

POKYNY

Pokyny pro identifikaci a pojmenovávání látek podle nařízení REACH a CLP

prosinec 2023
Verze 3.0



PRÁVNÍ UPOZORNĚNÍ

Cílem tohoto dokumentu je pomoci uživatelům při plnění jejich povinností vyplývajících z nařízení REACH a CLP. Dovolujeme si nicméně uživatele upozornit, že texty nařízení REACH a CLP jsou jediným závazným právním zdrojem a že informace v předkládaném dokumentu nepředstavují právní poradenství. Za způsob využití těchto informací nese výlučnou odpovědnost uživatel. Evropská agentura pro chemické látky nepřebírá odpovědnost za způsob využití informací uvedených v tomto dokumentu.

Pokyny pro identifikaci a pojmenování látek podle nařízení REACH a CLP

Referenční číslo: ECHA-23-H-07-CS
Katalogové číslo: ED-09-23-444-CS-N
ISBN: 978-92-9468-313-7
DOI: 10.2823/578040
Datum vydání: prosinec 2023
Jazyk: CS

© Evropská agentura pro chemické látky, 2023
Titulní strana © Evropská agentura pro chemické látky

Máte-li otázky nebo připomínky týkající se tohoto dokumentu, zašlete je prosím (s uvedením referenčního čísla a data vydání) prostřednictvím formuláře žádosti o informace. Tento formulář je k dispozici na internetových stránkách agentury ECHA na adrese:

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

Evropská agentura pro chemické látky

Poštovní adresa: P. O. Box 400, FI-00121 Helsinky, Finsko
Adresa pro osobní návštěvu: Telakkakatu 6, 00150, Helsinky, Finsko

PŘEDMLUVA

Tento dokument popisuje, jak identifikovat a pojmenovat látku podle nařízení REACH a CLP. Je součástí souboru pokynů, jejichž cílem je pomoci všem partnerům při plnění povinností vyplývajících z nařízení REACH a CLP. Tyto dokumenty obsahují podrobné pokyny k řadě základních postupů podle nařízení REACH a CLP i k některým konkrétním vědeckým nebo technickým metodám, které průmyslové subjekty a příslušné orgány podle nařízení REACH a CLP musejí používat.

Pokyny byly navrženy a projednány v rámci projektů provádění registrace, hodnocení, povolování a omezování chemických látek (RIP) pod vedením útvarů Evropské komise, které zahrnují všechny partnery: členské státy, průmyslové subjekty a nevládní organizace. Tyto pokyny lze získat na internetových stránkách Evropské agentury pro chemické látky (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Na těchto stránkách budou průběžně zveřejňovány další dokumenty s pokyny a aktualizované verze dokumentů stávajících.

HISTORIE DOKUMENTU

| Verze | Poznámky | Datum |
|-----------|--|---|
| Verze 1 | První vydání | červen 2007 |
| Verze 1.1 | <p>Oprava</p> <ul style="list-style-type: none"> - Do názvu celého dokumentu a do názvů kapitol byl přidán odkaz na nařízení CLP (nařízení (ES) č. 1272/2008 ze dne 16. prosince 2008). - Byl přidán doplňující text s cílem objasnit rozsah působnosti pokynů. V celém dokumentu byl odstraněn nadbytečný text. - V celém textu byly podle potřeby doplněny odkazy na nařízení CLP. - Výraz „TGD“ byl v celém dokumentu změněn na „pokyny“. - Výraz „přípravek“ byl v celém dokumentu změněn na „směs“. - Výraz „bod“ byl v celém dokumentu změněn na „oddíl“. - Výraz „předběžná registrace“ byl v celém dokumentu změněn na výraz „(pozdní) předběžná registrace“. - Byly přidány zkratky AAS a CLP a odstraněny zkratky RIP a TGD. - Byl upraven popis slitiny, seznamu ES a nástroje IUCLID. Byly přidány definice čísla ES, pořadového čísla, směsi a oznámené látky. Definice „přípravku“ byla vypuštěna. - Oddíl 3.2 byl revidován s cílem vyjasnit obsah. - Oddíl 3.3 byl revidován s cílem vyjasnit obsah, pokud jde o povinnosti podle nařízení CLP. - V oddíle 4.2.2.1 byl změněn způsob uvádění složek z koncentrace vyjádřené v procentech na abecední pořadí, takže z pořadí na seznamu nelze vyvodit relativní složení. - V oddíle 4.2.3.1 byl změněn výraz „mřížka“ na „krystal“. - Oddíl 4.3.1.2.3 byl revidován s cílem vyjasnit obsah. - Do oddílu 5 byl přidán odkaz na Příručku pro předkládání údajů, část 18 – „Jak oznamovat identifikaci látky v IUCLID 5 v rámci | listopad 2011 (pouze v angličtině) |

| | | |
|-----------|--|---------------|
| | <p>registrace podle nařízení REACH“.</p> <ul style="list-style-type: none">- Oddíl 5 byl revidován s cílem vyjasnit obsah.- V oddíle 6 byl popis předběžné registrace změněn na popis (pozdní) předběžné registrace.- V dodatku 1 byly aktualizovány nefunkční hypertextové odkazy.- Oddíl 4.3 dodatku 2 byl odstraněn, jelikož jeho obsah lze nalézt na příslušné internetové stránce. | |
| Verze 1.2 | <p>Oprava Definice „zavedené látky“ byla sjednocena s definicí obsaženou v nařízení (ES) č. 1907/2006, která byla zavedena nařízením Rady (ES) č. 1354/2007 a opravou uvedeného nařízení, Úř. věst. L 36, 5.2.2009, s. 84 (nařízení (ES) č. 1907/2006). Upozorňujeme, že změny ve verzích 1.1 a 1.2 byly u všech jazyků s výjimkou angličtiny shrnuty do jediné přeložené verze 1.2.</p> | březen 2012 |
| Verze 1.3 | <p>Oprava Do kapitoly 7.6 byly vloženy dva chybějící strukturní vzorce.</p> | únor 2014 |
| Verze 1.4 | <p>Oprava</p> <ul style="list-style-type: none">- Formát dokumentu byl upraven tak, aby byl v souladu se stávající identitou agentury.- Kapitola 8, která uváděla technické pokyny založené na zastaralé verzi nástroje IUCLID, byla vypuštěna.- V oddíle 7.5 byl opraven popis u kristobalitu a křemene a smazán odkaz na směrnici 2000/30/ES.- Byly vypuštěny odkazy na kapitolu 8 a na příručky pro předkládání údajů a přidány odkazy na nové příručky agentury ECHA.- Dodatek III byl vypuštěn a informace byly přesunuty do tabulky verzí dokumentu.- Byly opraveny nefunkční odkazy na internetové stránky a redakční chyby. | červen 2016 |
| Verze 2.0 | <p>Částečná aktualizace:</p> <ul style="list-style-type: none">- Byl přidán nový dodatek III s popisem konceptu profilu identity látky. | prosinec 2016 |

| | | |
|-----------|---|---------------|
| | <ul style="list-style-type: none">- V kapitole 1 byla doplněna informace o novém dodatku III.- Byly opraveny překlepy a redakční chyby. | |
| Verze 2.1 | Oprava, jejímž cílem je odstranit typografické chyby v textu a nedostatky v informacích o složení v příkladech uvedených v obrázku 2 dodatku III. | květen 2017 |
| Verze 3.0 | Aktualizace: <ul style="list-style-type: none">- Byl zajištěn soulad se změnami zavedenými nařízením Komise (EU) 2022/477 ze dne 24. března 2022.- Byly odstraněny odkazy na (pozdní) předběžnou registraci.- Byly opraveny překlepy a redakční chyby.- Byly přidány odkazy na stránky podpory agentury ECHA a otázky a odpovědi.- Byl odstraněn odstavec 5 dodatku III týkající se přechodu z nástroje IUCLID 5 na nástroj IUCLID 6. | prosinec 2023 |

Obsah

| | |
|--|-----------|
| 1. OBECNÉ INFORMACE | 9 |
| 1.1. Cíle | 9 |
| 1.2. Rozsah působnosti | 10 |
| 1.3. Struktura pokynů | 11 |
| 2. DEFINICE A ZKRATKY | 12 |
| 2.1. Zkratky | 12 |
| 2.2. Definice | 14 |
| 3. RÁMEC PRO IDENTIFIKACI LÁTEK V NAŘÍZENÍCH REACH A CLP | 17 |
| 3.1. Definice látky | 17 |
| 3.2. Číselné identifikátory | 17 |
| 3.2.1. Seznam ES | 17 |
| 3.2.2. Pořadová čísla | 19 |
| 3.3. Požadavky na identifikaci látky v nařízeních REACH a CLP | 19 |
| 4. POKYNY PRO IDENTIFIKACI A POJMENOVÁNÍ LÁTEK PODLE NAŘÍZENÍ REACH A CLP | 22 |
| 4.1. Úvod | 22 |
| 4.2. Látky s přesně definovaným složením | 28 |
| 4.2.1. Jednosložkové látky | 29 |
| 4.2.2. Vícesložkové látky | 32 |
| 4.2.3. Látky s definovaným chemickým složením a další hlavní identifikátory | 35 |
| 4.3. Látky UVCB | 36 |
| 4.3.1. Obecné pokyny pro látky UVCB | 37 |
| 4.3.2. Zvláštní typy látek UVCB | 45 |
| 5. KRITÉRIA PRO OVĚŘENÍ, ZDA SE JEDNÁ O TOTOŽNÉ LÁTKY | 54 |
| 6. IDENTITA LÁTKY V RÁMCI DOTAZOVÁNÍ | 61 |
| 7. PŘÍKLADY | 62 |
| 7.1. Diethyl-peroxydikarbonát | 62 |
| 7.2. ZOLIMIDIN | 63 |
| 7.3. Směs izomerů | 63 |
| 7.4. Vonná látka AH | 67 |
| 7.5. Minerály | 73 |
| 7.6. Éterický olej z <i>Lavandin grosso</i> | 76 |
| 7.7. Chryzantémový olej a izomery izolované z tohoto oleje | 82 |
| 7.8. Fenol, isopropylovaný, fosfát | 85 |

| | |
|--|------------|
| 7.9. Kvartérní amoniové sloučeniny | 87 |
| 7.10. ropné látky..... | 91 |
| 7.10.1. Benzinový pool (C ₄ -C ₁₂)..... | 91 |
| 7.10.2. Plynové oleje (ropné)..... | 93 |
| 7.11. Enzymy | 94 |
| 7.11.1. Subtilizin..... | 94 |
| 7.11.2. α-amyláza | 95 |
| DODATEK I – PODPŮRNÉ MATERIÁLY | 97 |
| DODATEK II – TECHNICKÉ POKYNY PRO PARAMETRY IDENTIFIKACE LÁTEK..... | 101 |
| DODATEK III – IDENTIFIKACE LÁTKY A SPOLEČNÉ PŘEDKLÁDÁNÍ ÚDAJŮ | 117 |

Seznam tabulek

| | |
|---|----|
| Tabulka 1: Zkratky | 12 |
| Tabulka 2: Definice..... | 14 |
| Tabulka 3: Parametry identifikace látky uvedené v oddíle 2 přílohy VI nařízení REACH ... | 20 |
| Tabulka 4: Seskupení hlavních identifikátorů u příkladů, které představují různé typy přesně definovaných podobných látek | 23 |
| Tabulka 5: Seskupení hlavních identifikátorů u příkladů představujících různé typy látek UVCB | 24 |

Seznam obrázků

| | |
|--|-----|
| Obrázek 1: Klíč ke kapitolám a přílohám tohoto dokumentu k nalezení příslušných pokynů pro různé typy látek..... | 27 |
| Obrázek 2 (na násl. stránce): Schematický přehled kroků potenciálních žadatelů o registraci od určení registrační povinnosti (1) po definování SIP pro jednu identitu látky (4) a předložení registrace při formálním splnění povinnosti registrovat jejich látky (8). | 123 |
| Obrázek 3: Schematické znázornění definování SIP (krok 4 na obrázku 2) pro látku typu UVCB identifikovanou na základě deskriptorů zdroje a procesu z popisů zdroje a procesu individuálního právního subjektu. | 126 |

1. Obecné informace

Nařízení REACH (nařízení (ES) č. 1907/2006) zavádí systém registrace, hodnocení, povolování a omezování chemických látek a za účelem provádění nařízení zřizuje Evropskou agenturu pro chemické látky (ECHA).¹

Nařízení CLP (nařízení (ES) č. 1272/2008) je nové evropské nařízení o klasifikaci, označování a balení chemických látek a směsí.² Tento právní předpis zavádí v celé EU nový systém klasifikace a označování chemických látek, který vychází z globálně harmonizovaného systému Organizace spojených národů (UN GHS).

Nařízení REACH se zaměřuje na látky. Aby se zajistilo řádné fungování postupů podle nařízení REACH, je nezbytná správná a jednoznačná identifikace látky. Tyto pokyny pro identifikaci a pojmenovávání látek mají být nápomocny průmyslovým subjektům, členským státům a Evropské agentuře pro chemické látky.

Vycházejí ze zkušeností s identifikací látek podle předchozích právních předpisů týkajících se chemických látek (směrnice 67/548/EHS a směrnice 98/8/EHS). Základem pro zpřesnění těchto pokynů je nicméně stávající praxe týkající se identity látek podle nařízení REACH a nařízení o klasifikaci, označování a balení látek a směsí (CLP). Dále byly vzaty v úvahu přístupy pocházející z jiných režimů zacházení s chemickými látkami mimo Evropskou unii, pokud to bylo vhodné.

Do dokumentu byly zařazeny rovněž specifické pokyny zaměřené na různé typy látek.

Tyto pokyny by se měly používat k identifikaci a pojmenovávání látek, které podléhají regulaci podle nařízení REACH a CLP.

1.1. Cíle

Cílem těchto pokynů je poskytnout výrobcům a dovozcům pokyny, jak zaznamenávat a oznamovat identitu látky v kontextu nařízení REACH a CLP. Tento dokument obsahuje pokyny pro pojmenovávání látek, které je při identifikaci látky významným a klíčovým prvkem. Uvádí také pokyny pro rozhodování, zda je možné látky v kontextu nařízení REACH a CLP považovat za totožné a jak lze provádět zásadu „jedna látka, jedna registrace“ prostřednictvím vymezení profilu identity látky (SIP). Identifikace totožných látek, na něž se může vztahovat tentýž SIP, je důležitá pro dotazování, sdílení údajů, společné předložení údajů, oznámení látky na seznam klasifikací a označení a pro harmonizaci klasifikací a označení.

Identifikaci látek by měli pokud možno provádět odborníci v daném odvětví. Pro ty průmyslové subjekty, které mají s identifikací látek málo zkušeností, byly do tohoto dokumentu ve formě přílohy zařazeny doplňující pokyny k parametrům identifikace.

Dále tyto pokyny uvádějí odkazy na příslušné nástroje na podporu charakterizace a kontroly chemické identity látek.

¹ Nařízení Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1907/2006 ze dne 18. prosince 2006 o registraci, hodnocení, povolování a omezování chemických látek, o zřízení Evropské agentury pro chemické látky, o změně směrnice 1999/45/ES a o zrušení nařízení Rady (EHS) č. 793/93, nařízení Komise (ES) č. 1488/94, směrnice Rady 76/769/EHS a směrnic Komise 91/155/EHS, 93/67/EHS, 93/105/ES a 2000/21/ES (dále jen „nařízení REACH“).

² Nařízení Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1272/2008 ze dne 16. prosince 2008 o klasifikaci, označování a balení látek a směsí, o změně a zrušení směrnic 67/548/EHS a 1999/45/ES a o změně nařízení (ES) č. 1907/2006 (Text s významem pro EHP) (dále jen „nařízení CLP“).

Podrobnější informace o tom, jak vyplnit informace o identitě látky v nástroji IUCLID v kontextu různých postupů podle nařízení REACH a CLP, naleznete v příručkách agentury ECHA na adrese <http://echa.europa.eu/manuals..>

1.2. Rozsah působnosti

Podle článku 1 nařízení REACH se uvedené nařízení týká výroby, dovozu, uvádění na trh a použití látek samotných a ve směsích a předmětech. Směsi a předměty jako takové nejsou nařízením REACH regulovány.

V souladu s článkem 10 nařízení REACH registrace vyžaduje, aby byla identita látky zaznamenána za pomoci parametrů uvedených v oddíle 2 přílohy VI nařízení REACH (viz Tabulka 3). Podobné parametry (jako ty uvedené v oddílech 2.1 až 2.3.4 přílohy VI nařízení REACH) jsou vyžadovány k zaznamenání identity látky pro účely oznámení v souladu s čl. 40 odst. 1 nařízení CLP. Tyto pokyny se zaměřují na náležitou identifikaci látek, které spadají do právní definice látky podle nařízení REACH a CLP, a uvádějí pokyny ohledně parametrů identifikace uvedených v oddíle 2 přílohy VI nařízení REACH. Poskytnuté informace o identitě látky mají být dostačující k identifikaci každé látky. Pokud není technicky možné požadované informace dodat nebo pokud se to nezdá být z vědeckého hlediska nezbytné, je možné jeden nebo více parametrů identifikace látky vypustit. Důvody takového vypuštění informací se musí jasně uvést a musí být vědecky zdůvodněné.

Přístup k identifikaci látky závisí na typu látky. Proto se uživatel těchto pokynů odkazuje na konkrétní kapitoly týkající se různých typů látek.

Důležitým nástrojem při identifikaci látky jsou seznamy ES používané v rámci směrnice 67/548/EHS (seznamy EINECS, ELINCS a NLP). V kapitole 3.2 jsou uvedeny pokyny týkající se úlohy těchto seznamů v rámci nařízení REACH.

Látky spadající do rozsahu působnosti nařízení REACH a CLP (a tudíž i těchto pokynů) jsou obvykle výsledkem chemických reakcí, které jsou součástí výrobního procesu látky, a mohou obsahovat vícero odlišných složek. Látky, jak jsou definovány v nařízeních REACH a CLP, rovněž zahrnují látky chemicky odvozené nebo izolované z přirozeně se vyskytujících materiálů, které se mohou skládat z jediného prvku nebo molekuly (např. čisté kovy nebo určité minerály) nebo několika složek (např. éterické oleje, kovové lechy či kamínky, které se vytvářejí při tavení kovových sulfidů). Látky, které jsou regulovány jinými právními předpisy Společenství, jsou však v řadě případů z povinnosti registrace podle nařízení REACH vyňaty (viz článek 2 nařízení REACH). Od registrace jsou osvobozeny rovněž látky uvedené v příloze IV nařízení REACH a látky splňující určitá kritéria specifikovaná v příloze V nařízení REACH. Je třeba upozornit, že ačkoliv látka může být osvobozena od registrace, nemusí to nezbytně znamenat, že nepodléhá ostatním hlavám nařízení REACH či požadavkům nařízení CLP.

Nařízení REACH vyžaduje, aby se žadatelé o registraci téže látky spojili a dohodli na společném předložení určitých informací o látce (zásada „jedna látka, jedna registrace“)³. K provádění této zásady je zapotřebí vysvětlit, jak žadatelé o registraci definovali rozsah svého SIP.

³ Podrobné informace o sdílení údajů o téže látce v rámci společného předkládání údajů naleznete v *Pokynech pro sdílení údajů*.

1.3. Struktura pokynů

V kapitole 1 jsou uvedeny základní informace, jako jsou cíle a rozsah působnosti těchto pokynů, a v kapitole 2 naleznete použité zkratky a definice. Kapitola 3 obsahuje příslušné informace o rámci pro identifikaci látek v nařízení REACH, např. definici látky a požadavky na informace v právním textu.

Praktické pokyny pro identifikaci a pojmenování látek jsou uvedeny v kapitole 4.

- Kapitola 4.1 popisuje rozlišování mezi „přesně definovanými“ a „nedostatečně definovanými“ látkami, přičemž v rámci těchto dvou hlavních skupin existují různé typy látek, na které se vztahují specifické pokyny pro identifikaci látek. Je zde uveden diagram, který uživatele navede na příslušnou kapitolu s pokyny pro identifikaci určenými pro konkrétní typ látky.
- V následujících kapitolách jsou ve formě souboru pravidel s výkladem a příklady uvedeny konkrétní pokyny pro jednotlivé typy látek.

Kapitola 5 obsahuje pokyny, jak zjistit, zda je možné látky považovat za stejné či nikoliv. V kapitole 6 jsou uvedeny pokyny ohledně identity látky v rámci postupu dotazování.

Kapitola 7 navíc obsahuje několik podrobných příkladů zpracovaných s použitím praktických pokynů uvedených v kapitole 4.

Dodatek I uvádí odkazy na příslušné nástroje na podporu charakterizace a kontroly chemické identity látek.

Dodatek II poskytuje další základní informace o jednotlivých parametrech identifikace látky používaných v postupu identifikace látek, jako jsou pravidla názvosloví, čísla ES a čísla CAS, zápisy molekulového vzorce a strukturního vzorce a analytické metody.

Dodatek III poskytuje informace o konceptu SIP, jeho významu z hlediska povinnosti společného předkládání údajů a o tom, jak by měl být vymezen a předkládán.

2. Definice a zkratky

2.1. Zkratky

V Tabulka 1 jsou uvedeny a vysvětleny zkratky použité v těchto pokynech.

Tabulka 1: Zkratky

| Zkratka | Význam |
|-----------------------------|---|
| AAS | atomová absorpční spektroskopie |
| AISE | Mezinárodní asociace pro mýdla, čisticí prostředky a prostředky na údržbu |
| CAS | Chemical Abstracts Service (nepřekládá se) |
| CLP | nařízení (ES) č. 1272/2008 o klasifikaci, označování a balení látek a směsí |
| EINECS | Evropský seznam existujících obchodovaných chemických látek |
| EK | Evropská komise |
| ELINCS | Evropský seznam oznámených chemických látek |
| ENCS | Existující a nové chemické látky (Japonsko) |
| ESIS | Evropský informační systém o chemických látkách |
| EU | Evropská unie |
| GC (plynová chromatografie) | plynová chromatografie |
| GHS | Globálně harmonizovaný systém |
| HPLC | vysoce účinná kapalinová chromatografie |
| INCI | Mezinárodní nomenklatura kosmetických přísad |
| InChI | mezinárodní chemický identifikátor IUPAC |
| IR | infračervený |
| ISO | Mezinárodní organizace pro normalizaci |
| IUBMB | Mezinárodní unie pro biochemii a molekulární biologii |
| IUCLID | Mezinárodní jednotná databáze informací o chemických látkách |
| IUPAC | Mezinárodní unie pro čistou a užitou chemii |
| MS | hmotnostní spektroskopie |
| NLP | látka, která není nadále pokládána za polymer |
| NMR | nukleární magnetická rezonance |
| ppm | miliontina |

| | |
|--------|--|
| REACH | registrace, hodnocení, povolování a omezování chemických látek |
| SIEF | fórum pro výměnu informací o látce |
| SIP | profil identity látky |
| SMILES | Simplified Molecular Input Line Entry Specification (nepřekládá se) |
| TSCA | zákon pro kontrolu toxických látek (USA) |
| UV/VIS | ultrafialový/viditelný |
| UVCB | látky s neznámým nebo proměnlivým složením, komplexní reakční produkty nebo biologické materiály |
| w/w | hmotnostní % (zkratkou hmot. %) |
| XRD | rentgenová difrakce |
| XRF | rentgenová fluorescence |

2.2. Definice

V Tabulka 2 jsou uvedeny a popsány definice použité v těchto pokynech.

Tyto definice zohledňují definice uvedené v nařízeních REACH a CLP. Proto jsou některé výrazy definovány jinak, než jak se používaly v rámci směrnice 67/548/EHS.

Tabulka 2: Definice

| Definice | Popis |
|---------------------------------|--|
| Číslo ES | Číslo ES je číselný identifikátor látek na seznamu ES. |
| Hlavní složka | Složka látky, která není ani přídatnou látkou ani nečistotou, jež tvoří podstatnou část této látky, a proto se používá k pojmenování látky a její podrobné identifikaci. |
| Chemicky neupravená látka* | Látka, jejíž chemická struktura se nezměnila ani poté, co prošla chemickým procesem nebo zpracováním nebo fyzikální mineralogickou přeměnou, například za účelem odstranění nečistot. |
| Chromatografický profil | Představuje složení látky podle charakteristického rozložení složek na analytickém chromatogramu. |
| IUCLID | Mezinárodní jednotná databáze informací o chemických látkách IUCLID je databáze a systém řízení sloužící ke správě údajů o chemických látkách. |
| Jednosložková látka | Jednosložkovou látkou se zpravidla rozumí látka definovaná složením, ve kterém je jedna hlavní složka přítomna v koncentraci nejméně 80 % hmot. |
| Látka vyskytující se v přírodě* | Přírodně se vyskytující látka jako taková, nezpracovaná nebo zpracovaná pouze manuálně, mechanicky nebo gravitačně, rozpuštěním ve vodě, flotací, extrakcí vodou, parní destilací nebo zahříváním výhradně za účelem odstranění vody anebo extrahovaná ze vzduchu jakýmkoli postupem. |
| Látka* | Chemický prvek a jeho sloučeniny v přírodním stavu nebo získané výrobním procesem, včetně všech přídatných látek nutných k uchování jeho stability a všech nečistot vznikajících v použitém procesu, avšak s vyloučením všech rozpouštědel, která lze oddělit bez ovlivnění stability látky nebo změny jejího složení. |

| | |
|-----------------|---|
| Meziprodukt* | <p>Látka, která je vyráběna a spotřebovávána nebo používána pro účely chemické výroby, aby byla přeměněna na jinou látku (dále jen <i>syntéza</i>):</p> <p>a) <u>neizolovaným meziproduktem</u> se rozumí meziprodukt, který není během syntézy záměrně odebírán (vyjma odběru vzorků) ze zařízení, ve kterém syntéza probíhá. Toto zařízení zahrnuje reakční nádobu, její pomocná zařízení a veškerá zařízení, kterými látky procházejí během kontinuálního nebo vsádkového procesu, včetně potrubí pro přepravu z jedné nádoby do jiné pro účely dalšího reakčního kroku, avšak vyjma nádrže nebo jiné nádoby, ve kterých se látky skladují po výrobě;</p> <p>b) <u>izolovaným meziproduktem na místě</u> se rozumí meziprodukt, který nesplňuje kritéria pro neizolovaný meziprodukt a jehož výroba a syntéza jiných látek z tohoto meziproduktu se uskutečňuje na stejném místě provozovaném jedním nebo více právními subjekty;</p> <p>c) <u>přepřavovaným izolovaným meziproduktem</u> se rozumí meziprodukt, který nesplňuje kritéria pro neizolovaný meziprodukt a je přepřavován nebo dodáván na jiná místa.</p> |
| Monomer* | <p>Látka, která je za specifických podmínek příslušné polymerační reakce, použité pro daný proces, schopna vytvářet kovalentní vazby se sekvencí dalších stejných nebo nestejných odlišných molekul.</p> |
| Nečistota | <p>Nechtěná složka přítomná v látce v důsledku výroby. Může pocházet z výchozích materiálů nebo může být výsledkem sekundárních či nedokonalých reakcí během výrobního procesu. Je sice přítomna v konečné látce, ale nebyla přidána záměrně.</p> |
| Oznámená látka* | <p>Látka, pro kterou bylo podáno oznámení a kterou bylo možné uvést na trh podle směrnice 67/548/EHS.</p> |
| Polymer* | <p>Látka, která se skládá z molekul charakterizovaných sekvencí jednoho nebo více typů monomerních jednotek. U těchto molekul musí existovat rozdělení podle molekulové hmotnosti, přičemž rozdíly v molekulové hmotnosti jsou primárně způsobeny rozdíly v počtu monomerních jednotek. Polymer obsahuje:</p> <p>a) prostou hmotnostní většinu molekul obsahujících nejméně tři monomerní jednotky, které jsou kovalentně vázány alespoň k jedné jiné monomerní jednotce nebo jinému reaktantu;</p> <p>b) méně než prostou hmotnostní většinu molekul stejné molekulové hmotnosti.</p> <p>V souvislosti s touto definicí se „monomerní jednotkou“ rozumí zreagovaná forma monomeru v polymeru.</p> |
| Pořadové číslo | <p>Číslo přidělené agenturou. Číslo automaticky přidělené nástrojem REACH-IT. Používá se u všech příchozích platných předložení dokumentace (např. PPORD, dotazování, registrace či oznámení klasifikace a označení).</p> |

| | |
|--------------------|---|
| Předmět* | Věc, která během výroby získává určitý tvar, povrch nebo vzhled určující její funkci ve větší míře než její chemické složení. |
| Přidatná látka | Látka, která byla záměrně přidána, aby stabilizovala látku. ⁴ |
| Seznam ES | Ačkoliv není v nařízení REACH právně definován, seznam ES je kombinací tří nezávislých a právně schválených evropských seznamů látek pocházejících z předchozích regulačních rámců EU pro chemické látky: EINECS, ELINCS a NLP (seznam látek, které nejsou nadále pokládány za polymery). Položky v seznamu ES se skládají z chemického názvu a čísla (název ES a číslo ES), čísla CAS, molekulového vzorce (je-li k dispozici) a popisu (u určitých typů látek). |
| Slitina* | Kovový materiál, makroskopicky homogenní, sestávající ze dvou nebo více prvků spojených tak, že je mechanicky nelze snadno oddělit. Slitiny se považují za speciální směsi. |
| Složka látky | Jakýkoli jednotlivý druh látky přítomný v látce, který je možné charakterizovat pomocí její jedinečné chemické identity. |
| Složka směsi | Látka záměrně přidaná za účelem vytvoření směsi. |
| Směs* | Směs nebo roztok složený ze dvou nebo více látek. |
| Vícesložková látka | Vícesložkovou látkou se zpravidla rozumí látka definovaná složením, ve kterém je více než jedna hlavní složka přítomna v koncentraci $\geq 10\%$ hmot. a $< 80\%$ hmot. |
| Výroba* | Výroba látek nebo těžba látek v přírodním stavu. |

* Definice podle článku 3 nařízení REACH.

⁴ V jiných oblastech může mít přidatná látka také jiné funkce, např. regulátor pH či barvicí činidlo. V nařízení REACH a těchto pokynech se nicméně za přidatnou látku považuje stabilizační činidlo.

3. Rámec pro identifikaci látek v nařízeních REACH a CLP

Nařízení REACH a CLP obsahují definici látky a nařízení REACH rovněž uvádí parametry identifikace látky (oddíl 2 přílohy VI), které se mají uvést při identifikaci látky za účelem registrace.

Tato kapitola popisuje definici látky v nařízeních REACH a CLP (kapitola 3.1), uvádí obecné pokyny týkající se použití seznamu ES z předchozího regulačního rámce pro chemické látky (kapitola 3.2) a poskytuje další základní informace o požadavcích na identifikaci látek stanovených v nařízení REACH (kapitola 3.3).

3.1. Definice látky

Látka je definována v nařízení REACH (čl. 3 odst. 1) i v nařízení CLP (čl. 2 odst. 7):

Látkou se rozumí chemický prvek a jeho sloučeniny v přírodním stavu nebo získané výrobním procesem, včetně všech přídatných látek nutných k uchování jeho stability a všech nečistot vznikajících v použitém procesu, avšak s vyloučením všech rozpouštědel, která lze oddělit bez ovlivnění stability látky nebo změny jejího složení.

Definice látky v nařízeních REACH a CLP se shoduje s definicí látky použitou v sedmé změně směrnice o nebezpečných látkách (směrnice 92/93/EHS, kterou se mění směrnice 67/548/EHS). V obou případech tato definice přesahuje čistou chemickou sloučeninu definovanou jedinou molekulovou strukturou. Definice látky zahrnuje různé složky, například nečistoty.

3.2. Číselné identifikátory

3.2.1. Seznam ES

Existují tři samostatné seznamy zřízené v předchozím regulačním rámci pro chemické látky. Jsou to Evropský seznam existujících obchodovaných chemických látek (EINECS), Evropský seznam oznámených chemických látek (ELINCS) a seznam látek, které nejsou nadále pokládány za polymery (NLP).

Látky, které se nacházely na evropském trhu v době mezi 1. lednem 1971 a 18. zářím 1981, jsou uvedeny na Evropském seznamu existujících obchodovaných chemických látek (EINECS).^{5, 6, 7.}

⁵ Seznam EINECS vychází ze seznamu ECOIN (**E**uropean **C**ORE **I**NVENTORY), do něhož mohou průmyslové subjekty podávat dodatečná hlášení o látkách (v souladu s kritérii pro oznamování látek do seznamu EINECS). Seznam ECOIN byl vytvořen spojením různých seznamů chemických látek, o nichž se předpokládalo, že se nacházejí na evropském trhu (např. TSCA). Seznam EINECS byl zveřejněn dne 15. června 1990 a obsahuje více než 100 000 látek. Během používání tohoto seznamu se přišlo na řadu chyb (tiskové chyby, např. nesprávný chemický název, vzorec nebo registrační číslo CAS). Proto bylo dne 1. března 2002 publikováno opravené znění.

⁶ ECB (2005), Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/EEC (Directives 79/831/EEC and 92/32/EEC) (Příručka rozhodnutí k provedení šesté a sedmé změny směrnice 67/548/EHS (směrnice 79/831/EHS a 92/32/EHS)), nedůvěrná verze. EUR 20519 EN. Aktualizovaná verze z června 2005.

⁷ Geiss, F., Del Bino, G., Blech, G. a kol. (1992), seznam EINECS existujících chemických látek na trhu ES. Tox Env Chem, sv. 37, s. 21–33.

Tento seznam obsahuje přibližně 100 000 látek identifikovaných pomocí chemického názvu (a u určitých typů látek i na základě popisu), čísla CAS a sedmimístného čísla zvaného číslo EINECS. Čísla EINECS vždy začínají číslicí 2 nebo 3 (2xx-xxx-x, 3xx-xxx-xx). Látky nahlášené na seznam EINECS prošly ověřením, které zdůvodňuje zařazení látky do tohoto seznamu.

Látky oznámené a uvedené na trh po 18. září 1981 jsou uvedeny v Evropském seznamu oznámených chemických látek (ELINCS).⁶ Tento seznam obsahuje všechny látky oznámené do 31. května 2008 v souladu se směrnicí 67/548/EHS a jejími změnami. Tyto látky jsou takzvané „nové látky“, neboť se do 18. září 1981 nenacházely na trhu Společenství. Po přezkoumání příslušnými orgány členských států přidělila Evropská komise látce číslo ELINCS. Seznam ELINCS na rozdíl od seznamu EINECS neobsahuje ve svých položkách číslo CAS, nýbrž číslo přidělené příslušným orgánem členského státu, obchodní název (je-li k dispozici), klasifikaci a název IUPAC pro klasifikované látky. Čísla ELINCS jsou také sedmimístná a vždy začínají číslicí 4 (4xx-xxx-x).

Polymery byly z oznamování na seznam EINECS vyloučeny a podléhaly zvláštním pravidlům v rámci směrnice 67/548/EHS.^{8, 9} Výraz „polymer“ byl podrobněji definován v sedmé změně směrnice 67/548/EHS (směrnice 92/32/EHS). Důsledkem zavedení této definice byl fakt, že některé látky, jež byly podle pravidel oznamování na seznam EINECS považovány za polymery, podle sedmé změny směrnice *už nebyly* za polymery považovány. Jelikož všechny látky, které nejsou uvedeny na seznamu EINECS, podléhaly oznamovací povinnosti, měly by teoreticky být všechny „látky, které nejsou nadále pokládány za polymery“ oznámeny. Rada ministrů však jasně prohlásila, že tyto látky, které nejsou nadále pokládány za polymery, by neměly zpětně podléhat oznamování. Komise byla požádána o vypracování seznamu látek, které nejsou nadále pokládány za polymery (seznam NLP). Na tento seznam měly být zařazeny látky, které se nacházely na trhu ES v období od 18. září 1981 (datum vstupu v platnost směrnice 79/831/EHS, tj. šesté změny směrnice 67/548/EHS) do 31. října 1993 (datum vstupu v platnost směrnice 92/32/EHS, tj. sedmé změny směrnice 67/548/EHS) a které splňovaly podmínku, že byly podle pravidel oznamování na seznamu EINECS považovány za polymery, avšak nebyly již nadále pokládány za polymery podle sedmé změny směrnice. Seznam NLP není vyčerpávající. Látky na seznamu NLP jsou identifikovány pomocí chemického názvu, čísla CAS a sedmimístného čísla zvaného číslo NLP. Číslo NLP vždy začíná číslicí 5 (5xx-xxx-x).

Tyto tři seznamy látek, EINECS, ELINCS a NLP, se sloučené do jednoho nazývají seznam ES. Každá látka na tomto seznamu má číslo ES, které jí přidělila Evropská komise (viz podrobné informace o čísle ES v dodatku II).

Informace o těchto látkách je možné získat na internetových stránkách Evropské agentury pro chemické látky (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), která rovněž vede a zveřejňuje seznam registrovaných látek (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Seznam ES může sloužit výrobcům a dovozcům jako nástroj pro zjištění čísla ES jejich látky.

⁸ ECB (2003), Oznamování nových chemických látek v souladu se směrnicí 67/548/EHS o klasifikaci, balení a označování nebezpečných látek. Seznam látek, které nejsou nadále pokládány za polymery. EUR 20853 EN.

⁹ Rasmussen, K., Christ, G. a Davis, J. B. (1998), Registrace polymerů podle směrnice 67/548/EHS. Tox Env Chem sv. 67, s. 251–261.

3.2.2. Pořadová čísla

Když agentura ECHA zaváděla systém REACH-IT, považovala za přínosné přidělit automaticky číslo všem látkám v příchozích předložených dokumentacích (předběžné registrace, PPORD, dotazy, registrace, oznámení klasifikace a označení atd.), které byly z technického hlediska kompletní a u kterých nebylo určeno číslo ES (viz níže kritéria přidělování pořadových čísel). Technicky to usnadnilo správu, další zpracování a identifikaci látek v těchto předložených dokumentacích. Tato takzvaná „pořadová čísla“ mají stejný číselný formát jako čísla EINECS, ELINCS a NLP, začínají však jinými číslicemi.

Pořadová čísla mají s položkami seznamů EINECS, ELINCS a NLP společný číselný formát. U velké většiny pořadových čísel a identifikace látek s nimi spojených nebyla zkontrolována správnost, platnost a ani to, zda byla dodržena pravidla uvedená v těchto pokynech.

Je třeba zdůraznit, že je možné, že jsou těže látce přiřazena různá pořadová čísla, pokud jsou pro tuto látku použity různé identifikátory (např. název). V důsledku toho je rovněž možné, že bude pořadové číslo přiděleno látce uvedené na seznamu EINECS, ELINCS nebo NLP. K tomu může dojít, pokud se při předložení dokumentace agentuře ECHA prostřednictvím nástroje REACH-IT použije název látky odlišný od názvu použitého v seznamu ES.

Pořadová čísla mohou například začínat číslicemi 6, 7, 8 nebo 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

Je třeba upozornit na skutečnost, že v některých položkách seznamu EINECS je popis látky relativně obecný a mohl by případně zahrnovat více než jednu identitu látky podle čl. 3 odst. 1 nařízení REACH. V takových případech se požaduje, aby potenciální žadatel o registraci popsal danou látku přesněji (např. pomocí názvu IUPAC a jiných dostupných identifikátorů). Žadatel o registraci by měl každopádně uvést, ke které položce seznamu EINECS látka patří. Evropská agentura pro chemické látky v takových případech zváží, zda je vhodné přidělit dané látce pořadové číslo či nikoliv.

3.3. Požadavky na identifikaci látky v nařízeních REACH a CLP

Je-li podle nařízení REACH nutná registrace, má zahrnovat informace o identifikaci látky tak, jak je uvádí oddíl 2 přílohy VI. Tyto informace musí být přiměřené a dostatečné, aby umožnily identifikaci každé látky. Není-li technicky možné poskytnout informace k jednomu nebo více parametrům identifikujícím látku nebo nejeví-li se to z vědeckého hlediska jako nutné, uvede se jasné zdůvodnění, jak je stanoveno v poznámce 1 přílohy VI.

Podobně je-li podle nařízení CLP nutné učinit oznámení (článek 40 nařízení CLP), musí obsahovat informace o identifikaci látky, jak je uvedeno v oddílech 2.1 až 2.3.4. přílohy VI nařízení REACH. Tyto informace musí být dostatečné k tomu, aby umožnily identifikaci každé látky. Není-li technicky možné poskytnout informace k jednomu nebo více parametrům identifikujícím látku nebo nejeví-li se to z vědeckého hlediska jako nutné, uvede se jasné zdůvodnění, jak je stanoveno v poznámce 1 přílohy VI.

Tabulka 3 uvádí přehled parametrů identifikace látky v rámci přílohy VI nařízení REACH.

Tabulka 3: Parametry identifikace látky uvedené v oddíle 2 přílohy VI nařízení REACH

| Parametry identifikace látky uvedené v oddíle 2 přílohy VI nařízení REACH | |
|---|---|
| 2. | <p>IDENTIFIKACE LÁTKY</p> <p><i>Pro každou látku musí být uvedené informace dostačující k umožnění její identifikace. Není-li technicky možné poskytnout informace k jedné nebo více následujícím položkám nebo nejeví-li se to z vědeckého hlediska jako nutné, uveďte se jasné zdůvodnění.</i></p> |
| 2.1 | Název a jakýkoli jiný identifikátor každé látky |
| 2.1.1 | <i>Názvy podle nomenklatury IUPAC. Pokud nejsou k dispozici, uvedou se jiné mezinárodní názvy chemických látek.</i> |
| 2.1.2 | <i>Ostatní názvy (běžný název, obchodní název, zkratka)</i> |
| 2.1.3 | <i>Číslo ES, tj. číslo EINECS, ELINCS nebo NLP, nebo číslo přidělené agenturou (je-li k dispozici a potřebné)</i> |
| 2.1.4 | <i>Název a číslo CAS (je-li k dispozici)</i> |
| 2.1.5 | <i>Jiný identifikační kód, např. celní číslo (je-li k dispozici)</i> |
| 2.2 | Informace o molekulových a strukturních vzorcích nebo krystalické struktuře každé látky |
| 2.2.1 | <i>Molekulový a strukturní vzorec (včetně zápisu SMILES a jiného znázornění, je-li k dispozici) a popis krystalické struktury (struktur)</i> |
| 2.2.2 | <i>Informace o optické aktivitě a obvyklý poměr (stereo)izomerů (jsou-li k dispozici a potřebné)</i> |
| 2.2.3 | <i>Molekulová hmotnost nebo rozmezí molekulové hmotnosti</i> |
| 2.3. | Složení každé látky |
| 2.3.1 | <i>Případně stupeň čistoty (%)</i> |

| | |
|-------|--|
| 2.3.2 | <p><i>Názvy složek a nečistot</i></p> <p><i>V případě látky neznámého nebo proměnlivého složení, komplexních reakčních produktů nebo biologických materiálů (UVCB):</i></p> <ul style="list-style-type: none"><i>– názvy složek přítomných v koncentraci ≥ 10 %,</i><i>– názvy známých složek přítomných v koncentraci < 10 %,</i><i>– popis skupin složek na základě chemické povahy u těch složek, které nelze identifikovat jednotlivě,</i><i>– popis původu nebo zdroje a výrobního procesu</i> |
| 2.3.3 | <p><i>Typická koncentrace a rozmezí koncentrace (v procentech) složek, skupin složek, které nelze identifikovat jednotlivě, a nečistot podle bodu 2.3.2</i></p> |
| 2.3.4 | <p><i>Názvy a typická koncentrace a rozmezí koncentrace (v procentech) přídatných látek</i></p> |
| 2.3.5 | <p><i>Všechny nezbytné kvalitativní analytické údaje specifické pro identifikaci látky, jako jsou údaje o ultrafialovém záření, infračerveném záření, nukleární magnetické rezonanci, hmotnostním spektru nebo difrakci</i></p> |
| 2.3.6 | <p><i>Všechny nezbytné kvantitativní analytické údaje specifické pro identifikaci látky, jako jsou údaje o chromatografii, titraci, elementární analýze nebo difrakci</i></p> |
| 2.3.7 | <p><i>Popis analytických metod nebo příslušné bibliografické odkazy, které jsou nezbytné pro identifikaci látky (včetně identifikace a kvantifikace jejích složek a případně nečistot a přídatných látek). Popis se skládá ze stávajících zkušebních protokolů a příslušné interpretace výsledků uvedených v bodech 2.3.1 až 2.3.6. Tyto informace musí být dostačující k tomu, aby bylo možné tyto metody zopakovat.</i></p> |
| 2.5 | <p><i>Veškeré další dostupné informace důležité pro identifikaci látky</i></p> |

4. Pokyny pro identifikaci a pojmenovávání látek podle nařízení REACH a CLP

4.1. Úvod

Pravidla pro identifikaci a pojmenovávání se u různých typů látek liší. Z praktických důvodů jsou tyto pokyny rozčleněny takovým způsobem, aby byl u každého typu látky uživatel přímo odkázán na kapitolu, v níž jsou příslušné pokyny uvedeny. Za tímto účelem je níže podáno vysvětlení ohledně různých typů látek a klíč k nalezení příslušné kapitoly.

Identifikace látky by se měla zakládat přinejmenším na parametrech identifikace látky uvedených v oddíle 2 přílohy VI nařízení REACH (viz Tabulka 3). Proto je třeba každou látku identifikovat spojením vhodných parametrů identifikace:

- název IUPAC nebo jiný název a jiné identifikátory, např. číslo CAS, číslo ES (oddíl 2.1 přílohy VI),
- Informace o molekulových a strukturních vzorcích (oddíl 2.2 přílohy VI),
- chemické složení (oddíl 2.3 přílohy VI).

Látka je zcela identifikována svým chemickým složením, tj. chemickou identitou a obsahem svých jednotlivých složek. Ačkoli je u většiny látek taková přímá identifikace možná, u určitých látek není proveditelná či není v oblasti působnosti nařízení REACH a CLP dostačující. V takových případech se požaduje jiná nebo doplňující identifikace látky.

Látky je tedy možné rozdělit do dvou hlavních skupin:

1. „Přesně definované látky“: Látky s přesně stanoveným kvalitativním a kvantitativním složením, které lze dostatečně identifikovat pomocí parametrů identifikace uvedených v oddíle 2 přílohy VI nařízení REACH.
2. „Látky UVCB“: Látky s neznámým nebo proměnlivým složením, komplexní reakční produkty nebo biologické materiály. Tyto látky nelze dostatečně identifikovat pomocí výše uvedených parametrů.

Variabilita složení přesně definovaných látek je vymezena horním a dolním limitem koncentračního rozmezí hlavní složky (koncentračních rozmezí hlavních složek). Variabilita látek UVCB je poměrně velká nebo obtížně předpověditelná.

Je třeba uznat, že budou existovat hraniční případy mezi přesně definovanými látkami (reakční produkty s mnoha složkami, z nichž se každá nachází v širokém rozmezí) a látkami UVCB (reakční produkty s proměnlivým a těžko předvídatelným složením). Žadatel o registraci zodpovídá za to, aby látka byla identifikována co nejvhodněji.

Pravidla pro identifikaci a pojmenovávání pro „přesně definované látky“ s jednou hlavní složkou a „přesně definované látky“ s více než jednou hlavní složkou se liší. Pro různé typy látek zahrnutých pod názvem „UVCB“ jsou popsána různá pravidla identifikace a pojmenovávání.

V

Tabulka 4 a v Tabulka 5 jsou u několika příkladů různých typů látek uvedeny hlavní identifikátory. Tyto příklady jsou rozčleněny do skupin takovým způsobem, aby bylo možné snadno rozpoznat podobnosti a rozdíly pro účely identifikace látek.

Tabulka 4 a Tabulka 5 nepředstavují vyčerpávající seznam všech možných typů látek. Toto rozčlenění látek do skupin s pravidly identifikace a pojmenovávání by nemělo být považováno za oficiální systém kategorizace látek, nýbrž za praktickou pomůcku k vhodnému uplatnění konkrétních pravidel a k nalezení příslušných pokynů v tomto dokumentu.

Tabulka 4: Seskupení hlavních identifikátorů u příkladů, které představují různé typy přesně definovaných podobných látek

| Obecné znaky | Příklady | Hlavní identifikátory |
|---|---|--|
| Látky přesně definované chemickým složením <i>[kapitola 4.2]</i> | <p>Jednosložkové látky, např.</p> <ul style="list-style-type: none"> - benzen (95 %) - nikl (99 %) <p><i>[kapitola 4.2.1]</i></p> <p>Vícesložkové látky, např. definované reakční produkty, jako např. reakční směs 2-, 3- a 4-chlorotoluenu (každý 30 %) <i>[kapitola 4.2.2]</i></p> <p>Látky definované více než jen chemickým složením, např. grafit a diamant <i>[kapitola 4.2.3]</i></p> | <p>Chemické složení: jedna hlavní složka ≥ 80 %:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Chemická identita hlavní složky (chemický název, číslo CAS, číslo ES atd.) - Typická koncentrace a horní a dolní mez <p>Chemické složení: směs (reakční směs) hlavních složek, každá v rozmezí ≥ 10 – < 80 %:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Chemická identita jednotlivých hlavních složek - Typické koncentrace a horní a dolní mez pro každou složku a pro reakční směs jako celek <p>Chemické složení jako jednosložková nebo vícesložková látka A</p> <p>Další fyzikální parametry nebo parametry charakterizace: např. morfologie krystalů, (geologické) minerální složení atd.</p> |

Tabulka 5: Seskupení hlavních identifikátorů u příkladů představujících různé typy látek UVCB

| Obecné znaky | Příklady | Hlavní identifikátory | | | |
|--|---|---|---|---|---|
| | | Zdroj | Proces | Jiné identifikátory | |
| Látky UVCB (Látky s neznámým nebo proměnlivým složením, komplexní reakční produkty nebo biologické materiály) [kapitola 4.3] | Biologické materiály (B) | Extrakty biologických materiálů, např. přírodní vonné látky, přírodní oleje, přírodní barviva a pigmenty | - Rostlinný nebo živočišný druh a čeleď - Část rostliny/živočicha | - Extrakce - Frakcionace, zakoncentrování, izolace, purifikace atd. - <u>Tvorba derivátů*</u> | - Známé nebo obecné složení - Chromatografické a jiné profily - Odkaz na normy - Index barev |
| | | Komplexní biologické makromolekuly, např. enzymy, bílkoviny, DNA nebo fragmenty RNA, hormony, antibiotika | | | - Standardní index enzymu - Genetický kód - Prostorová konfigurace - Fyzikální vlastnosti - Funkce/aktivita - Struktura - Pořadí aminokyselin |
| | Produkty fermentace antibiotika, biopolymery, enzymy, vinázy (produkty fermentace cukru), soforolipidy atd. | - Kultivační médium - Použitý mikroorganismus | - Fermentace - Izolace produktů - Purifikační kroky | - Druh produktů: např. antibiotika, biopolymery, bílkoviny atd. - Známé složení | |
| Chemické a minerální látky s těžko definovaným, komplexním nebo | Reakční směsi s obtížně předpověditelným nebo proměnlivým složením | Výchozí materiály | <u>Druh chemické reakce</u> , např. esterifikace, alkylace, hydrogenace | - Známé složení - Chromatografické a jiné profily - Odkaz na normy | |
| | - Frakce nebo destiláty, např. ropné látky - Jíl, např. bentonit - Dehty | - Ropa - Uhlí/rašelina - Minerální plyny - Minerály | - Frakcionace, destilace - <u>Konverze frakcí</u> - Fyzikální zpracování - Rezidua | - Limitní rozmezí - Rozmezí délky řetězců - Poměr aromatických/alifatických | |

| | | | | | |
|--|----------------------------|--|------|--|--|
| | proměnlivým složením (UVC) | Koncentráty nebo taveniny, např. kovových minerálů, nebo rezidua pocházející z různých tavicích nebo metalurgických procesů, např. strusky | Rudy | - Tavení - Tepelné zpracování - Různé metalurgické procesy | uhlovodíků - Znamé složení - Standardní index - Znamé nebo obecné složení - Koncentrace kovů |
|--|----------------------------|--|------|--|--|

* Podtržené procesy označují syntézu nové molekuly.

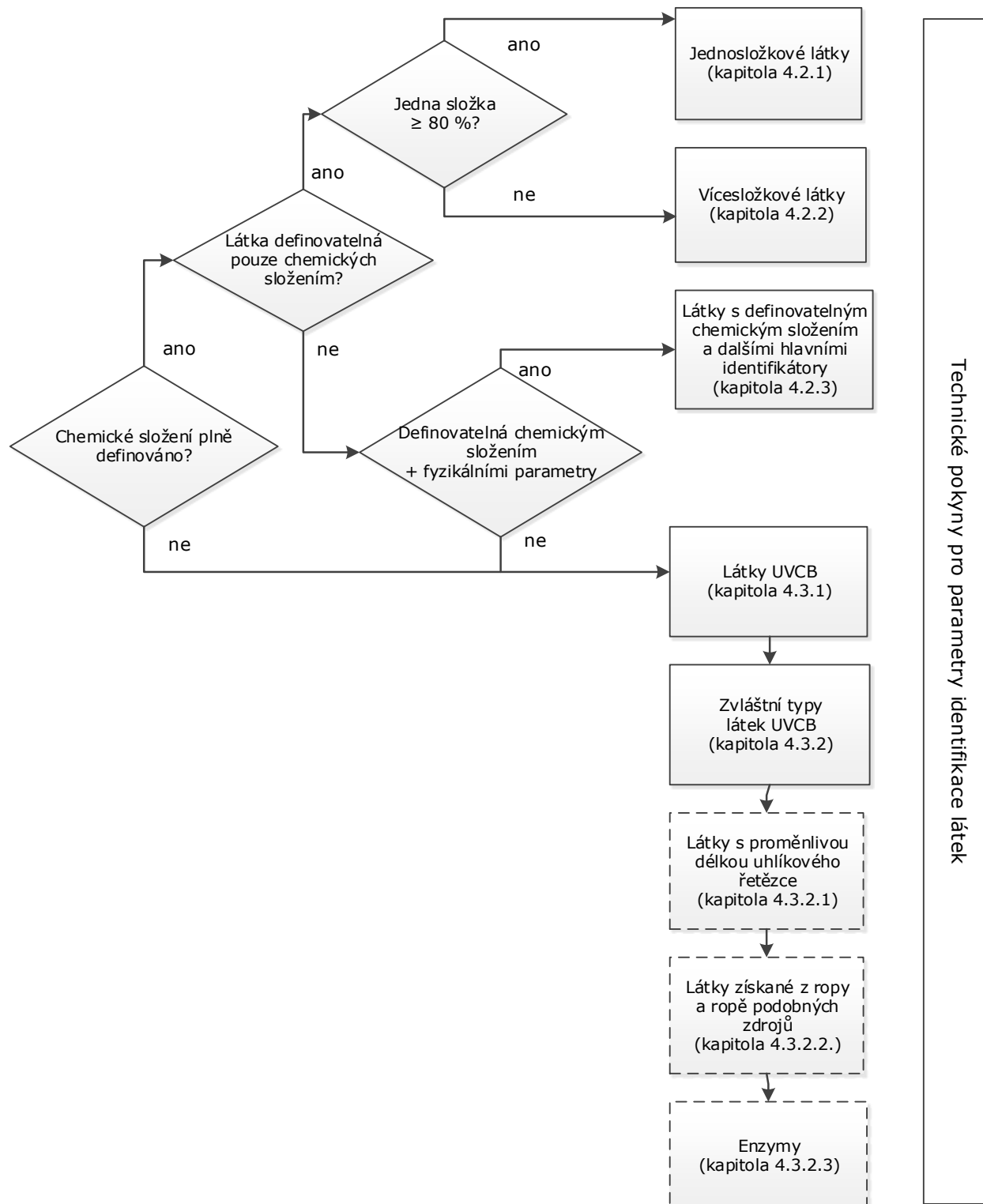
Tato kapitola je rozčleněna do podkapitol, které obsahují konkrétní pokyny pro identifikaci látky pro různé typy látek. Klíč k příslušným kapitolám je znázorněn na Obrázek 1.

Klíč na Obrázek 1 se zakládá na empirických kritériích. Žadatel o registraci nese odpovědnost za výběr nejvhodnější kapitoly a zaznamenání identity látky v souladu s pravidly a kritérii pro daný typ látky.

Základním pravidlem je definovat látky co možná nejvíce pomocí chemického složení a identifikace složek. Pouze tehdy, není-li tento přístup technicky uskutečnitelný, měly by se použít jiné identifikátory, stanovené pro různé typy látek UVCB.

Jestliže se žadatel o registraci odchýlí od pravidel a kritérií identifikace látky uvedených v těchto pokynech, měl by uvést zdůvodnění. Identifikace látky by měla být jasná a spolehlivá a měla by zajišťovat konzistentnost.

Obrázek 1: Klíč ke kapitolám a přílohám tohoto dokumentu k nalezení příslušných pokynů pro různé typy látek



Je třeba uvést popis analytických metod nebo příslušné bibliografické údaje k identifikaci látky a případně k identifikaci nečistot a přídatných látek (oddíly 2.3.5, 2.3.6 a 2.3.7 přílohy VI nařízení REACH). Tyto informace musí být dostačující k tomu, aby bylo možné tyto metody zopakovat. Rovněž by se měly uvést typické výsledky při použití analytických technik.

4.2. Látky s přesně definovaným složením

Látky s přesně definovaným chemickým složením se pojmenovávají podle hlavní složky (hlavních složek). U některých chemických látek samotné chemické složení k charakterizaci nestačí. V těchto případech se musí k identifikaci látky přidat doplňující fyzikální parametry vztahující se k chemické struktuře.

Obecným pravidlem by měla být snaha pokrýt složení látky až ze 100 %, přičemž každá složka vyžaduje úplnou chemickou specifikaci, včetně informací o struktuře. U látek definovaných svým chemickým složením se rozlišuje mezi:

- Hlavní složkou: Složka látky, která není ani přídatnou látkou ani nečistotou, jež tvoří podstatnou část této látky, a proto se používá při tvorbě názvu látky a podrobné identifikaci látky.
- Nečistotou: Nezamýšlená složka, která se do látky dostane při výrobě. Může pocházet z výchozích materiálů nebo může být výsledkem sekundárních nebo nedokonalých reakcí během výrobního procesu. Nečistoty jsou sice přítomny v konečné látce, ale nebyly přidány záměrně.
- Přídatnou látkou: Látka, která byla záměrně přidána, aby stabilizovala látku.

Všechny složky (kromě přídatných látek), které nejsou hlavní složkou (hlavními složkami) v jednosložkové látce nebo ve vícesložkové látce, se považují za nečistoty. Přestože je v některých odvětvích obecnou praxí používání výrazu „stopové prvky“, v těchto pokynech se používá pouze výraz „nečistoty“.

Tyto různé složky podléhají různým požadavkům na identifikaci:

- Hlavní složky přispívají k pojmenování látky a každá hlavní složka musí být přesně identifikována.
- Nečistoty se nepodílejí na pojmenování látky, ale každá nečistota musí být přesně identifikována.
- Přídatné látky přispívají ke složení látky (nikoli k jejímu názvu), a měly by proto být vždy přesně identifikovány.
- Přesná identifikace hlavních složek, nečistot a přídatných látek musí obsahovat název IUPAC, chemický název, strukturální vzorec, číslo ES a číslo CAS, pokud existuje.

K rozlišení mezi jednosložkovými a vícesložkovými látkami se používají určitá pravidla:

- Jednosložková látka je látka, v níž se jedna složka vyskytuje v koncentraci nejméně 80 % hmot. a která obsahuje maximálně 20 % hmot. nečistot.

Jednosložková látka se pojmenovává podle jediné hlavní složky.

- Vícesložková látka je látka obsahující několik hlavních složek obvykle přítomných v hmotnostních koncentracích $\geq 10\%$ a $< 80\%$.

Vícesložková látka se pojmenovává jako reakční směs dvou a více hlavních složek.

Výše uvedená pravidla jsou míněna jako vodítko. Odchyly lze akceptovat, je-li možné podat důkladné zdůvodnění.

Obvykle by se měly specifikovat nečistoty přítomné v koncentraci ≥ 1 %. Nečistoty, které jsou důležité pro klasifikaci nebo posouzení PBT¹⁰, se nicméně musí specifikovat vždy, nezávisle na koncentraci. Podle obecného pravidla by měly být informace o složení kompletní až ze 100 %.

Přídavné látky ve smyslu nařízení REACH a CLP a v těchto pokynech jsou činidla nezbytná k zachování stability látky. Přídavné látky jsou tudíž nezbytnou složkou látky a berou se v úvahu při stanovování hmotnostní bilance. Výraz „přídavné látky“ se však mimo rozsah jeho definice v nařízení REACH a těchto pokynech rovněž používá pro záměrně přidané látky, které mají jiné funkce, např. regulátory pH nebo barvicí činidla. Tyto záměrně přidané látky nejsou součástí látky jako takové, a proto se neberou v úvahu při stanovování hmotnostní bilance.

Směsi, jak je definují nařízení REACH a CLP, jsou záměrně vytvořené směsi látek, a tudíž se nemají považovat za vícesložkové látky.

V kapitole 4.2.1 naleznete konkrétní pokyny pro jednosložkové látky a v kapitole 4.2.2 konkrétní pokyny pro vícesložkové látky. Pokyny pro látky, které vyžadují doplňující informace (např. určité minerály) naleznete v kapitole 4.2.3.

4.2.1. Jednosložkové látky

Jednosložková látka je látka definovaná svým kvantitativním složením, ve kterém je přítomna jedna hlavní složka v koncentraci nejméně 80 % hmot.

Pravidlo pro pojmenování

Jednosložková látka se pojmenovává podle hlavní složky. V zásadě by se měl uvést název v anglickém jazyce podle pravidel nomenklatury IUPAC (viz dodatek I). Jako doplněk je možné uvést další mezinárodně uznávané názvy.

Identifikátory

Jednosložková látka je identifikována chemickým názvem a veškerými dalšími identifikátory (včetně molekulového a strukturního vzorce nebo krystalické struktury) hlavní složky. Musí být identifikována jakákoli nečistota a/nebo přídavná látka jednosložkové látky. Musí být uvedena typická koncentrace a koncentrační rozmezí hlavní složky, nečistot a/nebo přídavných látek. Všechny tyto informace musí být potvrzeny analytickými údaji.

| Příklad | | | | |
|---------------|-----------|-----------|-----------|----------------|
| Hlavní složka | Obsah (%) | Nečistota | Obsah (%) | Identita látky |
| m-xylen | 91 | o-xylen | 5 | m-xylen |
| o-xylen | 87 | m-xylen | 10 | o-xylen |

¹⁰ Více informací ohledně posouzení PBT a příslušná kritéria naleznete v Pokynech k požadavkům na informace a posuzování chemické bezpečnosti, kapitole R11: Posouzení PBT.

Hlavní složka tvoří obvykle > 80 % a musí být kompletně specifikována pomocí všech výše uvedených parametrů. Součet typických koncentrací hlavní složky a nečistot by měl činit 100 %. Nečistoty přítomné v koncentraci > 1 % musí být specifikovány názvem a identifikátory. Nečistoty, které mají význam pro klasifikaci nebo posouzení PBT¹¹, se musí vždy specifikovat pomocí stejných identifikátorů, nezávisle na jejich koncentraci.

Pro správné použití pravidla 80 % by se záměrně přidané látky, jako jsou regulátory pH nebo barvicí činidla, neměly zahrnovat do hmotnostní bilance.

„Pravidlo 80 %“ se používá při oznamování nových látek (směrnice 67/548/EHS) a používá se i v nařízení REACH. Odchýlení se od pravidla 80 % je nicméně nutné zdůvodnit. Možné příklady odůvodněného odchýlení:

- Pokud hlavní složka tvoří < 80 %, avšak látka vykazuje podobné fyzikálně-chemické vlastnosti a stejný profil nebezpečnosti jako jiné jednosložkové látky se stejnou identitou, které splňují pravidlo 80 %.
- Rozsah koncentrací hlavní složky a nečistot přesahuje kritérium 80 % a hlavní složka pouze zřídka tvoří ≤ 80 %.

| Příklady | | | | | | | | | |
|----------|--------------------|----------------------|-------------------|----------------------|-----------|----------------------|-------------------|----------------------|----------------|
| Látka | Hlavní složka | Horní mez obsahu (%) | Typický obsah (%) | Dolní mez obsahu (%) | Nečistota | Horní mez obsahu (%) | Typický obsah (%) | Dolní mez obsahu (%) | Identita látky |
| 1 | o-xylen | 90 | 85 | 65 | m-xylen | 35 | 15 | 10 | o-xylen |
| 2 | o-xylen m-xylen | 90 35 | 85 15 | 65 10 | p-xylen | 5 | 4 | 1 | o-xylen |

Látky 1 a 2 lze díky koncentračním rozmezím hlavní složky a nečistoty považovat za vícesložkovou látku sestávající ze dvou hlavních složek, o-xylenu a m-xylenu, nebo za jednosložkovou látku. V takovém případě je správným rozhodnutím považovat obě látky za jednosložkovou látku, přičemž se vychází ze skutečnosti, že o-xylen je obvykle přítomen v koncentraci > 80 %.

Analytické informace

K potvrzení identity složek a nečistot jednosložkové látky musí být poskytnuty dostatečné kvalitativní údaje. K potvrzení identity látky může být vhodných několik spektroskopických metod, například absorpční spektrometrie v ultrafialové a viditelné oblasti (UV/VIS), infračervená spektroskopie (IR), spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) a hmotnostní spektrometrie (MS). U anorganických látek nebo organických a/nebo kovově-organických látek, které lze zjistit/měřit pomocí krystalické struktury, se ve většině případů upřednostňuje použití rentgenové difrakce (XRD).

K potvrzení složení látky musí být k dispozici kvantitativní metody, jako jsou chromatografické techniky, například plynová chromatografie (GC) nebo vysoce účinná kapalinová chromatografie (HPLC), ve spojení s detekční technikou. U anorganických látek může být vhodnější rentgenová difrakce (XRD), rentgenová fluorescence (XRF), atomová absorpční spektroskopie (AAS), optická emisní spektroskopie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-OES) nebo hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-MS). Rovněž je nutné použít jiné platné techniky separace složek, je-li to vhodné.

Popis analytických metod musí zahrnovat použité experimentální protokoly a interpretaci uvedených výsledků.

¹¹ Více informací ohledně posouzení PBT a příslušná kritéria naleznete v Pokynech k požadavkům na informace a posuzování chemické bezpečnosti, kapitole R11: Posouzení PBT.

Analytické metody se neustále vyvíjejí a zdokonalují. Žadatel o registraci proto zodpovídá za to, že předloží náležité analytické údaje.

4.2.2. Vícesložkové látky

Vícesložková látka je látka definovaná svým kvantitativním složením, ve které je více než jedna hlavní složka přítomna v koncentraci ≥ 10 % hmot. a < 80 % hmotnostních. Vícesložková látka je výsledkem výrobního procesu.¹²

Nařízení REACH požaduje registraci látky tak, jak je vyráběna. Jestliže se vyrábí vícesložková látka, je nutné ji zaregistrovat^{13 14}. Rozhodnutí, která určují, do jaké míry se na různé kroky produkce látky vztahuje definice „výroby“, se přijímají na základě jednotlivých případů. Lze-li dostatečně popsat profil nebezpečnosti látky pomocí informací o jejích jednotlivých složkách, není třeba provádět zkoušky látky jako takové.

Pravidlo pro pojmenování

Lze-li dostatečně popsat profil nebezpečnosti látky pomocí informací o jejích jednotlivých hlavních složkách, není třeba provádět zkoušky látky jako takové. Obecný formát je: „Reakční směs [názvy hlavních složek]“. Doporučuje se uvádět názvy složek v abecedním pořadí a oddělovat je spojkou „a“. Na názvu látky se podílí pouze hlavní složky, které tvoří obvykle ≥ 10 %. V zásadě by se měly uvést názvy v anglickém jazyce podle pravidel nomenklatury IUPAC. Jako doplněk je možné uvést další mezinárodně uznávané názvy.

Identifikátory

Vícesložková látka je identifikována chemickým názvem a všemi dalšími dostupnými identifikátory látky jako takové a chemickou identitou složek (včetně molekulového a strukturního vzorce nebo krystalické struktury). Musí být identifikována jakákoli nečistota a/nebo přídatná látka vícesložkové látky. Musí být uvedena typická koncentrace a koncentrační rozmezí složek, nečistot a/nebo přídatných látek. Všechny tyto informace musí být potvrzeny analytickými údaji.

| Příklad | | | | |
|---------------|-----------|-----------|-----------|----------------------------------|
| Hlavní složky | Obsah (%) | Nečistota | Obsah (%) | Identita látky |
| m-xylen | 50 | p-xylen | 5 | Reakční směs m-xylenu a o-xylenu |
| o-xylen | 45 | | | |

U vícesložkových látek je chemické složení známé a při identifikaci látky je důležitá více než jedna hlavní složka. Chemické složení látky je navíc předpověditelné ve formě typických hodnot a rozmezí. Hlavní složky se musí kompletně specifikovat pomocí všech příslušných parametrů. Součet typických koncentrací hlavních složek (≥ 10 %) a nečistot (< 10 %) by měl činit 100 %.

Pro správnou identifikaci vícesložkové látky by se záměrně přidané látky (např. regulátory pH nebo barvicí činidla) neměly zahrnovat do hmotnostní bilance.

Nečistoty přítomné v koncentraci ≥ 1 % musí být specifikovány názvem a všemi dostupnými identifikátory. Nečistoty, které mají význam pro klasifikaci nebo posouzení PBT, se musí vždy specifikovat pomocí stejných identifikátorů, nezávisle na jejich koncentraci.

¹² Rozdíl mezi směsí a vícesložkovou látkou je ten, že směs se získává smícháním dvou a více látek bez chemické reakce. Vícesložková látka je výsledkem chemické reakce.

¹³ Řada látek je od povinnosti registrace v rámci nařízení REACH osvobozena (např. látky uvedené v příloze IV).

¹⁴ Tento přístup se nepoužívá u několika specifických látek, jako jsou minerály (podrobnosti viz kapitola 7.5).

| Příklad | | | | | | | | |
|----------------------|-----------------------------|--------------------------|-----------------------------|------------------|-----------------------------|--------------------------|-----------------------------|----------------------------------|
| Hlavní složka | Horní mez obsahu (%) | Typický obsah (%) | Dolní mez obsahu (%) | Nečistota | Horní mez obsahu (%) | Typický obsah (%) | Dolní mez obsahu (%) | Identita látky |
| anilin | 90 | 75 | 65 | fenanthren | 5 | 4 | 1 | Reakční směs anilinu a naftalenu |
| naftalen | 35 | 20 | 10 | | | | | |

Podle pravidel uvedených v těchto pokynech je tato látka vícesložkovou látkou. Přestože rozmezí koncentrace jedné složky přesahuje 80 %, stává se to pouze občas a typické složení je < 80 %.

Pokud je hlavní složka vícesložkové látky ≥ 80 % nebo < 10 % hmot., musí být toto odchylení odůvodněno. Možný příklad odůvodněného odchylení:

- Složka bývá ≥ 80 % nebo < 10 % jen zřídka.

Například pokud látka obsahuje dvě složky, jednu v koncentraci 85 % a druhou v koncentraci 10 %, zbytek tvoří nečistoty. Obě složky se podílejí na žádoucím technickém účinku látky a jsou pro něj nezbytné. V tomto případě lze látku popsat jako dvousložkovou látku, přestože se jedna složka vyskytuje v koncentraci > 80 %.

Analytické informace

K potvrzení identity složek a nečistot vícesložkové látky musí být poskytnuty dostatečné kvalitativní údaje. K potvrzení identity látky může být vhodných několik spektroskopických metod, například absorpční spektrometrie v ultrafialové a viditelné oblasti (UV/VIS), infračervená spektroskopie (IR), spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) a hmotnostní spektrometrie (MS). U anorganických látek nebo organických a/nebo kovově-organických látek, které lze zjistit/měřit pomocí krystalické struktury, se ve většině případů upřednostňuje použití rentgenové difrakce (XRD).

K potvrzení složení látky musí být k dispozici kvantitativní metody, jako jsou chromatografické techniky, například plynová chromatografie (GC) nebo vysoce účinná kapalinová chromatografie (HPLC), ve spojení s detekční technikou. U anorganických látek může být vhodnější rentgenová difrakce (XRD), rentgenová fluorescence (XRF), atomová absorpční spektroskopie (AAS), optická emisní spektroskopie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-OES) nebo hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-MS). Rovněž je nutné použít jiné platné techniky separace složek, je-li to vhodné.

Popis analytických metod musí zahrnovat použité experimentální protokoly a interpretaci uvedených výsledků.

Analytické metody se neustále vyvíjejí a zdokonalují. Žadatel o registraci proto zodpovídá za to, že předloží náležité analytické údaje.

Registrace jednotlivých složek vícesložkové látky

Obecně by se zaznamenávání identity látek pro účely registrace mělo řídit přístupem pro vícesložkové látky (tj. registrace vícesložkové látky). Odchylně od tohoto přístupu je možné registrovat jednotlivé složky, je-li to odůvodněné. Možnost odchylně se od standardního postupu a identifikovat (a potenciálně registrovat) látky pomocí jejich jednotlivých složek existuje, pokud

- nedojde k omezení požadavků na informace,
- existuje dostatek stávajících údajů, které odůvodňují přístup založený na registraci jednotlivých složek, tj. tento přístup by neměl v porovnání se standardním přístupem obvykle znamenat další zkoušky (na obratlovcích),
- registrování jednotlivých složek vede k efektivnější situaci (tj. zabrání se početným registracím látek, které se skládají ze stejných složek),
- jsou uvedeny informace o složení jednotlivých reakčních směsí.

Nabízená flexibilita by neměla být zneužívána za účelem vyhnouti se požadavkům. Například v případě 1 200 tun za rok vícesložkové látky „C + D“ se složením 50 % C a 50 % D by tento přístup vedl ke dvěma registracím s těmito informacemi:

Látka C

- Množství 600
- Požadavky na údaje je nutné splnit pro množství > 1 000 tun (příloha X)

Látka D

- Množství 600
- Požadavky na údaje je nutné splnit pro množství > 1 000 tun (příloha X)

Tento přístup je třeba zkombinovat s požadavkem nařízení REACH, tzn. sečíst objemy stejné látky pro každý právní subjekt. Navrhuje se stanovit požadavky na údaje tímto způsobem:

- sečíst všechny objemy jednotlivých složek (podle množství v látce),
- použít nejvyšší objem látky, která obsahuje danou složku.

Požadavky na informace by měly být stanoveny na základě nejvyššího výsledku. Při oznamování množství by se měl použít výsledek součtu množství každé jednotlivé složky. Dále jsou uvedeny zjednodušené příklady znázorňující praktické provedení tohoto přístupu:

Příklad 1

Vícesložková látka „C+D+E“ je výsledkem procesu v rámci jednoho právního subjektu, který vede k různým látkám:

- Látka 1: 50 % C a 25 % D a 25 % E, 1 100 t za rok
- Látka 2: 50 % C a 50 % D, 500 t za rok

Také v tomto případě je výchozím bodem reakční produkt: tyto dvě látky by se měly registrovat jako vícesložkové látky. Jestliže se postupuje na základě registrace jednotlivých složek,¹⁵ uplatňuje se toto:

Ohlášení látky D by v tomto případě znamenalo:

- Množství: $(25 \% \times 1\ 100) + (50 \% \times 500) = 525$ t za rok

Stanovení požadavků na informace je založeno na nejpřísnějším požadavku. V tomto případě: > 1 000 t za rok, neboť celkové množství vícesložkové látky „C+D+E“ přesahuje 1 000 t za rok.

Poznámka: v tomto příkladu by se obdobně měly registrovat látky C a E.

¹⁵ Tento příklad je určen pouze k názorné ukázce stanovení požadavků na informace a nahlášení objemů. Nezabývá se tím, zda je uvedený přístup v tomto případě opodstatněný.

Příklad 2

Vícesložková látka „G+H+I“ je výsledkem procesu v rámci jednoho právního subjektu, který vede k různým látkám:

- Látka 3: 65 % G a 15 % H a 20 % I, 90 t za rok
- Látka 4: 60 % G a 40 % H, 90 t za rok

Ohlášení látky G:

- Množství: $(65 \% \times 90) + (60 \% \times 90) = 112,5$ t za rok

Stanovení požadavků na informace je založeno na nejpřísnějším požadavku. V tomto případě: > 100 t za rok, neboť celkové množství složky G přesahuje 100 t za rok.

Poznámka: v tomto příkladu by se obdobně měly registrovat látky H a I.

Kromě uvedeného stanovení požadavku na informace je dále třeba vzít v úvahu počet nových studií (na obratlovcích), které je třeba provést. Předtím, než se potenciální žadatelé o registraci rozhodnou pro určitou strategii, musí zvážit, zda je k dispozici dostatek existujících studií (na obratlovcích) a zda navrhovaná flexibilita vede k méně nebo více novým zkouškám (na obratlovcích). Měla by se zvolit strategie, která zabraňuje novým zkouškám (na obratlovcích).

V případě pochybností by standardní cestou zaznamenání identity látky pro účely registrace vždy měla být identifikace látky tak, jak je vyrobena.

4.2.3. Látky s definovaným chemickým složením a další hlavní identifikátory

Některé látky (např. anorganické minerály), které lze identifikovat pomocí jejich chemického složení, je třeba dále vymezit pomocí doplňujících identifikátorů, aby získaly svou vlastní identifikaci látky. Tyto látky mohou být buď jednosložkové, nebo vícesložkové, aby však u nich bylo možné jednoznačně zaznamenat identitu látky, jsou kromě parametrů identifikace látky popsaných v předchozích kapitolách zapotřebí i další hlavní identifikátory.

Příklady

U některých nekovových minerálů (z přírodních zdrojů nebo syntetických) s jedinečnou strukturou je k jednoznačné identifikaci látky zapotřebí také morfologie a minerální složení. Příkladem je kaolin (CAS 1332-58-7), který se skládá z kaolinitu, hlinitokřemičitanu draselného, živce a křemene.

Pokyny k plnění specifických povinností podle nařízení REACH pro látky v „nanoformách“ jsou uvedeny v *Dodatku k pokynům pro registraci a identifikaci látek týkající se nanoforem*¹⁶. Uvedené rady se týkají otázek souvisejících s identifikací a charakterizací nanoforem.

Pravidlo pro pojmenování

V zásadě je třeba řídit se stejnými pravidly pro pojmenování jako u jednosložkových látek (viz kapitola 4.2.1) nebo vícesložkových látek (viz kapitola 4.2.2).

¹⁶ Dodatek k pokynům pro registraci a identifikaci látek týkající se nanoforem, k dispozici na adrese <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

U anorganických minerálů lze pro složky použít mineralogické názvy. Například apatit je vícesložková látka skládající se ze skupiny fosfátových minerálů, kterým se obvykle říká hydroxylapatit, fluoroapatit a chlorapatit, přičemž jsou tak pojmenovány podle vysoké koncentrace iontů OH⁻, F⁻ nebo Cl⁻ v krystalu. Vzorec směsi tří nejčastějších druhů je Ca₅(PO₄)₃(OH, F, Cl). Dalším příkladem je aragonit, jedna ze speciálních krystalických struktur uhličitanu vápenatého.

Identifikátory

Tyto látky se identifikují a pojmenovávají podle pravidel pro jednosložkové látky (viz kapitola 4.2.1) nebo vícesložkové látky (viz kapitola 4.2.2). Další specifické hlavní parametry identifikace, které je nutno doplnit, závisí na látce. Dalšími hlavními identifikátory mohou být například elementární složení se spektrálními údaji, krystalická struktura stanovená pomocí rentgenové difrakce (XRD), absorpční maxima v infračervené oblasti, index puchnutí, kationtová výměnná kapacita či jiné fyzikální a chemické vlastnosti.

U minerálů je pro identifikaci mineralogického složení a krystalické struktury důležité zkombinovat výsledky elementárního složení se spektrálními údaji. To je pak potvrzeno charakteristickými fyzikálně-chemickými vlastnostmi, jako je krystalická struktura (stanovená pomocí rentgenové difrakce), tvar, tvrdost, bobtnavost, hustota nebo plocha povrchu.

U konkrétních minerálů je možné uvést příklady specifických doplňkových hlavních identifikátorů, neboť minerály mají charakteristické fyzikálně-chemické vlastnosti, které umožňují doplnění jejich identifikace, např.: velmi nízká tvrdost u masku, bobtnavost bentonitu, tvary diatomitu, velmi vysoká hustota barytu a plocha povrchu (adsorpce dusíku).

Analytické informace

Hlavním kritériem je poskytnout všechny potřebné informace k potvrzení struktury látky. Musí se uvést stejné analytické informace jako u jednosložkových látek (viz kapitola 4.2.1) nebo vícesložkových látek (viz kapitola 4.2.2).

4.3. Látky UVCB

Látky s neznámým nebo proměnlivým složením, komplexní reakční produkty nebo biologické materiály (z angl. *substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials*^{17, 18, 19}), rovněž nazývané látky UVCB, nelze dostatečně identifikovat jejich chemickým složením, protože:

- počet složek je relativně velký nebo
- složení je z velké části neznámé nebo
- variabilita složení je relativně velká nebo obtížně předpověditelná.

V důsledku toho jsou k identifikaci látek UVCB kromě toho, co je známo o jejich chemickém složení, nutné další typy informací.

¹⁷ Rasmussen, K., Pettauer, D., Vollmer, G. a kol. (1999), Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. Tox Env Chem sv. 69, s. 403–416.

¹⁸ US EPA (2005-B), Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Combinations of two or more substances: complex reaction products (Registrace kombinací dvou či více látek v seznamu dle zákona pro kontrolu toxických látek: komplexní reakční produkty).

¹⁹ US EPA (2005-D), Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Chemical Substances of Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Materials: UVCB Substances. (Registrace látek s neznámým nebo proměnlivým složením v seznamu dle zákona pro kontrolu toxických látek, komplexní reakční produkty a biologické materiály: látky UVCB).

Z Tabulka 5 je patrné, že hlavní identifikátory různých typů látek UVCB souvisí se zdrojem látky a použitým procesem nebo patří do skupiny „další hlavní identifikátory“ (např. „chromatografické nebo jiné profily“). Počet a druh identifikátorů uvedených v Tabulka 5 představuje názornou ukázkou variability typů a neměl by být považován za vyčerpávající přehled. Je-li chemické složení např. komplexního reakčního produktu nebo látky biologického původu známé, látka by se měla náležitě identifikovat jako jednosložková nebo vícesložková. Definování látky jako UVCB má za následek, že jakákoli významná změna zdroje či procesu pravděpodobně povede k odlišné látce, která by se měla opět registrovat. Jestliže je reakční směs identifikována jako „vícesložková látka“, může být látka získána z různých zdrojů nebo různými procesy, pokud složení konečné látky zůstane v stanoveném rozmezí. Nová registrace proto nebude vyžadována.

V kapitole 4.3.1 naleznete obecné pokyny pro látky UVCB a v kapitole 4.3.2 specifické pokyny pro látky s proměnlivou délkou uhlíkového řetězce, látky získané z ropy a ropě podobných zdrojů a enzymy jakožto specifické typy látek UVCB.

4.3.1. Obecné pokyny pro látky UVCB

Tato kapitola pokynů poskytuje obecné pokyny ohledně toho, jak kromě parametrů identifikace látky uvedených v příloze VI (oddíle 2) nařízení REACH používat k identifikaci látek UVCB určité hlavní identifikátory.

Informace o chemickém složení

Látky UVCB buď nelze specifikovat výhradně pomocí názvu IUPAC jednotlivých složek, neboť všechny složky nelze identifikovat, nebo mohou být obecně specifikovány, avšak s nedostatečnou konkrétností způsobenou proměnlivostí jejich přesného složení. V důsledku nedostatečného rozlišení mezi složkami a nečistotami by se pojmy „hlavní složky“ a „nečistoty“ neměly u látek UVCB považovat za relevantní.

Přesto je třeba uvést co nejvíce známých informací o chemickém složení a identitě složek látky. Složení lze popsat i obecnějším způsobem, například „lineární mastné kyseliny C8–C16“ nebo „ethoxyláty alkoholů s alkoholy C10–C14 a 4–10 ethoxylátovými jednotkami“. Dále je možné uvést informace o chemickém složení na základě dobře známých referenčních vzorků nebo norem a v mnoha případech je navíc možné použít indexy a existující kódy. Další obecné informace o složení mohou představovat takzvané „profily“, tj. například chromatografické nebo spektrální zobrazení, které ukazují charakteristický vzor (profil) rozložení absorpčních vrcholů.

U látky UVCB musí být všechny složky přítomné v koncentracích $\geq 10\%$ a všechny ostatní známé složky přítomné v koncentracích $< 10\%$ specifikovány názvem IUPAC v anglickém jazyce, typickými koncentracemi a koncentračními rozmezími.

Kromě toho musíte pro každou složku uvést číselný identifikátor (číslo CAS a/nebo číslo ES nebo pořadové číslo), pokud je k dispozici.

Složky, které nelze identifikovat jednotlivě, se popíší ve skupinách podle chemické povahy. V tomto případě musíte pro každou skupinu uvést alespoň chemický název, typickou koncentraci a koncentrační rozmezí. Kromě toho je třeba uvést informace o molekulovém a strukturním vzorci, pokud jsou k dispozici.

Složky, které mají význam pro klasifikaci látky nebo posouzení PBT²⁰, se musí vždy identifikovat pomocí stejných identifikátorů, nezávisle na jejich koncentraci.

²⁰ Více informací ohledně posouzení PBT a příslušná kritéria naleznete v Pokynech k požadavkům na informace a posuzování chemické bezpečnosti, kapitole R11: Posouzení PBT.

Neznámé složky, které nemají vliv na klasifikaci, se musí identifikovat co nejvíce pomocí obecného popisu jejich chemické povahy. Přidatné látky se musí kompletně specifikovat způsobem podobným tomu, který byl popsán pro přesně definované látky.

Hlavní parametry identifikace – název, zdroj a proces

Protože samo chemické složení k identifikaci látky nestačí, musí se látka obecně identifikovat pomocí svého názvu, původu nebo zdroje a popisu výrobního procesu. Důležitými identifikátory mohou být také další vlastnosti látky, ať už jako důležité obecné identifikátory (např. bod varu), nebo jako zásadní identifikátory pro specifické skupiny látek (např. katalytická aktivita u enzymů).

1. Pravidlo pro pojmenování

Název látky UVCB je obvykle kombinací zdroje a procesu a má tento obecný formát: nejprve zdroj a poté proces či procesy.

- Látka získaná z biologických zdrojů se identifikuje pomocí názvů druhů.
- Látka získaná z nebiologických zdrojů se identifikuje pomocí výchozích materiálů.
- Procesy se identifikují typem chemické reakce, pokud se jedná o syntézu nových molekul, nebo typem kroku rafinace, např. extrakce, frakcionace, zakoncentrování nebo jako reziduum.

Příklady

| Číslo ES | Název ES |
|-----------|---|
| 296-358-2 | Levandule, Lavandula hybrida, ext., acetylovaná |
| 307-507-9 | Levandule, Lavandula latifolia, ext., sulfurizovaná, sůl palladia |

V případě reakčních produktů se v seznamu ES používají odlišné formáty, např.

- EINECS: hlavní výchozí materiál, reakční produkt či produkty druhého výchozího materiálu (ostatních výchozích materiálů)
- ELINCS: reakční produkt či produkty výchozího materiálu (výchozích materiálů)

Příklady

| Číslo ES | Název ES |
|-----------|---|
| 232-341-8 | Kyselina dusitá, reakční produkty s 4-methylbenzen-1,3-benzendiamin-hydrochloridem |
| 263-151-3 | Mastné kyseliny, kokos, reakční produkty s diethylentriaminem |
| 400-160-5 | Reakční produkty mastných kyselin talového oleje, diethanolaminu a kyseliny borité |
| 428-190-4 | Reakční produkt: 2,4-diamino-6-[2-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)ethyl]-1,3,5-triazinu a kyseliny kyanurové |

V těchto pokynech se používá tento obecný formát názvu reakčního produktu (reakčních produktů): „reakční produkt(y) [názvy výchozích materiálů]“. V zásadě by se měly uvést názvy v anglickém jazyce podle pravidel nomenklatury IUPAC. Jako doplněk je možné uvést další mezinárodně uznávané názvy. Doporučuje se nahradit v názvu slovo „reakční“ konkrétním typem reakce popsaným obecným způsobem, např. esterifikace nebo tvorba solí atd. (viz pokyny níže pro čtyři specifické podskupiny UVCB).

2. Zdroj

Zdroje lze rozdělit do dvou skupin:

2.1. Zdroje biologické povahy

Látky biologického původu je nutné definovat rodem, druhem a čeledí, např. *Pinus cembra*, *Pinaceae* znamená *Pinus* (rod), *cembra* (druh), *Pinaceae* (čeleď), popřípadě kmenem nebo genetickým typem. Je-li to vhodné, měla by se také uvést část organismu použitá k extrakci látky, např. kostní dřev, slinivka nebo kmen, semena či kořen.

| Příklady | |
|-----------|--|
| Číslo ES | Název ES |
| 283-294-5 | Saccharomyces cerevisiae, ext. Popis ES Extrakty a jejich fyzikálně modifikované deriváty, jako jsou tinktury, silice konkrétní (konkrety), silice absolutní, éterické oleje, olejopryskyřice, terpeny, diterpenované frakce, destiláty, rezidua atd., získané z kvasinek <i>Saccharomyces cerevisiae</i> , <i>Saccharomycelaceae</i> . |
| 296-350-9 | <i>Arnica mexicana</i> , ext. Popis ES Extrakty a jejich fyzikálně modifikované deriváty, jako jsou tinktury, silice konkrétní (konkrety), silice absolutní, éterické oleje, olejopryskyřice, terpeny, diterpenované frakce, destiláty, rezidua atd., získané z rostliny <i>Arnica mexicana</i> , <i>Compositae</i> . |

2.2. Chemické nebo minerální zdroje

V případě reakčních produktů chemických reakcí se musí výchozí materiály popsat pomocí jejich názvu IUPAC v anglickém jazyce. Minerální zdroje je třeba popsat obecnými výrazy, např. fosfátové rudy, bauxit, kaolin, minerální plyn, uhlí, rašelina.

3. Proces

Procesy se identifikují typem chemické reakce, pokud se jedná o syntézu nových molekul, nebo typem kroků rafinace, např. extrakce, frakcionace, zakoncentrování nebo jako reziduum procesu rafinace.

U některých látek, např. chemických derivátů, je nutné proces popsat jako kombinaci rafinace a syntézy.

3.1 Syntéza

Určitá chemická nebo biochemická reakce, ke které dochází mezi výchozími materiály a jež vede k dané látce. Například Grignardova reakce, sulfonace, enzymatické štěpení proteázou nebo lipázou atd. K tomuto typu rovněž patří mnoho reakcí vedoucích k derivátům.

U nově syntetizovaných látek, u nichž nelze uvést chemické složení, jsou hlavním identifikátorem výchozí materiály společně se specifikací reakce, tj. typem chemické reakce. Typ chemické reakce naznačuje, jaké molekuly se očekávají, že budou přítomny v látce. Existuje několik druhů konečné chemické reakce: hydrolýza, esterifikace, alkylace, chlorace atd. Poněvadž ty podávají pouze obecnou informaci o možných vyprodukovaných látkách, bude v mnoha případech pro úplnou charakterizaci a identifikaci látky nezbytný chromatografický profil.

| Příklady | |
|-----------------|--|
| Číslo ES | Název ES |
| 294-801-4 | Lněný olej, epoxidovaný, reakční produkty s tetraethylenpentaminem |
| 401-530-9 | Reakční produkt 2-hydroxy-4-(propenoxy)benzofenonu a triethoxysilanu s produktem hydrolýzy silikagelu a trimethoxy(methyl)silanu |

3.2 Rafinace

Rafinaci lze použít mnoha způsoby u látek přírodního nebo minerálního původu. Nemění se při ní chemická identita látek, avšak mění se koncentrace složek, např. při zpracování rostlinného pletiva chladem a následném provedení extrakce alkoholem.

Rafinaci lze dále definovat uvedením procesu, např. extrakce. Identifikace látky závisí na druhu procesu:

- U látek získaných fyzikálními metodami, např. rafinací nebo frakcionací, se musí uvést limitní rozmezí a parametr frakce (např. velikost molekuly, délka řetězce, bod varu, rozmezí těkavosti atd.).
- U látek získaných zakoncentrováním, např. u produktů metalurgických procesů, odstředěných sraženin, filtračních reziduí atd., se musí specifikovat fáze zakoncentrování spolu s obecným složením výsledné látky v porovnání s výchozím materiálem.

| Příklady | |
|-----------------|---|
| Číslo ES | Název ES |
| 408-250-6 | Koncentrát organických sloučenin wolframu (produkty reakce chloridu wolframového, terc-butylalkoholu, nonylfenolu a pentan-2,4-dionu) |

- U reziduí pocházejících ze specifické reakce, např. strusek, dehtů a těžkých frakcí, je třeba popsat proces a obecné složení výsledné látky.

| Příklady | |
|-----------------|--|
| Číslo ES | Název ES |
| 283-659-9 | Cín, tavná rezidua Popis ES Látka pocházející z používání a výroby cínu a jeho slitin, získaná z primárních a sekundárních zdrojů, včetně recyklovaných meziproductů z továren. Složená především ze sloučenin cínu, přičemž může obsahovat jiné zbytkové neželezné kovy a jejich sloučeniny. |
| 293-693-6 | Sójová moučka, rezidua po extrakci proteinů Popis ES Vedlejší produkt, který obsahuje především sacharidy, vyráběný extrakcí odtučněných sójových bobů ethanolem. |

- U extraktů se musí uvést metoda extrakce, rozpouštědlo použité k extrakci a další důležité podmínky, např. teplota / teplotní rozmezí.
- U kombinovaného zpracování je nutné kromě informací o zdroji specifikovat všechny kroky procesu (obecným způsobem). Toto kombinované zpracování má význam zejména v případě tvorby chemických derivátů.

Příklady:

- Rostlina je nejprve podrobena extrakci, poté je extrakt destilován a destilační frakce rostlinného extraktu se použije k tvorbě chemických derivátů. Výsledná látka může být dále purifikována. Purifikovaný produkt může být nakonec přesně definován svým chemickým složením, tudíž není třeba danou látku identifikovat jako UVCB. Jestliže se produkt i nadále považuje za UVCB, lze toto kombinované zpracování popsat jako „purifikovaný chemický derivát destilační frakce rostlinného extraktu“.
- Jestliže další zpracování extraktu zahrnuje pouze tvorbu fyzikálních derivátů, jeho složení se změní, avšak bez záměrné syntézy nových molekul. Změna ve složení však vede k odlišné látce, např. destilátu nebo sraženinu rostlinného extraktu.
- Při výrobě ropných produktů se často používá tvorba chemických derivátů ve spojení s frakcionací. Například destilace ropy následovaná krakováním dává vzniknout frakci výchozího materiálu a také novým molekulám. V takovém případě by proto měly být identifikovány oba procesy, anebo by se měl destilát specifikovat jakožto výchozí materiál krakování. To se týká zejména ropných derivátů, které jsou často výsledkem kombinace procesů. Pro identifikaci ropných látek je však možné použít samostatný specifický systém (viz kapitola 4.3.2.2).

Protože chemický derivát extraktu nebude obsahovat stejné složky jako původní extrakt, musí se považovat za odlišnou látku. Toto pravidlo může mít za následek, že identifikace pomocí názvu a popisu se bude lišit od dřívějšího názvu a popisu v seznamu EINECS. V době vytváření seznamu EINECS se extrakty z různých procesů, různá rozpouštědla a dokonce i fyzikální a chemické deriváty často zahrnovaly do jedné jediné položky. Podle nařízení REACH by se však tyto látky měly registrovat jako odlišné látky.

4. Další parametry identifikace látky

Kromě chemického názvu, zdroje a specifikace procesu by se u UVCB látky měly uvést všechny další důležité informace, které vyžaduje oddíl 2 přílohy VI nařízení REACH.

Další parametry identifikace mohou být důležité zejména u specifických typů látek UVCB. Další doplňující identifikátory mohou zahrnovat:

- o obecný popis chemického složení,
- o chromatografický profil nebo jiné profily,
- o referenční materiál (např. ISO),
- o fyzikálně-chemické parametry (např. bod varu),
- o číslo v indexu barev,
- o číslo AISE.

Níže jsou uvedeny konkrétní pokyny ohledně pravidel a kritérií, jak použít informace o názvu, zdroji a procesu k identifikaci látek UVCB pro různé typy zdrojů a procesů. V následujících odstavcích jsou popsány čtyři podtypy látek UVCB jakožto kombinace biologických nebo chemických/minerálních zdrojů a procesů (syntéza nebo rafinace).

UVCB podtyp 1, u něhož je zdroj biologický a procesem je syntéza

Látky biologické povahy lze (bio)chemickým procesem modifikovat a vyrobit tak složky, které nebyly přítomny ve výchozím materiálu, např. chemické deriváty rostlinných extraktů nebo produkty enzymatické úpravy extraktů. Například proteiny lze hydrolyzovat proteázou a získat tak oligopeptidy, anebo lze karboxylací celulózy ze dřeva získat karboxymethylcelulózu (CMC).

K tomuto podtypu UVCB mohou rovněž patřit produkty fermentace. Například vinázy jsou produktem fermentace cukru a na rozdíl od cukru obsahují mnoho různých složek. Pokud se produkty fermentace dále purifikují, mohou se tyto látky nakonec stát plně identifikovatelnými svým chemickým složením a již by se neměly nadále označovat jako látky UVCB.

Enzymy jsou zvláštní skupina látek, které lze získat extrakcí ze zdroje biologického původu a následným čištěním. Přestože lze zdroj a proces podrobně specifikovat, neposkytuje to specifické informace o enzymu. U těchto látek je nutné použít specifický systém klasifikace, pojmenování a identifikace (viz kapitola 4.3.2.3).

Za účelem identifikace látky je třeba uvést konečný krok procesu nebo jakýkoli jiný krok procesu, který je pro identitu látky důležitý.

Popis chemického procesu musí zahrnovat obecný popis typu procesu (esterifikace, alkalická hydrolýza, alkylace, chlorace, substituce atd.) a příslušné podmínky procesu.

Popis biochemického procesu může zahrnovat obecný popis katalyzované reakce a název enzymu, který reakci katalyzuje.

U látek, které se vyrábějí fermentací nebo pomocí (tkáňových) kultur druhů, by se měl uvést fermentující druh organismu, typ a obecné podmínky fermentace (vsádková nebo kontinuální, aerobní, anaerobní, anoxická, teplota, pH atd.) spolu s dalšími kroky procesu použitými k izolaci produktů fermentace, např. odstředování, srážení, extrakce atd. Jsou-li tyto látky dále čištěny, může se tím získat frakce, koncentrát nebo reziduum. Tyto dále zpracované látky jsou identifikovány doplňující specifikací dalších kroků procesu.

UVCB podtyp 2, u něhož je zdroj chemický nebo minerální a procesem je syntéza

Látky UVCB získané z chemických nebo minerálních zdrojů procesem, při němž dochází k syntéze nových molekul, jsou „reakční produkty“. Příkladem chemických reakčních produktů jsou produkty esterifikace, alkylace nebo chlorace. Biochemické reakce používající izolované enzymy jsou zvláštním typem chemických reakcí. Jestliže se však použije komplexní biochemická dráha syntézy za využití celého mikroorganismu, je lepší považovat výslednou látku za produkt fermentace a identifikovat ji pomocí fermentačního procesu a fermentujícího druhu organismu, spíše než pomocí výchozích materiálů (viz UVCB podtyp 4).

Ne každý reakční produkt by se měl automaticky specifikovat jako UVCB. Je-li možné reakční produkt dostatečně definovat pomocí chemického složení (počítaje v to jistou variabilitu), měla by se dát přednost identifikaci jako vícesložková látka (viz kapitola 4.2.2). Pouze není-li složení reakčního produktu dostatečně známo či je obtížně předpověditelné, měla by se látka identifikovat jako látka UVCB („reakční produkt“). Identifikace reakčního produktu je založena na výchozích materiálech reakce a na (bio)chemickém procesu reakce, v němž se látka vytváří.

| Příklady | | |
|-----------------|---|------------------|
| Číslo ES | Název EINECS | Číslo CAS |
| 294-006-2 | Nonandiová kyselina, reakční produkty s 2-amino-2-methyl-1-propanolem | 91672-02-5 |
| 294-148-5 | Formaldehyd, reakční produkty s diethylenglykolem a fenolem | 91673-32-4 |

Hlavním identifikátorem reakčních produktů je popis výrobního procesu. Pro účely identifikace látky se uvede konečný nebo nejdůležitější krok procesu. Popis chemického procesu musí zahrnovat obecný popis typu procesu (esterifikace, alkalická hydrolýza, alkylace, chlorace, substituce atd.) a příslušné podmínky procesu. Biochemický proces se popíše typem reakce a názvem enzymu katalyzujícího danou reakci.

UVCB podtyp 3, u něhož je zdroj biologický a procesem je čištění (rafinace)

Látky UVCB biologického původu získané procesem čištění, při němž se záměrně nevytvářejí nové molekuly, mohou být např. extrakty, frakce extraktů, koncentráty extraktů, purifikované extrakty nebo procesní rezidua látek biologického původu.

Jakmile se extrakt dále zpracovává, není již látka identická s extraktem, ale jedná se o jinou látku, která patří k jinému podtypu UVCB, např. frakce nebo reziduum extraktu. Tyto látky se specifikují doplňujícími (dalšími) parametry procesu. Je-li extrakt modifikován chemickými nebo biochemickými reakcemi vedoucími k novým molekulám (derivátům), identifikuje se látka pomocí pokynů pro UVCB podtyp 2 nebo pokynů pro přesně definovanou látku v kapitole 4.2.

Toto rozlišení dále zpracovaných extraktů může mít za následek skutečnost, že se nový název a popis budou lišit od názvu a popisu uvedených v seznamu EINECS. V době vytváření seznamu se extrakty takto nerozlišovaly a všechny typy extraktů získaných různými rozpouštědly a dalšími kroky procesu mohly být zahrnuty do jediné položky.

Prvním hlavním identifikátorem pro tento podtyp látek UVCB je čeleď, rod a druh organismu, ze kterého látka pochází. Je-li to vhodné, měla by se uvést část organismu použitá k extrakci látky, např. kostní dřeň či slinivka nebo kmen, semena či kořen. U látek mikrobiologického původu se definuje kmen a genetický typ daného druhu organismu.

Jestliže je látka UVCB získána z odlišného druhu organismu, bude se považovat za odlišnou látku, přestože její chemické složení může být podobné.

| Příklady | |
|-----------------|--|
| Číslo ES | Název EINECS |
| 290-977-1 | Oxidovaný extrakt kampešky (<i>Haematoxylon campechianum</i>) Popis ES Tato látka je v indexu barev identifikována číslem C.I. 75290 oxidovaný. |
| 282-014-9 | Pankreatické extrakty, zbavené bílkovin |

Druhým hlavním identifikátorem je zpracování látky, např. proces extrakce, frakcionace, purifikace nebo zakoncentrování, nebo proces, který ovlivňuje složení rezidua. Čištění extraktů pomocí různých procesů, např. použitím různých rozpouštědel nebo různých purifikačních kroků, tudíž povede k různým látkám.

Čím více kroků se při čištění použije, tím snadnější bude definovat látku pomocí jejího chemického složení. V takovém případě odlišné výchozí druhy nebo odlišné procesní modifikace nepovedou automaticky k odlišné látce.

Hlavním parametrem identifikace látek biologického původu je popis příslušných procesů. U extraktů se popíše proces extrakce tak podrobně, jak je to pro identitu látky nutné. Je třeba specifikovat přinejmenším použité rozpouštědlo.

Pokud se při výrobě látky používají další procesní kroky, jako je frakcionace nebo zakoncentrování, popíše se kombinace příslušných kroků procesu, např. kombinace extrakce a frakcionace, včetně limitních rozmezí.

UVCB podtyp 4, u něhož je zdroj chemický nebo minerální a procesem je čištění (rafinace)

Látky nebiologického původu, tj. látky, které jsou minerály nebo pocházejí z minerálů, rud, uhlí, zemního plynu a ropy či z jiných surovin chemického průmyslu a jsou výsledkem zpracování bez záměrných chemických reakcí, mohou být (purifikované) frakce, koncentráty či rezidua těchto procesů.

Uhlí a ropa se používají při procesech destilace nebo zplyňování za účelem produkce široké škály látek, např. ropných látek a topných olejů atd., a rovněž reziduí, jako jsou dehty a strusky. Destilovaný nebo jiným způsobem frakcionovaný produkt se velmi často ihned dále zpracovává, včetně za použití chemických reakcí. V takových případech se identifikace látky řídí pravidly uvedenými u UVCB podtypu 2, neboť proces je důležitější než zdroj.

U ropných látek se používá zvláštní systém identifikace (viz kapitola 4.3.2.2). Mezi látky zahrnuté do tohoto systému patří frakce a produkty chemických reakcí.

Další látky UVCB podtypu 4 mohou zahrnovat rudy, rudné koncentráty a strusky obsahující různá množství kovů, které lze extrahovat při metalurgickém zpracování.

Minerály, jako je bentonit nebo uhličitán vápenatý, se mohou zpracovávat např. rozpouštěním v kyselině nebo chemickým srážením či na kolonách pro iontovou výměnu. Je-li chemické složení plně definováno, měly by se minerály identifikovat podle pravidel uvedených v příslušné části kapitoly 4.2. Pokud jsou minerály zpracovány pouze mechanickými metodami, např. mletím, prosíváním, odstředováním, flotací atd., považují se stále za stejné minerály jako minerály při těžbě. Minerály, které se produkuje výrobním procesem, lze – za

účelem identifikace²¹ – považovat za stejné jako jejich přirozeně se vyskytující protějšky, pokud je jejich složení podobné a profil toxicity identický.

Hlavním parametrem identifikace látek nebiologického původu je popis příslušného kroku (příslušných kroků) procesu.

U frakcí se popíše proces frakcionace s parametry a limitním rozmezím izolované frakce, případně společně s popisem předchozích kroků procesu.

U kroku zakoncentrování se kromě informací o předchozím kroku (předchozích krocích) procesu uvede typ procesu, např. odpařování, srážení atd., a poměr mezi výchozí a konečnou koncentrací hlavních složek.

Hlavním parametrem identifikace reziduí nebiologického původu je popis procesu, z něhož reziduum pochází. Tímto procesem může být jakákoli fyzikální reakce, při níž se tvoří rezidua, např. proces purifikace, frakcionace či zakoncentrování.

Analytické informace

Látky UVCB zahrnují velmi rozmanité typy látek, které se liší parametry, jako je zdroj a výrobní proces. Měly by být proto předloženy vhodné analytické metody pro poskytnutí informací o složení látky UVCB, které závisí na konkrétním případě. Poznátky o tom, jak tyto metody používat, jsou navíc předmětem neustálého vývoje a zlepšování. Žadatel o registraci proto zodpovídá za to, že předloží náležité analytické údaje, aby poskytl co nejlepší informace, které umožňují identifikaci látky.

K charakterizaci látek UVCB lze použít několik kvalitativních metod, například UV/VIS, infračervenou a hmotnostní spektrometrii, nukleární magnetickou rezonanci a rentgenovou difrakci.

K charakterizaci složení látky se přiloží kvantitativní údaje, jako jsou chromatogramy nebo údaje o difrakci, které lze považovat za stanovení chemického profilu.

Popis analytických metod musí zahrnovat použité experimentální protokoly a interpretaci uvedených výsledků.

4.3.2. Zvláštní typy látek UVCB

V tomto oddíle jsou uvedeny pokyny týkající se zvláštních skupin látek UVCB: látek s proměnlivou délkou uhlíkového řetězce (4.3.2.1), látek získaných z ropy nebo ropě podobných zdrojů (4.3.2.2) a enzymů (4.3.2.3).

4.3.2.1 Látky s proměnlivou délkou uhlíkového řetězce

Tato skupina látek UVCB zahrnuje alkylové látky s dlouhým řetězcem, které mají proměnlivou délku uhlíkového řetězce, např. parafiny a olefiny. Tyto látky se získávají buď z přírodních tuků či olejů, nebo se vyrábějí synteticky. Přírodní tuky pocházejí z rostlin nebo živočichů. Látky s dlouhým uhlíkovým řetězcem získané z rostlin mají obvykle pouze sudý počet atomů uhlíku v řetězci, zatímco látky s dlouhým uhlíkovým řetězcem získané z živočišných zdrojů zahrnují i (některé) řetězce s lichým počtem atomů uhlíku. Synteticky vyráběné látky s dlouhým uhlíkovým řetězcem mohou zahrnovat celou škálu uhlíkových řetězců se sudým i lichým počtem atomů uhlíku.

²¹ Stejný přístup k identifikaci přirozeně se vyskytujících a chemicky vyráběných minerálů neznámá nezbytně, že právní požadavky (např. výjimky z registrace) jsou stejné.

Identifikátory a pravidlo pro pojmenování

Tato skupina obsahuje látky, jejichž jednotlivé složky mají společný rys týkající se jejich struktury: jednu nebo více alkylových skupin s dlouhým řetězcem, často s připojenou funkční skupinou. Složky se od sebe liší v jedné nebo více z těchto charakteristik alkylové skupiny:

- o délka uhlíkového řetězce (počet atomů uhlíku),
- o nasycení,
- o struktura (lineární nebo větvené),
- o umístění funkční skupiny.

Chemickou identitu složek lze dostatečně popsat a systematicky pojmenovat pomocí těchto tří deskriptorů:

- o **Deskriptor alkylu**, který popisuje počet atomů uhlíku v uhlíkovém řetězci (uhlíkových řetězcích) alkylové skupiny (alkylových skupin).
- o **Deskriptor funkční skupiny**, který identifikuje funkční skupinu látky, např. amin, amonium nebo karboxylová kyselina.
- o **Deskriptor soli**, tj. kationt/aniont jakékoli soli, např. sodný (Na^+), uhličitanový (CO_3^{2-}), chloridový (Cl^-).

Deskriptor alkylu

- o Deskriptor alkylu C_{x-y} se obecně vztahuje na satureované lineární alkylové řetězce o všech délkách řetězce od x do y , např. C_{8-12} odpovídá C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} a C_{12} .
- o Je třeba uvést, zda se deskriptor alkylu vztahuje pouze na alkylové řetězce o sudém či lichém počtu atomů uhlíku, např. C_{8-12} (sudý počet).
- o Je třeba uvést, zda se deskriptor alkylu vztahuje (také) na větvené alkylové řetězce, např. C_{8-12} (větvené) nebo C_{8-12} (lineární a větvené).
- o Je třeba uvést, zda se deskriptor alkylu vztahuje (také) na nesatureované alkylové řetězce, např. C_{12-22} (C_{18} nesatureovaný).
- o Úzké rozmezí rozložení délky alkylových řetězců nepokrývá širší rozmezí a naopak, např. C_{10-14} neodpovídá C_{8-18} .
- o Deskriptor alkylu se může rovněž vztahovat ke zdroji alkylových řetězců, jako je kokos nebo lůj. Rozložení délek uhlíkových řetězců však musí odpovídat zdroji.

Výše popsaný systém by se měl použít k popisu látek s proměnlivou délkou uhlíkových řetězců. Není vhodný pro přesně definované látky, které lze identifikovat pomocí jednoznačné chemické struktury.

Informace o deskriptoru alkylu, deskriptoru funkční skupiny a deskriptoru soli jsou základem pro pojmenování tohoto typu látky UVCB. Dále mohou být k přesnější identifikaci látky užitečné informace o zdroji a procesu.

Příklady

| Deskriptory | Název |
|---|--|
| Deskriptor alkylu Deskriptor funkční skupiny Deskriptor soli | alkylové řetězce o délce C_{10-18} mastné kyseliny (karboxylové kyseliny) soli kadmia |
| | kadmiové soli mastných kyselin (C_{10-18}) |

| | | |
|---|--|--|
| Deskriptor alkylu Deskriptor funkční skupiny Deskriptor soli | di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl-dimethyl amonium chlorid | chlorid di-C ₁₀₋₁₈ -alkyl- dimethylamonný |
| Deskriptor alkylu Deskriptor funkční skupiny Deskriptor soli | trimethylalkyl odvozený z mastných kyselin loje amonium chlorid | chlorid trimethylalkyl amonný odvozený z mastných kyselin loje |

4.3.2.2 Látky získané z ropy a ropě podobných zdrojů

Látky získané z ropy (ropné látky) nebo zdrojů podobných ropě (např. uhlí) jsou látky s velmi komplexním a proměnlivým či částečně nedefinovaným složením. V této kapitole je na ropných látkách názorně předvedeno, jak identifikovat tento specifický typ látek UVCB. Stejný přístup lze nicméně použít i na jiné látky získané ze zdrojů podobných ropě, jako je uhlí.

Výchozím materiálem používaným v ropném rafinářském průmyslu může být ropa nebo jakýkoli specifický produkt či meziprodukt zpracování ropy získaný jedním nebo více procesy. Složení konečných produktů závisí na ropě použité k výrobě (neboť složení ropy se liší v závislosti na místě původu) a následných rafinačních postupech. Proto existuje přirozená variabilita ve složení ropných látek nezávislá na procesu.¹⁷

1. Pravidlo pro pojmenování

Při identifikaci ropných látek se doporučuje dát jim název v souladu se zavedeným systémem názvosloví²². Tento název se obvykle skládá z rafinačního procesu, zdroje proudu a obecného složení či charakteristik. Pokud látka obsahuje > 5 % hmot. aromatických uhlovodíků s 4–6 kondenzovanými jádry, měla by se tato informace začlenit do popisu. U ropných látek s číslem EINECS se použije název uvedený v seznamu ES.

2. Identifikátory

Výrazy a definice sloužící k identifikaci ropných látek obvykle zahrnují zdroj proudu, rafinační proces, obecné složení, počet atomů uhlíku, rozmezí varu či jiné vhodné fyzikální charakteristiky a převládající typ uhlovodíku.²²

Měly by se uvést parametry identifikace uvedené v oddíle 2 přílohy VI nařízení REACH. Je však třeba připustit, že se ropné látky vyrábějí spíše podle přesného popisu chování než specifikace složení. Proto jsou obvykle k co možná nejjasnější identifikaci ropné látky užitečnější charakteristiky, jako je název, rozmezí délek uhlíkových řetězců, bod varu, viskozita, mezní hodnoty a jiné fyzikální vlastnosti, než informace o složení.

Přestože chemické složení není hlavním identifikátorem látek UVCB, musí se uvést všechny složky v koncentraci $\geq 10\%$ a známé složky v koncentraci $< 10\%$ a obecně popsat složení, např. rozmezí molekulové hmotnosti, alifatické nebo aromatické uhlovodíky, stupeň hydrogenace a další nezbytné informace. Pomocí stejných parametrů by měly být popsány

²² US EPA (1978), TSCA PL 94-469, Candidate list of chemicals substances, Addendum I. Generic terms covering petroleum refinery process streams (Seznam chemických látek, dodatek I. Obecné výrazy týkající se proudů ropných rafinačních procesů). US EPA, Office of Toxic Substances (Úřad pro toxické látky), Washington DC 20460.

i skupiny složek, které nelze identifikovat jednotlivě. Dále je nutné pomocí názvu a typické koncentrace identifikovat jakékoli další složky o nižší koncentraci, které mají vliv na klasifikaci nebezpečnosti.

4.3.2.3 Enzymy

Enzymy se nejčastěji vyrábějí fermentací pomocí mikroorganismů, příležitostně však mohou být i rostlinného nebo živočišného původu. Tekutý enzymový koncentrát, který je výsledkem fermentace nebo extrakce a následných purifikačních kroků, obsahuje kromě vody aktivní protein enzymu a další složky sestávající z reziduí po fermentaci, tj. proteiny, peptidy, aminokyseliny, sacharidy, lipidy a anorganické soli.

Enzymový protein spolu s ostatními složkami pocházejícími z procesu fermentace či extrakce, avšak s vyloučením vody, kterou lze oddělit, aniž by se tím ovlivnila stabilita či složení enzymového proteinu, by měly být pro účely identifikace považovány za látku.

Enzymatická látka obvykle obsahuje 10–80 % hmot. enzymového proteinu. Procento ostatních složek je rozmanité a závisí na organismu použitém při výrobě, fermentačním médiu a provozních parametrech fermentačního procesu a rovněž na použité následné purifikaci, složení se však bude obvykle nacházet v rozmezích uvedených v této tabulce.

| | |
|--|---------|
| Aktivní enzymový protein | 10–80 % |
| Ostatní proteiny + peptidy a aminokyseliny | 5–55 % |
| sacharidy | 3–40 % |
| Lipidy | 0–5 % |
| Anorganické soli | 1–45 % |
| Celkem | 100 % |

Enzymatická látka by se měla považovat za „látku UVCB“ díky své variabilitě a částečně neznámému složení. Enzymový protein by se měl považovat za složku látky UVCB. Vysoce purifikované enzymy lze identifikovat jako látky o přesně definovaném složení (jednosložkové nebo vícesložkové) a měly by se identifikovat v souladu s touto skutečností.

V seznamu EINECS je hlavním identifikátorem enzymů katalytická aktivita. Enzymy jsou uvedeny jako obecné položky bez další specifikace nebo se specifickými záznamy uvádějícími zdrojový organismus nebo substrát.

| Příklady | | |
|-----------------|--|------------|
| Číslo ES | Název EINECS | Číslo CAS |
| 278-547-1 | Proteináza, <i>Bacillus neutral</i> | 76774-43-1 |
| 278-588-5 | Proteináza, <i>Aspergillus neutral</i> | 77000-13-6 |
| 254-453-6 | Elastáza (ze slinivky břišní prasat) | 39445-21-1 |

| | | |
|-----------|-----------|------------|
| 262-402-4 | Mannanáza | 60748-69-8 |
|-----------|-----------|------------|

V rámci studie enzymů zadané Evropskou komisí bylo navrženo identifikovat enzymy podle mezinárodního systému pro názvosloví enzymů, IUBMB (Mezinárodní unie pro biochemii a molekulární biologii).²³ Tento přístup je převzat i v těchto pokynech a oproti seznamu EINECS umožní systematictější, podrobnou a ucelenou identifikaci enzymů.

1. Pravidlo pro pojmenování

Enzymy se pojmenovávají podle pravidel názvosloví IUBMB.

Klasifikační systém IUBMB přiděluje každému typu enzymu a katalytické funkci jedinečné čtyřciferné číslo (např. 3.2.1.1 pro α -amylázu).²⁴ Každé číslo může zahrnovat enzymy s různou sekvencí aminokyselin a rozličného původu, avšak s identickou enzymatickou funkcí. Název a číslo pocházející z názvosloví IUBMB by se měly používat k identifikaci látky. Podle názvosloví IUBMB jsou enzymy rozděleny do šesti hlavních skupin:

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

Následující příklad znázorňuje položku podle názvosloví IUBMB:

EC 3.4.22.33

Schválený název: Bromelain z plodu

Reakce: Hydrolýza proteinů s širokou specifitou pro peptidické vazby. Dobrým syntetickým substrátem je Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec, avšak nepůsobí na Z-Arg-Arg-NHMec (srov. bromelain z lodyhy).

Jiný název (jiné názvy): bromelain ze šťávy; ananase (angl.); bromelase (angl.); bromelin; extranase (angl.); bromelain, šťáva; pinase (angl.); ananasový enzym; traumanase (angl.); fruit bromelain FA2 (angl.)

Poznámky: Z rostliny ananasu, *Ananas comosus*. Nepatrně inhibován kuřecím cystatinem. Z příbuzné rostliny *Bromelia pinguin* se získává další cysteinová endopeptidáza s podobným účinkem na substráty o malé molekule, pinguinain (dříve EC 3.4.99.18), avšak pinguinain se od bromelainu pocházejícího z plodu liší v tom, že je inhibován kuřecím cystatinem [4].²⁵

²³ UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Soubor informací o enzymech. Závěrečná zpráva. Spolupráce mezi rakouskou Spolkovou agenturou pro životní prostředí a Meziuniverzitním výzkumným střediskem pro technologii, práci a kulturu (IFF/IFZ), Č. smlouvy B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

²⁴ Výrazy „číslo EC“ (≡ číslo podle Komise pro enzymy) a „číslo IUBMB“ se často používají jako synonyma. Aby se předešlo nedorozumění, doporučuje se pro čtyřciferný kód IUBMB používat výraz „číslo IUBMB“.

²⁵ Rowan, A.D., Buttler, D.J. a Barrett, A.J. The cysteine proteinases of the pineapple plant. *Biochem. J.* 266 (1990) 869-875. [Medline UI: 90226288].

Patří do skupiny peptidáz C1²⁶ (skupina papainů). Dříve EC 3.4.22.5 a zařazen pod EC 3.4.22.4, číslo v registru CAS: 9001-00-7.

Odkazy na další databáze:

[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)

Obecná literatura:

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

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

Ota, S., Muta, E., Katanita, Y. a Okamoto, Y. Reinvestigation of fractionation and some properties of the proteolytically active components of stem and fruit bromelains. *J. Biochem. (Tokio)* 98 (1985) 219-228. [PMID: 4044551]

Příklady klasifikace enzymů podle systému IUBMB

(<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>)

Proteázy jsou číslovány podle těchto kritérií:

| | |
|--------|---|
| 3. | Hydrolázy |
| 3.4 | Působící na peptidické vazby (peptidázy), s podtřídami: |
| 3.4.1 | α-amino-acyl-peptid hydrolázy (nyní pod EC 3.4.11) |
| 3.4.2 | peptidyl-aminokyselina hydrolázy (nyní pod EC 3.4.17) |
| 3.4.3 | dipeptid hydrolázy (nyní pod EC 3.4.13) |
| 3.4.4 | peptidyl peptid hydrolázy (nyní překlasifikovány do EC 3.4) |
| 3.4.11 | aminopeptidázy |
| 3.4.12 | peptidyl-aminokyselina hydrolázy nebo acyl-aminokyselina hydrolázy (nyní překlasifikovány do 3.4) |
| 3.4.13 | dipeptidázy |
| 3.4.14 | dipeptidyl-peptidázy a tripeptidyl-peptidázy |
| 3.4.15 | peptidyl-dipeptidázy |

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

| | |
|--|---|
| 3.4.16 | karboxypeptidázy serinového typu |
| 3.4.17 | metalokarboxypeptidázy |
| 3.4.18 | karboxypeptidázy cysteinového typu |
| 3.4.19 | omega peptidázy |
| 3.4.21 | serinové endopeptidázy |
| A dále jsou identifikovány specifické enzymy: | |
| 3.4.21.1 | chymotrypsin |
| 3.4.21.2 | chymotrypsin C |
| 3.4.21.3 | metridin |
| 3.4.21.4 | trypsin |
| 3.4.21.5 | thrombin |
| 3.4.21.6 | koagulační faktor Xa |
| 3.4.21.7 | plasmin |
| 3.4.21.8 | nyní zahrnut do EC 3.4.21.34 a EC 3.4.21.35 |
| 3.4.21.9 | enteropeptidáza |
| 3.4.21.10 | akrosin |
| 3.4.21.11 | nyní zahrnut do EC 3.4.21.36 a EC 3.4.21.37 |
| 3.4.21.12 | 12 a-lytická endopeptidáza |
| ... | |
| 3.4.21.105 | |
| 3.4.99 | endopeptidázy s neznámým katalytickým mechanismem |

Příklady ze seznamu EINECS s přidáním číslem IUBMB

| Číslo ES | Název EINECS | Číslo CAS | Číslo IUBMB |
|-----------|--|------------|-------------|
| 278-547-1 | Proteináza, <i>Bacillus neutral</i> | 76774-43-1 | 3.4.24.28 |
| 232-752-2 | Subtilizin | 9014-01-1 | 3.4.21.62 |

| | | | |
|-----------|----------|-----------|---------|
| 232-734-4 | Celulóza | 9012-54-8 | 3.2.1.4 |
|-----------|----------|-----------|---------|

2. Identifikátory

Enzymatické látky jsou identifikovány přítomným enzymovým proteinem (názvosloví IUBMB) a ostatními složkami pocházejícími z fermentace. Kromě enzymového proteinu není obvykle žádná specifická složka přítomna v koncentracích nad 1 %. Jestliže identity těchto specifických složek nejsou známy, je možné je uvést na základě seskupování (tj. proteiny, peptidy, aminokyseliny, sacharidy, lipidy a anorganické soli). Jsou-li však identity jednotlivých složek známy nebo pokud se jejich koncentrace rovná nebo přesáhne 10 % nebo pokud jsou důležité pro klasifikaci a označení a/nebo posouzení PBT²⁷, musí se jednotlivé složky uvést.

Enzymové proteiny

Enzymové proteiny v koncentrátu by se měly identifikovat pomocí:

- čísla IUBMB
- názvů přidělených podle IUBMB (systematický název, názvy enzymu, synonyma),
- poznámek IUBMB
- reakce a typu reakce,
- čísla a názvu ES, je-li to vhodné,
- čísla a názvu CAS, jsou-li k dispozici.

Měla by se specifikovat reakce indukovaná enzymem. Tato reakce je definovaná IUBMB.

Příklad

alfa-amyláza: polysacharid obsahující glukózové jednotky spojené alfa-1,4 glykosidovou vazbou + H₂O = malto-oligosacharidy; endohydrolýza alfa-1,4-D-glykosidových vazeb v polysacharidech obsahujících tři nebo více D-glukózových jednotek spojených alfa-1,4 glykosidovou vazbou.

Typ reakce se přidělí podle třídy enzymů. Může se jednat o oxidaci, redukci, eliminaci, adici nebo název reakce.

Příklad

alfa-amyláza: hydrolýza O-glykosylové vazby (endohydrolýza).

Jiné složky než enzymový protein

Měly by se identifikovat všechny složky přítomné v koncentraci ≥ 10 % (hmot.) či složky důležité pro klasifikaci a označení nebo posouzení PBT.²⁸ Identitu složek vyskytujících se v koncentraci menší než 10 % lze uvést jako chemickou skupinu. Je třeba uvést jejich typickou koncentraci (typické koncentrace) nebo koncentrační rozmezí, tj.:

- (glyko)proteiny

²⁷ Více informací ohledně posouzení PBT a příslušná kritéria naleznete v Pokynech k požadavkům na informace a posuzování chemické bezpečnosti, kapitole R11: Posouzení PBT.

²⁸ Více informací o posouzení PBT a příslušných koncentračních limitech naleznete v technických pokynech RIP 3.2 ohledně posouzení bezpečnosti, v oddíle posouzení PBT.

- peptidy a aminokyseliny
- sacharidy
- lipidy
- anorganický materiál (např. chlorid sodný nebo jiné anorganické soli)

Není-li možné dostatečně identifikovat ostatní složky enzymového koncentrátu, měl by se uvést název produkčního organismu (rod a kmen nebo genetický typ, pokud je to vhodné), stejně jako u jiných látek UVCB biologického původu.

Jsou-li k dispozici, mohou se uvést i další parametry, např. funkční parametry (tj. pH nebo teplotní optima a rozmezí), kinetické parametry (tj. specifická aktivita nebo číslo přeměny), ligandy, substráty a produkty a kofaktory.

5. Kritéria pro ověření, zda se jedná o totožné látky

Při ověřování, zda lze látky od různých výrobců/dovozců považovat za totožné, je třeba dodržovat určitá pravidla. Tato pravidla, která byla použita při vytváření seznamu EINECS, by se měla považovat za obecný základ pro identifikaci a pojmenování látky, a tedy i pro nalezení potenciálního žadatele o společnou registraci této konkrétní látky^{5, 6, 16, 29, 30}. Látky, které se nepovažují za totožné, lze nicméně na základě odborného posudku považovat za strukturně příbuzné. U těchto látek je možné sdílet údaje, pokud je to vědecky podložené. Toto však není předmětem těchto pokynů, zabývají se tím *Pokyny pro sdílení údajů*.

- Pro jednosložkové látky by se mělo použít pravidlo „≥ 80 %“ a měla by se použít definice vícesložkové látky.

Nerozlišuje se mezi různými stupni čistoty látek, jimiž jsou technicky čistá, čistá či analyticky čistá. To znamená, že „totožná“ látka může mít jiný profil čistoty/nečistoty v závislosti na svém stupni čistoty. Přesně definované látky by však měly obsahovat stejnou hlavní složku (stejně hlavní složky) a jediné povolené nečistoty jsou nečistoty pocházející z výrobního procesu (podrobnosti viz kapitola 4.2) a přídatné látky, které jsou nezbytné k stabilizaci látky.

- Hydratované a bezvodé formy sloučenin se pro účely registrace považují za totožnou látku.

| Příklady | | | |
|--|-----------|-----------|---|
| Název a vzorec | Číslo CAS | Číslo ES | Pravidlo |
| Síran měďnatý (Cu · H ₂ O ₄ S) | 7758-98-7 | 231-847-6 | |
| Měďnatá sůl kyseliny sírové (1:1), pentahydrát (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O) | 7758-99-8 | | Na tuto látku se vztahuje registrace její bezvodé formy (číslo ES: 231-847-6) |

Hydratované a bezvodé formy mají odlišné chemické názvy a odlišná čísla CAS.

- Kyseliny nebo zásady a jejich soli se považují za rozdílné látky.

| Příklady | | |
|-----------|---|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 201-186-8 | Kyselina peroxyoctová C ₂ H ₄ O ₃ | Tato látka se nepovažuje za totožnou například s příslušnou sodnou solí (EINECS 220-624-9). |

²⁹ Vollmer a kol. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem sv. 65, s. 113–122.

³⁰ Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, internetové stránky ECB; Geiss a kol 1992, Vollmer a kol. 1998, Rasmussen a kol. 1999.

| | | |
|-----------|---|--|
| 220-624-9 | Glykolát sodný C ₂ H ₄ O ₃ . Není k dispozici | Tato látka se nepovažuje za totožnou například s odpovídající kyselinou (EINECS 201-186-8). |
| 202-426-4 | 2-chloranilin C ₆ H ₆ ClN | Tato látka se nepovažuje za totožnou, například s látkou 2-chloranilin hydrobromid (1:1) (C ₆ H ₆ ClN . HBr) |

- Jednotlivé soli (např. sodné nebo draselné) se považují za rozdílné látky.

| Příklady | | |
|-----------------|--|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 208-534-8 | Benzoát sodný C ₇ H ₅ O ₂ . Není k dispozici | Tato látka se nepovažuje za totožnou například s draselnou solí (EINECS 209-481-3). |
| 209-481-3 | Benzoát draselný C ₇ H ₅ O ₂ . K | Tato látka se nepovažuje za totožnou například se sodnou solí (EINECS 208-534-8). |

- Větvené nebo lineární alkylové řetězce se považují za rozdílné látky.

| Příklady | | |
|-----------------|---|--|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 295-083-5 | Kyselina fosforečná, dipentylester, větvený a lineární | Tato látka se nepovažuje za totožnou s jednotlivými látkami, jako je kyselina fosforečná, dipentylester, rozvětvený či kyselina fosforečná, dipentylester, lineární. |

- Rozvětvené skupiny se jako takové uvedou v názvu. Není-li specifikováno jinak, zahrnují látky obsahující alkylové skupiny bez jakýchkoli dalších informací pouze nevětvené lineární řetězce.

| Příklady | | |
|-----------------|--|--|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 306-791-1 | Mastné kyseliny, C ₁₂₋₁₆ | Za totožnou látku se považují pouze látky s lineárními a nevětvenými alkylovými skupinami. |
| 279-420-3 | Alkoholy, C ₁₂₋₁₄ | |
| 288-454-8 | Aminy, C ₁₂₋₁₈ -alkylmethyl | |

- Látky s alkylovými skupinami, u nichž se používají dodatečné výrazy jako iso-, neo-, větvené atd., se nepovažují za totožné s látkami bez této specifikace.

| Příklady | | |
|-----------------|--|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 266-944-2 | Glyceridy, C ₁₂₋₁₈ Tato látka je identifikována názvem podle SDA: C _{12-C18} trialkylglycerid a číslem SDA: 16-001-00 | Tato látka se nepovažuje za totožnou s látkou C ₁₂₋₁₈ -iso se saturovanými alkylovými řetězci, které jsou v kterémkoli místě rozvětveny. |

- Alkylové řetězce v kyselinách či alkoholech atd. se považují pouze za saturované řetězce, aniž by to muselo být výslovně uvedeno. Nesaturované řetězce se jako takové specifikují a považují se za rozdílné látky.

| Příklady | | |
|-----------------|--|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 200-313-4 | Kyselina stearová, čistá C ₁₈ H ₃₆ O ₂ | Tato látka se nepovažuje za totožnou s kyselinou olejovou, čistou C ₁₈ H ₃₄ O ₂ (EINECS 204-007-1) |

- Látky s chirálními centry

Látka s jedním stereogenním centrem může existovat v levotočivé nebo pravotočivé formě (enantiomery). Nejsou-li k dispozici známky svědčící o opaku, předpokládá se, že je látka (racemickou) směsí obsahující stejné množství obou forem.

| Příklady | | |
|-----------------|--------------------|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 201-154-3 | 2-chlorpropan-1-ol | Jednotlivé enantiomery (R)-2-chlorpropan-1-ol a (S)-2-chlorpropan-1-ol se nepovažují za totožné s touto položkou. |

Racemáty se považují za vícesložkové látky. Pokud byla látka obohacena o jednu enantiomerní formu, platí pravidla pro jednosložkové nebo vícesložkové látky, tj. v závislosti na koncentračních rozmezích izomerů se jedná o jednosložkovou nebo vícesložkovou látku.

Látky s vícero stereogenními centry mohou existovat v 2^n formách (kdy n je počet stereogenních center). Tyto různé formy se od sebe mohou lišit fyzikálně-chemickými, toxikologickými nebo ekotoxikologickými vlastnostmi. Měly by se považovat za rozdílné látky.

- Anorganické katalyzátory

Anorganické katalyzátory se považují za směsi. Pro účely identifikace by se měly kovové složky či kovové sloučeniny považovat za jednotlivé látky (bez specifikace použití).

| Příklady | | |
|-----------------|---------------------------------------|--|
| | Název | Pravidlo |
| | Oxid kobaltu-oxid hlinitý katalyzátor | Měly by být identifikovány jednotlivé složky: - oxid kobaltnatý - oxid kobaltitý - oxid hlinitý - oxid hliníku a kobaltu |

- Enzymové koncentráty se stejným číslem IUBMB lze považovat za stejnou látku, a to i při použití odlišného produkčního organismu, za předpokladu, že se nebezpečné vlastnosti nijak významně neliší a zaručují stejnou klasifikaci.

Vícesložkové látky

Směrnice 67/548/EHS regulovala uvádění látek na trh. Způsob výroby látky nebyl důležitý. Proto byla vícesložková látka na trhu pokryta seznamem EINECS, pokud byly *všechny* jednotlivé složky uvedeny na seznamu EINECS, např. izomerní směs difluorbenzenů byla pokryta položkami seznamu EINECS 1,2-difluorbenzen (206-680-7), 1,3-difluorbenzen (206-746-5) a 1,4-difluorbenzen (208-742-9), přestože sama izomerní směs na seznamu EINECS uvedena nebyla.

Nařízení REACH místo toho vyžaduje registraci vyráběné látky. Rozhodnutí, která určují, do jaké míry se na různé kroky produkce látky vztahuje definice „výroby“ (např. různé purifikační nebo destilační kroky), se provádějí případ od případu. Vyrábí-li se vícesložková látka, musí se registrovat (pokud není pokryta registrací jednotlivých složek, viz kapitola 4.2.2.4). Např. se vyrábí izomerní směs difluorbenzenu, tudíž je nutné „difluorbenzen“ registrovat jako izomerní směs. Je-li však u vícesložkových látek možné dostatečně popsat profil

nebezpečnosti látky pomocí informací o jejích jednotlivých složkách, není třeba provádět zkoušky látky jako takové. Jestliže se vyrábějí jednotlivé izomery 1,2-difluorbenzen, 1,3-difluorbenzen a 1,4-difluorbenzen a teprve poté se smíchají, je nutné registrovat jednotlivé izomery a izomerní směs se bude považovat za směs.

Vícesložková látka sestávající z hlavních složek A, B a C se nepovažuje za totožnou s vícesložkovou látkou z hlavních složek A a B ani s reakční směsí A, B, C a D.

- Vícesložková látka se nepovažuje za rovnocennou s látkou, která obsahuje pouze podmnožinu jednotlivých složek.

| Příklady | | |
|-----------------|-------------------|--|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 207-205-6 | 2,5-difluortoluen | Tyto dvě látky se nepovažují za totožné s izomerní směsí difluortoluenů, neboť představují pouze podmnožinu všech možných izomerů. |
| 207-211-9 | 2,4-difluortoluen | |

- Registrace vícesložkové látky nepokrývá jednotlivé složky.

| Příklady | | |
|-----------------|-------------------|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 208-747-6 | 1,2-dibromethylen | Tato látka představuje směs cis- a trans-izomerů. Registrace této izomerní směsi se nevztahuje na jednotlivé látky (1Z)-1,2-dibromethen a (1E)-1,2-dibromethen. |

Látky UVCB

- Látka UVCB s úzkým rozmezím složek se nepovažuje za totožnou s látkou UVCB s širším složením a naopak.

| Příklady | | |
|-----------------|------------------------------|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 288-450-6 | Aminy, C12-18-alkyl, acetáty | Látky „aminy, C12-14-alkyl, acetáty“ či „aminy, C12-20-alkyl, acetáty“ či „aminy, dodecyl (C12-alkyl), acetáty“ anebo látky obsahující pouze alkylové řetězce se sudým počtem uhlíkových atomů se nepovažují za totožné s touto látkou. |

- Látka, která je charakterizována druhem/rodem organismu, se nepovažuje za totožnou s látkou izolovanou z jiného druhu/rodu.

| Příklady | | |
|-----------------|----------------------------------|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 296-286-1 | Glyceridy, slunečnicový olej di- | Tato látka se nepovažuje za totožnou s látkou glyceridy, soja di- (EINECS: 271-386-8) ani s látkou glyceridy, lojové di- (EINECS: 271-388-9) |
| 232-401-3 | Lněný olej, epoxidovaný | Tato látka se nepovažuje za totožnou s látkou lněný olej, oxidovaný (EINECS: 272-038-8), ani s látkou lněný olej, reakční produkt s kyselinou maleinovou (EINECS: 268-897-3), ani s látkou ricinový olej, epoxidovaný (není uvedena na seznamu EINECS). |

- Purifikovaný extrakt nebo koncentrát se považuje za látku odlišnou od extraktu.

| Příklady | | |
|-----------|---|---|
| Číslo ES | Název | Pravidlo |
| 232-299-0 | Řepkový olej Extrakty a jejich fyzikálně modifikované deriváty. Obsahuje převážně glyceridy mastných kyselin, a to kyseliny erukové, linolové a olejové. (<i>Brassica napus</i> , <i>Cruciferae</i>) | Látka „(Z)-dokos-13-enová kyselina (eruková kyselina)“ je složkou látky „řepkový olej“. Eruková kyselina se nepovažuje za totožnou s řepkovým olejem, neboť se z řepkového oleje izoluje jako čistá látka. Eruková kyselina je v seznamu EINECS vedena samostatně (204-011-3). Izolovaná směs kyseliny palmitové, kyseliny olejové, kyseliny linolové, kyseliny erukové a kyseliny ikosenové se nepovažuje za totožnou s řepkovým olejem, neboť tyto složky nepředstavují celý olej. |

6. Identita látky v rámci dotazování

V kapitole 4 tohoto dokumentu jsou uvedeny pokyny pro identifikaci a pojmenování látek. Těmito pokyny byste se měli řídit při rozhodování o tom, zda lze látky pro účely nařízení REACH a CLP považovat za stejné. Níže jsou tyto pokyny podrobněji rozpracovány pro dotazování se na látky.

Podle článku 4 může každý výrobce nebo dovozce určit třetí osobu zástupcem pro všechny postupy podle hlavy III, včetně diskuzí s ostatními výrobci či dovozci, přičemž si zachovává plnou zodpovědnost za splnění všech povinností vyplývajících z nařízení REACH.

U všech látek platí, že potenciální žadatel o registraci má povinnost informovat se před registrací u agentury, zda již nebyla pro tutéž látku předložena žádost o registraci (článek 26 nařízení REACH). Tento dotaz musí uvádět:

- totožnost potenciálního žadatele o registraci, jak ji vymezuje oddíl 1 přílohy VI nařízení REACH, kromě míst použití,
- identitu látky, jak ji vymezuje oddíl 2 přílohy VI nařízení REACH,
- které požadavky na informace by vyžadovaly, aby potenciální žadatel o registraci provedl nové studie na obratlovcích,
- které požadavky na informace by vyžadovaly, aby potenciální žadatel o registraci provedl jiné nové studie.

Potenciální žadatel o registraci by měl uvést identitu a název látky podle pravidel stanovených v kapitole 4 těchto pokynů.

Agentura zjistí, zda již byla stejná látka v minulosti registrována. Měla by přitom rovněž použít pravidla uvedená v kapitole 4 těchto pokynů. Výsledek sdělí potenciálnímu žadateli o registraci a rovněž o něm informuje všechny předchozí či ostatní potenciální žadatele o registraci.

Více informací o postupu dotazování naleznete v *Pokynech pro sdílení údajů* a na internetových stránkách agentury ECHA věnovaných tomuto tématu:

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

7. Příklady

Příklady uvedené na následujících stránkách mají sloužit pouze jako názorná ukázka toho, jak by uživatel mohl pracovat s pokyny v tomto dokumentu. Nepředstavují žádný precedens, pokud jde o povinnosti v souvislosti s nařízením REACH.

Zahrnují tyto příklady:

- „Diethyl-peroxydikarbonát“ je příkladem jednosložkové látky obsahující rozpouštědlo, které zároveň slouží jako stabilizační činidlo (viz kapitola 7.1).
- „Zolimidin“ je příkladem látky, kterou lze identifikovat jako jednosložkovou nebo vícesložkovou látku (viz kapitola 7.2).
- „Směs izomerů“ vzniklá během výrobní reakce je zařazena jako příklad vícesložkové látky (viz kapitola 7.3). Tato látka byla dříve pokryta záznamy jednotlivých izomerů v seznamu EINECS.
- „Vonná látka AH“ je příkladem látky vyráběné v různých kvalitách, kterou lze popsat jako reakční směs pěti složek s uvedením koncentračních rozmezí (kapitola 7.4). Rovněž je příkladem odůvodněného odchýlení se od prahových hodnot 80 % a 10 %.
- V kapitole 7.5 jsou uvedeny nekovové „minerály“ včetně montmorilonitu coby příkladu přesně definované látky, která vyžaduje doplňující fyzikální charakterizaci.
- „Éterický olej z levandule“ je příkladem látky UVCB získané z rostlin (kapitola 7.6).
- „Chryzantémový olej a z něj izolované izomery“ je příkladem látky UVCB biologického původu, která se dále zpracovává (kapitola 7.7).
- „Fenol, isopropylovaný, fosfát“ je příkladem proměnlivé látky UVCB, kterou nelze plně definovat (kapitola 7.8).
- „Kvartérní amoniové sloučeniny“ jsou příklady látek s proměnlivou délkou uhlíkového řetězce (kapitola 7.9).
- V kapitole 7.10 jsou uvedeny dva příklady „ropných látek“, proud určený k mísení (automobilového) benzínu a plynové oleje.
- Kapitola 7.11 uvádí dva příklady, jak identifikovat enzymy, lakázu a amylázu.

7.1. Diethyl-peroxydikarbonát

Látka „diethyl-peroxydikarbonát“ (ES 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) se vyrábí jako 18% roztok v isododekanu (ES 250-816-8, CAS 31807-55-3). Isododekan zároveň působí jako stabilizační činidlo proti výbušným vlastnostem. Nejvyšší možná koncentrace, která zaručuje bezpečnou manipulaci s touto látkou, je 27% roztok.

Jak by se měla výše popsaná látka identifikovat a pojmenovat pro účely registrace?

Podle definice látky v nařízení REACH by se měla vyloučit rozpouštědla, která lze oddělit, aniž by to ovlivnilo stabilitu látky nebo změnilo její složení. Poněvadž isododekan působí ve výše uvedeném případě také jako stabilizační činidlo a kvůli výbušným vlastnostem látky jej nelze úplně oddělit, musí se považovat za přídatnou látku, a nikoli pouze za rozpouštědlo. Daná látka by však měla být i nadále považována za jednosložkovou látku. Proto by se měla tato látka zaregistrovat jako roztok o nejnižší koncentraci isododekanu, která zaručuje bezpečnou manipulaci:

Diethyl-peroxydikarbonát (horní koncentrační limit: 27 %). Isododekan by se měl zařadit pod „přídatné látky“ a měla by se specifikovat jeho stabilizační funkce.

7.2. ZOLIMIDIN

Vyráběný methanolvý roztok obsahuje „zolimidin“ (ES 214-947-4; CAS 1222-57-7, C₁₄H₁₂N₂O₂S) a „imidazol“ (ES 206-019-2; CAS 288-32-4, C₃H₄N₂). Po odstranění rozpouštědla „methanolu“ a optimalizací výrobního procesu vykazuje látka rozmezí čistoty 74–86 % zolimidinu a 4–12 % imidazolu.

Jak by se měla výše popsaná látka identifikovat a pojmenovat pro účely registrace?

Podle definice látky v nařízení REACH by se měla vyloučit rozpouštědla, která lze oddělit, aniž by to ovlivnilo stabilitu látky nebo změnilo její složení. Poněvadž ve výše uvedeném případě lze methanol odstranit bez jakýchkoli obtíží, musí se registrovat látka bez rozpouštědla.

Obecně se látka považuje za jednosložkovou, pokud se jedna z hlavních složek vyskytuje v koncentraci ≥ 80 %. Látka se považuje za vícesložkovou, pokud se více než jedna z hlavních složek vyskytuje v koncentraci ≥ 10 % a < 80 %. Výše uvedený příklad představuje hraniční případ, neboť dochází k překročení prahových hodnot. Látka by proto mohla být považována za jednosložkovou látku „zolimidin“ nebo za vícesložkovou látku, reakční směs „zolimidinu“ a „imidazolu“.

V takovémto hraničním případě lze k rozhodnutí o tom, jak nejlépe tuto látku popsat, použít typickou koncentraci hlavních složek látky takto:

- (1) Jestliže typická koncentrace zolimidinu činí 77 % a imidazolu 11 %, doporučuje se považovat látku za reakční směs zolimidinu a imidazolu.
- (2) Jestliže typická koncentrace zolimidinu činí 85 % a imidazolu 5 %, doporučuje se považovat látku za jednosložkovou látku „zolimidin“.

7.3. Směs izomerů

Posuzovanou látkou je směs (reakční směs) dvou izomerů, která vzniká během výrobní reakce. Jednotlivé izomery byly nahlášeny na seznam EINECS. Směrnice 67/548/EHS regulovala uvádění látek na trh. Poněvadž způsob výroby látky nebyl důležitý, směs byla pokryta jednotlivými záznamy těchto dvou izomerů v seznamu EINECS. Nařízení REACH vyžaduje registraci vyráběných látek. Rozhodnutí, která určují, do jaké míry se na různé kroky produkce látky vztahuje definice „výroby“, se provádějí případ od případu. Je-li směs izomerů registrována jako vícesložková látka (podle pokynů uvedených v kapitole 4.2.2), není třeba provádět zkoušky látky jako takové, jestliže lze její profil nebezpečnosti dostatečně popsat pomocí informací o jejích jednotlivých složkách.

1. Název a jiné identifikátory

| Příklady | |
|---|---|
| Název IUPAC nebo jiný mezinárodní chemický název (látky) | Reakční směs 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanolu a 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanolu |
| Jiné názvy (látky) | 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol Reakční směs ethanolu, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- a vody Ethanol, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- (9CI) izomerní sloučenina |
| Číslo ES (látky) Název ES Popis ES | Pro tuto látku neexistuje žádné číslo ES, neboť tato směs izomerů nebyla nahlášena na seznam EINECS. Látku však pokrývají položky EINECS pro její složky (279-502-9, 279-501-3). |
| Číslo CAS (látky) Název CAS | není k dispozici není k dispozici |
| Číslo ES (složka A) Název ES Popis ES | 279-502-9 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol / |
| Číslo ES (složka B) Název ES Popis ES | 279-501-3 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol / |
| Číslo CAS (složka A) Název CAS | 80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- |
| Číslo CAS (složka B) Název CAS | 80584-88-9 Ethanol, 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- |
| Jiný identifikační kód Odkaz | Číslo ENCS 5-5917 |

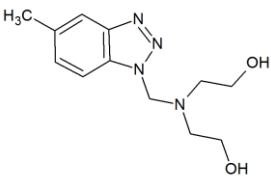
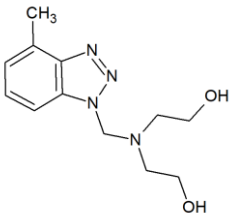
2. Informace o složení – hlavní složky

| Hlavní složky | | | | | | |
|---------------|--|------------|-----------|---|-------------------------|-------------------------|
| | Název IUPAC | Číslo CAS | Číslo ES | Molekulový vzorec Hilova metoda | Typická konc. (% hmot.) | Konc. rozmezí (% hmot.) |
| A | Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- | 80584-89-0 | 279-502-9 | C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂ | 60 | 50-70 |
| B | Ethanol, 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- | 80584-88-9 | 279-501-3 | C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂ | 40 | 30-50 |

| Hlavní složky | |
|---------------|---|
| Jiné názvy | |
| A | 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol |
| B | 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol |

| Hlavní složky | | |
|---------------|---|----------|
| | Název ES | Popis ES |
| A | 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol | / |
| B | 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol | / |

| Hlavní složky | | |
|---------------|--|------------|
| | Název CAS | Číslo CAS |
| A | Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- | 80584-89-0 |
| B | Ethanol, 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- | 80584-88-9 |

| Hlavní složky | | | |
|---------------|---------------------------------|---|----------------------------|
| | Molekulový vzorec Metoda CAS | Strukturní vzorec | Kód SMILES |
| A | / |  | OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12 |
| B | / |  | OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12 |

| Hlavní složky | | |
|---------------|--|------------------------------|
| | Molekulová hmotnost [g mol ⁻¹] | Rozmezí molekulové hmotnosti |
| A | 250 | / |
| B | 250 | / |

7.4. Vonná látka AH

Vonná látka AH se skládá z gama (iso-alfa)methyliononu a jeho izomerů. Vyrábí se ve třech různých kvalitách (kvalita A, B a C), které se liší poměrem izomerů.

Následující tabulka podává přehled složení jednotlivých kvalit.

| Složení různých kvalit vonné látky AH | | | | |
|--|------------------|------------------|------------------|------------------------|
| Koncentrační rozmezí [%] | Kvalita A | Kvalita B | Kvalita C | Celková rozmezí |
| gama (iso-alfa) methylionon | 80 - 85 | 65 - 75 | 50 - 60 | 50 - 85 |
| delta (iso-beta) methylionon | 6 - 10 | 3 - 7 | 3 - 7 | 3 - 10 |
| alfa n-methylionon | 3 - 11 | 10 - 20 | 20 - 30 | 3 - 30 |
| gama n-methylionon | 0,5-1,5 | 2 - 4 | 2 - 4 | 0,5-4 |
| beta n-methylionon | 0,5-1,5 | 4 - 6 | 5 - 15 | 0,5-15 |
| pseudomethylionony | 0,5-1,5 | 1 - 3 | 1 - 3 | 0,5-3 |

Pro identifikaci látky existuje několik možností:

- **Kvalita A** obsahuje nejméně 80 % gama izomeru (iso-alfa)methyliononu, a mohla by se proto považovat za jednosložkovou látku založenou na gama izomeru (iso-alfa)methyliononu, přičemž ostatní izomery by se považovaly za nečistoty.
- **Kvality B a C** obsahují méně než 80 % gama izomeru (iso-alfa)methyliononu a ≥ 10 % ostatních izomerů. Proto by se mohly považovat za vícesložkové látky:
 - **Kvalita B**: za reakční směs gama (iso-alfa)methyliononu (65-75 %) a alfa n-methyliononu (10-20 %), přičemž ostatní izomery by se považovaly za nečistoty.
 - **Kvalita C**: za reakční směs gama (iso-alfa)methyliononu (50-60 %) a alfa n-methyliononu (20-30 %), přičemž ostatní izomery by se považovaly za nečistoty.

Složení je proměnlivé a někdy je izomer přítomen v koncentraci ≥ 10 % (a proto je obvykle označován jako hlavní složka) a někdy < 10 % (a proto je obvykle označován jako nečistota).

Bylo by možné zaregistrovat tyto rozdílné kvality každou zvlášť. To by znamenalo tři registrace. Nicméně lze odůvodnit analogický přístup k údajům.

Případně je možné zvážit:

- Jednu registraci jako jednosložkové látky se dvěma podskupinami kvality. V takovém případě se podskupiny kvality odchyľují od pravidla 80 % (viz kapitola 4.2.1).
- Jednu registraci jako definované reakční směsi pěti izomerů (vícesložková látka). V takovém případě se některé izomery (hlavní složky) odchyľují od prahové hodnoty 10 %, která slouží k rozlišení mezi hlavními složkami a nečistotami (viz kapitola 4.2.2).
- Jednu registraci jako definovaná reakční směs, kde je proměnlivost složení pokryta uvedením plného rozmezí pro každý izomer.

Může být důležité vzít v úvahu, že:

- Dané tři kvality mají stejné nebo velmi podobné fyzikálně chemické vlastnosti.
- Dané tři kvality mají podobná použití a podobné scénáře expozice.
- Všechny kvality mají stejnou klasifikaci nebezpečnosti a označení a obsah bezpečnostních listů a zprávy o bezpečnosti jsou totožné.
- Dostupné údaje ze zkoušek (a budoucí zkoušky) pokrývají proměnlivost těchto tří kvalit.

Tento příklad popisuje identifikaci látky jako definované reakční směsi pěti izomerů (vícesložková látka). Kvůli odchýlení se od prahové hodnoty 80 % (viz kapitola 4.2.1) a prahové hodnoty 10 % (viz kapitola 4.2.2) je nutné odůvodnění (definice vícesložkové látky, viz kapitola 4.2.2). Protože se každá kvalita vyrábí samostatně, mělo by být v registrační dokumentaci specifikováno složení všech tří kvalit. Za formálních podmínek by však mohly být nezbytné alespoň dvě registrace: 1) gama (iso-alfa)methyliononu a 2) reakční směsi gama (iso-alfa)methyliononu a alfa-n-methyliononu.

Identifikace látky

Vonná látka AH se vyrábí ve třech různých kvalitách (A, B a C), se stejným kvalitativním, avšak odlišným kvantitativním složením. Všechny tři kvality jsou popsány v jedné registrační dokumentaci pro vícesložkovou látku. Přestože to znamená, že definice není striktně dodržena, registrace jako jedné vícesložkové látky je odůvodněná, neboť 1) dostupné údaje ze zkoušek pokrývají proměnlivost všech tří složek; 2) tyto tři kvality mají velmi podobné fyzikálně-chemické vlastnosti; 3) všechny kvality mají stejnou klasifikaci nebezpečnosti a označení (tudíž jejich bezpečnostní listy jsou identické) a 4) všechny tři kvality mají podobná použití a podobné scénáře expozice (tudíž i podobné zprávy o chemické bezpečnosti).

1. Název a jiné identifikátory

| | |
|--|--|
| Název podle IUPAC nebo jiný mezinárodní název chemické látky | Reakční směs 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on; 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on; 1-(6,6-methyl-2-methylencyklohex-1-yl)pent-1-en-3-on; 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on |
| Jiné názvy | Methylionon gama, kvalita A Methylionon gama, kvalita B Methylionon gama, kvalita C |
| Číslo ES | není k dispozici |
| Název ES | / |
| Popis ES | / |

| | |
|-----------|------------------|
| Číslo CAS | není k dispozici |
| Název CAS | / |

2. Informace o složení – hlavní složky

Teoreticky se mohou vyskytovat další enantiomery. Analyzovány však byly tyto izomery:

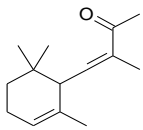
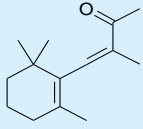
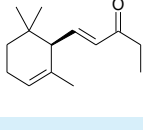
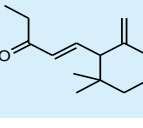
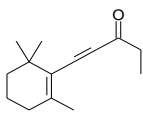
| Hlavní složky | | | | | | |
|----------------------|---|------------------|------------------|---|-----------------------------|-----------------------------|
| | Název IUPAC | Číslo CAS | Číslo ES | Molekulový vzorec Hillova metoda | Min. konc. (% hmot.) | Max. konc. (% hmot.) |
| A | 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on | 127-51-5 | 204-846-3 | C ₁₄ H ₂₂ O | 50 | 85 |
| B | 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on | 79-89-0 | 201-231-1 | C ₁₄ H ₂₂ O | 3 | 10 |
| C | [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on | 127-42-4 | 204-842-1 | C ₁₄ H ₂₂ O | 3 | 30 |
| D | 1-(6,6-methyl-2-methylcyklohex-1-yl)pent-1-en-3-on | není k dispozici | není k dispozici | C ₁₄ H ₂₂ O | 0,5 | 4 |
| E | 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on | 127-43-5 | 204-843-7 | C ₁₄ H ₂₂ O | 0,5 | 15 |

| Hlavní složky | |
|---------------|---|
| Jiné názvy | |
| A | alfa-iso-methylionon; gama methylionon |
| B | beta-iso-methylionon; delta methylionon |
| C | alfa n-methylionon |
| D | gama n-methylionon |
| E | beta n-methylionon |

| Hlavní složky | | |
|---------------|--|----------|
| | Název ES | Popis ES |
| A | 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on | / |
| B | 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on | / |
| C | [<i>R-(E)</i>]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on | / |
| D | 1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on | / |
| E | 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on | / |

| Hlavní složky | | |
|---------------|---|------------------|
| | Název CAS | Číslo CAS |
| A | 3-buten-2-on, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)- | 127-51-5 |
| B | 3-buten-2-on, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)- | 79-89-0 |
| C | 1-penten-3-on, 1-[(1 <i>R</i>)-2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl]-, (1 <i>E</i>)- | 127-42-4 |
| D | není k dispozici | není k dispozici |
| E | 1-penten-3-on, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)- | 127-43-5 |

| Hlavní složky | | |
|---------------|------------------------|---------------------------------------|
| | Jiný identifikační kód | Odkaz |
| A | 2714 07.036 | FEMA EU registr aromatických látek |
| B | 07.041 | EU registr aromatických látek |
| C | 2711 07.009 | FEMA EU registr aromatických látek |
| D | není k dispozici | není k dispozici |
| E | 2712 07.010 | FEMA EU registr aromatických látek |

| Hlavní složky | | | |
|---------------|-----------------------------------|---|---|
| | Molekulový vzorec Metoda CAS | Strukturní vzorec | Kód SMILES |
| A | C ₁₄ H ₂₂ O |  | <chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem> |
| B | C ₁₄ H ₂₂ O |  | <chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem> |
| C | C ₁₄ H ₂₂ O |  | <chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem> |
| D | C ₁₄ H ₂₂ O |  | <chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem> |
| E | C ₁₄ H ₂₂ O |  | <chem>O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC</chem> |

| Hlavní složky | | |
|----------------------|---|-------------------------------------|
| | Molekulová hmotnost / g mol⁻¹ | Rozmezí molekulové hmotnosti |
| A | 206,33 | / |
| B | 206,33 | / |
| C | 206,33 | / |
| D | 206,33 | / |
| E | 206,33 | / |

3. Informace o složení – nečistoty a přídatné látky

| Nečistoty | | | | | | |
|--|--------------------------------|------------------|-----------------|-----------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| | Název IUPAC | Číslo CAS | Číslo ES | Molekulový vzorec | Typická konc. (% hmot.) | Konc. rozmezí (% hmot.) |
| F | | | | | | |
| počet nespecifických nečistot: | | | | 11 (pseudomethylionony) | | |
| celková koncentrace nespecifických nečistot: | | | | 0,5–3 % hmot. | | |
| Přídatné látky | | | | | | |
| | Název IUPAC | Číslo CAS | Číslo ES | Molekulový vzorec | Typická konc. (% hmot.) | Konc. rozmezí (% hmot.) |
| G | Butylovaný hydroxytoluen (BHT) | 128-37-0 | 204-881-4 | C ₁₅ H ₂₄ O | 0,1 | 0,05–0,15 |

4. Informace týkající se různých kvalit

Níže jsou uvedeny rozsahy koncentrací hlavních složek ve třech různých kvalitách:

| Koncentrační rozmezí [%] | Kvalita A | Kvalita B | Kvalita C |
|---------------------------------|------------------|------------------|------------------|
| gama (iso-alfa) methylionon | 80 - 85 | 65 - 75 | 50 - 60 |
| delta (iso-beta) methylionon | 6 - 10 | 3 - 7 | 3 - 7 |
| alfa n-methylionon | 3 - 11 | 10 - 20 | 20 - 30 |
| gama n-methylionon | 0,5-1,5 | 2 - 4 | 2 - 4 |
| beta n-methylionon | 0,5-1,5 | 4 - 6 | 5 - 15 |
| pseudomethylionony | 0,5-1,5 | 1 - 3 | 1 - 3 |

7.5. Minerály

Minerál je definován jako kombinace anorganických složek v podobě, v jaké se vyskytují v zemské kůře, a je charakterizován svým chemickým složením, krystalickou formou (od vysoce krystalické až po amorfni) a fyzikálně-chemickými vlastnostmi.

Minerály jsou osvobozeny od povinnosti registrace, pokud splňují definici látky vyskytující se v přírodě (čl. 3 odst. 39 nařízení REACH) a pokud jsou chemicky neupravené (čl. 3 odst. 40 nařízení REACH). To se týká minerálů, jejichž chemická struktura se nemění ani poté, co prošla chemickým procesem nebo zpracováním nebo fyzikální mineralogickou přeměnou, například za účelem odstranění nečistot.

Zatímco některé minerály lze popsat pouze prostřednictvím jejich chemického složení (viz kapitola 4.2.1 a 4.2.2 pro jednosložkové a vícesložkové látky), u jiných minerálů samo chemické složení k jednoznačné identifikaci těchto látek nepostačuje (viz kapitola 4.2.3).

Na rozdíl od ostatních jednosložkových či vícesložkových látek musí identifikace mnoha minerálů vycházet z chemického složení a vnitřní struktury (zjištěné například za pomoci rentgenové difrakce), neboť kombinace těchto vlastností představuje základ minerálu a určuje jeho fyzikálně-chemické vlastnosti.

Stejně jako v případě ostatních vícesložkových látek musí být v rámci identifikace minerálu (tj. určení kombinace anorganických složek) použito číslo CAS. Čísla CAS anorganických složek (definovaných na základě systematické mineralogie) jsou používána k popisu různých složek. Pokud by vznikla jednotlivá anorganická složka (jednosložková látka), mělo by být pro identifikaci látky použito číslo CAS této látky. Například:

- Minerál kaolin (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) je v zásadě tvořen primárními a sekundárními kaolinity (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), což je hydratovaný hlinitokřemičitý jíl.

V případě, že by byl na kaolin použit postup rafinace s cílem získat jednotlivou složku kaolinu, např. kaolinit, číslo CAS/EINECS pro látku by bylo EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Minerál bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), který je v EINECS popsán jako „koloidní jíl Sestává především z montmorilonitu“, obsahuje vysoký podíl anorganické složky montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), avšak nejen tuto složku.

V případě, že by byl získán čistý montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), číslem CAS použitým k identifikaci látky bude číslo montmorilonitu.

Je třeba zdůraznit, že bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) a montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) nejsou považovány za tutéž látku.

Závěrem je třeba uvést, že minerály se zpravidla pojmenovávají podle kombinace anorganických složek, které je tvoří. Lze je považovat za jednosložkové nebo vícesložkové látky (všeobecné pokyny jsou uvedeny v kapitolách 4.2.1 a 4.2.2). Některé minerály nelze popsat pouze za pomoci jejich chemického složení, ale je třeba vzít v úvahu další fyzikální vlastnosti nebo parametry zpracování, aby bylo možné je dostatečně identifikovat (viz kapitola 4.2.3). V následující tabulce jsou uvedeny některé příklady.

Příklady minerálů

| Název | CAS | EINECS | Další popis |
|----------------------------|------------|-----------|--|
| Kristobalit | 14464-46-1 | 238-455-4 | O ₂ Si (krystalová soustava: kubická/tetragonální) |
| Křemen | 14808-60-7 | 238-878-4 | O ₂ Si (krystalová soustava: trigonální/hexagonální) |
| Křemelina | 61790-53-2 | - | Rovněž známá jako diatomit a celit. Popis: Měkká křemičitá pevná látka tvořená schránkami jednobuněčných prehistorických vodních rostlin. Obsahuje převážně oxid křemičitý. |
| Dolomit | 16389-88-1 | 240-440-2 | CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg |
| Skupina živcových minerálů | 68476-25-5 | 270-666-7 | Anorganická látka, která je reakčním produktem vysokoteplotní kalcinace, při níž jsou oxid hlinitý, oxid barnatý, oxid vápenatý, oxid hořečnatý, oxid křemičitý a oxid strontnatý v různých množstvích homogenně a v iontové formě difusně uspořádány do formy krystalu. |
| Mastek | 14807-96-6 | 238-877-9 | Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄ |
| Vermikulit | 1318-00-9 | - | (Mg _{0,33} [Mg ₂₋₃ (Al ₀₋₁ Fe ₀₋₁) ₀₋₁](Si _{2,33-3,33} Al _{0,67-1,67})(OH) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O) |

Analytické informace vyžadované pro minerály

| | |
|---|--|
| Elementární složení | Chemické složení poskytuje celkový přehled o složení minerálu bez ohledu na počet složek a jejich podíl v minerálu. Chemické složení se obvykle uvádí pro oxidy. |
| Spektrální údaje (rentgenová difrakce nebo podobné techniky) | Za použití rentgenové strukturní analýzy nebo dalších technik lze identifikovat minerály na základě jejich krystalografické struktury. Typická rentgenová difrakce (XRD) nebo vhodné alternativní údaje, jež identifikují minerál, by měly být uvedeny společně se stručným popisem analytické metody nebo bibliografickými odkazy. |
| Typické fyzikálně-chemické vlastnosti | Minerály mají typické fyzikálně-chemické vlastnosti, které umožňují jejich konečnou identifikaci, například: <ul style="list-style-type: none"> - velmi nízká tvrdost - bobtnavost - tvary diatomitu (optický mikroskop) - velmi vysoká hustota - povrch (adsorpce dusíku) |

7.6. Éterický olej z *Lavandin grosso*

Silice, jinak též éterické oleje, jsou látky získávané z rostlin. Lze je proto rovněž charakterizovat jako látky odvozené z rostlin.

Látky odvozené z rostlin jsou komplexní přírodní látky získané zpracováním rostliny nebo jejích částí metodou extrakce, destilace, lisování, frakcionace, purifikace, koncentrace či fermentace. Složení těchto látek se liší v závislosti na rodu, druhu, podmínkách růstu a období sklizně zdrojů a použitých technikách zpracování.

Éterické oleje lze definovat jejich hlavními složkami, jako je tomu u vícesložkových látek. Éterické oleje však mohou sestávat až z několika set složek, které se mohou významně lišit v závislosti na řadě faktorů (např. rodu, druhu, podmínkách růstu, období sklizně, použitých technikách zpracování). Popis hlavních složek proto často k popisu těchto látek UVCB nepostačuje. Éterické oleje by měly být popsány za pomoci rostlinného zdroje a metody zpracování v souladu s popisem v kapitole 4.3.1 (s využitím UVCB podtypu 3).

V mnoha případech jsou pro éterické oleje stanoveny průmyslové standardy (pro řadu éterických olejů rovněž normy ISO). Kromě toho mohou být uvedeny informace o normách. Identifikace látky by nicméně měla vycházet z látky v podobě, v jaké se vyrábí.

V příkladu uvedeném níže je popsán „éterický olej z *Lavandin grosso*, pro nějž existuje norma ISO (ISO 8902-1999).

1. Názvy a jiné identifikátory

Zdroj

| | |
|------|---|
| Druh | <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) |
|------|---|

Proces

Popis (bio)chemické reakce použité k výrobě látky:

Destilace kvetoucích částí rostliny *Lavandula hybrida grosso* (Lamiaceae) vodní parou a následné oddělení vody od éterického oleje.
Následné oddělení je spontánním fyzikálním procesem, který obvykle probíhá v separátoru (tzv. „florentinská láhev“), který umožňuje snadnou izolaci odděleného oleje. Teplota v této fázi destilačního procesu je zhruba 40 °C.

Název

| | |
|--|--|
| Název podle IUPAC nebo jiný mezinárodní název chemické látky | Éterický olej z rostliny <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) |
| Číslo ES Název ES Popis ES | 297-385-2 Levandule, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extrakt. Extrakty a jejich fyzikálně modifikované deriváty, jako jsou tinktury, silice konkrétní (konkrety), silice absolutní, éterické oleje, olejopryskyřice, terpeny, deterpenované frakce, destiláty, rezidua atd., získané z <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae. ³¹ |
| Číslo CAS Název CAS | 93455-97-1 Levandule, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extrakt. |

³¹ „Labiatae“ a „Lamiaceae“ jsou synonyma.

2. Informace o složení – známé složky

| Známé složky | | | | | |
|--------------|--|--|--|-------------------------------|----------------------------------|
| | Chemický název ES CAS IUPAC Jiné | Číslo ES CAS | Molekulový vzorec Hillova metoda | Typická konc. (% hmot.) | Konc. rozmezí (% hmot.) |
| A | ES linalyl-acetát CAS 1,6-oktadien-3-ol, 3,7- dimethyl-acetát IUPAC 3,7-dimethyl-okta-1,6-dien- 3-yl-acetát | ES 204-116-4 CAS 115-95-7 | C ₁₂ H ₂₀ O ₂ | 33 | 28 – 38 |
| B | ES linalol CAS 1,6-oktadien-3-ol, 3,7- dimethyl- IUPAC 3,7-dimethyl-okta-1,6-dien- 3-ol | ES 201-134-4 CAS 78-70-6 | C ₁₀ H ₁₈ O | 29,5 | 24 – 35 |
| C | ES bornan-2-on CAS bicyklo[2.2.1] heptan-2-on, 1,7,7-trimethyl- IUPAC 1,7,7- trimethylbicyklo[2.2.1]-2- heptanon Jiné kafr | ES 200-945-0 CAS 76-22-2 | C ₁₀ H ₁₆ O | 7 | 6 – 8 |
| D | ES cineol CAS 2-oxabicyklo [2.2.2]oktan, 1,3,3-trimethyl- IUPAC 1,3,3-trimethyl-2- oxabicyklo[2.2.2]oktan Jiné 1,8-cineol | ES 207-431-5 CAS 470-82-6 | C ₁₀ H ₁₈ O | 5,5 | 4 – 7 |

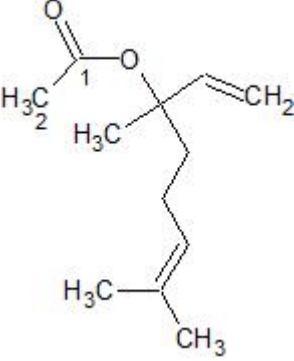
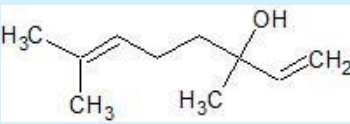
| | | | | | |
|----------|--|---|--|------|-------|
| E | <p>ES P-menth-1-en-4-ol</p> <p>CAS 3-cyklohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-</p> <p>IUPAC 1-(1-methylethyl)-4-methyl-3-cyklohexen-1-ol</p> <p>Jiné terpinen-4-ol</p> | <p>ES 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p> | C ₁₀ H ₁₈ O | 3,25 | 1,5–5 |
| F | <p>ES 2-isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetát</p> <p>CAS 4-hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetát</p> <p>IUPAC 2-(1-methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol</p> <p>Jiné (±)-lavandulol acetát</p> | <p>ES 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p> | C ₁₂ H ₂₀ O ₂ | 2,25 | 1,5–3 |
| G | <p>ES DL-borneol</p> <p>CAS bicyklo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyklo[2.2.1]heptan-2-ol</p> <p>Jiné borneol</p> | <p>ES 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p> | C ₁₀ H ₁₈ O | 2,25 | 1,5–3 |
| H | <p>ES karyofylen</p> <p>CAS bicyklo[7.2.0]undec-4-en, 4,11,11-trimethyl-8-methylen-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylen bicyklo[7.2.0]undec-4-en</p> <p>Jiné trans-beta-karyofylen</p> | <p>ES 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p> | C ₁₅ H ₂₄ | 1,75 | 1–2,5 |
| I | <p>ES (E)-7,11-dimethyl-3-methylendodeka-1,6,10-trien</p> <p>CAS 1,6,10-dodekatrien, 7,11-dimethyl-3-methylen-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-dimethyl-3-methylen-1,6,10-dodekatrien</p> <p>Jiné trans-beta-farnesen</p> | <p>ES 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p> | C ₁₅ H ₂₄ | 1,1 | 0,2–2 |

| | | | | | |
|----------|---|--|---------------------------------|---|---------|
| J | ES (R)-p-mentha-1,8-dien CAS cyklohexen, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-methyl-4-(1-methylethenyl)cyklohexen Jiné limonen | ES 227-813-5 CAS 5989-27-5 | C ₁₀ H ₁₆ | 1 | 0,5–1,5 |
| K | ES 3,7-dimethylokta-1,3,6-trien CAS 1,3,6-oktatrien, 3,7-dimethyl- IUPAC 3,7-dimethylokta-1,3,6-trien Jiné cis-beta-ocimen | ES 237-641-2 CAS 13877-91-3 | C ₁₀ H ₁₆ | 1 | 0,5–1,5 |

Známé složky ≥ 10 %

| Známé složky | | |
|--------------|---|----------|
| | Název ES | Popis ES |
| A | linalyl acetát C ₁₂ H ₂₀ O ₂ | |
| B | linalol C ₁₀ H ₁₈ O | |

| Známé složky | | |
|--------------|---|------------------------|
| | Název CAS | Odpovídající čísla CAS |
| A | linalyl acetát C ₁₂ H ₂₀ O ₂ | 115-95-7 |
| B | linalol C ₁₀ H ₁₈ O | 78-70-6 |

| Známé složky | | | |
|--------------|--|--|------------|
| | Molekulový vzorec Metoda CAS | Strukturní vzorec | Kód SMILES |
| A | C ₁₂ H ₂₀ O ₂ |  | |
| B | C ₁₀ H ₁₈ O |  | |

| Známé složky | | |
|--------------|---------------------|------------------------------|
| | Molekulová hmotnost | Rozmezí molekulové hmotnosti |
| A | 196,2888 | / |
| B | 154,2516 | / |

7.7. Chryzantémový olej a izomery izolované z tohoto oleje

Společnost vyrábí chryzantémový olej, který se získává z rozdrčených květů a listů *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae za pomoci rozpouštědla obsahujícího směs vody a ethanolu (1:10). Po extrakci je rozpouštědlo odstraněno a „čistý“ extrakt se během dalších fází rafinuje, přičemž konečným výsledkem je chryzantémový olej.

Kromě toho jsou z extraktu izolovány dva izomery za pomoci reakční směsi těchto látek:

Jasmolin I

(Cyklopropankarboxylová kyselina, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyklopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; číslo CAS 4466-14-2) a

Jasmolin II

(Cyklopropankarboxylová kyselina, 3-[(1E)-3-methoxy-2-methyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-dimethyl-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyklopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; číslo CAS 1172-63-0)

Dále se společnost rozhodla syntetizovat rovněž izomerickou reakční směs jasmolinu I a II.

Společnost vznesla tyto dotazy:

1. Jak identifikovat chryzantémový olej pro účely registrace?
2. Vztahuje se registrace oleje na reakční směs izolovaných izomerů jasmolinu I a II?
3. Lze syntetizovanou směs těchto dvou izomerů považovat za totožnou se směsí izomerů izolovaných z chryzantémového oleje?

1. Jak identifikovat chryzantémový olej pro účely registrace?

Chryzantémový olej je považován za látku UVCB, kterou nelze dostatečně identifikovat jejím chemickým složením (podrobné pokyny naleznete v kapitole 4.3). Zásadní význam mají další parametry identifikace, jako je zdroj a zpracování. Chryzantémový olej má biologickou povahu a měl by být identifikován na základě druhu a části organismu, z něhož byl získán, a na základě postupu rafinace (extrakce za pomoci rozpouštědla). Chemické složení a identifikace složek by nicméně měly být také uvedeny, jsou-li známe.

Následující informace jsou považovány za nezbytné k dostatečné identifikaci látky:

| Název látky | <i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; olej získaný z rozdrčených květů a listů extrakcí s využitím směsi vody a ethanolu (1:10) |
|--|--|
| Zdroj | |
| Rod, druh, poddruh | <i>Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae</i> |
| Část rostliny použitá pro výrobu oleje | Květy a listy |
| Proces | |

| Výrobní metoda | Drcení a následná extrakce | | | |
|---|----------------------------|------------|--------|--------|
| Rozpouštědlo použité pro extrakci | Voda:ethanol (1:10) | | | |
| Informace o složení – známé složky v hmotnostních % | | | | |
| Název složky | Číslo ES | Číslo CAS | Min. % | Max. % |
| Pyrethrin I: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-chrysanthemát | 204-455-8 | 121-21-1 | 30 | 38 |
| Pyrethrin II: 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyklopropankarboxylát | 204-462-6 | 121-29-9 | 27 | 35 |
| Cinerin I: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyklopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyklopropankarboxylát | 246-948-0 | 25402-06-6 | 5 | 10 |
| Cinerin II: 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyklopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropan karboxylát | 204-454-2 | 121-20-0 | 8 | 15 |
| Jasmolin I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyklopropankarboxylát | neexistuje | 4466-14-2 | 4 | 10 |
| Jasmolin II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-en-1-yl [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropankarboxylát | neexistuje | 1172-63-0 | 4 | 10 |

Látka dále obsahuje max. 40 složek v množství menším než 1 %.

Látku lze rovněž identifikovat jako přesně definovanou vícesložkovou látku s šesti hlavními složkami (reakční směs pyrethrinu I, pyrethrinu II, cinerinu I, cinerinu II, jasmolinu I a jasmolinu II).

Látku by bylo možno považovat za „látku vyskytující se v přírodě“, pokud by výrobní proces spočíval pouze v „drcení“, a byla by osvobozena od povinnosti registrace, pokud nesplňuje kritéria pro klasifikaci jako nebezpečná látka podle směrnice 67/548/EHS.

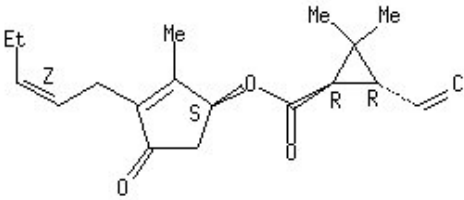
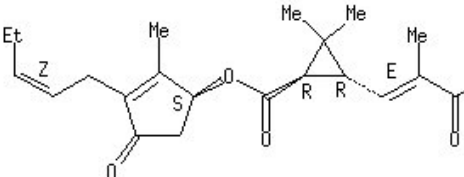
2. Vztahuje se registrace oleje na reakční směs izolovaných izomerů jasmolinu I a II?

Registrace „oleje *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae“ se na reakční směs izolovaných izomerů jasmolinu I a jasmolinu II nevztahuje, jelikož na jednotlivou složku (jednotlivé složky) se nevztahuje celá látka UVCB a naopak. Reakční směs jasmolinu I a II se považuje za jinou látku.

Reakční směs jasmolinu I a jasmolinu II lze považovat za vícesložkovou látku (podrobný popis naleznete v kapitole 4.2.3) se dvěma hlavními složkami.

Následující informace jsou považovány za nezbytné k dostatečné identifikaci látky:

| Název látky podle IUPAC | Reakční směs 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyklopropankarboxylát a (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropankarboxylát) | | | |
|--|--|-----------|--------|--------|
| Jiný název | Reakční směs jasmolinu I a jasmolinu II | | | |
| Čistota látky | 95–98 % hmot. | | | |
| Informace o složení – hlavní složky v % hmot. | | | | |
| Název složky | Číslo ES | Číslo CAS | Min. % | Max. % |
| Jasmolin I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyklopropankarboxylát | neexistuje | 4466-14-2 | 40 | 60 |

| | | | | |
|---|-------------------|--|-----------|-----------|
| <p>Molekulový vzorec</p> <p>Strukturní vzorec</p> <p>Molekulová hmotnost</p> | |  <p>$C_{22}H_{30}O_5$ M = 374 g/mol</p> | | |
| <p>Jasmolin II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklo pent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]- 2,2-dimethyl-3-(3- methoxy-2-methyl-3- oxoprop-1- enyl)cyklopropankarbox ylát</p> <p>Molekulový vzorec</p> <p>Strukturní vzorec</p> <p>Molekulová hmotnost</p> | <p>neexistuje</p> | <p>1172-63-0</p>  <p>$C_{21}H_{30}O_3$ M = 330 g/mol</p> | <p>35</p> | <p>65</p> |

3. Lze syntetizovanou směs (reakční směs) těchto dvou izomerů považovat za totožnou se směsí izomerů izolovaných z chryzantémového oleje?

Pro chemicky přesně definované látky, jejichž složky jsou dostatečně popsány, není relevantní, zda je látka izolována z extraktu nebo syntetizována za pomoci chemického procesu. Syntetizovanou reakční směs jasmolinu I a jasmolinu II lze proto považovat za totožnou s izomerovou směsí izolovanou z chryzantém, i když je získána prostřednictvím jiného výrobního procesu, za předpokladu, že čistota směsi a koncentrační rozmezí hlavních složek jsou shodné.

4. Závěr

Byly identifikovány dvě látky:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; olej získaný z rozdrcených květů a listů extrakcí s využitím směsi vody a ethanolu (1:10)
2. Reakční směs izomerů jasmolinu I a jasmolinu II, bez ohledu na postup výroby látky.

Pokud by výše uvedené látky byly použity *pouze* v přípravcích na ochranu rostlin a v biocidních přípravcích, byly by považovány za registrované podle nařízení REACH (článek 15).

7.8. Fenol, isopropylovaný, fosfát

Fenol, isopropylovaný, fosfát (3:1) je látkou UVCB, u níž variabilitu isopropylované jednotky nelze plně definovat.

1. *Název a jiné identifikátory*

| | |
|---|--|
| Název podle IUPAC nebo jiný mezinárodní název chemické látky | Fenol, isopropylovaný, fosfát (3:1) |
| Jiné názvy | Fenol, isopropylovaný, fosfát Fenol, isopropylovaný, fosfát (3:1) (na základě molového poměru propylenu a fenolu 1:1) |
| Číslo ES Název ES Popis ES | 273-066-3 Fenol, isopropylovaný, fosfát (3:1) / |
| Číslo CAS Název CAS | 68937-41-7 Fenol, isopropylovaný, fosfát (3:1) |

2. *Informace o složení – hlavní složky*

| Hlavní složky | | | | | |
|-------------------------------------|------------------|-----------------|---|--------------------------------|--------------------------------|
| Název IUPAC | Číslo CAS | Číslo ES | Molekulový vzorec Hillova metoda | Typická konc. (% hmot.) | Konc. rozmezí (% hmot.) |
| Fenol, isopropylovaný, fosfát (3:1) | 68937-41-7 | 273-066-3 | Nespecifikováno | | |

| Hlavní složky | |
|-------------------------------------|------------------|
| Název ES | Popis ES |
| Fenol, isopropylovaný, fosfát (3:1) | / |
| Název CAS | Číslo CAS |
| Fenol, isopropylovaný, fosfát (3:1) | 68937-41-7 |

7.9. Kvartérní amoniové sloučeniny

Společnost syntetizuje následující látky:

Látka A

Kvartérní amoniové sloučeniny, di-C₁₀₋₁₈-alkyldimethyl, chloridy

Číslo ES 294-392-2

Číslo CAS 91721-91-4

Distribuce délek uhlíkového řetězce:

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

Látka B

Kvartérní amoniové sloučeniny, dialkyl(dimethyl)amonium-chloridy

Číslo ES 263-087-6

Číslo CAS 61789-77-3

Společnost nemá informace o přesném složení této látky.

Látka C

Didodecyl(dimethyl)amonium-bromid

Látka D

Didodecyl(dimethyl)amonium-chlorid

Látka E

Látka E je vyráběna za pomoci reakční směsi didodecyl(dimethyl)amonium-bromidu a didodecyl(dimethyl)amonium-chloridu (reakční směs látky C a D).

Látka F

Kvartérní amoniové sloučeniny, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimethylamonium-chloridy

Číslo ES 268-072-8

Číslo CAS 68002-59-5

Distribuce délek uhlíkového řetězce:

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

Látka G

Kvartérní amoniové sloučeniny, di-C₄₋₂₂-alkyldimethyl, chloridy

Distribuce délek uhlíkového řetězce (jedna čárka v indexu označuje jednu dvojnou vazbu, dvě čárky v indexu označují jednu trojnou vazbu):

| | |
|-------------------|--------|
| 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 % |

Společnost zatím používá pro pojmenování pouze látku B (kvartérní amoniové sloučeniny, dialkyl(dimethyl)amonium-chloridy, číslo ES 263-087-6 a číslo CAS 61789-77-3), protože se nejlépe hodí pro všechny ostatní látky (látky A až G). Společnost by ráda zjistila, zda je možné zařadit všechny látky (A až G) pod jedinou registraci látky B.

1. Obecné poznámky

Uhlovodíky (parafiny, olefiny) získané z tuků a olejů nebo syntetické náhražky jsou identifikovány distribucí uhlíkového řetězce nebo původem (deskriptor alkylu), funkční skupinou (deskriptor funkční skupiny), např. amonium, a anionty/kationty (deskriptor soli), například chlorid. Distribuce délky řetězce, např. C₈₋₁₈, se vztahuje na uhlovodíky nasycené

lineární (nevětvené)

a zahrnuje všechna zastoupení uhlíkových atomů (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁, ..., C₁₈), přičemž úzká distribuce nezahrnuje širší distribuci a naopak.

Jinak by byly uvedeny tyto údaje:

nenasycené (C₁₆ nenasycené)

větvené (C₁₀ větvené)

se sudým počtem atomů uhlíku (C₁₂₋₁₈ se sudým počtem)

Uhlíkové řetězce popsané podle zdroje musí zahrnovat distribuci, která se objevuje ve zdroji, např. lojové alkylaminy:

Lojové alkylaminy jsou z 99 % primární alkylaminy s lineárním řetězcem s následující distribucí délky uhlíkového řetězce (Ullmann, 1985) (jedna čárka v indexu označuje jednu dvojnou vazbu, dvě čárky v indexu označují jednu trojnou vazbu):

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

2. Jak identifikovat látky pro registrační účely?

Každá látka se porovná s látkou B (která byla dosud používána pro pojmenování) s cílem určit, zda mohou být obě látky považovány za totožné.

Srovnání látky A s látkou B

U „koko-alkylu“ látky B lze nalézt následující distribuci délek uhlíkového řetězce (Ullmann, 1985) (jedna čárka v indexu znamená jednu dvojnou vazbu, dvě čárky v indexu znamenají jednu trojnou vazbu):

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

Distribuce délek řetězce látky A se liší od distribuce délek uhlíkového řetězce „koko-alkylu“ látky B. Vzhledem k tomu, že se kvalitativní a kvantitativní složení obou látek výrazně odlišuje, nelze tyto látky považovat za totožné.

Srovnání látky B s látkou C

Látka B „kvartérní amoniové sloučeniny, dialkyl(dimethyl)amonium-chloridy“ popisuje směs složek s různými délkami uhlíkového řetězce (C₆ až C₁₈ se sudým počtem atomů uhlíku, lineárních, nasycených a nenasycených), zatímco látka C popisuje pouze jednu složku s jednou definovanou délkou nasyceného řetězce (C₁₂) s odlišným aniontem (bromidem). Látku C proto nelze považovat za totožnou s látkou B.

Srovnání látky B s látkou D

Látka B „kvartérní amoniové sloučeniny, dialkyl(dimethyl)amonium-chloridy“ popisuje směs složek s různými délkami uhlíkového řetězce (C₆ až C₁₈ se sudým počtem atomů, lineárních, nasycených a nenasycených), zatímco látka D popisuje jednu složku s definovanou délkou nasyceného řetězce (C₁₂) a stejným aniontem (chloridem). Látky B a D mají odlišné názvy a nelze je považovat za totožné, neboť jednotlivá složka není totožná se směsí obsahující určitou složku a naopak.

Srovnání látky B s látkou E

Látka E je směsí látek C a D. Obě látky mají nasycený řetězec délky C₁₂, ale odlišné anionty (bromid a chlorid). Látka B „kvartérní amoniové sloučeniny, dialkyl(dimethyl)amonium-chloridy“ popisuje směs složek s různými délkami uhlíkového řetězce (C₆ až C₁₈ se sudým počtem atomů uhlíku, lineárních, nasycených a nenasycených) a chloridem jako aniontem. Látka E je však popsána pouze na základě délky uhlíkového řetězce s počtem uhlíkových atomů C₁₂ a bromidem jako dalším aniontem. Látky B a E proto nelze považovat za totožné. Je tudíž nutné provést samostatnou registraci látky E.

Srovnání látky B s látkou F

Látka F „kvartérní amoniové sloučeniny, di-C₁₄₋₁₈-alkyldimethylammonium-chloridy“ je směsí složek s různými délkami uhlíkového řetězce (se sudým a lichým počtem uhlíkových atomů C₁₄ až C₁₈, lineárních a nasycených). Látka F se liší od látky B, pokud jde o složení a rozmezí distribuce uhlíkového řetězce. Látka F má úzkou distribuci délky uhlíkového řetězce, a kromě toho i uhlíkové řetězce o počtu uhlíkových atomů C₁₅ a C₁₇. Látky B a F proto nelze považovat za totožné.

Srovnání látky B s látkou G

Látky B a G se zdají být velmi podobné, jelikož distribuce uhlíkového řetězce je téměř ve stejném rozmezí. Nicméně látka G navíc zahrnuje délky uhlíkového řetězce s počtem atomů C₄, C₂₀ a C₂₂. Distribuce délek uhlíkového řetězce látky G zahrnuje širší rozmezí než je tomu u látky B. Látky B a G proto nelze považovat za totožné.

3. Závěr

Uhlovodíky (parafiny, olefiny) lze považovat za totožné látky pouze v případě, že všechny tři deskriptory (alkylu, funkční skupiny a soli) jsou stejné.

V daném případě uvedeném výše se deskriptory vždy vzájemně liší. Látky proto nelze zahrnout pod jedinou registraci látky B.

7.10. ropné látky

Níže jsou uvedeny dva příklady vycházející z pokynů pro konkrétní látky UVCB, které jsou obsaženy v kapitole 4.3.2.

7.10.1. Benzinový pool (C₄–C₁₂)

1. *Název a jiné identifikátory*

Název

| | |
|---|---------------------------------------|
| Název podle IUPAC nebo jiný mezinárodní název chemické látky | Nafta (ropa), katalyticky reformovaná |
|---|---------------------------------------|

Zdroj

| | |
|---------------------------------------|------|
| Identifikace nebo popis zdroje | Ropa |
|---------------------------------------|------|

Proces

| | |
|---|--|
| Popis rafinačního procesu | Katalytické reformování |
| Uhlíkové rozmezí | C ₄ -C ₁₂ |
| Rozmezí bodu varu nebo mezní bod | 30 °C až 220 °C |
| Další fyzikální vlastnosti, např. viskozita | Nižší než 7 mm ² /s při 40 °C (viskozita) |
| Číslo ES Číslo CAS Název ES / název CAS Popis ES / popis CAS | 273-271-8 68955-35-1 Nafta (ropa), katalyticky reformovaná Složitá kombinace uhlovodíků z destilace produktů z katalytického reformování. Je složena z uhlovodíků s počtem uhlíkových atomů převážně v rozmezí C ₄ až C ₁₂ a má bod varu v rozmezí přibližně 30 °C až 220 °C (90 °F až 430 °F). Obsahuje relativně velký podíl aromatických uhlovodíků a uhlovodíků s větveným řetězcem. Tento pool může obsahovat nejméně 10 % (obj.) benzenu. |

2. Informace o složení

| Známé složky | | | |
|---------------------|------------------|-----------------|--------------------------------|
| Název IUPAC | Číslo CAS | Číslo ES | Konc. rozmezí (% hmot.) |
| Benzen | 71-43-2 | 200-753-7 | 1-10 |
| Toluen | 108-88-3 | 203-625-9 | 20-25 |
| Xylen | 1330-20-7 | 215-535-7 | 15-20 |

7.10.2. Plynové oleje (ropné)

1. *Název a jiné identifikátory*

| | |
|---|---|
| Název podle IUPAC nebo jiný mezinárodní název chemické látky | Plynové oleje (ropné), těžké atmosférické |
|---|---|

Zdroj

| | |
|---------------------------------------|------|
| Identifikace nebo popis zdroje | Ropa |
|---------------------------------------|------|

Proces

| Popis rafinačního procesu | Atmosférická destilace |
|---|--|
| Uhlíkové rozmezí | C ₇ –C ₃₅ |
| Rozmezí bodu varu nebo mezní bod | 121 °C až 510 °C |
| Další fyzikální vlastnosti, např. viskozita | 20 mm ² /s při 40 °C (viskozita) |
| Číslo ES Číslo CAS Název ES / název CAS Popis ES / popis CAS | 272-184-2 68783-08-4 Plynové oleje (ropné), těžké atmosférické Složitá směs uhlovodíků získaná destilací ropy. Je složena převážně z uhlovodíků s počtem uhlíkových atomů převážně v rozmezí C ₇ až C ₃₅ a má bod varu v rozmezí přibližně 121 °C až 510 °C (250 °F až 950 °F). |

2. *Chemické složení*

Nejsou k dispozici žádné informace.

7.11. Enzymy

Níže jsou uvedeny dva příklady pro koncentráty enzymů čerpané z pokynů pro konkrétní látky UVCB, zahrnutých v kapitole 4.3.2.3: subtilizin (identifikovaný podle nomenklatury IUBMB + další složky) a α -amyláza (identifikovaná podle nomenklatury IUBMB + produkční organismus)

7.11.1. Subtilizin

| Enzymový protein | Subtilizin |
|---|---|
| Číslo IUBMB | 3.4.21.62 |
| Názvy IUBMB (Systémový název, název enzymu, synonyma) | Subtilizin; alkaláza; alkaláza 0.6L; alkaláza 2.5L; ALK-enzym; bacilopeptidáza A; bacilopeptidáza B; Bacillus subtilis alkalická proteináza bioprása; bioprása AL 15; bioprása APL 30; kolistináza; (viz rovněž poznámky); subtilizin J; subtilizin S41; subtilizin Sendai; subtilizin GX; subtilizin E atd. |
| Poznámky IUBMB | Subtilizin je serinová endopeptidáza, příklad typu skupiny peptidáz S8 . Neobsahuje žádná rezidua cysteinu (ačkoli taková rezidua se nacházejí v homologických enzymech). Varianty druhů zahrnují subtilizin BPN (rovněž subtilizin B, subtilopeptidázu B, subtilopeptidázu C, Nagarse, proteinázu Nagarse, subtilizin Novo, bakteriální proteinázu Novo) a subtilizin Carlsberg (subtilizin A, subtilopeptidázu A, alkalázu Novo). Dříve ES 3.4.4.16 a zahrnut v ES 3.4.21.14. Podobné enzymy jsou produkovány různými kmeny <i>Bacillus subtilis</i> a dalšími druhy <i>Bacillus</i> [1,3]. |
| Reakce | Hydrolýza proteinů se širokou specifičností peptidových vazeb a preferencí pro velká neutrální rezidua v P1. Hydrolyzuje peptidové amidy. |
| Typ reakce | Hydrolázy; Působí na peptidové vazby (peptidázy); serinové endopeptidázy |

| | |
|--|---|
| Číslo ES | 232-752-2 |
| Název ES | Subtilizin |
| Číslo CAS | 9014-01-1 |
| Název CAS | Subtilizin |
| Koncentrace enzymového proteinu | 26 % |
| Jiné složky | |
| Jiné proteiny, peptidy a aminokyseliny | 39 % |
| Sacharidy | 11 % |
| Lipidy | 1 % |
| Anorganické soli | 23 % |
| Doplňkové parametry | |
| Substráty a produkty | Proteiny nebo oligopeptidy, voda, peptidy |

7.11.2. α -amyláza

| Enzymový protein | α-amyláza |
|---|---|
| Číslo IUBMB | 3.2.1.1 |
| Názvy IUBMB (Systémový název, název enzymu, synonyma) | 1,4- α -D-glukanglukanohydroláza; glykogenáza; α -amyláza; alfa-amyláza; endoamyláza; Taka-amyláza A |

| | |
|--|---|
| Poznámky IUBMB | Občas působí na škrob, glykogen a příbuzné polysacharidy a oligosacharidy; redukující skupiny se uvolňují v α -konfiguraci. Výraz „ α “ se vztahuje k počáteční anomerní konfiguraci uvolněné volné skupiny cukru, nikoli ke konfiguraci hydrolyzované vazby. |
| Reakce | Endohydrolyza 1,4- α -D-glukosidických vazeb v polysacharidech obsahujících tři nebo více D-glukózových jednotek vázaných v poloze 1,4- α |
| Typ reakce | hydrolázy; glykosidázy; glykosidázy, tj. enzymy hydrolyzující O- a S-glykosylové sloučeniny |
| Číslo ES | 232-565-6 |
| Název ES | Amyláza, α - |
| Číslo CAS | 9000-90-2 |
| Odpovídající čísla CAS | 9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (všechna byla zrušena) |
| Název CAS | Amyláza, α - |
| Koncentrace enzymového proteinu | 37 % |
| Jiné složky | |
| Jiné proteiny, peptidy a aminokyseliny | 30 % |
| Sacharidy | 19 % |
| Anorganické soli | 14 % |
| Doplňkové parametry | |
| Substráty a produkty | škrob; glykogen; voda; polysacharid; oligosacharid |

Dodatek I – Podpůrné materiály

Tento dodatek zahrnuje seznam internetových stránek, databází a příruček, které mohou být užitečné při vyhledávání vhodných názvů IUPAC, CAS a ES, čísel CAS a ES, molekulových a strukturních vzorců, včetně zápisu SMILES a jiných parametrů, které jsou vyžadovány při identifikaci látky. Obchodní databáze a nástroje sloužící jako zdroj pokynů nebyly zahrnuty.

| Obecné informace | | |
|--|---|--|
| Parametr identifikace látky | Zdroj | Popis zdroje |
| Ministerstvo zdravotnictví a sociálních služeb USA | https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/ | Databáze a nástroje určené uživatelům k vyhledávání informací o chemických látkách |
| Perkin Elmer Informatics | https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice | Volně dostupná databáze strukturních vzorců, fyzikálních vlastností a hypertextových odkazů na související informace |
| BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB) | https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/ | Chemický software; Accord Alphabetical Product Listing |

| Název a jiné identifikátory | | |
|------------------------------------|---|---|
| Parametr identifikace látky | Zdroj | Popis zdroje |
| Název IUPAC | https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/ | Oficiální internetové stránky IUPAC |
| | https://iupac.qmul.ac.uk/ | Chemické názvosloví a doporučení IUPAC (podle IUPAC) |
| | Názvosloví v organické chemii (Modrá kniha), Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699] | Základní publikace o názvosloví IUPAC, předpokládaná aktualizace 2006. |
| | Průvodce názvoslovím organických sloučenin podle IUPAC (doporučení 1993) (doplněk k Modré knize), Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882] | Základní publikace o názvosloví IUPAC, předpokládaná aktualizace 2006. |
| | Názvosloví v anorganické chemii (doporučení 1990) (Červená kniha) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941] | Základní publikace o názvosloví IUPAC, předpokládaná aktualizace červenec 2005. |
| Název IUPAC | Názvosloví v biochemii a související dokumenty (Bílá kniha), Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4] | Základní publikace o názvosloví IUPAC |
| | Zásady chemického názvosloví: příručka doporučení IUPAC Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856] | Úvodní díl zahrnující všechny typy sloučenin |
| Název IUPAC | http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/ | Komerční počítačový program pro vytváření názvů, který může být velmi užitečný při pojmenování středně složitých struktur. Pro malé molekuly je volně dostupný (doporučeno IUPAC) |
| | http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature | Názvosloví v organické chemii podle IUPAC (doporučeno IUPAC) |

| | | |
|---------------------|---|---|
| | http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm | Úplný seznam schválených triviálních a polosystematických kořenových názvů organických sloučenin |
| | http://www.chemexper.com/ | Cílem ChemExper Chemical Directory je vytvořit všeobecnou a na internetu volně dostupnou databázi chemických látek. Tato databáze obsahuje chemické látky s jejich fyzikálními charakteristikami. Každý může poskytnout a nalézt informace o chemické látce za pomoci internetového prohlížeče. |
| Názvosloví IUBMB | https://iubmb.qmul.ac.uk/ | Databáze názvosloví v biochemii IUBMB (podle IUBMB) |
| Jiné názvy | http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name | Druhové názvy podle indexu barev, mezinárodní index barev, čtvrté vydání on-line |
| | https://incipedia.personalcarecouncil.org/ | INCI (Mezinárodní názvosloví kosmetických přísad), oficiální internetové stránky obsahující rady týkající se výrobků pro osobní hygienu |
| | https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges | Látky US EPA obsahující uhlíkové řetězce o různých délkách (rozmezí alkylů za použití zápisu CX-Y) |
| Jiné identifikátory | https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en | Normy ES, oficiální evropská stránka ES |
| Číslo ES | https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory | Seznam ES: vyhledávání v seznamech EINECS, ELINCS, NLP a v příloze I směrnice 67/548/EHS |
| Číslo CAS | http://www.cas.org | Oficiální internetové stránky registru CAS |
| | http://www.chemistry.org | Oficiální internetové stránky Americké chemické společnosti |

Molekulový a strukturní vzorec

| Parametr identifikace látky | Zdroj | Popis zdroje |
|--|---|---|
| SMILES | http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html | Volně dostupný program generující kódy SMILES |
| Molekulová hmotnost a SMILES | http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html | ACDChemsSketch, volně dostupný software (rovněž komerčně dostupný) |
| Některé fyzikálně-chemické parametry | https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface | EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ je sada programů sloužících k odhadování fyzikálně-chemických vlastností a osudu v životním prostředí za pomoci vědeckých systémů pro systém Windows®, vyvinutá oddělením agentury EPA pro prevenci znečištění toxickými chemickými látkami a společností Syracuse Research Corporation (SRC). |
| Dodatečná podpora pro specifické látky | Otázky a odpovědi – ECHA Podpora pro jednotlivá odvětví v souvislosti s identifikací látek – ECHA | Podpora týkající se přístupů k pojmenování a charakterizaci specifických látek je uvedena na internetových stránkách agentury ECHA a v otázkách a odpovědích. |

Dodatek II – Technické pokyny pro parametry identifikace látek

Informace v tomto dodatku jsou určeny pro uživatele pokynů, kteří nejsou obeznámeni s technickými pravidly pro názvosloví, používáním různých registračních čísel a pravidly pro tvorbu zápisu při uvádění molekulových a strukturních vzorců, spektrálních údajů atd.

V obecném úvodu jsou shrnuty hlavní zásady a uživatel je odkázán na původní zdroje obsahující úplné informace.

Tento přehled je zjednodušenou verzí, neúplnou, a nikoli vyčerpávající a pro profesionálního uživatele není dostatečně podrobný. V žádném případě by neměl být považován za rovnocenný oficiálnímu zdroji.

1 Název/názvy v IUPAC nebo jiném mezinárodním názvosloví

Pro účely registrace se musí uvádět anglický název podle IUPAC nebo jiný dobře definovaný mezinárodně uznávaný název látky.

Název podle IUPAC vychází z mezinárodního standardního chemického názvosloví, které zavedla Mezinárodní unie pro čistou a aplikovanou chemii, IUPAC (vhodné odkazy naleznete v dodatku 1). Názvosloví podle IUPAC představuje systematický způsob pojmenovávání chemických látek, organických i neorganických. V názvosloví podle IUPAC se k popisu typu a polohy funkčních skupin v látce používají prefixy (předpony), sufixy (přípony) a infixy (vpony).

penta-1,3-dien-1-ol, v tomto případě:

je předponou (prefixem) **penta-1,3-**

vponou (infixem) **-di** a

příponou (sufixem) **-ol**

en- je základem názvu, jeho kořenem.

Soubor pravidel byl vypracován v průběhu několika let a průběžně se mění, aby se zohlednily nové složky molekulové rozmanitosti a aby se odstranily případné rozpory nebo nejistoty, které byly zjištěny. Pravidla stanovená IUPAC lze použít pouze pro dobře definované látky.

Níže jsou uvedena některá obecná pravidla týkající se struktury názvu podle IUPAC. Podrobnější údaje lze nalézt v návodu, který je obsažen v kapitole 4 pokynů.

1.1 Organická látka

Krok 1 Zjistěte počet atomů uhlíku v nejdelším souvislém řetězci atomů uhlíku; tento počet určuje prefix (předponu) kořene názvu:

| Počet atomů uhlíku | Kořen |
|--------------------|-------|
| 1 | meth- |
| 2 | eth- |

| | |
|---|-------|
| 3 | prop- |
| 4 | but- |
| 5 | pent- |
| 6 | hex- |
| 7 | hept- |
| 8 | okt- |
| N | |

Krok 2 Určete nasycení řetězce; nasycení řetězce určuje sufix kořene názvu:

| Nasycení | Vazba | Přípona |
|------------|------------------|------------|
| nenasycené | dvojná trojná | -en -yn |
| nasycené | - | -an |

V případě vícenásobných dvojných nebo trojných vazeb se počet vazeb označuje za pomoci „mono“, „di“, „tri“ atd., které se coby infix (vpona) klade před sufix.

Penten se 2 dvojnými vazbami: pentadien

Krok 3 Ke kořeni názvu přidejte příslušné prefixy, sufixy a infixy.

Poznámka: Jako kořen názvu lze použít i triviální a polosystematické názvy schválené IUPAC:

benzen, toluen atd.

Krok 4 Použijte tabulku uvedenou níže:

- Identifikujte substituenty nebo funkční skupiny: uhlíkové nebo neuhlíkové skupiny připojené k řetězci atomů uhlíku identifikovaných v bodě 1.
- Určete pořadí důležitosti substituentů nebo funkčních skupin.
- Připojte příponu pro první substituent / funkční skupinu, jakož i všechny následující, v pořadí důležitosti.
- Připojte příponu pro ostatní substituenty a funkční skupiny v abecedním pořadí.

| Priorita | Skupina | Vzorec | Přípona | Předpona |
|----------|----------------------|---------------------|---------------|------------|
| 1 | karboxylová kyselina | R-COOH | -ová kyselina | karboxy- |
| 2 | ester | R-CO-O-R | -oat | - |
| 3 | amid | R-CONH ₂ | -amid | karbamoyl- |
| 4 | kyanid | R-CN | -nitril | kyano- |
| 5 | aldehyd | R-CHO | -al | oxo- |
| 6 | keton | R-CO-R | -on | oxo- |
| 7 | alkohol | R-OH | -ol | hydroxyl- |
| 8 | thiol | R-SH | -thiol | sulfanyl- |
| 9 | amin | R-NH ₂ | -amin | amino- |

1.2 Anorganická látka

1.2.1 Pojmenování jednoduchých anorganických látek

Pojmenování anorganických látek vychází ze souboru pravidel (Červená kniha IUPAC, viz odkaz v kapitole 7.1), přičemž ty nejdůležitější z nich jsou uvedeny níže:

1 Jednoatomové anionty jsou pojmenovány za pomoci přípony -id:

O²⁻ je oxid.

2 Jednoduché iontové sloučeniny jsou pojmenovány tak, že za názvem kationtu následuje aniont. V případě kationtů s náboji > 1 se náboje píšou římskými číslicemi v závorce bezprostředně za názvem prvku:

Cu²⁺ je měď(II).

3 Hydráty se pojmenovávají jako iontová sloučenina, za kterou následuje číselná předpona a koncovka -hydrát. Číselné prefixy jsou mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, okta-, nona-, deka-:

CuSO₄ · 5H₂O je „pentahdrát síranu měďnatého“.

Poznámka: Hydráty a případná bezvodá forma určité soli kovu se pro účely registrace považují za „stejně látky“.

4 Anorganické molekulové sloučeniny se před každým prvkem pojmenovávají předponou (viz hydráty). Elektronegativnější prvek se uvede jako poslední s příponou -id:

CO₂ je oxid uhličitý a CCl₄ je chlorid uhličitý.

5 Kyseliny se pojmenovávají podle aniontu, který vzniká po rozpuštění ve vodě. Existuje několik možností:

a Pokud se po rozpuštění ve vodě kyselina rozloží na aniont s názvem „x“-id, kyselina nese název kyselina „x“-vodíková:

Kyselina chlorovodíková vytváří aniont chloridu.

b Pokud se po rozpuštění ve vodě kyselina rozloží na aniont s názvem „x“-ečnan, kyselina nese název kyselina „x“-ečná:

Kyselina chorečná se ve vodě rozloží na chlorečnanové anionty.

c Pokud se po rozpuštění ve vodě kyselina rozloží na aniont s názvem ve formě „x“-itan, kyselina nese název kyselina „x“-itá:

Kyselina chloritá se rozloží na chloritanové anionty.

1.2.2 Pojmenování mineralogických fází

Komplexní mineralogické fáze zpravidla zahrnují kombinaci dvou či více prvků. Většina přítomných prvků je sloučena s kyslíkem a v zájmu zjednodušení identifikace mineralogové obvykle považují komplexní sloučeniny za sloučeniny, které sestávají z oxidů, přičemž některé z nich jsou zásadité a jiné kyselé. Například v případě křemičitanů je zvykem označovat je jako souhrn určitého množství oxidů nebo jako soli kyseliny křemičité či jako kyseliny hlinitokřemičité. V souladu s tím je možné označit ortokřemičitan vápenatý jako $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$, tedy jako kombinaci samostatných oxidů, nebo jako Ca_2SiO_4 , tzn. jako vápenatou sůl kyseliny ortokřemičité H_4SiO_4 . Totéž platí pro i pro jiné komplexní minerální oxidy – pojmenovávají se prefixem před každým oxidem (např. Ca_3SiO_5 = křemičitan trojvápenatý = $3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$). V některých průmyslových odvětvích se za účelem zkrácení vzorce sloučenin zavedlo další zjednodušení. Například v případě slínku portlandského cementu $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ (ortokřemičitan vápenatý nebo křemičitan dvojvápenatý) se zkracuje na C_2S , kde $\text{C} = \text{CaO}$ a $\text{S} = \text{SiO}_2$. V případě, kdy mají být pojmenovány nebo identifikovány komplexní mineralogické fáze, se doporučuje konzultovat standardní mineralogické nebo průmyslové texty.

1.3 Produkty přírodního původu a příbuzné složky

Pro přírodní produkty organizace IUPAC vypracovala několik pravidel systematického pojmenování. Ve stručnosti to znamená, že v případě látek získaných z přírodního zdroje vždy, když je to možné, vychází název z názvu čeledě, rodu či druhu organismu, ze kterého byla látka získána.

V případě hypotetického proteinu *Hypothecalia Exemplare* názvy vycházejí z *hypothecalia* nebo *exemplare*, např. *Horse Exemplare*

Je-li to možné, název by měl vyjadřovat známou nebo pravděpodobnou distribuci přírodního produktu. Pokud je to vhodné, za základ názvu látky, která se vyskytuje v několika příbuzných čeledích, by měla být použita i třída nebo řád. Název přírodních produktů neznámé struktury by neměl obsahovat předpony, přípony nebo vpony, které se používají v organickém názvosloví.

Kondenzační produkt *Horse exemplare*, Valarine připojený k N-terminu

Mnoho přirozeně se vyskytujících látek patří do dobře definovaných strukturních tříd, z nichž každou lze charakterizovat souborem mateřských struktur, které jsou úzce příbuzné, to znamená, že každou lze odvodit od základní struktury. Systematický název pro tyto přirozeně se vyskytující látky a jejich deriváty může vycházet z názvu příslušné mateřské struktury:

Dobře známé mateřské struktury jsou alkaloidy, steroidy, terpenoidy a vitaminy.

Základní mateřská struktura by měla vyjadřovat základní kostru, která je společná pro většinu látek dané třídy. Přirozeně se vyskytující látky nebo deriváty se pojmenovávají podle mateřské struktury přidáním předpon, přípon a vpon, které označují:

- modifikace skeletální struktury,
- nahrazení atomů ve skeletální struktuře,
- změny stavu hydrogenace, vyjádřené názvem mateřské struktury,
- atomy nebo skupiny, které v mateřské skupině nahrazují atomy vodíku,
- konfigurace, které již nejsou vyjádřeny názvem základní struktury nebo které jsou oproti vyjádřeným konfiguracím změněné.

Thiamin-chlorid je rovněž znám jako vitamin B₁.

Ohledně podrobnějších informací o systematickém pojmenování přírodních produktů a příbuzných látek je třeba kontaktovat organizaci IUPAC (viz dodatek 1).

1.4 Není možné odvodit název podle IUPAC

Pokud není možné pro určité látky odvodit název IUPAC, lze použít jiné mezinárodně uznávané názvosloví specifické pro tyto látky:

- minerály a rudy, mineralogické názvy,
- ropné látky,
- generické názvy indexu barev ³,
- přídatné látky olejů,
- INCI (Mezinárodní názvosloví kosmetických přísad) ⁴,
- názvy SDA (Soap and Detergent Association) pro povrchově aktivní látky ⁵
- atd.

2 Jiné názvy

Pro účely registrace podle nařízení REACH je vhodné uvést všechny relevantní názvy nebo veřejné identifikátory ve všech jazycích, ve kterých se látka uvádí nebo má být uváděna na trh EU (např. obchodní názvy). Patří sem obchodní názvy, synonyma, zkratky atd.

- <http://www.colour-index.com>, mezinárodní index barev, čtvrté vydání on-line
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, oficiální internetové stránky obsahující rady týkající se výrobků pro osobní hygienu
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, oficiální internetové stránky Amerického ústavu pro čisticí přípravky (American Cleaning Institute, ACI).

3 Číslo ES ze seznamu EINECS, ELINCS nebo NLP (seznam ES)

Číslo ES, tzn. číslo EINECS, ELINCS nebo NLP, představuje oficiální číslo látky v rámci Evropské unie. Číslo ES lze nalézt v oficiálních publikacích EINECS, ELINCS a NLP a oficiálních publikacích Evropské agentury pro chemické látky.

Číslo ES se skládá ze 7 číslic typu x₁x₂x₃-x₄x₅x₆-x₇. První číslice je určena podle seznamu, ke kterému látka přísluší:

| Seznam | První číslice čísla ES |
|--------|------------------------|
| EINECS | 2 nebo 3 |
| ELINCS | 4 |
| NLP | 5 |

4 Název a číslo CAS

Chemical Abstracts Service (CAS), útvar Americké chemické společnosti (American Chemical Society, ACS)), přiděluje název a číslo CAS každé chemické látce, která je zařazena do registrační databáze CAS. Názvy a čísla jsou přidělovány vědeckými pracovníky útvaru CAS ve vzestupném pořadí jedinečným identifikovaným látkám. Každá látka registrovaná v útvaru CAS má název podle názvosloví CAS, který ACS přijímá na základě doporučení výboru ACS pro názvosloví (viz odkazy v dodatku 1).

4.1 Název CAS

Název CAS je název přidělený útvarem CAS a liší se od názvu podle IUPAC. Názvosloví CAS vychází z omezeného souboru kritérií, která ne vždy postačují k odvození názvu látky. Z toho důvodu se za účelem získání správného názvu CAS doporučuje kontaktovat Chemical Abstracts Service.

Základní pravidla týkající se názvosloví jsou ve stručnosti tato:

- Za základ se zvolí „hlavní“ část látky.
- Substituenty se uvádějí za základem, a to v opačném pořadí.
- Pokud je přítomných více substituentů, uvádějí se v abecedním pořadí (včetně prefixů):

o-xylen-3-ol je benzen, 1,2-dimethyl, 3-hydroxy

4.2 Číslo CAS

Číslo CAS lze získat od Chemical Abstracts Service.

Číslo CAS sestává z minimálně pěti číslic, rozdělených na tři části, oddělené spojovníkem. Druhá část sestává vždy ze dvou číslic, třetí část z jedné číslice:

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

Pro kontrolu správnosti čísla CAS lze použít kontrolní součet:

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

Číslo CAS musí být správné a musí odpovídat kontrolnímu součtu.

5 Jiné identifikační kódy

Lze uvést i jiné mezinárodně uznávané kódy, například:

- celní číslo,
- číslo UN,
- číslo v indexu barev,
- číslo barviva.

6 Molekulový vzorec, strukturní vzorec a kód SMILES

6.1 Molekulový vzorec

Molekulový vzorec identifikuje každý typ prvku pomocí jeho chemické značky a uvádí počet atomů každého takového prvku v jedné samostatné molekule látky.

Molekulové vzorce by se měly uvádět podle (tradiční) Hillovy metody a navíc v souladu se systémem CAS v případech, kdy se tento vzorec od vzorce podle Hillovy metody odlišuje.

Při použití Hillovy metody se postupuje podle následujících kroků:

1. Identifikujte prvky a uveďte jejich chemické značky.
2. Prvky seřadte ve správném pořadí:

- a. Látky obsahující uhlík:

Uvede se chemická značka pro každý prvek v tomto pořadí:

- 1.) uhlík;
- 2.) vodík;
- 3.) značky pro jiné prvky v abecedním pořadí:

Pentan: C₅H₁₂

Penten: C₅H₁₀

Pentanol: C₅H₁₂O

- b. Látky neobsahující uhlík:

Prvky se uvádějí v abecedním pořadí:

Kyselina chlorovodíková: ClH

3. V případě každého prvku, který má počet atomů > 1, uveďte počet atomů ve formě dolního indexu za chemickými značkami.

4. Informace, které nesouvisí s hlavní strukturou, uveďte na konci molekulového vzorce oddělené tečkou nebo čárkou:

Benzoát sodný je C₇H₆O₂, sodná sůl.

Dihydrát síranu měďnatého je CuO₄S.2H₂O.

V případě, že pro specifickou látku nelze použít Hillovu metodu, molekulový vzorec by měl být uveden jiným způsobem, například jako empirický vzorec, jednoduchý popis atomů a známý poměr atomů nebo jako vzorec, který udává Chemical Abstracts Service (viz kapitola 4 pokynů).

6.2 Strukturní vzorec a popis krystalické struktury

Strukturní vzorec je zapotřebí ke znázornění rozložení molekul v látce a jejich vzájemných vztahů. Strukturní vzorec by měl vyjadřovat polohu atomů, iontů nebo skupin a povahu vazeb, které je spojují. Patří sem rovněž izomery, tj. cis/trans, chiralita, enantiomery atd.

Strukturní vzorec je možné uvést ve více formátech: ve formě molekulového vzorce nebo ve formě strukturního diagramu.

Strukturní vzorec ve formě molekulového vzorce

1. Zapište všechny skupiny prvků v pořadí jejich výskytu:

n-pentan: CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

2. Každý substituent se zapiše do závorek bezprostředně za atom, s nímž je spojený:

2-methylbutan: CH₃CH(CH₂)CH₂CH₃

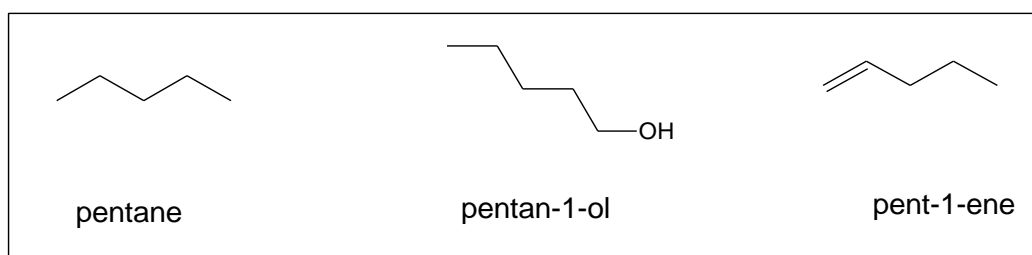
3. V případě dvojných a trojných vazeb je zobrazte mezi dotčenými skupinami prvků:

pent-1-en: CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

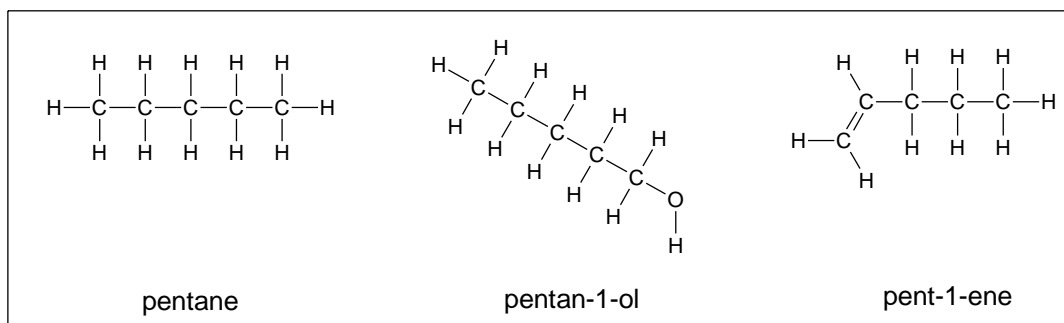
Strukturní vzorec ve formě strukturního diagramu

V případě strukturního diagramu se prvky a vazby mezi nimi vizuálně znázorňují dvojrozměrným nebo trojrozměrným obrazcem. Existuje několik metod:

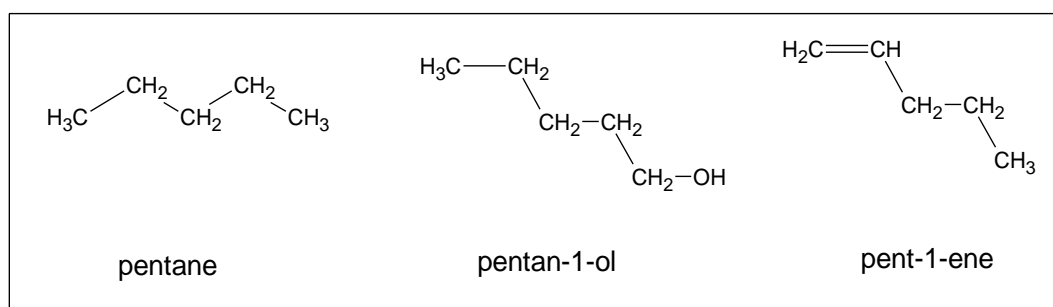
1. Zobrazení všech prvků kromě uhlíku a vodíku, s výjimkou vodíku, který je navázán na jiné prvky než uhlík



2. Zobrazení všech prvků podle názvu



3. Zobrazení uhlíku a vodíku jako skupiny (např. CH₃), všech prvků kromě uhlíku a všech atomů vodíku, které nejsou navázané na uhlík

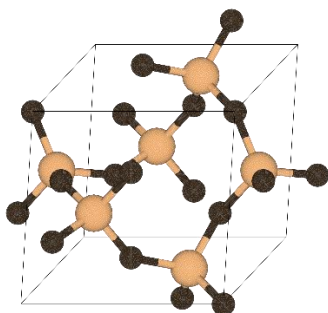


- Strukturní vzorec ve formě molekulového vzorce

1. Uveďte molekulový vzorec:

SiO₂

2. Uveďte krystalickou strukturu látky



3. Uveďte mineralogický a/nebo krystalografický název na základě krystalové soustavy³² a krystalové třídy:

α-křemen [*β*-křemen] / **krystalová soustava:** trigonální – hexagonální, **krystalová třída:** trigonálně-trapézový 3 2

6.3 Zápis SMILES

SMILES je zkratka pro Simplified Molecular Input Line Entry Specification.³³ Jde o systém chemického zápisu, který se používá ke znázornění molekulové struktury za pomoci lineárního sledu značek. V případě standardního systému SMILES je název molekuly synonymem její struktury: nepřímou představuje dvourozměrný obraz molekulové struktury. Jelikož dvourozměrnou chemickou strukturu lze znázornit různými způsoby, pro jednu molekulu existuje více správných zápisů SMILES. Základem SMILES je znázornění valenčního modelu molekuly. Není proto vhodné popisovat molekuly, které nelze znázornit valenčním modelem.

Zápisy SMILES sestávají z atomů, které jsou označeny značkami prvků, vazeb, závorek, které se používají ke znázornění větvené struktury, a čísel označujících cyklické struktury. Zápis SMILES znázorňuje chemickou strukturu ve formě grafu s volitelným označením chiralit. Zápis SMILES, který znázorňuje strukturu pouze pomocí vazeb a atomů, se nazývá všeobecným zápisem SMILES. Zápis SMILES, který je zapsán za pomoci izotopových a chirálních specifikací, je známý jako izomerický zápis SMILES.

Zápis SMILES vychází z několika základních pravidel:

1. Atomy jsou zaznamenány pomocí svých značek.

³² Kubická / tetragonální / orthombická / romboedrická (nebo trigonální) / hexagonální / monoklinická / triklinická.

³³ Weininger (1988), SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules; J. Chem. Inf. Comput. Sci.; 1988; 28(1); s. 31–36.

2. Každý atom s výjimkou vodíku je specifikován samostatně.
- a. Prvky v „organické podskupině“ B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br a I se píšou bez závorek a bez připojeného H, pokud počet H odpovídá nejnižšímu normálnímu mocenství (valenci) v souladu s explicitními vazbami:

| Prvek v „organické podskupině“ | „Nejnižší normální mocenství“ |
|--------------------------------|-------------------------------|
| B | 3 |
| C | 4 |
| N | 3 a 5 |
| O | 2 |
| P | 3 a 5 |
| S | 2, 4 a 6 |
| F | 1 |
| Cl | 1 |
| Br | 1 |
| I | 1 |

- b. Prvky v „organické podskupině“ se píšou v závorkách, pokud počet H neodpovídá nejnižšímu normálnímu mocenství:

Amonný kationt je NH₄⁺.

- c. Prvky, které nejsou obsaženy v „organické podskupině“, se píšou v závorkách spolu s každým připojeným vodíkem, který je zaznamenán.

3. Alifatické atomy se zapisují velkými písmeny, aromatické atomy se zapisují malými písmeny:

Benzen je c1ccccc1 a cyklohexan je C1CCCCC1.

4. Vodík se zapisuje pouze v těchto situacích:
- vodík s nábojem, tj. proton [H⁺];
 - atomy vodíku, které jsou vázány na jiné atomy vodíku, tj. molekulový vodík [H][H];
 - atomy vodíku, které jsou vázány na více než jeden atom, např. vodíkové můstky;
 - specifikace izotopového vodíku, např. deuterium ([²H]);
 - pokud se vodík váže na chirální atom.

5. Čtyři základní vazby jsou tyto:

| Typ vazby | Zápis SMILES |
|------------|----------------|
| jednoduchá | - (není nutný) |
| dvojná | = |
| trojná | # |
| aromatická | malá písmena |

6. Substituenty se znázorňují v závorkách, a to bezprostředně za atomy, na něž jsou vázány.

2-methylbutan je CC(C)CC.

- a. Substituenty se vždy uvádějí bezprostředně za příslušnými atomy, nemohou následovat za znakem dvojně či trojně vazby:

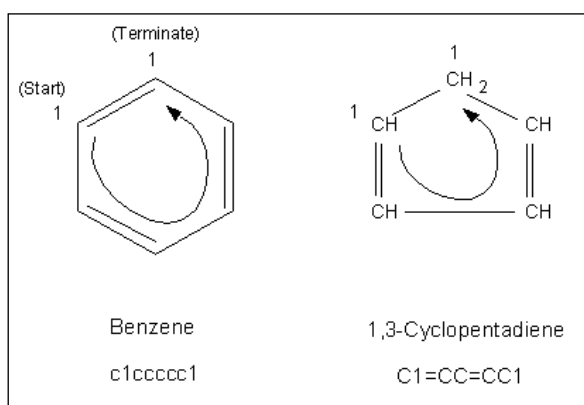
Kyselina pentanová je CCCCC(=O)O.

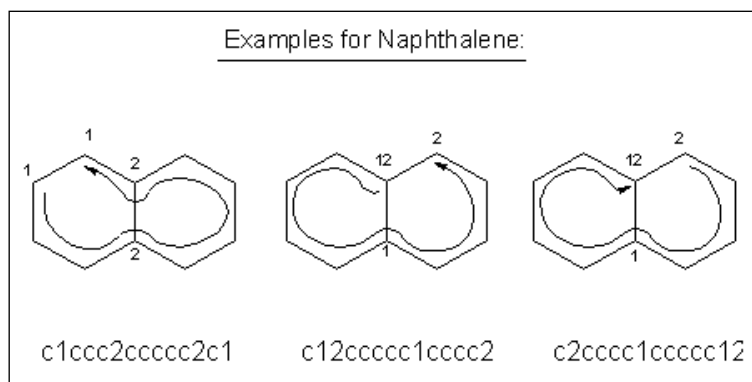
- b. Připouštějí se substituenty v rámci substituentů:

2-(1-methylethyl)butan je CC(C(C)C)CC.

7. V případě cyklických struktur se k označení počátečního a koncového atomu cyklu používají číslice od 1 do 9.

- a. V každém cyklu se k označení počátečního a koncového atomu používá stejné číslo. Počáteční a koncový atom musí být vzájemně vázány.
- b. Číslo se zapisuje bezprostředně za atomy, které označují počáteční a koncovou polohu.
- c. Počátečnímu a koncovému atomu mohou být přiřazena dvě po sobě následující čísla.





8. Nenavázané sloučeniny se označují jako samostatné struktury nebo ionty oddělené tečkou („.“). Sousedící atomy oddělené tečkou („.“) nejsou navzájem přímo vázány, např. Van der Waalsova vazba:

Aminopropen hydrochlorid je C=CC(N).HCl.

9. Izomerická konfigurace je specifikována lomítky „\“ a „/“. Tyto znaky udávají relativní směr mezi dvěma izomerickými vazbami. (cis = „/“ \“, trans = „/“ /“). Systém SMILES používá lokální chiralitu, což znamená, že chiralita musí být kompletně specifikovaná:

Cis-1,2-dibromethen je Br/C=C\Br.

Trans-1,2-dibromethen je Br/C=C/Br.

10. Enantiomery nebo chiralita jsou specifikovány znakem „@“. Znak „@“ udává, že následující sousedi chirálního atomu se uvádějí v protisměru hodinových ručiček. Pokud se použije znak „@@“, atomy se uvádějí ve směru hodinových ručiček. Chirální atom a „@“ se uvádějí v závorkách:

**2-chlor-2-hydroxypropanová kyselina se
specifikovanou chiralitou je C[C@](Cl)(O)C(=O)O.**

11. Izotopové specifikace se uvádějí tak, že se před značku atomu zapíše číslo, které se rovná příslušné celkové atomové hmotnosti. Atomovou hmotnost je možno specifikovat jen v závorkách:

Uhlík-13 je [13C] a kyslík-18 je [18O].

Pro stanovení zápisu SMILES lze použít několik nástrojů (generátory SMILES) (viz dodatek 1).

7 Informace o optické aktivitě

Optická aktivita je schopnost asymetrických látek otáčet orientaci roviny polarizovaného světla. Takové látky a jejich zrcadlové obrazy jsou známé jako enantiomery a mají jedno nebo více chirálních center. Ačkoli se navzájem liší svým geometrickým uspořádáním, enantiomery mají totožné chemické a fyzikální vlastnosti. Jelikož každý typ enantiomeru působí na polarizované světlo odlišně, pomocí optické aktivity lze identifikovat, jaký enantiomer je ve vzorku přítomen, a tím i určit čistotu látky. Magnituda rotace je vnitřní vlastností molekuly.

Enantiomery mají vždy opačnou rotaci: polarizují světlo ve stejné míře, ale v opačných směrech. Optická aktivita směsi enantiomerů proto naznačuje poměr mezi dvěma enantiomery. Optická aktivita směsi enantiomerů v poměru 50-50 se rovná nule.

Pozorovaná rotace závisí na koncentraci, délce vzorkové trubice, teplotě a vlnové délce světelného zdroje.

Optická aktivita je proto určujícím parametrem identifikace asymetrické látky; představuje jediný parametr, kterým lze odlišit látku od jejího zrcadlového obrazu. Z tohoto důvodu by se optická aktivita látky měla uvádět, je-li to možné.

Standard pro optickou aktivitu se nazývá specifická rotace. Specifická rotace je definována jako pozorované otáčení světla při hodnotě 5 896 angstromů, s délkou dráhy 1 dm a při koncentraci vzorku 1 g/ml. Specifická rotace se rovná podílu pozorované rotace a délky dráhy (dm) vynásobenému koncentrací (g/ml).

Optickou aktivitu lze měřit několika různými metodami. Mezi nejběžnější metody patří:

- optická rotace, při níž se otáčí rovina polarizovaného světelného paprsku procházejícího vzorkem,
- cirkulární dichroismus, při kterém se měří absorpce napravo a nalevo polarizovaného světla vzorkem.

Pokud látka otáčí světlo doprava (ve směru hodinových ručiček), nazývá se pravotočivou a označuje se znakem +. Pokud otáčí světlo doleva (proti směru hodinových ručiček), nazývá se levotočivou a označuje se znakem -.

8 Molekulová hmotnost nebo rozmezí molekulové hmotnosti

Molekulová hmotnost je hmotnost molekuly látky vyjádřená atomovými hmotnostními jednotkami (amu) nebo jako molární hmotnost (g/mol). Molekulovou hmotnost lze vypočítat z molekulového vzorce látky: je to součet atomových hmotností atomů tvořících molekulu. V případě molekul, jako jsou například některé proteiny nebo nedefinovatelné reakční směsi, u kterých není možné stanovit jednu molekulovou hmotnost, lze uvést rozmezí molekulové hmotnosti.

Ke stanovení molekulové hmotnosti látek lze použít několik metod:

- Ke stanovení molekulové hmotnosti plyných látek lze použít Avogadrův zákon, podle kterého za dané teploty a tlaku daný objem plynu obsahuje specifický počet molekul plynu.

$$PV = nRT = NkT$$

n = počet molů

R = univerzální plynová konstanta = 8,3145 J/mol K

N = počet molekul

k = Boltzmannova konstanta = $1,38066 \times 10^{-23}$ J/K = $8,617385 \times 10^{-5}$ eV/K

k = R/NA

NA = Avogadrova konstanta = $6,0221 \times 10^{23}$ /mol

- V případě kapalin a tuhých látek lze molekulovou hmotnost stanovit tak, že se určí jejich vliv na bod tání, bod varu, tlak par nebo osmotický tlak nějakého rozpouštědla.
- Hmotnostní spektrometrie, velmi přesná metoda měření.

- V případě molekul komplexních látek s vysokými molekulovými hmotnostmi, jako jsou například proteiny nebo viry, lze molekulovou hmotnost stanovit například měřením rychlosti sedimentace v laboratorní centrifuze nebo fotometrií rozptylu světla.
- Existuje několik nástrojů, pomocí nichž lze vypočítat molekulovou hmotnost na základě strukturního diagramu nebo molekulového vzorce látky (viz dodatek 1).

9 Složení látky

Pro každou látku se v souladu s pravidly a kritérii uvedenými v kapitole 4 pokynů oznamuje její složení jako kombinace hlavních složek, přídatných látek a nečistot.

Každá složka, přídatná látka nebo nečistota musí být řádně identifikována:

- názvem (názvem IUPAC nebo, není-li k dispozici, jiným mezinárodně uznávaným názvem),
- číslem CAS (pokud existuje),
- číslem ES (pokud existuje),
- veškerými dalšími dostupnými identifikátory.

Pro každou složku, skupinu složek, přídatnou látku nebo nečistotu by se měla uvést procentuální koncentrace, která je typická pro komerční šarže (pokud možno v hmotnostních nebo objemových jednotkách). Součet uvedených hodnot by se měl rovnat 100 %. Vždy by měly být uvedeny horní a dolní mezní hodnoty koncentrace, a sice jako rozsah v komerční látce.

10 Spektrální údaje

Spektrální údaje jsou potřebné k potvrzení struktury dané pro jednosložkovou látku nebo k potvrzení toho, že reakční směs není přípravkem. Pro spektra lze použít několik metod (ultrafialové spektrum, infračervené spektrum, spektrum nukleární magnetické rezonance a hmotnostní spektrum). Ne všechny metody jsou vhodné pro všechny typy látek. Tam, kde je to možné, budou pokyny obsahovat návod ohledně vhodných spekter, které se použijí pro různé typy látek (ECB, 2004; ECB, 2005).

V případě některých známých metod by se přímo na spektrogramu nebo v příloze měly uvést tyto informace:

Ultrafialové/viditelné (UV/VIS) spektrum

- identita látky
- rozpouštědlo a koncentrace
- rozsah
- poloha (a hodnoty epsilon) hlavních maxim
- vliv kyseliny
- vliv zásady

Infračervené (IR) spektrum

- identita látky
- médium
- rozsah

- výsledky (je třeba označit hlavní maxima důležitá pro identifikaci látky, například interpretaci specifické oblasti spektra zvané „fingerprint area“)

Spektrum spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR)

- identita látky
- jádro a frekvence
- rozpouštědlo
- pokud je to relevantní, tak i interní nebo externí odkazy
- výsledky (je třeba označit signály důležité pro identifikaci látky a signály odpovídající rozpouštědlu a nečistotám)
- v případě spekter ^1H NMR by měla být uvedena integrační křivka.
- intenzita slabých maxim NMR by měla být vertikálně zvýšena a komplexní části spektra by měly být rozšířeny.

Spektrum hmotnostní spektroskopie (MS)

- identita látky
- urychlující napětí
- metoda dávkování (přímé dávkování, prostřednictvím GS atd.)
- způsob ionizace (dopad elektronů, chemická ionizace, desorpce pole atd.)
- molekulární iont (M)
- fragmenty významné pro identifikaci látky
- hodnoty M/z nebo přiřazení pro identifikaci struktury důležitých maxim
- komplexní části spektra by měly být rozšířeny.

Spektrum hmotnostní spektroskopie pro rentgenovou difrakci (XRD)

- identita látky
- napětí
- proud
- zdroj rentgenového záření a veškeré bibliografické odkazy umožňující identifikaci krystalické fáze (krystalických fází) přítomné (přítomných) v látce.

V případě, že se metoda XRD používá k identifikaci a kvantifikaci krystalických nebo amorfních fází přítomných v látce, je třeba splnit přinejmenším tyto požadavky:

- popis použitých metod rafinace a interních norem
- vyjádření efektivní hodnoty, která odráží shodu mezi modelovaným/referenčním difrakčním obrazcem
- měřený vzorek a stupnice pro vyjádření efektivní hodnoty (např. 0–1 nebo 0–100)

Použit lze i jiné vědecky uznávané metody, pokud spektrální údaje potvrdí identifikaci látky, například vnitřní strukturu.

V zájmu pochopení nebo interpretace spekter se zpravidla požaduje podniknutí těchto kroků:

- popsat přípravu vzorku,
- zaznamenat významné vlnové délky nebo jiné vhodné údaje,
- poskytnout další informace, například spektra výchozích materiálů,
- uvést použité rozpouštědlo nebo další zásadní údaje, jaké jsou u některých metod uvedeny výše,
- poskytnout kopie (namísto originálů) s řádně vyznačenými poměry,
- poskytnout informace o použitých koncentracích látky,

- zajistit nejintenzivnější maxima příslušné látky v poměru 1:1.

11 Vysoce účinná kapalinová chromatografie, plynová chromatografie

Tam, kde je to vzhledem k typu látky vhodné, je třeba k potvrzení jejího složení poskytnout chromatogram. Vhodný chromatogram například potvrdí přítomnost nečistot, přídatných látek a složek v reakční směsi. Dvěma nejznámějšími metodami separace a identifikace směsí jsou plynová chromatografie (GC) a vysoce účinná kapalinová chromatografie (HPLC). Obě tyto metody jsou založeny na interakci mobilní fáze se stacionární fází, což má za následek oddělení složek směsi.

V případě chromatogramů GC/HPLC by se přímo na chromatogramu nebo v příloze měly uvádět tyto informace (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC (vysoce účinná kapalinová chromatografie)

- identita látky
- vlastnosti kolony, např. průměr, náplň, délka
- teplota, též teplotní rozmezí, pokud se používá
- složení mobilní fáze, též rozmezí, pokud se používá
- koncentrační rozmezí látky
- detekční metoda, např. UV/VIS
- výsledky (je třeba označit hlavní maxima důležitá pro identifikaci látky)

GC (plynová chromatografie)

- identita látky
- vlastnosti kolony, např. průměr, náplň, délka
- teplota, též teplotní rozmezí, pokud se používá
- teplota injektoru
- nosný plyn a tlak nosného plynu
- koncentrační rozmezí látky
- detekční metoda, např. MS
- identifikace maxim
- výsledky (je třeba označit maxima důležitá pro identifikaci látky)

12 Popis analytických metod

V příloze VI nařízení REACH se od žadatele o registraci vyžaduje, aby popsal analytické metody nebo uvedl bibliografické odkazy týkající se metod použitých k identifikaci látky a tam, kde je to vhodné, metod použitých k identifikaci nečistot a přídatných látek. Tyto informace musí být dostačující k tomu, aby bylo možné tyto metody zopakovat.

Dodatek III – Identifikace látky a společné předkládání údajů

Hlavní část těchto pokynů stanoví obecné zásady, jimiž se potenciální žadatelé o registraci musí řídit při identifikaci látek specifických pro jejich právní subjekt, které mají být zaregistrovány. Tento dodatek obsahuje praktické pokyny pro potenciální žadatele o registraci k tomu, jak uplatnit zásady identifikace látky při společném definování identity a rozsahu identity látky pro účely společné registrace v souladu se zásadou „jedna látka, jedna registrace“ (OSOR) nařízení REACH. Více informací o povinnostech týkajících se společného předkládání údajů a procesu sdílení údajů obecně naleznete v Pokynech pro sdílení údajů na adrese <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>. Rozumí se, že tytéž zásady identifikace látky uvedené v hlavních pokynech se uplatní podle typu látky na jednu identitu látky pro společnou registraci.

Ustanovení čl. 11 odst. 1 a čl. 19 odst. 1 nařízení REACH v úvodu skutečně stanoví požadavek na „společné předkládání údajů skupinou žadatelů o registraci“ Uvedená ustanovení konkrétněji vyžadují, že „[p]okud se zamýšlí, že látku bude ve Společenství vyrábět jeden nebo více výrobců nebo že bude dovážena jedním nebo více dovozci“, předloží informace týkající se vlastností látky a její klasifikace „nejprve jeden žadatel o registraci jednající se souhlasem ostatních srozuměných žadatelů o registraci (dále jen „hlavní žadatel o registraci“)“.

Prováděcí nařízení Komise (EU) 2016/9 o společném předkládání a sdílení údajů potvrzuje a sjednocuje uvedenou povinnost skupiny žadatelů o registraci látky totožné identity předkládat určité údaje společně. V praxi společné předkládání údajů vyžaduje, aby se dotčené strany dohodly na vymezení hranic a rozsahu identity látky. To se označuje jako profil identity látky nebo zkráceně SIP (z. angl. substance identity profile). SIP má vymezit hranice látky, u které se žadatelé o registraci dohodli předložit údaje společně. To se týká také žadatelů o registraci, kteří se rozhodli odstoupit od společného předložení určitých údajů.

Dohoda o rozsahu identity látky, na níž se registrace vztahuje, je proto nezbytným předpokladem pro společné předložení údajů. Transparentnost rozsahu této jedné identity látky a údajů, jichž se týká, je pro provádění stěžejní. Rozsah látky nebo SIP proto musí být jasně oznámen v dokumentaci hlavního žadatele o registraci jménem všech ostatních žadatelů, přičemž informace o složení oznamují všichni žadatelé o registraci samostatně.

Jednoduchý názorný příklad, jak určit profil identity látky pro chemické látky vyráběné v / dovážené do EU jednotlivými žadateli o registraci, naleznete na schématu na

Obrázek 2 níže. Ukazuje, jakým způsobem probíhá identifikace látky, která má být registrována, jak seskupit různá složení, vytvořit údaje a předložit je ve formátu IUCLID v registrační dokumentaci. Příklad se týká jednoduché přesně definované jednosložkové látky. U složitějších látek může vymezení SIP zahrnovat opakování kroků 3 až 5 na obrázku.

Během diskusí potenciálních žadatelů o registraci může být dokumentace SIP např. v podobě dokumentu aplikace Word nebo Excel, do kterého se zaznamenají příslušné údaje, na nichž se žadatelé dohodnou, a zpřístupní všem členům a potenciálním členům. Některá odvětvová sdružení nabízejí hotové vzory dokumentace SIP, které mnoho

žadatelů o registraci využívá (např. vzor sdružení Cefic³⁴). Jiná mají příslušné informace shrnuté v dokumentu aplikace Word nebo na internetových stránkách konsorcia zřízeného za účelem přípravy registrace dotčené látky.

2. Vymezení identity a rozsahu látky v souladu s údaji předkládanými za účelem registrace

Kroky, podle nichž může skupina potenciálních žadatelů o registraci postupovat při vymezení identity látky v souladu s údaji, které předkládají společně, znázorňuje schéma na

Obrázek 2 (kroky 1 až 4) pro jednoduché přesně definované látky.

Každý jednotlivý potenciální žadatel o registraci určí své povinnosti v souvislosti s látkou, kterou vyrábí/dováží, podle definice látky v čl. 3 odst. 1 a na základě zásad pro identifikaci látky uvedených v hlavní části těchto pokynů (kroky 1 a 2 na

Obrázek 2).

Každý potenciální žadatel o registraci si pak může zkontrolovat, zda ostatní potenciální žadatelé o registraci dospěli ke stejnému „názvu a dalším identifikátorům“ (krok 3). Od tohoto výchozího bodu mohou potenciální žadatelé o registraci společně uplatnit zásady hlavní části těchto pokynů a vymežit hranice identity látky v souladu s údaji, které společně předkládají, tj. profil identity látky (krok 4).

Uvedený SIP obecně popisuje rozsah látky z hlediska informací o jejím složení (včetně jakýchkoli dalších relevantních parametrů, jako je morfologie, např. fyzikální forma, tvar), názvu látky a dalších identifikátorů, jichž se týká klasifikace a společně předkládané údaje o nebezpečnosti. Vymezení SIP by nemělo být prováděno příliš konzervativním způsobem, aby se zamezilo vyloučení konkurence ze společného předkládání údajů.

Uvedený SIP stanoví nutné propojení mezi identitou látky a údaji o nebezpečnosti, které mají být společně předloženy. Je-li stanoveno dostatečně brzy, může usnadnit fázi vytváření/shromažďování údajů během procesu plnění povinnosti registrace (kterou stanoví Pokyny k požadavkům na informace a posuzování chemické bezpečnosti; viz krok 5 na

Obrázek 2 níže), aby bylo zajištěno, že se vytvořené nebo shromážděné údaje týkají identity látky v plném rozsahu.

Jak uvádí oddíly 4.2.3 a 4.3 hlavní části pokynů, u složitějších látek potenciální žadatelé o registraci zpravidla v krocích 1–3 používají doplňující parametry nebo deskriptory u informací o složení (např. popis zdroje/procesu) a ty, na kterých se dohodnou, mohou být zahrnuty do SIP (krok 4). V některých případech může být propojení mezi hranicí identity látky a společně předkládanými údaji o nebezpečnosti jasnější pouze tehdy, jakmile jsou shromážděny všechny dostupné údaje o nebezpečnosti nebo jejich část. Kroky 3–5 může být potřeba opakovat v závislosti na složitosti identity látky a údajů shromážděných v kroku 5, např. když některá složení zahrnují složky, které vedou ke klasifikaci a označování nebo posouzení PBT. SIP může zahrnovat více profilů složení, aby byly hranice identity látky odpovídajícím způsobem popsány.

³⁴ SIP byl původně popsán v „Pokynech pro hlavní žadatele o registraci“ sdružení Cefic, které naleznete na adrese <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Příklady profilů SIP vytvořených žadatelí o registraci pomocí tohoto vzoru jsou k dispozici např. na internetových stránkách střediska REACH <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

SIP musí obsahovat obecné informace, které umožňují stanovit hranice identity látky v souladu se společně předkládanými údaji:

- název látky,
- další identifikátory (CAS, ES, molekulové a strukturní vzorce, případně popis), které uvádějí všichni žadatelé ze skupiny žadatelů o registraci dotčené identity látky,
- informace o složení:
 - identity složek relevantních pro identifikaci látky a příslušná rozmezí koncentrace,
 - obecný seznam identit stabilizátorů relevantních pro identifikaci látky (případně včetně příslušných rozmezí koncentrace),
 - obecný seznam doplňujících parametrů týkajících se typu látky (např. deskriptory zdroje/procesu u některých látek UVCB).

Je důležité, aby parametry vymezující hranice identity látky zahrnuté ve společně předkládaných údajích schválili všichni žadatelé předkládající společnou registraci a aby byly podrobně zdokumentovány v SIP. SIP může být též potřeba upravit či rozšířit na základě žádosti případného nového potenciálního žadatele o registraci, pokud souhlasí s tím, že všechny společně předložené údaje nebo jejich část jsou relevantní také pro látku, kterou vyrábí či dováží

SIP nesmí vést ke sdílení důvěrných obchodních informací mezi žadateli o registraci nebo zpřístupnění takových informací třetím stranám na základě společně předložených údajů. V případě, kdy je potřeba, aby žadatelé o registraci společně předkládající údaje sdíleli potenciálně důvěrné obchodní informace, aby mohli SIP jasně definovat, mohou zvážit použití správce, jak stanoví Pokyny pro sdílení údajů.

3. Praktické pokyny k dokumentaci profilu identity látky

Obecné zásady identifikace látky týkající se přesně definovaných látek a látek UVCB stanoví hlavní pokyny. Níže naleznete několik praktických pokynů, jak uvedené zásady uplatňovat kolektivně. Hlavní část pokynů stanoví, že je možné se od obecných zásad odchýlit. Takové odchylky však vyžadují, aby žadatelé o registraci dokázali doložit nutné pojení mezi identitou látky a společně předkládanými údaji o nebezpečnosti.

3.1 Přesně definované látky

U přesně definované látky se při definování hlavní složky či složek a jejich rozmezí koncentrace a nečistot použije zásada $\geq 80\%$ hmot. v případě identifikace jednosložkové látky a $< 80\%$, $\geq 10\%$ v případě identifikace vícesložkové látky. To platí pro každého jednotlivého žadatele o registraci a pro všechny členy skupiny žadatelů o registraci dohromady při určování SIP. Je potřeba oznámit zejména profily nečistot dohodnuté v SIP. Pokud SIP zahrnuje specifické nečistoty, které by ovlivnily klasifikaci a označování nebo posouzení PBT, měli by je žadatelé o registraci, jichž se uvedené nečistoty týkají, zohlednit ve fázi shromažďování údajů (krok 5). Příslušné informace v souladu s přílohami VII–XI mohou být předloženy společně nebo samostatně v souladu s čl. 11 odst. 3 nařízení REACH (tzv. možnost odstoupení od společného předložení). Hodnoty koncentrace, které mají být oznámeny, by měly zohledňovat rozmezí koncentrace v celém společném předložení.

V případě látek, u nichž jsou zapotřebí doplňující parametry, aby bylo možné identifikaci látky jednohlasně zapsat, musí každý žadatel o registraci dodržovat zásady stanovené v kapitole 4.2.3 hlavní části těchto pokynů. Nutno zvážit, zda by proměnlivost těchto parametrů případně vyžadovala změnu klasifikace nebo společně předkládaných údajů

o nebezpečnosti. Podobné úvahy je možné uplatnit pro účely vymezení SIP v souvislosti se společným předkládáním údajů. Do profilu identity látky může být například potřeba zahrnout parametry (např. fyzikální formu nebo morfologické parametry jako pórovitost, velikost a tvar částic), které mohou mít vliv na vlastnosti relevantní pro stanovení profilu nebezpečnosti (např. rozpustnost, reaktivita, inhalační toxicita atd.). V takovém případě je potřeba obecná rozmezí těchto parametrů zahrnutých v SIP poskytnout transparentně (např. rozmezí velikosti částic platné pro všechny žadatele o registraci a seznam jejich tvarů a seznam chemických vlastností povrchu). Tím se zajistí, že budou společně předloženy úplné údaje o nebezpečnosti v souvislosti se SIP.

Podobně rozdíly v krystalické fázi anorganických chemických látek mohou vést k rozdílným úvahám o profilech nebezpečnosti specifických pro tyto fáze (např. křemen, kristobalit, amorfní oxid křemičitý). Pokud jde o možné rozdíly ve vlastnostech těchto různých fází, potenciální žadatelé o registraci těchto látek musí zvážit, zda předloží jednu společnou registraci zahrnující všechny fáze, včetně údajů o nebezpečnosti pro jednotlivé fáze, nebo zda předloží různé společné registrace pro jednotlivé fáze (tj. různé identity látky). V každém případě musí být zahrnuté fáze uvedené v SIP a příslušné údaje podle příloh VII–XI musí zahrnovat všechny fáze, které jsou součástí registrace, aby bylo zajištěno, že údaje zahrnují celý SIP.

Nutno poznamenat, že nečistota a profily nebezpečnosti složení se mohou lišit a tyto rozdíly nemusejí nutně znamenat, že uvedená složení nelze zaregistrovat ve stejné registraci.

3.2 Látky UVCB

U látek UVCB může být identifikace náročnější, a proto při schvalování identity látky pro společné předložení velmi pomůže transparentní dokumentace. Každý potenciální žadatel o registraci by měl individuálně zohlednit rady uvedené v hlavní části těchto pokynů a potom tytéž zásady aplikovat kolektivně. Sloučení rozmezí koncentrace do SIP by mohlo vést k profilu s velmi velkými rozmezími koncentrace, případně až do té míry, že již nelze hovořit o jedné látce.

Jak uvádí hlavní část pokynů, základem pro identifikaci některých látek UVCB je zdroj a proces použitý při jejich výrobě spíše než přímo identity a rozmezí koncentrace jejich složek. V takových případech se použijí jiné deskriptory, které slouží jako zástupné ukazatele pro identity složek a jejich příslušná rozmezí koncentrace. Potenciální žadatelé o registraci mohou popsat výrobní proces z hlediska zdroje a procesu v rozsahu nutném pro identifikaci látky. Popis může obsahovat jakékoli doplňující parametry / charakteristické vlastnosti, které jsou podle žadatelů o registraci relevantní pro identitu látky (viz například Tabulka 5 hlavní části pokynů). Pro účely společné registrace se deskriptory sdílejí výhradně tak, jak je potřeba k schválení rozsahu identity látky UVCB pro registraci. Potenciální žadatelé o registraci mohou postupovat podle zásad uvedených v hlavní části pokynů jak individuálně, tak kolektivně. V SIP se tak uvedou obecné informace o zdroji a procesních parametrech tak, aby byla v plném rozsahu zahrnuta složení jednotlivých žadatelů o registraci. To schematicky znázorňuje Obrázek 3.

U látek identifikovaných na základě zdroje a procesu by, jak uvádí hlavní část pokynů, jakákoli významná změna zdroje nebo procesu pravděpodobně vedla k jiné identitě látky, která by měla být registrována zvlášť. Odchytky od této zásady by znamenaly, že žadatelé o registraci mohou prokázat, že každá kombinace proces/zdroj má za následek složení, která lze zahrnout do téže společné registrace. V SIP lze zohlednit drobné změny zdrojových materiálů a procesu nebo podmínek výrobního procesu. Žadatelé o registraci by se měli shodnout na tom, že výsledkem každé kombinace proces/zdroj jsou složení, která jsou podobná do té míry, že je lze zahrnout pod jednu identitu látky, a dbát na to,

aby údaje o nebezpečnosti odpovídaly všem variantám v SIP. Konkrétněji musejí být žadatelé o registraci schopni odůvodnit, že společně předložený soubor údajů o nebezpečnosti je relevantní pro všechna tato složení nebo je v příslušných případech doplněn informacemi předloženými zvláště pro konkrétní složení v souladu s čl. 11 odst. 3 nařízení REACH (odstoupení od společného předložení).

Aby byla prokázána relevantnost údajů uvedených pro každou kombinaci proces/zdroj, musejí být tyto kombinace transparentně zdokumentovány v SIP, aby byla doložena kritéria pro zahrnutí/vyloučení uplatňovaná pro současné a budoucí společné žadatele o registraci.

U dalších typů látek UVCB (viz kapitola 4.3.2 hlavní části pokynů) mohou potenciální žadatelé o registraci jako relevantní použít kombinaci deskriptorů složení a doplňkových deskriptorů. Například u některých oleochemikálií je složení proměnlivé vlivem variability rozdělení délky alkylového řetězce složek. Rozdělení délky alkylového řetězce může být při identifikaci použito jako doplňkový deskriptor. Přístup, který uplatňuje SIEF, je potřeba v SIP transparentně zdokumentovat.

3.3 profil identity látky

Všichni žadatelé o registraci předkládající údaje společně se musejí shodnout na nezbytných parametrech pro identifikaci látky a transparentně je zdokumentovat v odpovídajícím SIP. Společné odchylky či výjimky z běžných zásad týkajících se identity látky musejí být transparentně zdokumentovány. Jelikož SIP dokumentuje kritéria pro začlenění/vyloučení, SIEF musí zajistit, aby uplatňovaná kritéria byla transparentní a aby příslušné shromážděné/vytvořené údaje podle příloh VII–XI prokazatelně zahrnovaly všechny dohodnuté profily složení.

Pokud potenciální žadatelé o registraci do svého profilu identity individuálně zahrnou stabilizační přídatné látky v souvislosti s čl. 3 odst. 1, musí být jejich identity a rozmezí koncentrace dohodnuty a transparentně uvedeny v SIP.

Ve fázi shromažďování údajů bude potřeba zvážit relevantnost zkušebních materiálů používaných pro vytvoření/shromáždění údajů za účelem splnění požadavků na informace stanovených v přílohách VII–XI. Odůvodnění závěrů týkajících se jejich reprezentativnosti pro složení zahrnutá v SIP bude nutno zdokumentovat a uvést v technické dokumentaci. To bude relevantní zejména u identit složitých látek, které zahrnují široké profily složení.

Potenciální žadatelé o registraci mohou během shromažďování údajů dospět k závěru, že jejich SIP je příliš široký a není vhodný pro účely společného předložení údajů o nebezpečnosti, které jsou reprezentativní pro dotčenou identitu látky. V takovém případě se mohou potenciální žadatelé o registraci rozhodnout rozdělit SIEF tak, aby byly dvě či více látek posuzovány samostatně³⁵. Každá látka by pak měla vlastní SIP a vlastní společné předložení údajů o nebezpečnosti, které musejí být reprezentativní pro identitu dané látky. Důvody, proč určité údaje o nebezpečnosti nebyly reprezentativní pro určité parametry identity látky, je potřeba transparentně zdokumentovat v SIP u každé jednotlivé registrace. Příslušní potenciální žadatelé o registraci mohou v této fázi také

³⁵ Úvahy o úloze EINECS při určování identity látky v souladu s nařízením REACH jsou k dispozici v dokumentu příslušných orgánů pro nařízení REACH a CLP schváleném na 4. zasedání příslušných orgánů pro nařízení REACH a CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 „Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)“ [Identita látky a vytvoření fóra SIEF (úloha seznamu EINECS)].

dospět k závěru, že profily složení je potřeba zpřesnit na základě složek nebo nečistot vedoucích ke klasifikaci a označování nebo posouzení PBT.

Potenciální žadatelé o registraci, kteří se chtějí připojit k jiným potenciálním žadatelům o registraci, kteří si již mezi sebou schválili SIP, ale ještě nepodali žádost o registraci, musejí zvážit, zda informace o jejich identitě látky spadají do rámce SIP. Pokud ne, musejí s potenciálními žadateli o registraci prodiskutovat a dohodnout, zda je potřeba buď rozšířit rozsah profilu, aby bylo možné zahrnout nového člena, nebo se shodnout na tom, že je mimo rozsah.

SIP bude potřeba změnit v případech, kdy látka, kterou chce potenciální žadatel o registraci zaregistrovat, má specifické parametry identity látky, které mohou změnit reprezentativnost společně předkládaných údajů o nebezpečnosti, a tudíž vyžadují specifické odůvodnění (např. specifická nečistota, jiný poměr složení, jiná fáze, jiná velikost částic atd.). V zájmu transparentnosti musí být tento parametr specifikován v SIP.

V jednotlivých případech se mohou potenciální a stávající žadatelé o registraci dohodnout, že společně předložené údaje o nebezpečnosti jsou zcela nereprezentativní pro látku potenciálního žadatele o registraci kvůli odlišným parametrům identity látky, které nespádají do dohodnutého rámce SIP. V takovém případě potenciální žadatel o registraci předloží samostatnou registraci buď společně s dalšími žadateli o registraci, jejichž identita látky tento parametr obsahuje, nebo individuálně, pokud nejsou další žadatelé o registraci se stejnou identitou látky.

4. Uvedení profilu identity látky v registrační dokumentaci

Když potenciální žadatelé o registraci shromáždí/vytvoří všechny údaje týkající se látky, které požadují přílohy VII–XI, (tj. krok 5 na

Obrázek 2), je balíček údajů připravený k tomu, aby mohl být ve formátu IUCLID zahrnut do dokumentace a předložen agentuře (tj. krok 6 na

Obrázek 2) K oznámení profilu SIP ve formátu IUCLID se uvede název a další identifikátory, informace o složení a další příslušné parametry v oddílech 1.1 a 1.2 nástroje IUCLID.

| profil identity látky | Oznámený v nástroji IUCLID |
|---|--|
| Název a jiné identifikátory | Oddíl 1.1 všech dokumentací |
| Informace o složení a další příslušné parametry | Oddíl 1.2 dokumentace hlavního žadatele o registraci |

Název SIP a další identifikátory se oznámí v oddílu 1.1 všech dokumentací. Hlavní žadatel o registraci oznámí informace o složení a další příslušné parametry SIP v oddílu 1.2 své dokumentace v podobě „rozmezí složení látky“³⁶. Hlavní žadatel o registraci musí též předložit všechny příslušné údaje podle příloh VII–XI v oddílech 4–14 (neexistuje-li odůvodněné odstoupení od splnění jednoho či více požadavků na informace) jménem všech žadatelů o registraci.

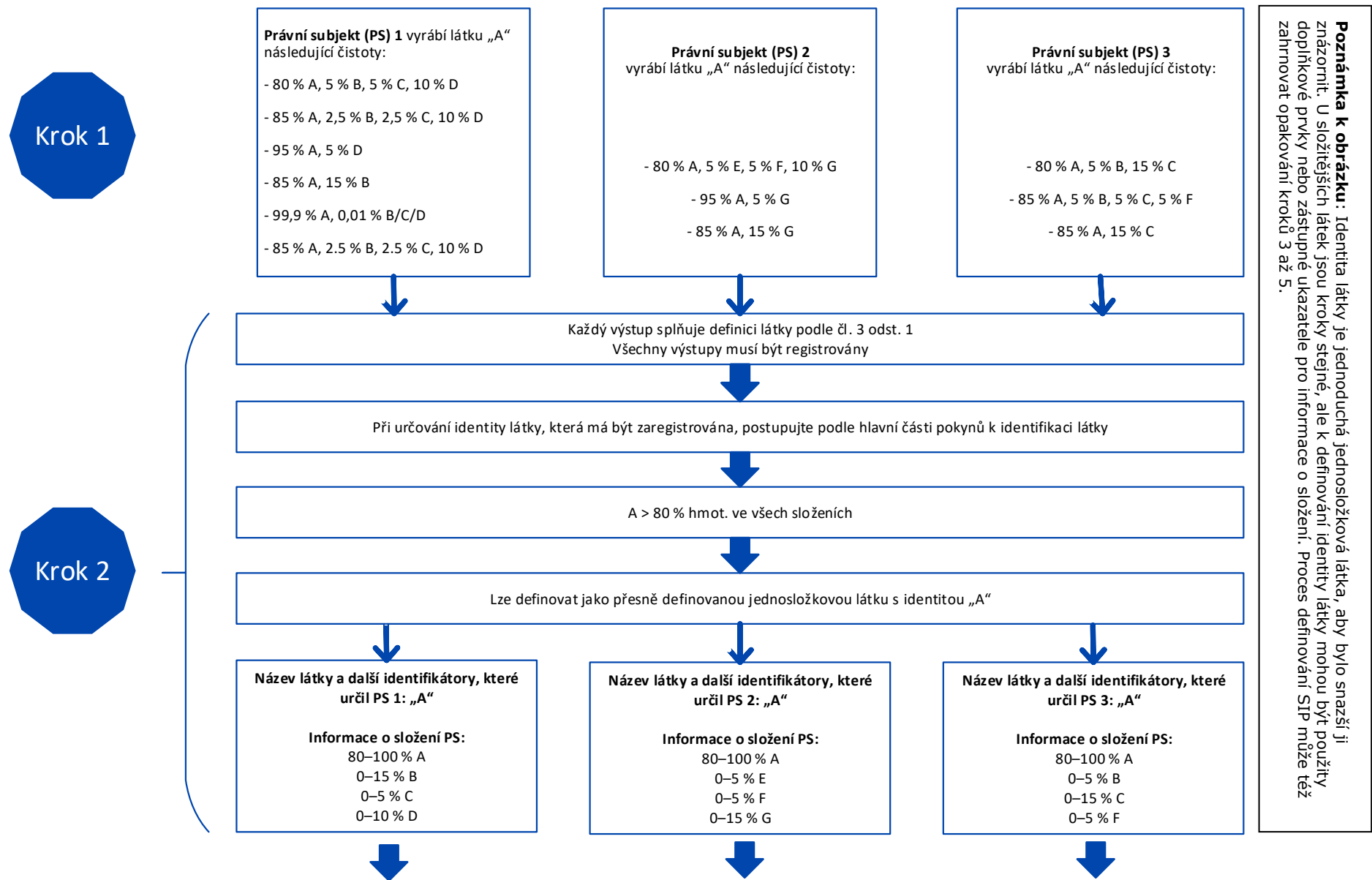
³⁶ Pokyny k zadání „rozmezí složení látky“ naleznete v příručce „Jak připravit dokumentaci pro registraci a oznamování PPORD“, která je k dispozici na adrese <http://echa.europa.eu/manuals>.

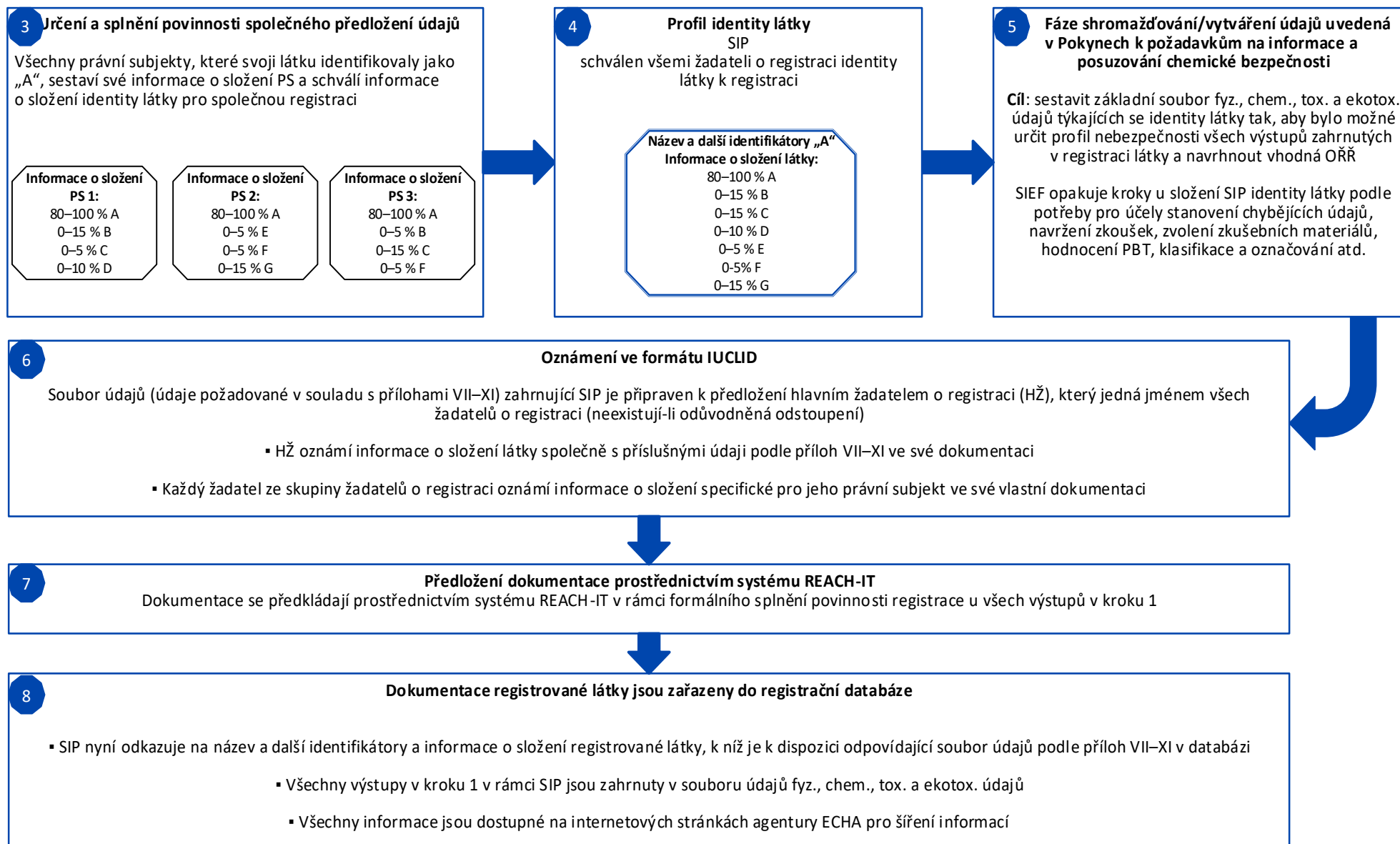
Každý žadatel o registraci (včetně hlavního žadatele) oznámí informace o složení látky, kterou vyrábí nebo dováží, za svůj právní subjekt v oddílu 1.2 své vlastní dokumentace. To znamená, že hlavní žadatel o registraci v oddílu 1.2 své dokumentace oznámí jak informace o složení SIP, tak informace o složení za svůj právní subjekt, zatímco všichni ostatní žadatelé oznámí své specifické informace o složení. Každá standardní registrace musí též obsahovat příslušné analytické informace v oddílu 1.4 nástroje IUCLID.

Každý žadatel o registraci by měl prokázat, že informace o složení látky, kterou vyrábí nebo dováží, jsou v SIP uvedeny jako v „rozmezí složení“ a zahrnuty v údajích podle příloh VII–XI předkládaných v dokumentaci hlavního žadatele o registraci (neexistují-li odůvodněná odstupení).

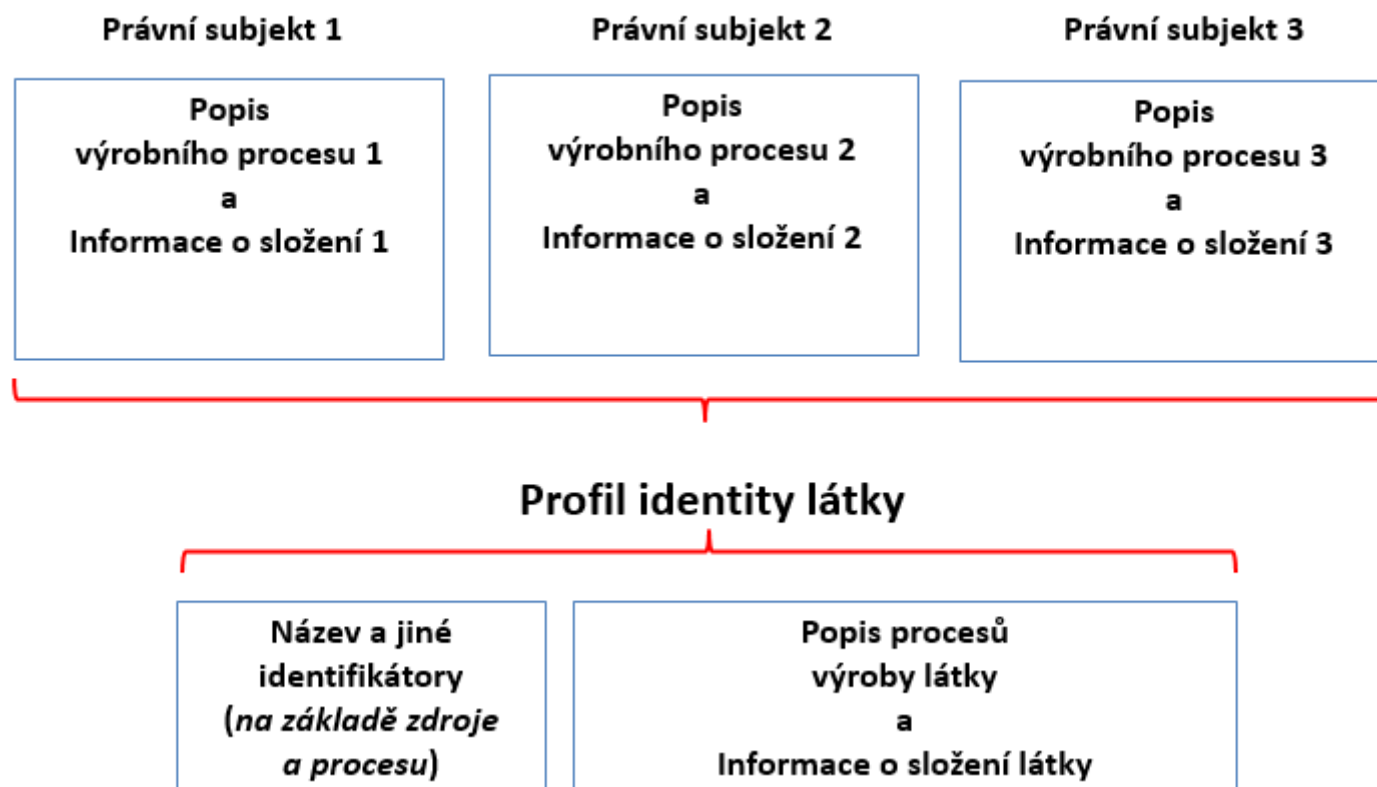
Technické pokyny týkající se způsobu oznamování informací o složení ve formátu IUCLID jsou k dispozici v příručkách k nástroji IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

Obrázek 2 (na následující stránce): Schematický přehled kroků potenciálních žadatelů o registraci od určení registrační povinnosti (1) po definování SIP pro jednu identitu látky (4) a předložení registrace při formálním splnění povinnosti registrovat jejich látky (8).





Obrázek 3: Schematické znázornění definování SIP (krok 4 na obrázku 2) pro látku typu UVCB identifikovanou na základě deskriptorů zdroje a procesu z popisů zdroje a procesu individuálního právního subjektu.



EVROPSKÁ AGENTURA PRO CHEMICKÉ LÁTKY
P. O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI, FINSKO
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://ECHA.EUROPA.EU)