва да се разглежда като „вещество, съществуващо в природата“, ако производственият процес е само „смачване“ и тогава се освобождава от регистрация, при условие, че отговаря на критериите за класифициране като опасно вещество, в съответствие с Директива 67/548/ЕИО.

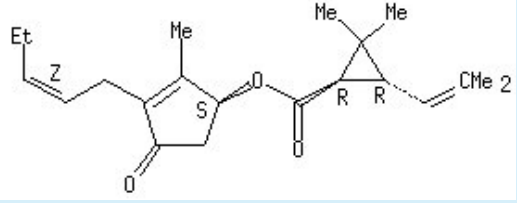
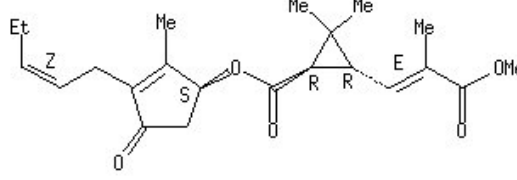
2. Реакционната маса от изолираните изомери жасмолин I и II обхваната ли е от регистрацията на маслото?

Реакционната маса от изолирани изомери жасмолин I и жасмолин II не е обхваната от регистрацията на „масло от *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae“, защото отделните съставки не са обхванати от цялото UVCB вещество и обратно. Реакционната маса от жасмолин I и жасмолин II се разглежда като различно вещество.

Реакционната маса от жасмолин I и жасмолин II може да се разглежда като вещество, включващо повече съставки (за подробни указания вж. глава 4.2.3) с две основни съставки.

Следната информация се счита за необходима за идентифициране на веществото в достатъчна степен:

IUPAC наименование на веществото	Реакционна маса на 2-метил-4-оксо-3-(пент-2-енил)циклопент-2-енил [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-диметил-3-(2-метилпроп-1-енил)циклопропанкарбоксилат и (2-метил-4-оксо-3-(пент-2-енил)циклопент-2-ен-1-ил [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-диметил-3-(3-метокси-2-метил-3-оксопроп-1-енил)циклопропанкарбоксилат)
Друго наименование	Реакционна маса от жасмолин I и жасмолин II
Чистота на веществото	95 — 98 % (т/т)
Информация за състава - основни съставки в % (т/т)	

Наименование на съставката	ЕС номер	CAS номер	Мин. %	Макс. %
Жасмолин I: 2-метил-4-оксо-3-(пент-2-енил)циклопент-2-енил [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-диметил-3-(2-метилпроп-1-енил)циклопропанкарбоксилат	няма	4466-14-2	40	60
Молекулна формула				
Структурна формула Молекулно тегло		C ₂₂ H ₃₀ O ₅ M = 374 g/mol		
Жасмолин II: 2-метил-4-оксо-3-(пент-2-енил)циклопент-2-ен-1-ил [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-диметил-3-(3-метокси-2-метил-3-оксопроп-1-енил)циклопропанкарбоксилат	няма	1172-63-0	35	65
Молекулна формула				
Структурна формула Молекулно тегло		C ₂₁ H ₃₀ O ₃ M = 330 g/mol		

3. Може ли синтезираната смес (реакционната маса) от двата изомера да се разглежда като идентична със сместа от изомери, изолирани от маслото на хризантема?

За химично ясно определени вещества, които са описани в достатъчна степен чрез съставките си е без значение дали веществото е изолирано от екстракт или е синтезирано чрез химичен процес. Следователно синтезираната реакционна маса от жасмолин I и жасмолин II може да се разглежда като идентична с изомерната смес, изолирана от *Chrysanthemum*, дори ако е получена при различни производствени процеси, при условие че чистотата на сместа и концентрационният диапазон на основните съставки са

едни и същи.

4. Заключение

Идентифицирани са две вещества:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; масло, получено от смачкани цветове и листа чрез екстракция с вода:етанол (1:10)
2. Реакционно маса от изомерите жасмолин I и жасмолин II, независимо от производствения процес на веществото.

Ако посочените по-горе вещества се използват *само* в продукти за растителна защита и като биоцидни продукти, те ще се разглеждат като регистрирани по REACH (*член 15*).

7.8. Фенол, изопропилиран, фосфат

Фенол, изопропилиран, фосфат (3:1) е UVCB вещество, при което променливостта на изопропилираната единица не може да бъде напълно дефинирана.

1. Наименование и други идентификатори

Наименование по IUPAC или друго международно химично наименование	Фенол, изопропилиран, фосфат (3:1)
Други наименования	Фенол, изопропилиран, фосфат Фенол, изопропилиран, фосфат (3:1) (основан на молно съотношение 1:1 пропилен към фенол)
ЕС номер Наименование на ЕС Описание на ЕС	273-066-3 Фенол, изопропилиран, фосфат (3:1) /
CAS номер CAS наименование	68937-41-7 Фенол, изопропилиран, фосфат (3:1)

2. Информация за състава — основни съставки

Основни съставки					
Наименование по IUPAC	CAS номер	ЕС номер	Молекулна формула Метод на Хил	Типична концентр. (% т/т)	Концентр. диапазон (%т/т)
Фенол, изопропилиран, фосфат (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Не е конкретизирано		

Основни съставки	
Наименование на ЕС	Описание на ЕС
Фенол, изопропилиран, фосфат (3:1)	/
CAS наименование	CAS номер
Фенол, изопропилиран, фосфат (3:1)	68937-41-7

7.9. Четвъртични амониени съединения

Дружеството синтезира следните вещества:

Вещество А:

Четвъртични амониени съединения, ди-С₁₀₋₁₈-алкилдиметил, хлориди

EINECS номер 294-392-2

CAS номер 91721-91-4

Разпределение на дължините на въглеродните вериги:

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 %

Вещество В

Четвъртични амониени съединения, дикоков алкилдиметил, хлориди

ЕС номер 263-087-6

CAS номер 61789-77-3

Дружеството не знае точния състав на това вещество.

Вещество С

Ди-додещилдиметиламониен бромид

Вещество D

Ди-додecilдиметиламониев хлорид

Вещество E

Вещество E се произвежда като реакционна маса от ди-додecilдиметиламониев бромид и ди-додecilдиметиламониев хлорид (реакционна маса от вещества C и D).

Вещество F

Четвъртични амониеви съединения, ди-C₁₄₋₁₈-алкилдиметиламониеви, хлориди

ЕС номер 268-072-8

CAS номер 68002-59-5

Разпределение на дължините на въглеродните вериги:

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

Вещество G

Четвъртични амониеви съединения, ди-C₄₋₂₂-алкилдиметил, хлориди

Разпределението на въглеродните вериги (единична кавичка «'» означава една двойна връзка, двойна кавичка «''» означава една тройна връзка):

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%

До момента дружеството използва само вещество B (четвъртични амониеви съединения, дикокос алкилдиметил, хлориди, ЕС номер 263-087-6, CAS-номер 61789-77-3) за именуване, защото е най-подходящо за всички съединения (вещества от A до G). Предприятието би искало да знае дали е възможно да се обхванат всички вещества (от A до G) с една регистрация на вещество B.

1. Общи бележки

Въглеводородите (парафини, олефини), получени от мазнини или масла или синтетични заместители, се идентифицират чрез разпределението на техните въглеродни вериги или чрез произхода си (алкилен дескриптор), чрез функционална група (функционален дескриптор), например амониева, и чрез съотношението аниони/катиони (солеви дескриптор), например хлорид. Разпределението на веригата напр. C₈₋₁₈ се отнася до

наситена

линейна (неразклонена)

включва всички въглеродни числа (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈), докато едно тясно разпределение не покрива по-широко и обратно

Обратното трябва да се посочи по следния начин:

ненаситени (C₁₆ненаситени)

разклонени (C₁₀ разклонени)

с четни номера (C₁₂₋₁₈ четни)

Въглеродни вериги, описани чрез източника, трябва да съдържат разпределението, както е в източника, например лой алкил амини:

Лой алкил амините са 99 % предимно алкил амини с линейна верига със следното въглеродно разпределение на веригите (Ullmann, 1985) [единична кавичка «'» означава една двойна връзка, двойна кавичка «''» означава една тройна връзка]:

C12	1%
C14	3 %
C14'	1%
C15	0,5%
C16	29 %
C16'	3%
C17	1%
C18	23%
C18'	37%
C18''	1,5%

2. Как да се идентифицират веществата за целите на регистрацията?

По-долу всяко вещество е сравнено с вещество В (което досега бе използвано за наименуване), за да се вземе решение дали двете вещества могат да се разглеждат като идентични.

Сравнение между веществата А и В

Следното разпределение на веригите може да се намери за „кокос“ във вещество В (Ullmann, 1985) [единична кавичка «'» означава една двойна връзка, двойна кавичка «''» означава една тройна връзка]:

C6	0,5%
C8	8%
C10	7 %
C12	50%
C14	18 %
C16	8 %
C18	1,5 %
C18'	6 %
C18''	1%

Следователно разпределението за вещество А се отличава от разпределението за „кокос“ във вещество В. Поради това че количественият и качественият състав на двете вещества се различава чувствително, те не могат да се разглеждат като идентични.

Сравнение между веществата В и С

Вещество В „четвъртични амониевы съединения, дикокосов алкилдиметил, хлориди“ описва смес от съставки с различни въглеродни вериги (C₆ до C₁₈ четни, линейни, наситени и ненаситени), докато вещество С описва само един съставка с една дефинирана наситена верига (C₁₂) с различен анион (бромид). Следователно веществото С не може да се разглежда като идентично с веществото В.

Сравнение между веществата В и D

Вещество В „Четвъртични амониевы съединения, дикокосов алкилдиметил, хлориди“ описва смес от съставки с различни дължини на въглеродните вериги (C₆ до C₁₈ четни, линейни, наситени и ненаситени), докато вещество D се описва от една съставка с дефинирана и наситена верига (C₁₂) и същия анион (хлорид). Вещества В и D имат различни наименования и не могат да се разглеждат като едно и също вещество, защото една съставка не е обхваната от смес, съдържаща определена съставка и обратно.

Сравнение между веществата В и E

Вещество E е смес от веществата С и D. Двете имат наситена верига от C₁₂, но различни аниони (бромиден и хлориден). Веществото В „Четвъртични амониевы съединения, дикокосов алкилдиметил, хлориди“ се описва като смес от съставки с различни въглеродни вериги (C₆ до C₁₈ четни, линейни, наситени и ненаситени) и хлориден анион. Веществото E обаче, се описва само с въглеродната верига C₁₂ и с бромид като допълнителен анион. Следователно веществата В и E не могат да се разглеждат като идентични. Необходима е отделна регистрация на веществото E.

Сравнение между веществата В и F

Веществото F „Четвъртични амониевы съединения, ди-C₁₄₋₁₈-алкилдиметиламониевы, хлориди“ е смес от съставки с различни дължини на въглеродните вериги (C₁₄ до C₁₈ четен и нечетен брой, линейни и наситени). Веществото F се различава от веществото В

по състав и по интервала на дължината на въглеродните вериги от веществото В. Веществото F има тясно разпределение на дължините на въглеродните вериги, а в допълнение и C₁₅- и C₁₇-въглеродни вериги. Следователно веществата В и F не могат да се разглеждат като едно и също вещество.

Сравнение между веществата В и G

Веществата В и G изглеждат много подобни, защото разпределението на въглеродните вериги е почти в същия интервал. Но веществото G включва в допълнение въглеродни вериги C₄, C₂₀ и C₂₂. Разпределението на въглеродните вериги на веществото G включва по-широк интервал от този на веществото В. Следователно веществата В и G не могат да се разглеждат като едно и също вещество.

3. Заключение

Въглеводородите (парафини, олефини) могат да се разглеждат като едно и също вещество, когато всичките три дескриптора (алкилен, функционален и соли) са еднакви.

В посочените по-горе примери дескрипторите са винаги различни. Следователно веществата не могат да бъдат обхванати от една регистрация на веществото В.

7.10. Петролни продукти

Посредством указанията за специфични UVCB вещества в глава 4.3.2 са включени два примера.

7.10.1. Бензини с добавки (C4-C12)

1. Наименование и други идентификатори

Наименование

Наименование по IUPAC или друго международно химично наименование	Нафта (нефтена), каталитично реформирана
--	--

Източник

Идентифициране или описание на потока	суров нефт
--	------------

Процес

Описание на процеса на пречистване	Процес на каталитичен реформинг
Въглероден интервал	C4-C12
Интервал или граници на точка на кипене	30 °C до 220 °C
Други физични свойства, например вискозитет	под 7 mm ² /s при 40 °C (вискозитет)
ЕС номер CAS номер ЕС наименование/CAS наименование ЕС описание/CAS описание	273-271-8 68955-35-1 Нафта (нефтена), каталитично реформирана Комплексна комбинация от въглеводороди, получена от дестилация на продукти от каталитичен реформинг. Тя се състои от въглеводороди с преобладаващо въглеродно число в интервала C4 до C12 и кипи в интервала приблизително 30 °C до 220 °C (90°F до 430°F). Съдържа сравнително голямо количество ароматни и с разклонена верига въглеводороди. Този поток може да съдържа 10 обемни % или повече бензен.

2. Информация за състава

Известни съставки			
Наименование по IUPAC	CAS номер	ЕС номер	Концентр. диапазон (%т/т)
Бензен	71-43-2	200-753-7	1-10
Толуен	108-88-3	203-625-9	20-25
Ксилен	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Газьоли (петролни продукти)

1. Наименование и други идентификатори

Наименование по IUPAC или друго международно химично наименование	Газьоли (нефтени), тежки атмосферни
--	-------------------------------------

Източник

Идентифициране или описание на потока	суров нефт
--	------------

Процес

Описание на процеса на пречистване	Атмосферна дестилация
Въглероден интервал	C7 - C35
Интервал или граници на точка на кипене	121 °C до 510 °C
Други физични свойства, например вискозитет	2 mm ² /s при 40 °C (вискозитет)
ЕС номер CAS номер ЕС наименование/CAS наименование ЕС описание/CAS описание	272-184-2 68783-08-4 Газьоли (нефтени), тежки атмосферни Комплексна комбинация от въглеводороди, получени от дестилацията на суров нефт. Състои се от въглеводороди с преобладаващо въглеродно число в интервала C7 до C35 и кипи в интервала приблизително 121 °C до 510 °C (250°F до 950°F).

2. Химичен състав

Няма налична информация

7.11. Ензими

Посредством указанията за специфични UVCB вещества в глава 4.3.2.3 са включени два примера за ензимни концентрати: субтилизин (идентифициран по номенклатурата на IUBMB + други съставки) и α -амилаза (идентифицирана по номенклатурата на IUBMB + произвеждащия организъм)

7.11.1. Субтилизин

Ензимен протеин	Субтилизин
IUBMB номер	3.4.21.62
Наименования по IUBMB (Систематично наименование, ензимно наименование, синоними)	Субтилизин; алкалаза; алкалаза 0,6L; алкалаза 2,5L; ALK-ензим; бацилопептидаза А; бацилопептидаза В; <i>Bacillus subtilis</i> алкалин протеиназа биопраза; AL биопраза15; биопраза APL 30; колистиназа; (вж. също забележките); субтилизин J; субтилизин S41; субтилизин Sendai; субтилизин GX; субтилизин E; т.н.
Коментари на IUBMB	Субтилизинът е серинова ендопептидаза, типов пример за семејство пептидази S8 . Той не съдържа цистеинови остатъци (въпреки че такива са открити в хомоложни ензими). Видовите варианти включват субтилизин BPN' (също субтилизин В, субтилопептидаза В, субтилопептидаза С, Nagarse, Nagarse протеиназа, субтилизин Novo, бактериална протеиназа Novo) и субтилизин Carlsberg (субтилизин А, субтилопептидаза А, алкалаза Novo). По-рано ЕС 3.4.4.16 и включен в ЕС 3.4.21.14. Подобни ензими са получени от различни родове <i>Bacillus subtilis</i> и други видове <i>Bacillus</i> [1,3].
Реакция	Хидролиза на протеини с определена специфичност при пептидните връзки и предимство за голямо непроменено остатъчно вещество в Р1. Хидролизни пептидни амиди

Тип реакция	Хидролази; Действие върху пептидните връзки (пептидази): Серин ендопептидази
ЕС номер	232-752-2
Наименование на ЕС	Субтилизин
CAS номер	9014-01-1
CAS наименование	Субтилизин
Концентрация на ензимен протеин	26 %
Други съставки	
Други протеини, пептиди и аминокиселини	39 %
Въглехидрати	11 %
Липиди	1 %
Неорганични соли	23 %
Субстрати и продукти	
Допълнителни параметри	протеини или олигопептиди, вода пептиди

7.11.2. α -Амилаза

Ензимен протеин	α -Амилаза
IUBMB номер	3.2.1.1
Наименования по IUBMB (Систематично наименование, ензимно наименование, синоними)	1,4- α -D-глюкан глюканохидролаза; гликогеназа; α -амилаза; алфа-амилаза; ендоамилаза; Така-амилаза А
Коментари на IUBMB	Действа върху скорбялата, гликогена и сродните полизахариди и олигозахариди по произволен начин; редуцираните групи в α -конфигурацията се освобождават. Терминът „ α “ се отнася до първоначалната аномерна конфигурация на отделените свободни захарни групи, а не до конфигурацията на хидролизираната връзка.
Реакция	Ендохидролиза на 1,4- α -D-гликозидни връзки в полизахариди, съдържащи три или повече 1,4- α -свързани D-глюкозни единици
Тип реакция	хидролази; гликозидази; гликозидази, т.е. ензими, хидролизиращи O- и S-гликозидни съединения
ЕС номер	232-565-6
Наименование на ЕС	Амилаза, α -
CAS номер	9000-90-2
Свързани CAS номера	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (всички заличени)

CAS наименование	Амилаза, α -
Концентрация на ензимен протеин	37 %
Други съставки	
Други протеини, пептиди и аминокиселини	30 %
Въглехидрати	19 %
Неорганични соли	14 %
Субстрати и продукти	
Допълнителни параметри	нишесте; гликоген; вода; полизахариди; олигозахариди;

Приложение I - Помощни материали

Това Приложение съдържа списък на уебстраниците, базите данни и справочници, които могат да са полезни за намиране на подходящите IUPAC, CAS и ЕС наименования, CAS и ЕС номера, молекулни формули и структурни формули, включително SMILES нотации и други параметри, които са необходими за идентифициране на веществото. Не са включени търговски бази данни и инструменти за търсене.

Общи положения		
Параметър идентичност на веществото	Източник	Описание на източника
Американското министерство на здравеопазването и човешките ресурси	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Семейство от бази данни и инструменти, които подпомагат потребителите при търсенето на информация за химикалите
Информатика Perkin Elmer	https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	База данни на свободен достъп, която предоставя химични структури, физични свойства и хипервръзки към подходяща информация
Експериментална база знания BIOVIA (ЕКВ)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Химически софтуер; Според азбучен списък с продукти

Наименование и други идентификатори		
Параметър идентичност на веществото	Източник	Описание на източника
Наименование по IUPAC	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	Официален уебсайт на IUPAC
	https://iupac.qmul.ac.uk/	Химична номенклатура на IUPAC и препоръки (под управлението на IUPAC)
	Номенклатура по органична химия (Синя книга), Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Основни публикации по номенклатурата на IUPAC, очаква се актуализиране през 2006 г.
	Наръчник по номенклатурата на IUPAC на органичните съединения (препоръки 1993) (допълнение към Синята книга), Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Основни публикации по номенклатурата на IUPAC, очаква се актуализиране през 2006 г.
	Номенклатура на неорганична химия (препоръки 1990) (Червена книга) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Основни публикации по номенклатура на IUPAC, очаква се актуализиране през юли 2005 г.
Наименование по IUPAC	Биохимична номенклатура и свързани с нея документи (Бяла книга) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Основни публикации по номенклатурата на IUPAC
	Принципи на химичната номенклатура: Наръчник за препоръките за IUPAC Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Въвеждаща книга, която покрива всички типове съединения

Наименование по IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/raw_nom/	Търговска компютъризирана програма за именуване, която може да бъде много полезна при образуване на наименованието на структури с умерена сложност. Достъпна е безплатна версия за малки молекули (препоръчана от IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Номенклатура на IUPAC по органична химия (препоръчана от IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Пълен списък на одобрени тривиални и полу-систематични основни наименования на органични съединения
	http://www.chemexper.com/	Целта на химичната директория ChemExper е да създаде обща база данни за химични вещества на свободен достъп в Интернет. Съдържа химични вещества с физичните им характеристики. Всеки може да подава химична информация и да търси информация с уеб-браузър
IUBMB номенклатура	https://iubmb.qmul.ac.uk/	База данни за IUBMB биохимична номенклатура (под ръководството на IUBMB)
Други наименования	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Генерични наименования на индекс на цвят, международен индекс на цвят, четвърто онлайн издание
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (Международна класификация на козметичните съставки), Официална страница на Съвета за продукти за лични грижи
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	US EPA вещества, съдържащи различни въглеродни вериги (алкилни диапазони, използващи X-Y запис)

Други идентификатори	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	СЕ норми, официален европейски сайт на СЕ
ЕС номер	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	Списък на ЕС: търсене в EINECS, ELINCS, NLP и Приложение I на 67/548/ЕИО
CAS номер	http://www.cas.org	Официална уеб страница на регистрационната служба на CAS
	http://www.chemistry.org	Официална уеб страница на Американското химическо дружество

Молекулна и структурна формула

Параметър идентичност на веществото	Източник	Описание на източника
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_chemicaler/index.html	Генератор на SIMLES на свободен достъп
Молекулно тегло и SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, програма на свободен достъп (също достъпна и като търговски продукт)
Редица физико-химични параметри	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface	EPI Suite™ (Estimation Programs Interface — интерфейс за програми за оценка) е пакет, базиран на Windows®, за физични/химични свойства и модели за оценка на поведението на химичните вещества в околната среда, разработен от службата на EPA за предотвратяване на замърсяване от токсични вещества и Изследователската корпорация в Сиракуза (SRC).

Допълнително съдействие за конкретни вещества	Въпроси и отговори - ЕСНА Специфична за сектора помощ за идентифициране на вещества - ЕСНА	Помощ относно подходите за именуване и характеризирание на конкретни вещества можете да намерите на уебсайта на ЕСНА и в раздела „Въпроси и отговори“.
---	---	--

Приложение II — Техническо ръководство за параметър за идентифициране на веществото

Информацията в това Приложение е предназначена за потребителите на ръководството, които не са запознати с техническите правила на номенклатурата, използването на различни регистрационни номера и правилата за нотация за молекулна и структурна информация, спектрални данни и т.н.

То предлага общо въведение чрез обобщаването на основните принципи и насочва потребителя към оригиналните източници за пълна информация.

Този преглед е опростена версия, не е пълна или изчерпателна, и не е достатъчно подробна за професионалния потребител. В никакъв случай не следва да се разглежда като еквивалентна на официалния източник.

1 Наименование(я) по IUPAC или друга международна номенклатура

За регистрацията се дава IUPAC наименованието на английски език или друго добре дефинирано международно прието наименование на веществото.

Наименованието по IUPAC се основава на международната стандартна химична номенклатура, установена от международната организация IUPAC, Международния съюз за чиста и приложна химия (за подходяща справочна литература вж. Приложение 1). Номенклатурата на IUPAC е систематичен начин за именуване на химичните вещества, както на органични, така и на неорганични. В номенклатурата на IUPAC се използват представки (префикси), наставки (суфикси) и междинни наставки (инфикси) за описание на типа и позицията на функционалните групи във веществото.

пента-1,3-диен-1-ол в този пример:

префиксът е **пента-1,3-**

инфиксът е **-ди** и

суфиксът е **-ол**

ен- е основата на наименованието, коренът му.

Наборът от правила бе разработван в продължение на много години и постоянно се променя, за да отразява нови съставки на молекулното разнообразие и да се справи с възможни конфликти или обърквания, които се откриват. Правилата, установени от IUPAC, могат да се използват за ясно определени вещества.

По-долу са посочени някои общи насоки за структурата на IUPAC наименованието. За подробности, моля, използвайте насоките, посочени в глава 4 на настоящото ръководство.

1.1 Органично вещество

Стъпка 1 Идентифицирайте броя на въглеродните атоми в най-дългата непрекъсната верига от въглеродни атоми; този брой определя префикса, първата част на корена на наименованието:

Брой въглеродни атоми	Корен
1	мет-
2	ет-
3	проп-
4	бут-
5	пент-
6	хекс-
7	хепт-
8	окт-
N

Стъпка 2 Определете наситеността на веригата; наситеността на веригата определя суфикса, втората част на корена на наименованието:

Наситеност	Връзки	Суфикс
Ненаситена	Двойна Тройна	-ен -ин
Наситена	-	-ан

В случай на много двойни или тройни връзки, броят на връзките се посочва с „моно“, „ди“, „три“, и т.н. преди суфикса:

Пентен с 2 двойни връзки: пентадиен

Стъпка 3 Комбинирайте префикса, суфикса и допълненията към корена на наименованието

Бележка: За корена на наименованието могат да се използват също и одобрени от IUPAC тривиални или полу-систематични наименования:

Бензен, толуен, и т.н.

Стъпка 4, Използвайте таблицата по-долу:

- Идентифицирайте съставките и/или функционалните групи: въглеродни или не-въглеродни групи, свързани с въглеродородната верига, определена в стъпка 1;
- Определете реда на предимство на съставките и/или функционалните групи;
- Добавете суфикса за първата съставка/ функционална група и следващите по реда на предимство;
- Добавете префикса за другите съставки и функционални групи по азбучен ред.

Предимство	Group (Група)	Формула	Суфикс	Префикс
1	Карбоксилна група	R-COOH	-ова к-на	Карбокси
2	Естер	R-CO-O-R	-оат	-
3	Амид	R-CONH ₂	-амид	Карбамоил
4	Цианид	R-CN	-нитрил	Циано
5	Алдеhid	R-CHO	-ал	Оксо
6	Кетон	R-CO-R	-он	Оксо
7	Алкохол	R-OH	-ол	Хидроксил
8	Тиол	R-SH	-тиол	Сулфанил
9	Амин	R-NH ₂	-амин	Амино

1.2 Неорганично вещество

1.2.1 Наименуване на прости неорганични вещества

Наименуването на неорганични вещества се основава на набор от правила (Червена книга на IUPAC, вж. справочната литература в 7.1), най-основните от които са представени по-долу:

- 1 Едноатомни аниони се наименоуват със суфикс –ид:

O²⁻ е окис

- 2 Прости йонни съединения се наименоуват с катиона, следван от аниона. За катиони със заряд > 1, зарядите се изписват с римски цифри в скоби веднага след името на елемента:

Cu²⁺ е мед (II)

- 3 Хидратите се наименоуват като йонни съединения, последвани от цифров префикс и –хидрат. Цифровите префикси са моно-, ди-, три-, тетра-, пента-, хекса-, хепта-, окта-, нона-, дека-:

CuSO₄ · 5H₂O "меден(II) сулфат пентахидрат"

Бележка: за целите на регистрирането на хидратите и където е уместно, безводната форма на конкретна метална сол се разглежда като „едни и същи вещества“.

4 Неорганичните молекулни съединения се наименоват с префикс (вж. хидрати) преди всеки елемент. Най-електроотрицателният елемент се пише последен, със суфикс –ид:

CO₂ въглероден диоксид, а CCl₄ е въглероден тетрахлорид.

5 Киселините се наименоват по аниона, образуван при разтваряне на киселината във вода. Има няколко възможности:

а Ако, когато е разтворена във вода, киселината дисоциира в анион с наименование „х“-ид, киселината се нарича хидро-“х“-на киселина:

хидрохлорната киселина образува хлориден анион.

б Ако при разтваряне във вода, киселината се дисоциира в анион с наименование „х“-ат, тя е „х“-на киселина::

във вода хлорната киселина се дисоциира в хлоратни йони.

в Ако при разтваряне във вода, киселината се дисоциира в анион с наименование „х“-ит, тя е „х“-иста киселина:

хлористата киселина дисоциира в хлоритни аниони.

1.2.2 Наименуване на минералогични фази

Сложните минералогични фази обикновено съдържат три или повече елемента в комбинация. Повечето от присъстващите елементи са комбинирани с кислород и за да се опрости идентифицирането, сложните съединения обикновено се разглеждат от минералозите като изградени от оксиди, някои от които основни, а други киселинни. Например обичайно е силикатите да се представят или като сума от определен брой оксиди, или като соли на силициевата киселина или алуминосилициевата киселина. Съответно калциевият ортосиликат може да се представи като $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$, комбинация от отделни оксиди или като Ca_2SiO_4 , като калциева сол на ортосилициевата киселина H_4SiO_4 . Същото важи и за други сложни минерални оксиди — те се наименоват с префикс преди всеки оксид (например, Ca_3SiO_5 = трикалциев силикат = $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$). В някои сектори на индустрията е въведено допълнително опростяване, за да се съкрати формулата на съединението. Например в случая на портландски циментов клинкер, $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ (калциев ортосиликат или дикалциев силикат) е съкратен на C_2S , където $\text{C} = \text{CaO}$ и $\text{S} = \text{SiO}_2$. Препоръчва се консултиране на стандартни минералогични или индустриални текстове, когато е необходимо да се наименоват или идентифицират минералогични фази.

1.3 Природни продукти и свързани съставки

За природните продукти IUPAC е разработил редица правила за систематично наименование. Накратко това означава, че за вещества, екстрактирани от естествени източници наименованието се базира, когато е възможно, на наименованието на семейството, рода или вида на организма, от който веществото се екстрактира:

За хипотетичен протеин *Hypothecalia Exemplare* наименованията се базират на *hipothecalia* и/или *exemplare*, например *Horse Exemplare*

Ако е възможно, наименованието следва да отразява познатото или вероятно разпределение на природния продукт. Ако е уместно, класът или редът може също да се използва като база за наименование на веществото, което присъства в редица близки семейства. Наименованието на природни продукти с непозната структура не

трябва да съдържа никакви префикси, суфикси и/или инфикси, използвани в номенклатурата на органичните съединения:

Продукт на кондензация на Horse exemplare, Valarine добавен към N-terminus

Много природни вещества принадлежат към добре дефинирани структурни класове, всеки от които може да се характеризира с набор от основни структури, които са близки, т.е. всяка може да се получи от фундаменталната структура. Систематичното наименование на такива природни вещества и техните производни (деривати) може да се базира на наименованието на съответната фундаментална структура:

Известни основни структури са алкалоиди, стероиди, терпеноиди и витамини

Фундаменталната структура трябва да отразява основния скелет, който е общ за повечето вещества в този клас. Природните вещества или деривати се наименоуват по тази структура, като се добавят префикси, суфикси или инфикси, показващи:

- модификация на скелетната структура
- заместване на атоми в скелета
- промени в състоянието на хидрогениране, съдържащо се в наименованието на основната структура
- атоми или групи, които заместват водородни атоми в основната структура
- конфигурации, които не се съдържат в наименованието на основната структура или променени от тези, които се съдържат

Тиамин хлорид е познат също като витамин В₁

За повече подробности за систематичното именуване на природни продукти и съставки, трябва да се свържете с IUPAC (вж. Приложение 1).

1.4 IUPAC наименование, което е невъзможно да се състави

Ако е невъзможно да се състави IUPAC наименование за някои вещества, може да се използва друга международно призната номенклатура, специфична за тези вещества, като:

- Минерали и руди; минералогични наименования;
- Петролни продукти
- Индекс на цветове, генерични наименования³;
- Добавки към масла;
- INCI (Международна номенклатура на козметичните съставки)⁴;
- SDA (Асоциация за сапуни и миещи вещества) наименования за повърхностни агенти⁵;
- и т.н.

2 Други наименования

Всички подходящи наименования и/или публични идентификатори на всички езици, под които се продава или ще се продава веществото в ЕС (например търговски наименования) е добре да бъдат включени в регистрацията по REACH рамката. Това включва търговски наименования, синоними, съкращения и т.н.

- <http://www.colour-index.com>, Международен индекс на цвят, четвърто онлайн издание
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI (Международна класификация на козметичните съставки), Официална страница на Съвета за продукти за лични грижи
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, официален уебсайт на Американския институт за почистване (ACI).

3 ЕС номер от EINECS, ELINCS или NLP (Списък на ЕС)

ЕС номерът, т.е. номера по EINECS, ELINCS или NLP, е официалният номер на веществото в Европейския съюз. ЕС номерът може да се получи от официалните публикации на EINECS, ELINCS и NLP, както и от Европейската агенция по химикали.

ЕС-номерът се състои от 7 цифри от типа $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$. Първата цифра се дефинира от списъка, към който принадлежи веществото:

Списък	Първа цифра от ЕС-номера
EINECS	2 или 3
ELINCS	4
NLP	5

4 CAS наименование и CAS номер

Справочната служба по химикали (CAS), подразделение на Американското химично общество (ACS), определя CAS наименования и CAS номера на всяко химично вещество, която влиза в регистрационната база данни на CAS. Наименованията и номерата се дават последователно на уникални вещества, идентифицирани от учените на CAS. Всяко вещество, регистрирано в Справочната служба по химикали (CAS), има наименование според CAS номенклатурата, която ACS приема след препоръки на ACS комитета по номенклатура (вж. справочната литература в Приложение 1).

4.1 CAS наименование

CAS наименованието е наименованието, посочено от Справочната служба по химикали (CAS) и е различно от IUPAC наименованието. CAS номенклатурата се основава на ограничен набор от критерии, които не винаги са достатъчни за получаване на наименование на вещество. Следователно най-често се препоръчва да се свържете със Справочната служба по химикали, за да получите правилното CAS наименование.

Накратко основните правила на номенклатурата са:

- Избира се „основна“ част на веществото, която действа като водеща.
- Заместителите се изброяват след водещата част, към която се прави препращане в обратен ред
- Когато има повече заместители, те се подреждат по азбучен ред (включително и префиксите):

о-ксилен-3-ол е бензен, 1,2-диметил, 3-хидрокси,

4.2 CAS номер

CAS номерата могат да бъдат получени от Справочната служба по химикали (CAS).

CAS номерата се състоят от минимум 5 цифри, разделени на три части с тире.

Втората част винаги се състои от две цифри, а третата — от една цифра,

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

За проверка на CAS номерата, се използва „проверка на сумата“:

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

CAS номерата трябва да са точни според проверката на сумата.

5 Други кодове за идентичност

Могат да се дадат също и други международно признати кодове за идентичност, като:

- Митнически номер
- ООН номер;
- Номер на индекса за цвят;
- Номер на багрило;

6 Молекулна формула, структурна формула и SMILES

6.1 Молекулна формула

Молекулната формула идентифицира всеки тип елемент по химичния символ и идентифицира броя на атомите на всеки елемент, намиращ се в една отделна молекула на веществото.

Молекулната формула трябва да се посочи според (традиционната) система на Хил и в допълнение според CAS-системата, където тя се различава от формулата по системата на Хил.

За прилагането на метода на Хил трябва да се следват следните стъпки:

1. Идентифициране на елементите и изброяване на химичните символи;
2. Подреждане на елементите в правилна последователност:

а. Вещества, съдържащи въглерод:

Всеки елемент се посочва с химичния си символ в следната последователност:

- (1) Въглерод;
- (2) Водород;
- (3) Други символи на елементите в азбучен ред:

Пентан: C₅H₁₂

Пентен: C₅H₁₀

Пентанол: C₅H₁₂O

б. Вещества, несъдържащи въглерод:

Всеки елемент се посочва в азбучен ред:

Хлороводородна киселина: ClH

3. За всеки елемент, при който броят на атомите е > 1 , посочете броя на атомите като долен индекс до химичния символ;
4. Добавете информацията, която не е свързана с основната структура в края на молекулната формула, отделена с точка или запетая:

Натриев бензоат е $C_7H_6O_2$, натриева сол

Меден сулфат дихидрат е $CuO_4S.2H_2O$

В случай че методът на Хил не може да се приложи за определено вещество, молекулната формула трябва да се посочи по различен начин, например като емпирична формула, просто описание на атомите и наличното съотношение или формулата, посочена от CAS (вж. глава 4 на ръководството).

6.2 Структурна формула и описание на кристалната структура

Структурната формула е необходима за онагледяване на разположението на молекулите във веществото и връзките им една с друга. Структурната формула трябва да показва местоположението на атомите, йоните или групите и природата на връзките помежду им. Това включва също изомерните форми, т.е. цис/транс, хиралност, енантиомери, и т.н.

Структурната формула може да се посочи в различни формати: под формата на молекулна формула и/или под формата на структурна диаграма.

- *Структурна формула под формата на молекулна формула*

1. Изпишете всички елементи по групи и по реда на появяването им:

n-пентан: $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$

2. Всеки заместител се изписва в скоби, веднага след атома, към който е свързан:

2-метилбутан: $CH_3CH(CH_2)CH_2CH_3$

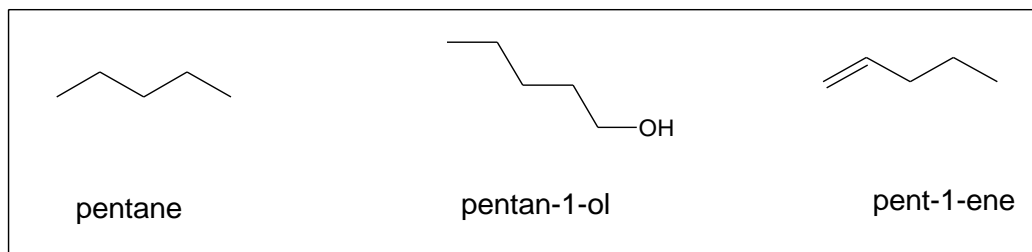
3. В случай на двойна или тройна връзка, покажете ги между групите засегнати елементи:

пент-1-ен: $CH_2=CHCH_2CH_2CH_3$

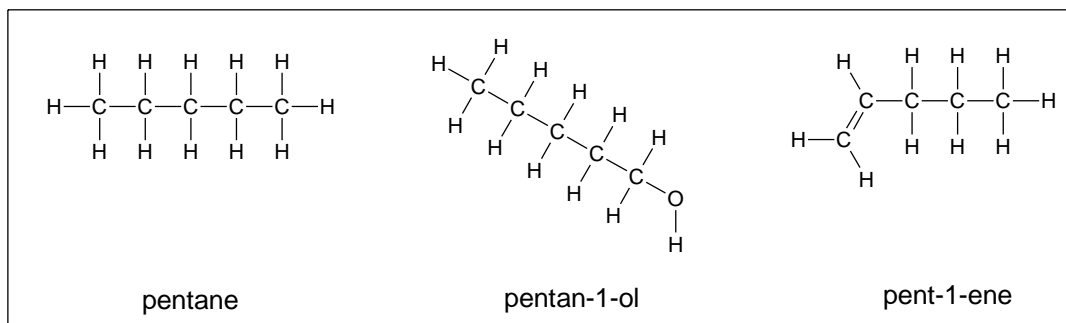
- *Структурна формула под формата на структурна диаграма*

За структурните диаграми елементите и връзките между тях се онагледяват в 2D или 3D изображение. Съществуват няколко метода:

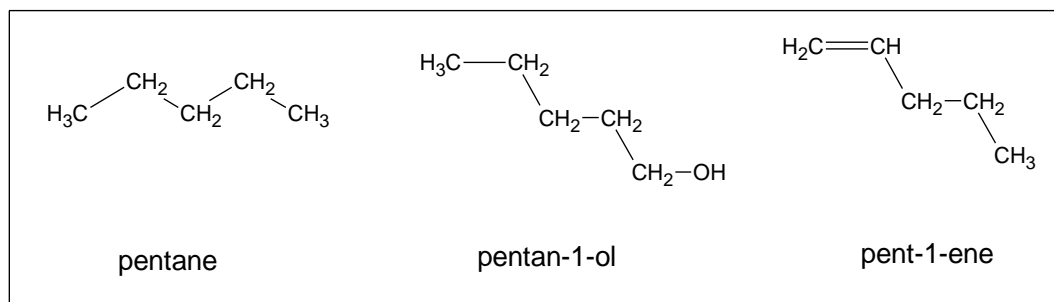
1. Показват се всички невъглеродни елементи и водород, свързани към невъглеродните елементи.



2. Показват се всички елементи по наименование



3. Показват се въглеродът и водородът като групи (например CH₃), всички невъглеродни елементи и всеки водород, несвързан с въглерод

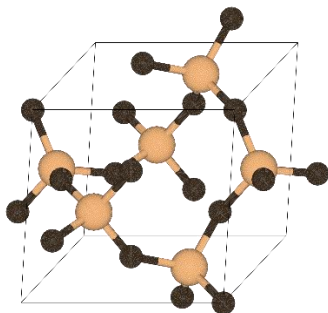


- Структурна формула под формата на молекулна формула

1. Предоставете молекулната формула:

SiO₂

2. Предоставете кристална структура за веществото



3. Предоставете наименование според минералните и/или кристалографските

характеристики, въз основа на кристалната система³² и кристалния клас:

α-кварц [*β*-кварц] / **кристална система:** тригонален - хексагонална, **кристален клас:** тригонално-трапецовиден 3 2

6.3 SMILES нотация

SMILES е акронимът за спецификация за опростено въвеждане на химични формули.³³ Това е система за нотация на химично вещество, използвана за да представлява молекулна структура с линеен низ от символи. При стандартната SMILES наименованието на молекулата е синоним на структурата ѝ: показва косвено двумерна картина на молекулната структура. Поради това, че двумерна химична структура може да се начертае по много начини, има редица правилни SMILES нотации за една молекула. Основата на SMILES е представянето на валентен модел на молекулата; следователно системата не е подходяща за описание на молекулите, които не могат да се представят чрез валентен модел.

SMILES нотациите се състоят от атоми, обозначени чрез елементни символи, връзки и скоби, използвани за описание на разклонения, и цифри — за описание на циклични структури. SMILES нотацията показва молекулна структура като диаграма с оптични хирални означения. SMILES нотация, която описва структурата само по отношение на връзки и атоми, се нарича генерична SMILES; SMILES нотация, написана с изотопни и хирални спецификации, се нарича изомерна SMILES.

Накратко SMILES нотацията се базира на няколко основни правила:

1. Атомите са представени чрез атомния им символ;
2. Всеки атом, с изключение на водорода, се конкретизира независимо;
 - a. Елементите от „органичната подгрупа“ B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br и I се изписват без скоби и без свързан H, стига броят на H да отговаря на най-ниската нормална валентност(и) в съответствие с конкретни връзки:

Елемент в „органичната подгрупа“	„Най-ниска нормална валентност(и)“ В C N
B	3
C	4

³² кубичен/тетрагонален/орторомбичен/ромбоиден (или тригонален)/хексагонален/моноклинен/триклинен

³³ Weininger (1988) SMILES, система за език и информация в областта на химикалите. 1. Въведение в методологията и правилата за кодиране; J. Chem. Inf. Comput. Sci.; 1988; 28(1); 31-36.

N	3 и 5
O	2
P	3 и 5
S	2, 4 и 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Елементите в „органичната подгрупа“ се изписват в скоби, когато броят на Н не съвпада с най-ниската нормална валентност:

Амониев катион е NH₄⁺

- c. Елементи, различни от тези в „органичната подгрупа“, се изписват в скоби с показване на всеки прикачен водород.

3. Алифатните атоми се въвеждат като главни букви; ароматните атоми се въвеждат като малки букви:

бензен е c1ccccc1 и циклохексан е C1CCCCC1

4. Водород се включва само в следните ситуации:
- Водород със заряд, т.е. протон. [H⁺];
 - Водород, свързан с друг водород, т.е. молекулен водород, [H][H];
 - Водород, свързан с друг атом посредством водород, т.е. водороден мост;
 - спецификации на изотопен водород, т.е. деутерий ([²H]);
 - Ако водородът е свързан с хирален атом.
5. Четирите основни връзки са показани, както следва:

Тип връзка	SMILES нотация
Единична	- (няма нужда да се показва)
Двойна	=
Тройна	#
Ароматна	Малки букви

6. Заместителите се посочват чрез затваряне в скоби и веднага след атомите, към които са свързани:

2-метилбутан е CC(C)CC

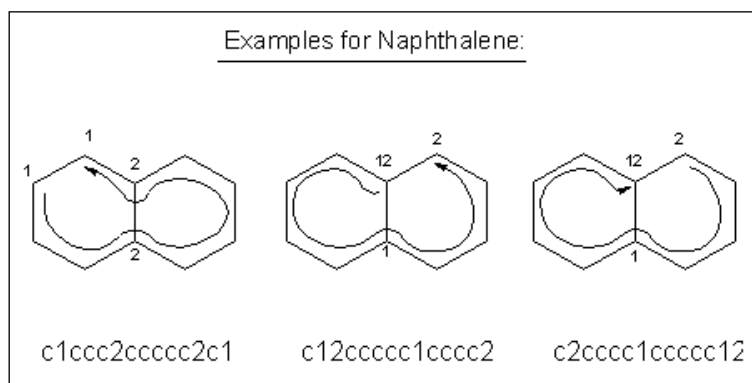
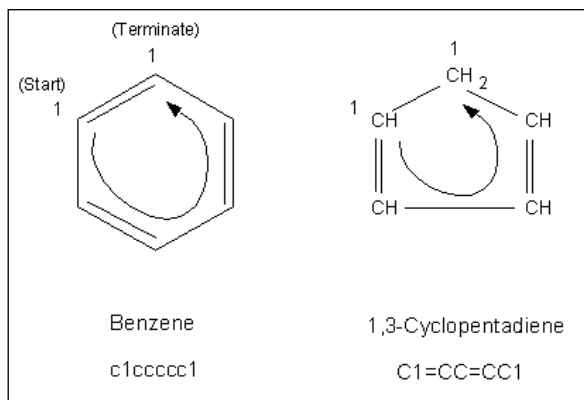
- а. Заместителите винаги се показват директно след съответния атом; те не могат да следват символ за двойна или тройна връзка:

Пентанова киселина е CCCC(=O)O

- б. Допускат се заместители в заместителите:

2-(1-метилетил)бутан е CC(C(C)C)CC

7. За циклични структури се използват цифрите от 1 до 9, за да се укаже началният и крайният атом на цикъла.
- а. Едно и също число се използва за указване на началния и крайния атом за всеки пръстен. Началният и крайният атом трябва да са свързани помежду си.
- б. Цифрите се изписват веднага след атомите, които са използвани за означаване на началната и крайната позиция.
- в. Началният и крайният атом могат да се асоциират с две последователни числа.



8. Несвързани съединения се означават като отделни структури или йони, разделени от точка („.“). Съседни атоми, разделени от точка („.“), не са пряко свързани един с друг, напр. вандервалсово свързване:

Аминопропен хидрохлорид е C=CC(N).HCl

9. Изомерната конфигурация се конкретизира с наклонена черта „\” и „/”. Тези символи означават посоката между две изомерни връзки. (цис = „/” \”, транс = „\” /”). SMILES използва локална хиралност, което означава, че хиралността трябва да се конкретизира напълно:

Цис-1,2-дибромоетен е $\text{Br}/\text{C}=\text{C}\backslash\text{Br}$

Транс-1,2-дибромоетен е $\text{Br}/\text{C}=\text{C}/\text{Br}$

10. Енантиомерите или хиралността се посочват със символа „@“. Този символ означава, че следващите съседни на хиралния атом се описват по посока, обратна на часовниковата стрелка. Ако е използван символът „@ @“, атомите са описани по посока на часовниковата стрелка. Хиралният атом и символът „@“ се изписват между скоби:

2-хлоро-2-хидроксипропанова киселина с

конкретизирана хиралност е $\text{C}[\text{C@}](\text{Cl})(\text{O})\text{C}(=\text{O})(\text{O})$

11. Изотопните спецификации се посочват, като пред атомния символ се поставя число, равно на съответната интегрална атомна маса. Атомната маса може да се конкретизира единствено в скоби:

Въглерод-13 е $[\text{13C}]$ и кислород-18 е $[\text{18O}]$

Налични са няколко инструмента (SMILES генератори) за определянето на SMILES нотациите (вж. Приложение 1).

7 Информация за оптична активност

Оптичната активност е способността на асиметрични вещества да завъртат ориентацията на планарна поляризирана светлина. Такива вещества и техните огледални образи са познати като енантиомери и имат един или повече хирални центрове. Въпреки че се различават по геометрично подреждане, енантиомерите притежават идентични химични и физични свойства. Поради това че енантиомерите въздействат на поляризираната светлина по различен начин, оптичната активност може да се използва, за да се идентифицира кой енантиомер присъства в посочена проба и следователно, също и чистотата на веществото. Големината на завъртането е характерно свойство на молекулата.

Енантиомерите винаги имат противоположно завъртане: те поляризират светлината в еднаква степен, но в различни посоки. Оптичната активност на една енантиомерна смес следователно е индикация за съотношението между двата енантиомера. Една енантиомерна смес от 50-50 има оптична активност 0.

Наблюдаваното завъртане зависи от концентрацията, дължината на съда за пробата, температурата и дължината на вълната на източника на светлина.

Оптичната активност следователно е определящ параметър за идентифициране на асиметрично вещество и е единственият параметър, който може да разграничи веществото от огледалния му образ. Следователно, ако е необходимо, следва да се посочи оптичната активност на веществото.

Стандартът за оптичната активност се нарича специфично завъртане. Специфичното завъртане се дефинира като наблюдавано завъртане на светлина при 5896 ангстрьома с дължина на пътя от 1 dm при концентрация на пробата 1 g/ml. Специфичното завъртане е наблюдаваното завъртане, разделено на дължината на пътя (dm), умножено по концентрацията (g/ml)

Оптичната активност може да се измери по няколко различни метода. Най-често използваните са:

- Оптично завъртане, при което се измерва завъртането на равнината на поляризирания лъч светлина, преминал през пробата;
- Кръгов дихроизъм, при който се измерва абсорбцията на дясно и ляво поляризирана светлина от пробата.

Ако веществото върти светлината надясно (по посока на часовниковата стрелка), то се нарича дясновъртящо и се означава със знака +. Ако върти светлината наляво (обратно на часовниковата стрелка), то се нарича лявовъртящо и се означава със знак -.

8 Молекулно тегло и диапазон на молекулното тегло

Молекулното тегло е масата на една молекула на дадено вещество, изразена с единици атомна маса (amu) или като моларна маса (g/mol). Молекулното тегло може да се изчисли от молекулната формула на веществото: тя е сума от атомните маси на атомите, образуващи молекулата. За молекули, като някои протеини или неидентифицирани реакционни смеси, за които молекулното тегло не може да се определи, се дава диапазон на молекулното тегло.

Могат да се използват няколко метода за определяне на молекулното тегло на вещества:

- За определяне на молекулното тегло на газообразни вещества може да се използва законът на Авогадро, според който при определени условия на температура и налягане посочен обем от кой да е газ съдържа специфичен брой молекули на газа:

$$PV = nRT = NkT$$

n - брой молове

R - универсална газова константа = 8,3145 J/mol K

N - брой молекули

k = Болцманова константа = 1,38066 x 10⁻²³ J/K = 8,617385 x 10⁻⁵ eV/K

k = R/NA

NA - число на Авогадро = 6,0221 x 10²³ /mol

- За течности и твърди вещества молекулното тегло може да се определи, като се определи ефектът върху точката на топене, точката на кипене, налягането на парите или осмотичното налягане на някой разтворител;
- Мас спектрометрия, много точен метод за измерване;
- За молекули на сложни вещества с високи молекулни тегла, като протеини или вируси, молекулното тегло може да се определи чрез измерване, например на скорост на утаяване в ултрацентрифуга или фотометрично;
- Има различен инструментариум, с който могат да се изчислят молекулните тегла на базата на структурна диаграма или на молекулна формула на веществото (вж. Приложение 1).

9 Състав на веществото

За всяко вещество съставът му като комбинация от основните съставки, добавки и примеси, се дава в съответствие с правилата и критериите, описани в глава 4 на настоящото ръководство.

Всяка съставка, добавка или примес трябва правилно да се идентифицира по:

- Наименование (IUPAC-наименование или, ако не е налично, друго международно признато наименование);
- CAS номер (ако е наличен);
- ЕС номер (ако е наличен);
- Всички други налични идентификатори

За всяка съставка, група съставки, добавка или примес, следва да се посочи типичната концентрация в проценти в търговските партии (за предпочитане по тегло или по обем), когато това е възможно. Сумата от посочените стойности трябва да е 100 %. Трябва винаги да се посочват горната и долната пределна концентрация, както и диапазонът в търговското вещество.

10 Спектрални данни

Спектралните данни са необходими, за да се потвърди структурата на еднокомпонентно вещество или да се потвърди, че дадена реакционна смес не е препарат. Могат да се използват няколко спектрални метода (ултравиолетови, инфрачервени, ядрено-магнитни и мас-спектрални). Не всички методи са подходящи за всички типове вещества. Където е възможно, ръководството дава насоки за подходящи спектри, които да се включат за различните типове вещества (ECF, 2004; ECB, 2005).

За редица добре познати методи следната информация трябва да се посочи върху самия спектър или в приложенията:

Ултравиолетов видим (UV-VIS) спектър

- Идентичността на веществото;
- Разтворител и концентрация;
- Диапазон;
- Позиция (и епсилон стойности) на основните пикове;
- Ефект на киселина;
- Ефект на основа.

Спектри от инфрачервена спектроскопия (IR)

- Идентичността на веществото;
- Среда;
- Диапазон;
- Резултати (посочете основните пикове, важни за идентифицирането, например интерпретация на областта на отпечатъка).

Ядрено-магнитно резонансна спектроскопия (NMR)

- Идентичността на веществото;
- Ядро и честота;
- Разтворител;
- Ако е уместно, вътрешни и външни референции;
- Резултати (посочете сигналите, които са важни за идентифицирането на веществото и сигналите, които съответстват на разтворителя и примесите);
- За ^1H NMR спектрите трябва да се посочи интеграционната крива;
- Интензитетът на слаби NMR пикове трябва да се увеличи вертикално, а сложните части да се уголемят.

Спектри от мас-спектрометрия (MS)

- Идентичността на веществото;
- Ускорителен волтаж;
- Метод на зареждане (директно, чрез GC т.н.);
- Йонизираща схема (електронно ударна, химична йонизация, полева десорбция и т.н.);
- Молекулен йон (M);
- Значими фрагменти за идентифициране на веществото;
- M/z стойности за пикове, важни за идентифициране на структурата;
- Сложните части трябва да се уголемят.

Спектър на рентгенова дифракционна масспектроскопия (XRD)

- Идентичността на веществото;
- Волтаж,
- Напрежение,
- източник на рентгенови лъчи и всякакви библиографски справки, позволяващи идентифицирането на кристалната(ите) фаза(и), присъстваща(и) във веществото;

Най-малко следните изисквания са необходими, в случай че методът XRD се използва за идентифициране и количествено определяне на кристалните или аморфните фази, присъстващи във веществото:

- Описание на използваните методи за пречистване и вътрешни стандарти,
- Стойност на показателя за качество, отразяваща съответствието между моделирания/референтния модел за дифракция
- Измерваният модел, както и скалата за стойността на показателя за качество (напр. 0-1 или 0-100)

Могат да се използват и други научно признати методи, ако спектралните данни ще потвърдят идентифицирането на веществото, напр. вътрешна структура.

Следните общи изисквания са необходими за ясното разбиране и/или интерпретиране на спектрите:

- Опишете подготовката на пробата;
- Отбележете значимите дължини на вълните или други данни, както е подходящо;
- Дайте допълнителна информация, напр. спектри на изходни материали;
- Посочете използвания разтворител и/или други важни подробности, както е посочено по-горе за някои методи;
- Предоставете чисти копия (а не оригинали) с добре маркирани скали;
- Предоставете информация за използваните концентрации на веществото;
- Направете така, че най-важните за веществото пикове да са максимално увеличени.

11 Високоэффективна течна хроматография, газова хроматография

Където е подходящо за типа на веществото, трябва да се предостави хроматограма, за да потвърди състава на веществото. Например една подходяща хроматограма ще потвърди съществуването на примеси, добавки и съставки на реакционната смес. Двата най-добре познати метода за разделяне и идентифициране на смеси са газова хроматография (GC) и високоэффективна течна хроматография (HPLC). Двата метода се основават на взаимодействието на мобилната фаза със стационарната, което води до разделянето на съставките на сместа.

За GC/HPLC хроматограми трябва да се посочи следната информация върху хроматограмите или в приложенията (ЕСВ, 2004; ЕСВ, 2005)

HPLC

- Идентичността на веществото;
- Свойства на колоните, като диаметър, съдържание, дължина;
- Температура и температурен диапазон, ако е използван такъв;
- Състав на мобилната фаза и интервал, ако е използван такъв;
- Концентрационен диапазон на веществото;
- Метод на визуализиране, например UV-VIS;
- Резултати (посочете най-важните пикове за идентифициране на веществото);

GC

- Идентичността на веществото;
- Свойства на колоните, като диаметър, съдържание, дължина;
- Температура и температурен диапазон, ако е използван такъв;
- Температура на впръскване;
- Газ-носител и налягане на този газ;
- Концентрационен диапазон на веществото;
- Метод на визуализация, например MS;
- Идентифициране на пиковете;
- Резултати (посочете най-важните пикове за идентифициране на веществото).

12 Описание на аналитичните методи

Приложение VI на REACH изисква регистрантът да опише аналитичните методи и/или да предостави библиографски източници за методите, използвани за идентифициране на веществото, и където е уместно, за идентифициране на примесите и добавките. Тази информация трябва да е достатъчна, за да позволи възпроизвеждане на методите.

Приложение III - Идентифициране на веществата и съвместно подаване на данни

В основната част на настоящото ръководство са изложени общите принципи, които потенциалните регистранти трябва да спазват, когато идентифицират специфичните вещества на своя правен субект, подлежащи на регистрация. В това приложение са дадени практически указания за потенциалните регистриращите регистранти за това как да прилагат принципите за идентифициране на веществото, когато определят съвместно идентичността и обхвата на идентичността на веществото за съвместна регистрация съгласно принципа „едно вещество - една регистрация“ (OSOR) на REACH. Допълнителна информация относно задълженията за съвместно подаване и обмен на данни изобщо е дадена в Ръководството относно обмена на данни на адрес <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

Подразбира се, че същите принципи за идентифициране на веществото, дадени в основната част на ръководството, се прилагат (в зависимост от вида на веществото) за единната идентичност на веществото за съвместна регистрация.

Всъщност първите части на член 11, параграф 1 и член 19, параграф 1 от Регламента за REACH поставят задължително изискване за „съвместно подаване на данни от множество регистранти“. По-специално тези разпоредби изискват, че „когато в Общността се планира производство или внос на химично вещество от един или повече производители и/или един или повече вносителни“, информацията относно свойствата на веществото и неговата класификация „първо се подава от един регистрант, действащ със съгласието на другите регистранти (наричан по-долу „водещ регистрант“).“

В Регламент за изпълнение (ЕС) 2016/9 на Комисията относно съвместното подаване на данни и обмена на данни се потвърждава и консолидира задължението на множество регистранти на една и съща идентичност на веществото да подават определена информация съвместно. На практика съвместното подаване на информация изисква от съответните страни да се споразумеят по границите и обхвата на идентичността на веществото. Това е известно като профил на идентичност на веществото или SIP. Очаква се SIP да уточни границите на веществото, които регистрантите са се споразумели да обхванат със съвместното подаване на данни. Това се отнася и до регистранти, които може да са изразили несъгласие с определена информация, подадена съвместно.

Следователно споразумението относно обхвата на идентичност на веществото, включен в регистрацията, е предварително условие за съвместното подаване. Прозрачността относно обхвата на тази единна идентичност на веществото и данните, за които се отнася, е от основно значение за изпълнението. Следователно обхватът на веществото или SIP трябва да се посочи ясно в досието на водещия регистрант от името на всички други регистранти, докато всички регистранти съобщават поотделно своята информация за състава.

Един прост показателен пример за начина на съставяне на профила на идентичност на веществото за химични вещества, произведени/внесени в ЕС от отделни регистранти, е даден схематично на

Фигура 2 по-долу. Той показва идентифицирането на веществото, подлежащо на регистрация, интегрирането на различните състави, генерирането на данните и накрая подаването им в регистрационно досие във формат IUCLID. Примерът е за просто, добре определено еднокомпонентно вещество. За по-сложни вещества процесът на определяне на SIP може да включва итерации между стъпки 3 и 5 от фигурата,

По време на обсъжданията между потенциални регистранти документацията за SIP може да бъде под формата например на документ в Word или Excel, където съответната съгласувана информация е вписана и направена достъпна за всички членове и потенциални членове. Някои промишлени асоциации имат готови образци за документиране на SIP, които са били използвани от много регистранти (напр. образец Cefic³⁴). Други са просто документирали съответната информация в документ Word или на уебстраницата на консорциум, съставен за работа по регистрацията на съответното вещество.

2. Определяне на идентичността и обхвата на веществото съгласно данните, подадени за регистрацията

Стъпките, които могат да се предприемат от множество потенциални регистранти при определяне на идентичността на веществото съгласно данните, които те представят съвместно, са показани схематично в примера, даден на

Фигура 2 (стъпки от 1 до 4) за прости, добре дефинирани вещества.

Всеки отделен потенциален регистрант определя задълженията си за това, което произвежда/внося, въз основа на дефинирането на веществото в член 3, параграф 1 и като прилага принципите за идентифициране на веществото в основната част на настоящото ръководство (стъпки 1 и 2 от

Фигура 2).

Всеки потенциален регистрант може да провери дали други потенциални регистранти са стигнали до същата стъпка „наименование и други идентификатори“ (стъпка 3). От тази начална точка потенциалните регистранти могат да приложат колективно принципите на основната част на настоящото ръководство, за да определят границите на идентичността на веществото, отговарящи на данните, които подават съвместно; напр. профила на идентичност на веществото (стъпка 4).

SIP описва по общ начин обхвата на веществото под формата на информация за състава му (включително всякакви други относими параметри, като морфология, напр. физически вид, форма), неговото наименование и други идентификатори, за които са приложими съвместно подадените данни за класификацията и риска. Определянето за SIP не следва да се извършва по твърде консервативен подход с оглед да се избегне изключване на конкуренти от съвместното подаване.

SIP установява вътрешно присъщата връзка между идентичността на веществото и данните за риска, подлежащи на съвместно подаване. Ако се определи достатъчно рано, този параметър може да улесни етапа на генериране/събиране на информация в процеса на изпълнение на задълженията за регистрацията (изложени в Ръководството относно изискванията за информация и оценката на безопасността на химичните вещества; стъпка 5 на

Фигура 2 по-долу), с оглед да се гарантира, че генерираните или събраните данни покриват изцяло обхвата на идентичността на веществото.

Както е посочено в раздели 4.2.3 и 4.3 от основното ръководство, за по-сложни вещества, допълнителни параметри и/или дескриптори за информацията за състава

³⁴ SIP бе описан първоначално в „Ръководство за водещи регистранти“ на Cefic на адрес <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Примери за SIP, изготвени от регистранти при използване на този образец, могат да се намерят напр. на уебсайта на центъра на REACH <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

(напр. описание на източника/процеса) се използват обикновено от потенциалните регистранти при стъпки 1—3, като приетите могат след това да бъдат включени в SIP (стъпка 4). В някои случаи връзката между границите на идентичността на веществото и съвместно подадените данни за риска може да стане напълно ясна, дори ако е била събрана само част от всички налични данни за риска. Възможни са итерации между стъпки 3—5, ако е необходимо в зависимост от сложността на идентичността на веществото и данните, събрани в стъпка 5, напр. когато в някои вещества са включени съставки, които изискват класификация и етикетиране и/или оценка на PBT. SIP може да включва повече от един профил на състава за адекватно описание на границите на идентичност на веществото.

SIP трябва да представя обща информация, даваща възможност за определяне на границите на идентичността на веществото, отговарящи на съвместно подадените данни:

- наименование на веществото
- други идентификатори (напр. CAS, EC, молекулна и структурна информация, описание като относими), използвани от цялото множество регистранти на съответната идентичност на веществото
- информация за състава
 - идентификационни данни за съставките, необходими за идентифициране на веществото и съответните концентрационни интервали
 - общ списък на идентификационните данни за стабилизаторите, необходими за идентифициране на веществото (и съответните концентрационни интервали, ако е приложимо),
 - общ списък на допълнителните параметри, относими към вида на веществото (напр. дескриптори на източника/процеса за някои UVCB вещества).

Важно е параметрите, определящи границите на идентичността на веществото, включени в съвместното подаване, да са одобрени от всички съвместни регистранти и да са документирани ясно в SIP. Съответно може да се наложи параметърът SIP да бъде модифициран или разширен по искане на евентуален нов потенциален регистрант, ако се постигне съгласие, че част или всички от съвместно подадените данни са също от значение за веществото, произведено или внесено от регистранта.

SIP не трябва да доведе до обмен на поверителна бизнес информация между регистрантите или до оповестяване на такава информация на трети страни от съвместното подаване. Когато потенциално поверителна бизнес информация се налага да бъде обменена между съвместните регистранти с оглед на ясното определяне на SIP, те могат да разгледат възможността за използване на доверител, както е посочено в Ръководството относно обмена на данни.

3. Практическо ръководство за документиране на профила на идентичност на веществото

Общите принципи на идентифициране на веществото за добре дефинирани вещества и UVCB вещества са изложени в основното ръководство. По-долу са дадени някои практически насоки за това как да се прилагат съвместно тези принципи. В основното ръководство се предвижда възможността за дерогации от общите принципи. Такива дерогации изискват от регистрантите да могат да докажат вътрешно присъщата връзка между идентичността на веществото и съвместно подадените данни за риска.

3.1 Ясно определени вещества

За добре дефинирано вещество трябва да се прилага принципът $\geq 80\%$ (w/w) за идентифициране на еднокомпонентно вещество и принципът $< 80\%$, $\geq 10\%$ за идентифициране на вещество, включващо повече съставки, при определяне на основната съставка (основните съставки) и техните концентрационни интервали и примеси. Това се отнася до всеки отделен регистрант и общо до цялото множество регистранти, когато се определя SIP. По-специално трябва да се посочат профилите на примесите, приети в SIP. Когато SIP включва специфични примеси, които могат да се отразят на класификацията и етикетването и/или на оценката на PBT, регистрантите, засегнати от такива примеси, трябва да ги обсъдят на етапа на събиране на данни (стъпка 5). Съответната информация от приложения VII—XI може да бъде подадена съвместно или поотделно от тях в съответствие с член 11, параграф 3 от Регламента за REACH (така наречените опции за отказ). Стойностите на концентрация, които трябва да се посочат, следва да са съобразени с концентрационния интервал в цялото съвместно подаване.

За вещества, за чието еднозначно вписване на идентифицирането на веществото се изискват допълнителни параметри, всеки регистрант трябва да следва принципите, изложени в глава 4.2.3 от основната част на ръководството. Следва да се обсъди дали променливостта на тези параметри ще доведе до корекция, ако е необходимо, на класификацията или на съвместно подадените данни за риска. За целите на определяне на SIP при съвместно подаване могат да се приложат подобни съображения. Възможно е например да се наложи да се включат в профила на идентичност на веществото онези параметри (напр. физическа форма и/или морфологични параметри, като поръзност, размер на частиците, форма на частиците), които може да повлияят на свойствата, важни за определяне на профила на риска (напр. разтворимост, реактивност, токсичност при вдишване и пр.). Когато случаят е такъв, общите диапазони на тези параметри, включени в SIP, трябва да се посочат прозрачно (напр. диапазони на размера на частиците, приложими за всички регистранти, списък на тяхната форма (техните форми) и списък на химиите на повърхностите). Така се осигурява пълнотата на съвместно подадените данни за риска във връзка със SIP.

По подобен начин разликите в кристалната фаза на неорганичните химични вещества може да предизвика различни съображения относно профила на риска, специфични за тези фази (напр. кварц, кристобалит, аморфен силициев диоксид). Като се вземат предвид възможните разлики в свойствата на отделните фази, потенциалните регистранти на тези вещества трябва да обсъдят дали да подадат една обща регистрация, включваща всички фази, в това число данни за риска, специфични за различните фази, или да подадат различни съвместни регистрации за различните фази (т.е. различни идентичности на веществата). Във всички случаи включените фази трябва да бъдат посочени в SIP и съответните данни от приложения VII—XI трябва да се отнасят до всички фази, включени в регистрацията, с което се гарантира, че данните покриват пълния обхват на SIP.

Трябва да се отбележи, че съставите може да имат различни профили на примесите и/или риска, но тези разлики не означават непременно, че тези състави не могат да бъдат регистрирани в същата регистрация.

3.2 UVCB вещества

За UVCB веществата идентифицирането може да се окаже по-голямо предизвикателство, така че прозрачната документация е много полезна за съгласуване на идентичността на веществото при съвместна регистрация. Всеки

потенциален регистрант трябва да разгледа съветите в основната част на ръководството поотделно, след което всички да приложат съвместно едни и същи принципи. Следва да се отбележи, че обединяването на концентрационни интервали в SIP може да доведе до профил с много широки концентрационни интервали, може би до такава степен, че да не може вече да става въпрос за едно вещество

Както е посочено в основното ръководство, базата за идентификация на някои UVCB вещества е източникът и процесът, използвани при тяхното производство вместо директно идентификационните данни и концентрационните интервали на съставките им. В тези случаи други дескриптори служат като заместители за идентификационните данни на съставките и съответните им концентрационни интервали. Потенциалните регистранти могат да опишат процеса на производство като източник и процес, доколкото това е необходимо за идентифициране на веществото. Описанието може да включва всякакви допълнителни параметри/характеристики, които според регистрантите са от значение за идентичността на тяхното вещество (вж. Например Таблица 5 в основното ръководство). За целите на съвместната регистрация описанията се обменят, само доколкото е необходимо за постигане на съгласие относно обхвата на идентичността на UVCB веществото за регистрацията. Потенциалните регистранти могат да следват принципите, изложени в основното ръководство поотделно, а след това и съвместно. По този начин SIP води до общо отчитане на параметрите на източника и процеса, така че включва изцяло съставите на отделните регистранти. Това е показано схематично на Фигура 3.

За вещества, идентифицирани на базата на източника и процеса, както е посочено в основното ръководство, всяка значителна промяна на източника или процеса ще доведе по всяка вероятност до различна идентичност на веществото, което следва да се регистрира отделно. Дерогациите от този принцип ще означават, че регистрантите могат да докажат, че от всяка комбинация от процес/източник се получават състави, които могат да бъдат включени в една и съща съвместна регистрация. Незначителни изменения в изходните материали и процеса и/или условията на процеса може да се вземат предвид в SIP. Регистрантите следва да се съгласят, че всяка комбинация от процес/източник дава състави, които са сходни дотолкова, че е разумно да бъдат обхванати в една идентичност на веществото и да се осигури, че данните за риска са в сила за цели диапазон на изменение на SIP. По-конкретно регистрантите трябва да са в състояние да обосноват, че съвместно подадените данни за риска се отнасят то всички тези състави или са коригирани, когато е приложимо, с информация, подадена поотделно за определени състави съгласно член 11, параграф 3 на REACH (опции за отказ).

За да се докаже относимостта на набора от данни за всяка комбинация от процес/източник, тези комбинации трябва да бъдат прозрачно документирани в SIP, за да се документират критериите за включване/изключване, прилагани за настоящите и бъдещите съвместни регистранти.

За други типове UVCB вещества (вж. глава 4.3.2 от основното ръководство) потенциалните регистранти могат да използват като относима и комбинация от дескриптори за състава и допълнителни дескриптори. Така например за някои олеохимични продукти съставът варира поради променливостта в разпределенията по дължината на алкилната верига на съставките, като разпределението по дължината на алкилната верига може да бъде допълнителен дескриптор, използван за идентифициране. Подходът, възприет от SIEF, трябва да бъде прозрачно документиран в техните SIP.

3.3 Профил на идентичност на веществото

Задължение на всички регистранти, подаващи съвместно информация, е да се споразумеят относно необходимите параметри за идентифициране на тяхното вещество и да ги документират прозрачно в съответните им SIP. Отклонения или дерогации от нормалните принципи на идентичност на веществото, които са извършени съвместно, трябва да бъдат прозрачно документирани. Тъй като SIP документира критериите за включване/изключване, SIEF трябва да осигури, че приложените критерии са прозрачни и че за съответните събрани/генерирани данни от приложения VII—XI може да се докаже, че обхващат одобрения(те) профил(и) на състава.

Когато потенциалните регистранти включват поотделно стабилизиращи добавки в контекста на член 3, параграф 1 в своя профил на идентичност, техните идентичности и концентрационни интервали трябва да бъдат съгласувани и прозрачно отчетени в SIP.

На етапа на събиране на данни ще трябва да се разгледа относимостта на тестовия(ите) материал(и), използван(и) за генериране/събиране на данни за изпълнение на изискванията към информацията от приложения VII—XI. Обосновката на заключенията относно тяхната представителност за съставите, включени в SIP, трябва да бъде документирана и включена в техническото досие. Това ще бъде по-специално важно за сложни идентичности на веществата, обхващащи широки профили на състава.

Възможно е потенциалните регистранти да установят по време на събирането на данни, че техният SIP е прекалено широк и не е годен за целите на съвместно подаване на информация за риска, която е представителна за съответната идентичност на веществото. В този случай потенциалните регистранти могат да изберат да разделят SIEF с оглед да решат въпроса поотделно с две или повече вещества³⁵. Всяко вещество ще има тогава свой собствен SIP и свое собствено съвместно подаване на информация за риска, която трябва да бъде представителна конкретно за тази идентичност на веществото. Причините, поради които някои данни за риска не са били представителни за определени параметри на идентичността на веществото, трябва да бъдат прозрачно документирани в SIP за всяка отделна регистрация. Съответните потенциални регистранти могат също така да установят на този етап, че профилите на състава трябва да бъдат доуточнени въз основа на съставките и/или примесите, водещи до класифициране и етикетирание, оценка на PBT и пр.

Потенциалните регистранти, които възнамеряват да се присъединят към други потенциални регистранти, след като последните са съгласували вече SIP и регистрацията не е била още подадена, трябва да разгледат дали информацията за тяхната идентичност на веществото е в границите на SIP. Когато това не е така, те трябва да обсъдят и да се договорят с потенциалните регистранти дали е необходимо

³⁵ Съображения относно ролята на EINECS за установяване на идентичността на веществото съгласно REACH могат да се намерят в документа CARACAL, приет на IV заседание на компетентните органи по REACH и C&L (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 „Идентичност на веществото и създаване на SIEF (ролята на EINECS)“.

да се разшири обхватът на профила за включване на нов член, или да приемат, че това е извън обхвата.

Ще се наложи корекция на SIP, ако веществото, подлежащо на регистрация от потенциалния регистрант, има специфични параметри на идентичност на веществото, които може да променят представителността на съвместно подадената информация за риска и поради това налагат изрична обосновка (напр. специфичен примес, различен процентен състав, различна фаза, различен размер на частиците и пр.). За повече прозрачност този параметър трябва да се посочи в SIP.

В отделни случаи потенциалните и съществуващите регистранти може да постигнат съгласие, че съвместно подадените данни за риска не са в основата си представителни за веществото на потенциалния регистрант поради отклонения на параметрите на идентичност на веществото, които не са в договорените граници на SIP. В този случай потенциалният регистрант подава отделна регистрация съвместно с други регистранти с идентичност на веществото, включваща този параметър, или самостоятелно, ако няма други регистранти за същата идентичност на веществото.

4. Посочване на профила на идентичност на веществото в регистрационното досие

Когато потенциалните регистранти са събрали/генерирани всички необходими данни от приложения VII—XI за своето вещество (т.е. стъпка 5 във

Фигура 2), пакетът данни е готов за включване във формат IUCLID в досиетата за подаване в агенцията (т.е. стъпка 6 във

Фигура 2). За докладване на SIP във формат IUCLID, наименованието и други идентификатори, информацията за състава и други относими параметри се отчитат в раздели 1.1 и 1.2 на IUCLID.

Профил на идентичност на веществото	Докладвано в IUCLID
наименование и други идентификатори	раздел 1.1 от всички досиета
информация за състава и други относими параметри	раздел 1.2 от досието на водещия регистрант

Наименованието и други идентификатори на SIP се докладват в раздел 1.1 на всички досиета. Водещият регистрант съобщава информацията за състава на SIP и други относими параметри в раздел 1.2 от своето досие под формата на „граница на състава на веществото“³⁶. Водещият регистрант трябва да подаде и всички относими данни от приложения VII—XI в раздели 4—14 (при липса на оправдани откази за едно или повече изисквания към информацията) от името на всички регистранти.

Всеки регистрант (включително водещия регистрант) съобщава информацията на своя правен субект за състава на веществото, което конкретно той произвежда или внася, в раздел 1.2 от своето досие. Това означава, че водещият регистрант съобщава

³⁶Указания относно вписването на „граничния състав на веществото“ може да се намерят в наръчника „Как да изготвяме досиета за регистрация и НИРДСПП“ на адрес: <http://echa.europa.eu/manuals>.

както информацията за състава на SIP, така и информацията за състава на веществото на своя правен субект в раздел 1.2 от своето досие, докато всички други регистранти съобщават собствените си специфични информации за състава. Всяка стандартна регистрация трябва да включва също така съответната аналитична информация в раздел 1.4 от IUCLID.

Всеки регистрант трябва да докаже че информацията за състава на веществата, които конкретно той специално произвежда или внася, е обхваната от SIP, отчетен в „граничния състав“, и освен това е обхваната от данните в приложения VII—XI, подадени в досието на водещия регистрант (при липса на оправдани откази).

Технически указания как да се докладва информацията за състава във формат IUCLID са дадени в наръчниците на IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

Фигура 2 (следващата страница): Схематичен преглед на стъпките, които потенциалните регистранти предприемат от определяне на задълженията си за регистрация (1) до дефиниране на своя SIP за единствената си идентичност на веществото (4) и накрая подаване на заявките си за регистрация при формално изпълнение на задълженията за регистриране на своите вещества (8).

Стъпка 1

Правен субект (ПС) 1 произвежда „А“ със следните чистоти:

- 80% А, 5% В, 5% С, 10% D
- 85% А, 2,5% В, 2,5% С, 10% D
- 95% А, 5% D
- 85% А, 15% В
- 99,9% А, 0,01% В/С/D
- 85% А, 2,5% В, 2,5% С, 10% D

Правен субект (ПС) 2 произвежда „А“ със следните чистоти:

- 80% А, 5% Е, 5% F, 10% G
- 95% А, 5% G
- 85% А, 15% G

Правен субект (ПС) 3 произвежда „А“ със следните чистоти:

- 80% А, 5% В, 15% С
- 85% А, 5% В, 5% С, 5% F
- 85% А, 15% С

Всеки изходен продукт изпълнява определението на вещество съгласно член 3, параграф 1
Всички изходни продукти трябва да бъдат регистрирани

Използвайте основното ръководство за идентифициране на веществото, за да определите идентичността на веществото, подлежащо на регистриране

$A > 80\%$ (т/т) при всички състави

Може да се определи като добре дефинирано еднокомпонентно вещество с идентичност „А“

Наименование и други
идентификатори, определени от ПС 1:
„А“

Информация за състава на ПС:

80—100% А
0—15% В
0—5% С
0—10% D

Наименование и други
идентификатори, определени от ПС 2:
„А“

Информация за състава на ПС:

80—100% А
0—5% Е
0—5% F
0—15% G

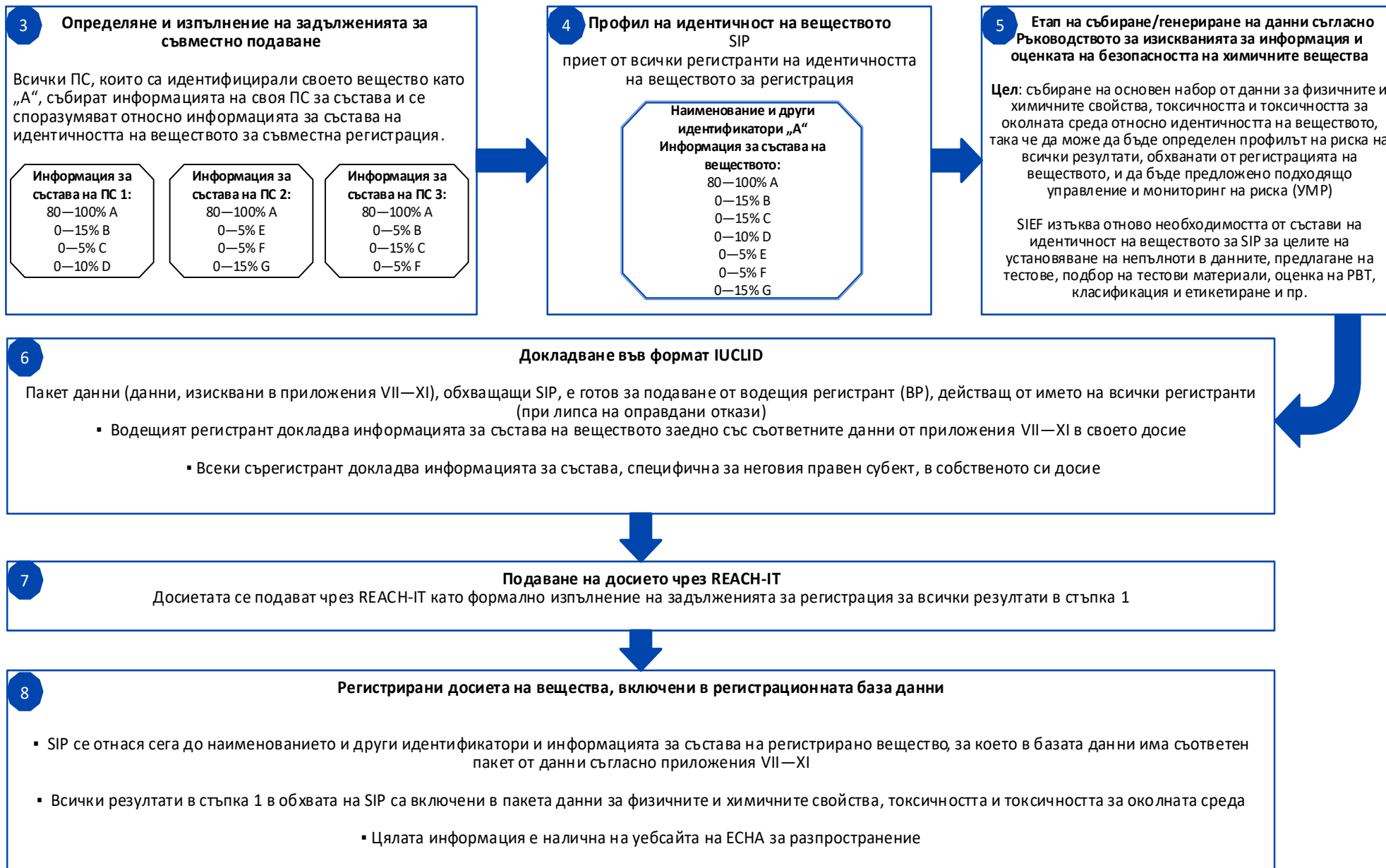
Наименование и други
идентификатори, определени от ПС 3:
„А“

Информация за състава на ПС:

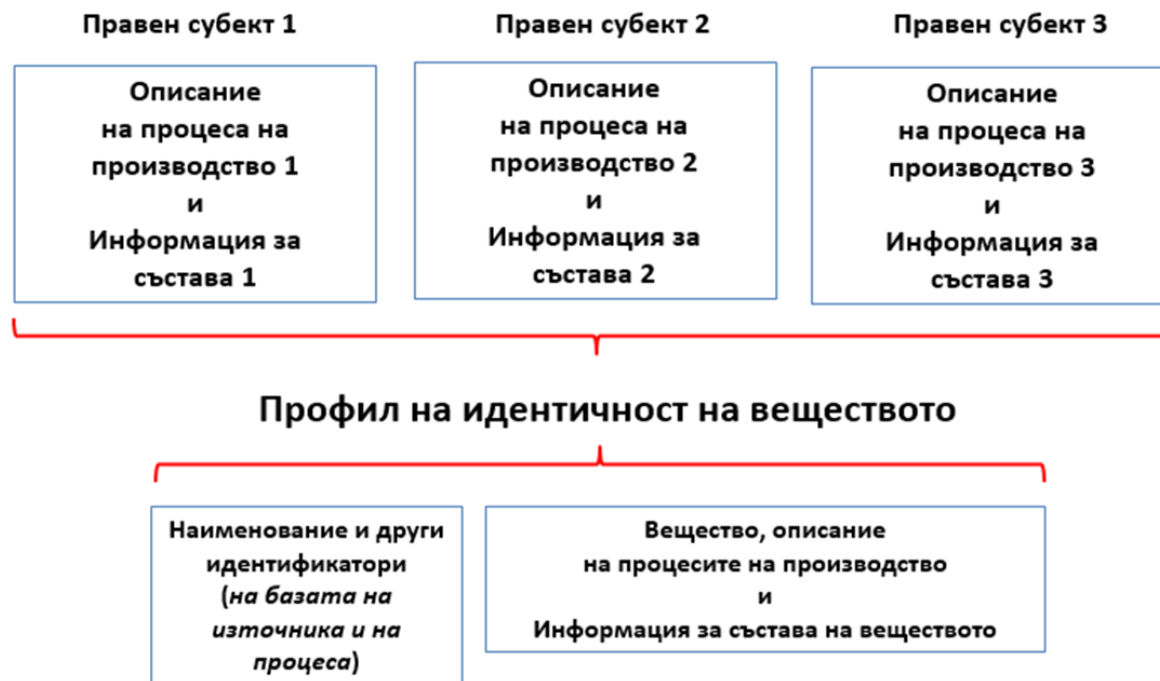
80—100% А
0—5% В
0—15% С
0—5% F

Бележка към фигурата: Идентичността на веществото е проста еднокомпонентна за опростено визуализиране. При по-сложни вещества стъпките са същите, но е възможно да се използват допълнителни елементи и/или заместители за информацията за състава, за да се определи идентичността на веществото. Процесът на определяне на SIP може освен това да включва итерации между стъпки 3 и 5.

Стъпка 2



Фигура 3: Илюстративна схема за определяне на SIP (стъпка 4 във фигура 2) за вещество тип UVCB въз основа на дескриптори на източника и процеса от описания на източника и процеса на отделния правен субект.



ЕВРОПЕЙСКА АГЕНЦИЯ ПО ХИМИКАЛИ
P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://echa.europa.eu)