

SMJERNICE

Smjernice za identifikaciju i nazive tvari prema uredbama REACH i CLP

Prosinac 2023.
Verzija 3.0.



PRAVNA NAPOMENA

Cilj je ovog dokumenta korisnicima pomoći u ispunjavanju njihovih obveza koje proizlaze iz uredbi REACH i CLP. No, korisnike treba podsjetiti da su tekstovi uredbi REACH i CLP jedine izvorne pravne reference te da informacije sadržane u ovom dokumentu ne predstavljaju pravne savjete. Korisnik se koristi ovim informacijama isključivo na vlastitu odgovornost. Europska agencija za kemikalije ne prihvaća nikakvu odgovornost za korištenje informacija sadržanih u ovom dokumentu.

Smjernice za identifikaciju i nazive tvari prema uredbama REACH i CLP

Referenca: ECHA-23-H-07-HR
Kataloški broj: ED-09-23-444-HR-N
ISBN: 978-92-9468-314-4
DOI: 10.2823/66750
Datum objave: Prosinac 2023.
Jezik: HR

© Europska agencija za kemikalije, 2023.
Naslovnica © Europska agencija za kemikalije

Ako imate pitanja ili primjedbi u vezi s ovim dokumentom, pošaljite ih (uz naznaku referentnog broja dokumenta i datuma objave) putem obrasca za upite. Obrazac za upite dostupan je na ECHA-inoj internetskoj stranici za kontakt:

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

Europska agencija za kemikalije

Poštanska adresa: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finland
Adresa ureda: Telakkakatu 6, 00150, Helsinki, Finland

PREDGOVOR

U ovom je dokumentu opisano kako odrediti naziv i identificirati tvar u skladu s uredbama REACH i CLP. Dio je niza smjernica kojima se svim dionicima nastoji pomoći u pripremi za ispunjavanje njihovih obveza u skladu s uredbama REACH i CLP. Te detaljne smjernice sadrže informacije za provedbu različitih ključnih postupaka u skladu s uredbama REACH i CLP te za neke posebne znanstvene i/ili tehničke metode kojima se industrijski sektor ili nadležna tijela moraju služiti u skladu s uredbama REACH i CLP.

Smjernice su sastavljene i o njima se raspravljalo u sklopu projekata provedbe Uredbe REACH (RIP-ovi), pod vodstvom službi Europske komisije, i uz sudjelovanje dionika, odnosno država članica, industrije i nevladinih organizacija. Ove su Smjernice dostupne na mrežnom mjestu Europske agencije za kemikalije (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Daljnje smjernice bit će objavljene na tom mrežnom mjestu čim se dovrše ili ažuriraju.

POVIJEST DOKUMENTA

Verzija	Primjedba	Datum
Verzija 1.	Prvo izdanje	lipanj 2007.
Verzija 1.1.	<p>Ispravak:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Dodati uputu na Uredbu CLP (Uredba (EZ) br. 1272/2008 od 16. prosinca 2008.) u naslov dokumenta i u naslove poglavlja. - Dodati tekst za razjašnjavanje područja primjene Smjernica. Obrisati višak teksta u dokumentu. - Uključiti uputu na Uredbu CLP na sva prikladna mjesta u tekstu. - U cijelom dokumentu zamijeniti izraz „TGD” izrazom „smjernice”. - U cijelom dokumentu zamijeniti izraz „pripravak” izrazom „smjesa”. - U cijelom dokumentu zamijeniti izraz „stavka” u „odjeljak”. - U cijelom dokumentu zamijeniti izraz „predregistracija” izrazom „(kasna) predregistracija”. - Unijeti pokrate AAS i CLP, a obrisati pokrate RIP i TGD. - Izmijeniti opise legure, EC inventara i programa IUCLID. Uvesti definicije broja EC, urudžbenog broja, smjese i prijavljene tvari. Obrisati definiciju „pripravka”. - Revidirati odjeljak 3.2 kako bi se razjasnio sadržaj. - Revidirati odjeljak 3.3 kako bi se razjasnio sadržaj u pogledu obveza prema Uredbi CLP. - U odjeljku 4.2.2.1. izmijeniti način predstavljanja sastojaka iz postotka koncentracije u abecedni redoslijed, tako da se relativni sastav ne vidi iz redoslijeda na popisu. - U odjeljku 4.2.3.1. zamijeniti izraz „rešetka” izrazom „kristal”. - Revidirati odjeljak 4.3.1.2.3. kako bi se razjasnio sadržaj. - U odjeljak 5. upute na Priručnik za izvješćivanje o tvarima uključiti dio 18. – „Kako opisati identitet tvari u programu IUCLID 5 za registraciju u skladu s Uredbom REACH”. 	Studen 2011. (samo na engleskom)

	<ul style="list-style-type: none">- Revidirati odjeljak 5. kako bi se razjasnio sadržaj.- U odjeljku 6. zamijeniti izraz „predregistracija“ izrazom „(kasna) predregistracija“.- U Dodatku 1. ažurirati poveznice koje ne funkcioniraju.- Obrisati odjeljak 4.3. Dodatka 2. jer se isti sadržaj može naći na odgovarajućem mrežnom mjestu.	
Verzija 1.2.	<p>Ispravak Definicija „tvari u postupnom uvođenju“ usklađena je s definicijom u Uredbi (EZ) br. 1907/2006 koju je uvela Uredba Vijeća (EZ) br. 1354/2007 i Ispravkom, Službeni list Europske unije br. 36. od 5. veljače 2009. godine, stranica 84. (1907/2006). Promjene u verzijama 1.1. i 1.2. objedinjene su u jednu verziju 1.2. i prevedene s engleskog na ostale jezike.</p>	Ožujak 2012.
Verzija 1.3.	<p>Ispravak U poglavlju 7.6. dodane su dvije strukturne formule koje su nedostajale.</p>	Veljača 2014.
Verzija 1.4.	<p>Ispravak:</p> <ul style="list-style-type: none">- Preoblikovati dokument u skladu s postojećim korporativnim identitetom.- Obrisati poglavlje 8. koje navodi tehničke upute na temelju zastarjele verzije programa IUCLID.- U odjeljku 7.5. ispraviti opis kristobalita i kvarca te obrisati upućivanje na Direktivu 2000/30/EZ.- Obrisati upućivanje na poglavlje 8. i na priručnike za dostavu podataka te dodati uputu na nove priručnike ECHA-e.- Obrisati Dodatak III. i premjestiti podatke u tablicu povijesti dokumenta.- Ispraviti poveznice na mrežna mjesta koja ne funkcioniraju te ispraviti uredničke pogreške.	Lipanj 2016.
Verzija 2.0.	<p>Djelomično ažuriranje ograničeno je na:</p> <ul style="list-style-type: none">- Dodavanje novog Dodatka III. s opisom koncepta profila identiteta tvari.	Prosinac 2016.

	<ul style="list-style-type: none">- Dodavanje novog teksta u poglavlju 1. kojim se uvodi Dodatak III.- Ispravak tipfelera i uredničkih pogrešaka.	
Verzija 2.1.	Ispravak kojim se popravljaju tipografske pogreške u tekstu i greške u informacijama o sastavu u primjerima na slici 2. Dodatka III.	Svibanj 2017.
Verzija 3.0.	Ažuriranje: <ul style="list-style-type: none">- Uskladiti tekst s izmjenama uvedenima Uredbom Komisije (EU) 2022/477 od 24. ožujka 2022.- Obrisati upućivanje na (kasnu) predregistraciju- Ispraviti tipfelere i uredničke pogreške.- Dodati poveznice na ECHA-ine stranice za podršku te pitanja i odgovore.- Obrisati Dodatak III. točku 5. o prijelazu s baze podataka IUCLID 5 na IUCLID 6	Prosinac 2023.

Sadržaj

1. OPĆENITO	9
1.1. Ciljevi.....	9
1.2. Područje primjene.....	10
1.3. Struktura Smjernica.....	10
2. DEFINICIJE I POKRATE	12
2.1. Pokrate	12
2.2. Definicije	14
3. OKVIR ZA IDENTIFIKACIJU TVARI U UREDBAMA REACH I CLP	17
3.1. Definicija tvari.....	17
3.2. Brojčane identifikacijske oznake	17
3.2.1. Inventar EC.....	17
3.2.2. Uredžbeni brojevi.....	18
3.3. Zahtjevi za identifikaciju tvari u uredbama REACH i CLP	19
4. SMJERNICE ZA IDENTIFIKACIJU I NAZIVE TVARI U UREDBAMA REACH I CLP	22
4.1. Uvod	22
4.2. Tvari dobro definiranog sastava	28
4.2.1. Tvari od jednog sastojka	29
4.2.2. Tvari od više sastojaka	32
4.2.3. Tvari definiranog kemijskog sastava i ostale glavne identifikacijske oznake	35
4.3. Tvari UVCB	36
4.3.1. Opće smjernice za tvari UVCB.....	37
4.3.2. Specifične vrste tvari UVCB	45
5. KRITERIJI ZA PROVJERU ISTOVJETNOSTI TVARI	53
6. IDENTITET TVARI U OKVIRU PROVJERE	59
7. PRIMJERI	60
7.1. Dietil peroksidikarbonat	60
7.2. ZOLIMIDIN	60
7.3. Smjesa izomera.....	61
7.4. Miris AH.....	65
7.5. Minerali	71
7.6. Eterično ulje lavandina grosso	74
7.7. Ulje krizanteme i iz njega izolirani izomeri	80
7.8. fenol, izopropiliran, fosfat	83
7.9. kvaterni amonijevi spojevi	85

7.10. Naftne tvari.....	89
7.10.1. Miješanje benzina (C4-C12).....	89
7.10.2. Plinska ulja (nafta)	90
7.11. Enzimi	91
7.11.1. Suptilizin.....	91
7.11.2. α -amilaza.....	93
DODATAK I.- DODATNI MATERIJALI.....	95
DODATAK II. – TEHNIČKE UPUTE ZA IDENTIFIKACIJU TVARI PREMA POJEDINAČNIM PARAMETRIMA	99
DODATAK III. – IDENTIFIKACIJA TVARI I ZAJEDNIČKA DOSTAVA PODATAKA	115

Popis tablica

Tablica 1.: Pokrate	12
Tablica 2.: Definicije	14
Tablica 3.: Parametri za identifikaciju tvari iz odjeljka 2. Priloga VI. Uredbi REACH	20
Tablica 4: Grupiranje glavnih identifikacijskih oznaka za primjere koji predstavljaju različite vrste dobro definiranih sličnih tvari.....	23
Tablica 5.: Grupiranje glavnih identifikacijskih oznaka za primjere koji predstavljaju različite vrste tvari UVCB	24

Popis slika

Slika 1: Upućivanje na poglavlja i dodatke ovoga dokumenta koji se odnose na odgovarajuće smjernice ovisno o tipu tvari.....	27
Slika 2 (sljedeća stranica): Shematski pregled koraka koje potencijalni podnositelji registracije trebaju poduzeti, od utvrđivanja svojih obveza registracije (1.) do definiranja profila identiteta tvari za utvrđivanje jedinstvenog identiteta tvari (4.) i konačnog podnošenja registracija u okviru službene obveze registracije tvari (8.).	121
Slika 3: Ilustrativni shematski prikaz definiranja profila identiteta tvari (4. korak na slici 2.) za tvar UVCB identificiranu na temelju opisnika izvora i postupka iz opisa izvora i postupka pojedinačnog pravnog subjekta.	124

1. Općenito

Uredbom REACH (Uredba (EZ) br. 1907/2006) uspostavljen je sustav registracije, evaluacije, autorizacije i ograničavanja kemikalija te je osnovana Europska agencija za kemikalije (ECHA).¹

Uredba CLP (Uredba (EZ) br. 1272/2008) nova je europska uredba o razvrstavanju, označavanju i pakiranju kemijskih tvari i smjesa.² Tim se propisima u cijeloj Europskoj uniji uvodi novi sustav razvrstavanja i označavanja kemikalija, utemeljen na Globalno usklađenom sustavu Ujedinjenih naroda (UN GHS).

Uredba REACH odnosi se na tvari. Kako bi se osigurala ispravna provedba postupaka propisanih Uredbom bitna je točna i jednoznačna identifikacija tvari. Ove Smjernice za identifikaciju i nazive tvari namijenjene su industriji, državama članicama i Europskoj agenciji za kemikalije.

Ovaj dokument utemeljen je na iskustvima s identifikacijom tvari u skladu s ranijim zakonodavstvom u području kemikalija (Direktiva 67/548/EEZ i Direktiva 98/8/EEZ). Međutim, postojeća praksa u identifikaciji tvari u skladu s Uredbom REACH i Uredbom o razvrstavanju, označavanju i pakiranju tvari i smjesa (CLP) osnova je pročišćenog teksta ovih Smjernica. Osim toga, gdje je to bilo primjereno, uključeni su i pristupi iz drugih kemijskih sustava izvan Europske unije.

Uključene su i posebno pripremljene upute za različite vrste tvari.

Smjernice treba koristiti za identifikaciju i određivanje naziva tvari obuhvaćenih uredbama REACH i CLP.

1.1. Ciljevi

Cilj je ovoga dokumenta proizvođačima i uvoznicima dati smjernice za evidentiranje i izvješćivanje o tvari u kontekstu uredbi REACH i CLP. Sadrži smjernice za određivanje naziva tvari, ključnog elementa identifikacije tvari. Također sadrži smjernice o tome mogu li se tvari smatrati istovjetnima u kontekstu uredbi REACH i CLP te kako se načelo „jedna tvar, jedna registracija“ (OSOR) može provesti definiranjem profila identiteta tvari (SIP). Identifikacija istovjetnih tvari koje mogu biti obuhvaćene istim profilom identiteta tvari važno je za upute, razmjenu podataka, zajedničku dostavu podataka, prijavu u inventar razvrstavanja i označavanja, kao i za usklađivanje razvrstavanja i označavanja.

Po mogućnosti bi tvari trebali identificirati stručnjaci iz industrije. Za subjekte u industriji s malo stručnog znanja u pogledu identifikacije tvari, kao dodatak ovim Smjernicama uključene su dodatne smjernice o identifikacijskim parametrima.

Osim toga, u ovom su dokumentu navedene poveznice na relevantne alate koji mogu pomoći pri opisu svojstava i provjeri kemijskog identiteta tvari.

Detaljnije upute o tome kako ispuniti informacije o identitetu tvari u bazi IUCLID u kontekstu

¹ Uredba (EZ) br. 1907/2006 Europskog parlamenta i Vijeća od 18. prosinca 2006. o registraciji, evaluaciji, autorizaciji i ograničavanju kemikalija (REACH) i osnivanju Europske agencije za kemikalije te o izmjeni Direktive 1999/45/EZ i stavljanju izvan snage Uredbe Vijeća (EEZ) br. 793/93 i Uredbe Komisije (EZ) br. 1488/94 kao i Direktive Vijeća 76/769/EEZ i direktiva Komisije 91/155/EEZ, 93/67/EEZ, 93/105/EZ i 2000/21/EZ

² Uredba (EZ) br. 1272/2008 Europskog parlamenta i Vijeća od 16. prosinca 2008. o razvrstavanju, označavanju i pakiranju tvari i smjesa, o izmjeni i stavljanju izvan snage Direktive 67/548/EEZ i Direktive 1999/45/EZ i o izmjeni Uredbe (EZ) br. 1907/2006 (tekst značajan za europski gospodarski prostor) (u daljnjem tekstu: „CLP“).

različitih postupaka u skladu s uredbama REACH i CLP navedene su u ECHA-inim priručnicima dostupnima na <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Područje primjene

Prema članku 1. Uredbe REACH Uredba se odnosi na proizvodnju, uvoz, stavljanje na tržište i uporabu tvari pojedinačno te u smjesama i proizvodima. Smjese i proizvodi kao takvi ne podliježu odredbama Uredbe REACH.

U skladu s člankom 10. Uredbe REACH, postupkom registracije propisuje se evidentiranje identiteta tvari uz pomoć parametara navedenih u odjeljku 2. Priloga VI. Uredbi REACH (vidjeti Tablica 3.). Slični parametri (navedeni u odjeljcima 2.1. do 2.3.4. Priloga VI. Uredbi REACH) propisani su za opis identiteta tvari u svrhu prijave u skladu s člankom 40. stavkom 1. Uredbe CLP. Ove se Smjernice odnose na odgovarajuću identifikaciju tvari obuhvaćenih pravnom definicijom tvari u uredbama REACH i CLP te pomažu pri određivanju parametara identifikacije tvari iz odjeljka 2. Priloga VI. Uredbi REACH. Informacije o identitetu tvari moraju biti dostatne za identifikaciju svake tvari. Jedan ili više parametara identifikacije tvari može se izostaviti ako je tehnički nemoguće ili se čini znanstveno neutemeljenim pružiti traženu informaciju. Razlozi takvih izostavljenih podataka moraju biti jasno navedeni i znanstveno opravdani.

Pristup identifikaciji tvari ovisi o vrsti tvari. Stoga čitatelje ovih Smjernica upućujemo na specifična poglavlja za različite vrste tvari.

Brojevi EC koji se koriste u okviru Direktive 67/548/EEZ (popisi EINECS, ELINCS i NLP) važni su alati za identifikaciju tvari. Smjernice o ulozi tih popisa prema Uredbi REACH navedene su u poglavlju 3.2.

Tvari unutar područja primjene uredbi REACH i CLP (a time i ovih Smjernica) obično su rezultat kemijskih reakcija tijekom njihove proizvodnje i mogu sadržavati više različitih sastojaka. Tvari, kako su definirane uredbama REACH i CLP, također uključuju tvari dobivene kemijskim postupkom ili izolirane iz prirodnih materijala, koje mogu imati samo jedan element ili molekulu (primjerice, čisti metali ili neki minerali) ili nekoliko sastojaka (primjerice, eterična ulja, bakrenac koji nastaje prilikom taljenja bakra iz sulfidne metalne rude). Međutim, tvari koje podliježu drugim propisima EU-a u nekim su slučajevima izuzete od obveze registracije u skladu s Uredbom REACH (vidjeti članak 2. Uredbe). Isto su tako tvari navedene u Prilogu IV. Uredbi REACH i tvari koje ispunjavaju neke kriterije navedene u Prilogu V. Uredbi REACH izuzete od obveze registracije. Napominjemo da iako tvar može biti izuzeta od obveze registracije, to nužno ne znači da je tvar izuzeta od odredbi ostalih glava Uredbe REACH ili zahtjeva propisanih Uredbom CLP.

Uredbom REACH od podnositelja se registracije za istu tvar traži da se dogovore o zajedničkoj dostavi određenih podataka o tvari (načelo „jedna tvar, jedna registracija”)³. Za provedbu takvog načela mora biti jasan način na koji je podnositelj registracije definirao opseg svojeg profila identiteta tvari.

1.3. Struktura Smjernica

Opće informacije, kao što su ciljevi i područje primjene ovog dokumenta, navedene su u poglavlju 1., a pokrate i definicije nalaze se u poglavlju 2. Relevantne informacije o okviru za

³ Detaljne informacije o zajedničkoj dostavi podataka o istoj tvari navedene su u *Smjernicama o razmjeni podataka*.

identifikaciju tvari u Uredbi REACH, primjerice, definicija tvari i zahtjevi obavješćivanja u pravnom tekstu, nalaze se u poglavlju 3.

Praktične upute za identifikaciju i nazive tvari dane su u poglavlju 4.

- U poglavlju 4.1. opisuje se razlika između „dobro definiranih“ i „nedovoljno definiranih“ tvari, a unutar tih dviju glavnih skupina različite vrste tvari mogu se prepoznati s pomoću vlastitih specifičnih smjernica za identifikaciju tvari. Prikazan je ključni dijagram kako bi se korisnika usmjerilo na odgovarajuće poglavlje sa smjernicama o postupku identifikacije određene vrste tvari.
- U narednim poglavljima za svaku su vrstu tvari dane upute u obliku pravila s objašnjenjem i primjerima.

Poglavlje 5. sadrži smjernice za provjeru moguće istovjetnosti tvari. Upute o identitetu tvari u sklopu postupka provjere navedene su u poglavlju 6.

Osim toga, u poglavlju 7. nalaze se neki detaljni primjeri na temelju praktičnih smjernica iz poglavlja 4.

U Dodatku I. navedene su poveznice na relevantne alate koji mogu pomoći pri opisu svojstava i provjeri kemijskog identiteta tvari.

U Dodatku II. ima još općih informacija o pojedinim identifikacijskim parametrima koji se koriste u postupku identifikacije tvari, kao što su pravila koja se tiču nomenklature, brojevi EC i CAS, oznake u molekulskim i strukturnim formulama te analitičke metode.

U Dodatku III. nalaze se informacije o konceptu profila identiteta tvari, relevantnosti za obveze zajedničke dostave podataka i načinu na koji bi ga trebalo definirati i o njemu izvješćivati.

2. Definicije i pokrate

2.1. Pokrate

Glavne pokrate iz ovih Smjernica navedene su i objašnjenje u Tablica 1..

Tablica 1.: Pokrate

Pokrata	Značenje
AAS	Atomska apsorpcijska spektroskopija
AISE	Međunarodna udruga proizvođača sapuna, deterdženata i sredstava za održavanje
CAS	Služba za sažetke i ostale informacije iz područja kemije
CLP	Uredba (EZ) br. 1272/2008 o razvrstavanju, označivanju, obilježavanju i pakiranju tvari i smjesa
DČ	Masena spektroskopija
EINECS	Europski registar postojećih trgovačkih kemijskih tvari
EK	Europska komisija
ELINCS	Europski popis prijavljenih kemijskih tvari
ENCS	Postojeće i nove kemijske tvari (Japan)
ESIS	Europski informacijski sustav o kemijskim tvarima
EU	Europska unija
GC	Plinska kromatografija
GHS	Globalno usklađen sustav
InChI	Međunarodna identifikacijska oznaka kemijskih tvari prema nomenklaturi IUPAC
INCI	Međunarodna nomenklatura kozmetičkih sastojaka
IR	Infracrveno
ISO	Međunarodna organizacija za normizaciju
IUBMB	Međunarodna unija za biokemiju i molekularnu biologiju
IUCLID	Međunarodna jedinstvena baza podataka za kemikalije
IUPAC	Međunarodna unija za čistu i primijenjenu kemiju
NLP	Tvari koje više nisu polimeri
NMR	Nuklearna magnetska rezonancija
ppm	Dio na milijun
REACH	Registracija, evaluacija, autorizacija i ograničavanje kemikalija

SIEF	Forum za razmjenu informacija o tvarima
SIP	Profil identiteta tvari
SMILES	Sustav oznaka SMILES (pojednostavljena molekulska specifikacija ulaznih linijskih podataka)
Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (HPLC)	Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti
TSCA	Zakon o nadzoru otrovnih tvari (USA)
UV/VIS	Ultraljubičasto/vidljivo
UVCB	Tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složeni reakcijski proizvodi ili biološki materijali
w/w	Maseni udio
XRD	Rendgenska difrakcija
XRF	Rendgenska fluorescencija

2.2. Definicije

Ključne definicije korištene u ovim Smjernicama navedene su i opisane u Tablica 2..

Te definicije uzimaju u obzir definicije iz uredbi REACH i CLP. Zbog toga su neki izrazi definirani drugačije nego u Direktivi 67/548/EEZ.

Tablica 2.: Definicije

Definicija	Opis
Broj EC	Broj EC brojčana je identifikacijska oznaka tvari u inventaru EC.
Dodatak (aditiv)	Tvar koja se dodaje namjerno radi stabilizacije tvari ⁴ .
EC inventar	Iako nije pravno definiran Uredbom REACH, EC inventar je kombinacija triju neovisnih i pravno odobrenih europskih popisa tvari iz prethodnih zakonskih okvira za kemikalije Europske unije: Popisi EINECS, ELINCS i NLP („tvari koje više nisu polimeri“). Stavke u inventaru EC sastoje se od kemijskog naziva i broja (naziv EC i broj EC), broja CAS, molekulske formule (ako postoji) i opisa (za neke vrste tvari).
Intermedijer*	Tvar koja se proizvodi kako bi se u kemijskoj preradi utrošila ili upotrijebila za pretvorbu u drugu tvar (u daljnjem tekstu: <i>sinteza</i>): <ul style="list-style-type: none"> (a) <u>neizolirani intermedijer</u> jest intermedijer koji se tijekom sinteze ne uklanja namjerno iz opreme u kojoj se odvija sinteza (osim u slučaju uzorkovanja). Ova oprema uključuje reakcijsku posudu i pripadajuću opremu kao i svu opremu kroz koju jedna ili više tvari prolaze tijekom kontinuiranog ili šaržnog postupka, uključujući cijevi za premještanje iz jedne posude u drugu za sljedeću fazu reakcije, isključujući spremnike i druge posude u kojima se tvari čuvaju nakon proizvodnje (b) <u>interni izolirani intermedijer</u> jest intermedijer koji ne ispunjava kriterije neizoliranog intermedijera i čija se proizvodnja, kao i sinteza drugih tvari iz tog intermedijera odvija na istoj lokaciji, koju koristi jedna ili više pravnih osoba (c) <u>prevezeni izolirani intermedijer</u> jest intermedijer koji ne ispunjava kriterije neizoliranog intermedijera i koji se prevozi između lokacija ili isporučuje na druge lokacije.
IUCLID	Međunarodna jedinstvena baza podataka za kemikalije IUCLID je sustav baze podataka i upravljanja podatcima o kemijskim tvarima.

⁴ U drugim područjima dodatak (aditiv) može imati i druge funkcije, npr. tvar za reguliranje pH ili bojilo. Međutim, u Uredbi REACH i u ovim Smjernicama dodatak (aditiv) je stabilizirajuće sredstvo.

Jedinstveni kromatogram	Prikaz sastava tvari iz karakteristične raspodjele sastojaka na analitičkom kromatogramu.
Legura*	Metalni materijal, homogen na makroskopskoj razini, koji se sastoji od najmanje dva elementa spojena na način da ih se ne može lako odvojiti mehaničkim sredstvima. Legure se smatra posebnim smjesama.
Monomer*	Tvar koje je sposobna tvoriti kovalentne veze s nizom drugih sličnih ili različitih molekula u uvjetima reakcije tvorbe polimera koja se koristi u određenom postupku.
Nečistoća	Nenamjeran sastojak prisutan u tvari koji proizlazi iz proizvodnog postupka. Može nastati iz početnih materijala ili kao rezultat sekundarnih ili nepotpunih reakcija tijekom proizvodnog postupka. Iako je prisutan u konačnoj tvari nije dodan namjerno.
Osnovni sastojak	Sastojak tvari, koji nije dodatak (aditiv) ili nečistoća, a čini značajan dio te tvari stoga se koristi za naziv tvari i njezinu detaljnu identifikaciju.
Polimer*	Tvar sastavljena od molekula za koje je karakterističan niz jedne ili više vrsta monomernih jedinica. Molekulske mase tih molekula moraju biti raspodijeljene unutar raspona u kojem se razlike u molekulskoj masi mogu prije svega pripisati razlikama u broju monomernih jedinica. Polimer sadrži: (a) više od 50 % masenog udjela molekula s najmanje tri monomerne jedinice koje su kovalentnom vezom povezane s najmanje jednom drugom monomernom jedinicom ili drugim reaktantom (b) manje od 50 % masenog udjela molekula iste molekulske mase. U kontekstu ove definicije „monomerna jedinica“ je izreagirani oblik monomerne tvari u polimeru
Prijavljena tvar*	Tvar za koju je podnesena prijava i koja bi se mogla staviti na tržište u skladu s Direktivom 67/548/EEZ.
Proizvod*	Predmet kojemu se tijekom proizvodnje daje poseban oblik, površina ili obličje koji određuju njegovu funkciju u većoj mjeri nego njegov kemijski sastav.
Proizvodnja*	Proizvodnja ili ekstrakcija tvari u prirodnom stanju.
Sastojak	Tvar namjerno dodana da nastane smjesa.

Sastojak	Svaka pojedinačna vrsta prisutna u tvari koju se može opisati njezinim jedinstvenim kemijskim identitetom.
Smjesa*	Smjesa ili otopina sastavljena od najmanje dvije tvari.
Tvar koja nije kemijski promijenjena*	Tvar čija kemijska struktura ostaje nepromijenjena i nakon provedenog kemijskog postupka ili obrade odnosno fizikalne mineraloške pretvorbe, primjerice radi uklanjanja nečistoća.
Tvar koja se pojavljuje u prirodi*	Tvar koja se pojavljuje u prirodi kao takva, neprerađena ili prerađena samo ručno, mehanički ili gravitacijski, otapanjem u vodi, flotacijom, ekstrakcijom vodom, parnom destilacijom ili zagrijavanjem isključivo radi uklanjanja vode, ili koja je na bilo koji način izlučena iz zraka.
Tvar od jednog sastojka	U pravilu tvar određena svojim sastavom, u kojoj je jedan osnovni sastojak prisutan u koncentraciji od najmanje 80 % (masenog udjela).
Tvar od više sastojaka	U pravilu tvar određena svojim sastavom, u kojoj je prisutno više osnovnih sastojaka u koncentraciji ≥ 10 % (masenog udjela) i < 80 % (masenog udjela).
Tvar*	Kemijski element i njegovi spojevi u prirodnom stanju ili dobiveni proizvodnim postupkom, uključujući i dodatke (aditive) nužne za održavanje stabilnosti te nečistoće koje proizlaze iz primijenjenog postupka, ali isključujući otapala koja se mogu izdvojiti bez utjecaja na stabilnost tvari i promjene njezinog sastava.
Urudžbeni broj	Broj koji dodjeljuje Agencija. Automatski dodijeljen broj iz programa REACH-IT. Primjenjuje se na sve valjane ulazne podneske (primjerice, PPORD (istraživanje i razvoj usmjereni prema procesu), upite, registracije, prijave razvrstavanja i označavanja).

* Definicije u skladu s člankom 3. Uredbe REACH.

3. Okvir za identifikaciju tvari u uredbama REACH i CLP

Uredbe REACH i CLP definiraju tvari, a u Uredbi REACH navedeni su identifikacijski parametri (Prilog VI. odjeljak 2.) koje se mora uključiti prilikom identifikacije tvari radi registracije.

U ovom poglavlju dana je definicija tvari iz Uredbi REACH i CLP (3.1.), navedene su opće smjernice za uporabu inventara EC iz prethodnog zakonodavnog okvira u području kemikalija (3.2.) te su dane dodatne opće informacije o zahtjevima za identifikaciju tvari koji su propisani u Uredbi REACH (3.3.).

3.1. Definicija tvari

U uredbama REACH (članak 3. stavak 1.) i CLP (članak 2. stavak 7.) tvar je definirana na sljedeći način:

Tvar je kemijski element i njegovi spojevi u prirodnom stanju ili dobiveni proizvodnim postupkom, uključujući i dodatke (aditive) koji su nužni za održavanje stabilnosti te nečistoće koje proizlaze iz primijenjenog postupka, ali isključujući otapala koja se mogu izdvojiti bez utjecaja na stabilnost tvari i promjene njezinog sastava.

Definicija tvari u uredbama REACH i CLP identična je definiciji tvari navedenoj u sedmoj izmjeni Direktive o opasnim tvarima (Direktiva 92/32/EEZ kojom se dopunjuje i mijenja Direktiva 67/548/EEZ). U oba slučaja definicija obuhvaća više od čistog kemijskog spoja definiranog jednom molekulskom strukturom. Definicija tvari uključuje različite sastojke, kao što su nečistoće.

3.2. Brojčane identifikacijske oznake

3.2.1. Inventar EC

Prethodnim zakonodavnim okvirom za kemikalije uspostavljena su tri odvojena popisa. To su Europski popis postojećih trgovačkih tvari (EINECS), Europski popis prijavljenih kemijskih tvari (ELINCS) i popis „Tvari koje nisu više polimeri“ (NLP).

Tvari koje su bile na europskom tržištu između 1. siječnja 1971. i 18. rujna 1981. godine navedene su na Europskom popisu postojećih trgovačkih tvari (EINECS)^{5, 6, 7}.

Taj popis sadrži oko 100 000 tvari identificiranih kemijskim nazivom (i opisom za neke vrste tvari), brojem CAS i sedmeroznamenkastim brojem – EINECS brojem. EINECS brojevi uvijek počinju znamenkom 2 ili 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Tvari prijavljene u popis EINECS prošle su verifikaciju koja opravdava njihovo uvrštenje u popis.

⁵ EINECS je utemeljen na Europskom osnovnom inventaru (**E**uropean **C**ORE **I**N – ECOIN) u koji industrija može dodatno prijavljivati tvari (prema kriterijima za prijavljivanje tvari u popis EINECS). ECOIN je nastao spajanjem različitih popisa kemikalija za koje se vjerovalo da su na europskom tržištu (npr. TSCA). EINECS je objavljen 15. lipnja 1990. godine i uključuje više od 100 000 tvari. Tijekom uporabe inventara primijećene su pogreške (tiskarske, npr. pogrešan kemijski naziv, formula ili broj CAS). Zato je 1. ožujka 2002. tiskan ispravak.

⁶ ECB (2005) Priručnik za odlučivanje u sklopu implementacije šeste i sedme dopune Direktive 67/548/EEZ (direktive 79/831/EEZ i 92/32/EEZ), javno dostupna verzija EUR 20519 EN. Ažurirana verzija iz lipnja 2005.

⁷ Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) The EINECS Inventory of existing chemical substances on the EC market. Tox Env Chem Vol. 37, str. 21-33.

Tvari prijavljene i stavljene na tržište nakon 18. rujna 1981. navedene su na Europskom popisu prijavljenih kemijskih tvari (ELINCS)⁶. Taj popis obuhvaća sve tvari prijavljene do 31. svibnja 2008. u skladu s Direktivom 67/548/EEZ i njezinim izmjenama. To su takozvane „nove tvari“, jer nisu bile na tržištu Zajednice prije 18. rujna 1981. godine. Broj ELINCS dodjeljuje tvari Europska komisija nakon pregleda koji provode nadležna tijela država članica. Za razliku od popisa EINECS, popis ELINCS ne uključuje broj CAS nego broj prijave koji dodjeljuje nadležno tijelo države članice, trgovački naziv (ako postoji), razvrstavanje i naziv prema nomenklaturi IUPAC. Brojevi ELINCS također su uvijek sedmeroznamenasti i počinju znamenkom 4 (4xx-xxx-x).

Polimeri su bili isključeni iz prijavljivanja u popis EINECS i bili su obuhvaćeni posebnim pravilima u skladu s Direktivom 67/548/EEZ⁸ ⁹. Pojam „polimer“ nadalje je definiran 7. izmjenom Direktive 67/548/EEZ (Direktiva 92/32/EEZ). Kao posljedica primjene te definicije, neke tvari koje su smatrane polimerima u skladu s pravilima prijave u popis EINECS prema sedmoj dopuni *više nisu* bili polimeri. Budući da su sve tvari koje nisu navedene u popisu EINECS bile podložne prijavi, teoretski su sve „tvari koje više nisu polimeri“ (NLP) bile prijavljene. Međutim, Vijeće ministara dalo je jasno do znanja da te „tvari koje više nisu polimeri“ ne podliježu retrospektivno obvezi prijavljivanja. Komisija je dobila zadaću sastaviti popis „tvari koje više nisu polimeri“ (NLP popis). Tvari koje je trebalo uvrstiti na taj popis bile su tvari na tržištu EU-a između 18. rujna 1981. (datum stupanja na snagu Direktive 79/831/EEZ, odnosno šeste izmjene Direktive 67/548/EEZ) i 31. listopada 1993. (datum stupanja na snagu Direktive 92/32/EEZ, odnosno sedme izmjene Direktive 67/548/EEZ), pod uvjetom da se te tvari smatraju polimerima u skladu s pravilima o izvješćivanju za popis EINECS, ali se u skladu sa sedmom izmjenom Direktive više ne smatraju polimerima. Popis NLP nije iscrpan. Tvari na popisu NLP identificirane su kemijskim nazivom, brojem CAS i sedmeroznamenastim brojem NLP. Svaki NLP broj uvijek počinje znamenkom 5 (5xx-xxx-x).

Ta tri popisa tvari, EINECS, ELINCS i NLP, zajedno se zovu inventar EC. Svaka tvar u tom inventaru ima broj EC koji joj dodjeljuje Europska komisija (za detaljne informacije o broju EC vidjeti Dodatak II.).

Informacije o tim tvarima nalaze se na mrežnom mjestu Europske agencije za kemikalije (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), koja također održava i objavljuje popis registriranih tvari (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Proizvođači i uvoznici u inventaru EC mogu naći brojeve EC svojih tvari.

3.2.2. Urudžbeni brojevi

Prilikom uspostave sustava REACH-IT, ECHA je smatrala korisnim automatski dodijeliti broj tvarima u svim pristiglim tehnički potpunim podnescima (predregistracija, istraživanje i razvoj usmjereni prema procesu, upiti, registracija, prijave razvrstavanja i označavanja, itd.) za koje nije bio određen broj EC (vidjeti u nastavku kriterije za dodjeljivanje urudžbenih brojeva). Time je olakšano upravljanje, daljnja obrada i identifikacija tvari u tim podnescima. „Urudžbeni brojevi“ imaju isti format kao brojevi EINECS, ELINCS i NLP, no počinju drugačijim znamenkama.

Urudžbeni brojevi imaju numerički format usklađen s unosima u popise EINECS, ELINCS i

⁸ ECB (2003) Prijavljivanje novih kemikalija u skladu s Direktivom 67/548/EEZ o usklađivanju zakona i drugih propisa u odnosu na razvrstavanje, pakiranje i označavanje opasnih tvari Popis tvari koje više nisu polimeri EUR 20853 EN

⁹ Rasmussen K, Christ G i Davis JB (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. Tox Env Chem Vol. 67, str. 251-261.

NLP. Točnost, valjanost i poštovanje načela iz ovih Smjernica nisu provjereni za veći dio urudžbenih brojeva za identifikaciju tvari.

Valja istaknuti kako je moguće da su različiti urudžbeni brojevi dodijeljeni istoj tvari ako se za nju koriste različite identifikacijske oznake (kao što je naziv). Stoga je posljedično također moguće da je dodijeljen urudžbeni broj tvari s popisa EINECS, ELINCS ili NLP, što se može dogoditi ako podnesak ECHA-i putem sustava REACHIT sadrži naziv tvari koji se razlikuje od onog navedenog u inventaru EC.

Urudžbeni brojevi mogu počinjati znamenkama 6, 7, 8 ili 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

Napominjemo da je za neke stavke na popisu EINECS, opis tvari prilično širok i mogao bi obuhvatiti identitete više tvari u skladu s člankom 3. stavku 1. Uredbe REACH. U takvim slučajevima podnositelju registracije preporučuje se preciznije opisati tvar o kojoj se radi (primjerice, uz pomoć naziva iz nomenklature IUPAC ili drugih dostupnih identifikacijskih oznaka). Podnositelj registracije svejedno treba naznačiti kojem unosu na popisu EINECS tvar pripada. U takvim slučajevima Europska agencija za kemikalije razmotrit će je li primjereno dodijeliti urudžbeni broj konkretnoj tvari.

3.3. Zahtjevi za identifikaciju tvari u uredbama REACH i CLP

Prema Uredbi REACH, kad je propisana registracija ona uključuje informacije o identifikaciji tvari određene u odjeljku 2. Priloga VI. Te informacije moraju biti odgovarajuće i dostatne za identifikaciju svake tvari. Ako je tehnički nemoguće ili se čini znanstveno neutemeljenim pružiti informacije o jednom ili više parametara identifikacije tvari, razlozi moraju biti jasno obrazloženi, kako je navedeno u napomeni 1. Prilog VI.

Slično tome, ako je prema Uredbi CLP obvezna prijava (članak 40. Uredbe CLP), mora uključivati informacije o identifikaciji tvari određene u odjeljcima od 2.1. do 2.3.4. Priloga VI. Uredbi REACH i te informacije moraju omogućiti identifikaciju svake tvari. Ako je tehnički nemoguće ili se čini znanstveno neutemeljenim pružiti informacije o jednom ili više parametara identifikacije tvari, razlozi moraju biti jasno obrazloženi, kako je navedeno u napomeni 1. Priloga VI.

Pregled parametara identifikacije tvari iz Priloga VI. Uredbi REACH naveden je u Tablica 3..

Tablica 3.: Parametri za identifikaciju tvari iz odjeljka 2. Priloga VI. Uredbi REACH

Parametri za identifikaciju tvari iz odjeljka 2. Priloga VI. Uredbi REACH	
2.	IDENTIFIKACIJA TVARI <i>Informacije moraju biti dostatne za identifikaciju svake tvari. Ako je tehnički nemoguće ili se čini znanstveno neutemeljenim pružiti informacije o jednoj ili više stavaka navedenih u nastavku, razloge se mora jasno obrazložiti.</i>
2.1	Naziv i druge identifikacijske oznake svake tvari
2.1.1	<i>Naziv(i) prema nomenklaturi IUPAC Ako naziv nije dostupan, drugo međunarodno kemijsko ime</i>
2.1.2	<i>Ostali nazivi (uobičajeni naziv, trgovački naziv, skraćeni nazivi)</i>
2.1.3	<i>Broj EC tj. EINECS, ELINCS ili NLP broj ili broj koji je dodijelila Agencija (ako je dostupan i potreban)</i>
2.1.4	<i>Naziv CAS i broj CAS (ako su dostupni)</i>
2.1.5	<i>Druga identifikacijska oznaka, kao što je carinski broj (ako je dostupan)</i>
2.2	Informacije u vezi s molekulskom i strukturnom formulom ili kristalnom strukturom svake tvari
2.2.1	<i>Molekulska formula i strukturna formula (uključujući oznaku iz sustava SMILES, i drugu prezentaciju ako je dostupna) i opis kristalnih struktura</i>
2.2.2	<i>Informacije o optičkoj aktivnosti i tipičnom udjelu (stereo)izomera (ako su raspoložive i potrebne)</i>
2.2.3	<i>Molekulska masa ili raspon molekulske mase</i>
2.3.	Sastav svake tvari
2.3.1	<i>Stupanj čistoće (%) ako je primjenjivo</i>

2.3.2	<p><i>Nazivi sastojaka i nečistoća</i></p> <p><i>U slučaju tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složenih reakcijskih proizvoda ili bioloških materijala (UVCB):</i></p> <ul style="list-style-type: none"><i>– naziv sastojaka prisutnih u koncentraciji $\geq 10\%$,</i><i>– naziv poznatih sastojaka prisutnih u koncentraciji $< 10\%$,</i><i>– za sastojke koji se ne mogu pojedinačno identificirati, opis skupina sastojaka na temelju njihove kemijske prirode</i><i>– opis podrijetla ili izvora i proizvodnog postupka</i>
2.3.3	<p><i>Tipična koncentracija i raspon koncentracije (u postotku) sastojaka, skupina sastojaka koji se ne mogu pojedinačno identificirati i nečistoća kako je navedeno u točki 2.3.2.</i></p>
2.3.4	<p><i>Nazivi, tipična koncentracija i raspon koncentracije (u postotku) dodataka (aditiva)</i></p>
2.3.5	<p><i>Svi potrebni kvalitativni analitički podatci specifični za identifikaciju tvari, kao što su podatci o ultraljubičastom i infracrvenom spektru te nuklearnoj magnetskoj rezonanciji, masenom spektru ili difrakciji</i></p>
2.3.6	<p><i>Svi potrebni kvantitativni analitički podatci specifični za identifikaciju tvari, kao što su kromatografski i titrimetrijski podatci te podatci o analizi elemenata ili difrakciji</i></p>
2.3.7	<p><i>Opis metoda analize ili odgovarajuće bibliografske bilješke potrebne za identifikaciju tvari (uključujući identifikaciju i kvantifikaciju njezinih sastojaka i, prema potrebi, njezinih nečistoća i dodataka/aditiva). Opis se sastoji od primijenjenih eksperimentalnih protokola i relevantnog tumačenja rezultata prijavljenih na temelju točaka od 2.3.1. do 2.3.6. Te informacije moraju biti dostatne za reprodukciju metoda.</i></p>
2.5	<p>Sve ostale dostupne informacije relevantne za identifikaciju tvari</p>

4. Smjernice za identifikaciju i nazive tvari u uredbama REACH i CLP

4.1. Uvod

Pravila za identifikaciju i davanje naziva nisu ista za sve vrste tvari. Iz praktičnih razloga ove su Smjernice ustrojene tako da se za svaku vrstu tvari čitatelja upućuje izravno na poglavlje u kojem se nalaze odgovarajuće upute. Zbog toga su u nastavku objašnjene različite vrste tvari i na kraju je dan ključ za pronalaženje odgovarajućeg poglavlja.

Identifikacija tvari treba se temeljiti barem na parametrima za identifikaciju tvari navedenima u odjeljku 2. Priloga VI. Uredbi REACH (vidjeti Tablica 3.). Stoga svaku tvar treba identificirati kombinacijom odgovarajućih parametara:

- naziva prema nomenklaturi IUPAC i/ili drugog naziva i drugih identifikacijskih oznaka, primjerice broja CAS ili broja EC (Prilog VI., odjeljak 2.1.)
- informacija u vezi s molekulskom i strukturnom formulom (Prilog VI., odjeljak 2.2.)
- kemijskog sastava (Prilog VI., odjeljak 2.3.).

Tvar je potpuno identificirana kemijskim sastavom, tj. kemijskim identitetom i sadržajem svakog sastojka u tvari. Iako je takva jednostavna identifikacija moguća za većinu tvari, za neke nije izvediva ili odgovarajuća u području primjene uredbi REACH i CLP. U takvim slučajevima potrebne su druge ili dodatne informacije o identifikaciji tvari.

Prema tome, tvari se mogu podijeliti u dvije glavne skupine:

1. dobro definirane tvari: tvari s definiranim kvalitativnim i kvantitativnim sastavom koje se mogu dostatno identificirati na temelju identifikacijskih parametara iz odjeljka 2. Priloga VI. Uredbi REACH.
2. „tvari UVCB“: tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složeni reakcijski produkti ili biološki materijali. Te tvari ne mogu se dostatno identificirati s pomoću navedenih parametara.

Promjenjivost sastava dobro definiranih tvari određena je gornjom i donjom granicom raspona koncentracije jednog ili više osnovnih sastojaka. Za tvari UVCB promjenjivost je razmjerno velika i/ili slabo predvidiva.

Jasno je da ima graničnih slučajeva između dobro definiranih tvari (reakcijski produkti s velikim brojem sastojaka, svaki unutar velikog raspona) i tvari UVCB (reakcijski produkti s promjenjivim i slabo predvidivim sastavom). Podnositelj registracije odgovoran je za identifikaciju tvari na najprikladniji način.

Različita se pravila za identifikaciju i davanje naziva primjenjuju na „dobro definirane tvari“ s jednim osnovnim sastojkom i na „dobro definirane tvari“ s više osnovnih sastojaka. Za različite vrste tvari pod zajedničkim nazivom „UVCB“ opisana su drugačija pravila za identifikaciju i određivanje naziva.

U

Tablica 4 i Tablica 5. glavne identifikacijske oznake navedene su za nekoliko primjera različitih vrsta tvari. Ti su primjeri grupirani tako da se lako prepoznaju sličnosti i razlike bitne za identifikaciju tvari.

Tablica 4 i Tablica 5. ne predstavljaju iscrpan popis svih mogućih vrsta tvari. Takvo grupiranje tvari prema pravilima identifikacije i davanja naziva ne bi se trebalo smatrati službenim sustavom kategorizacije tvari, već praktičnom pomoći u odgovarajućoj primjeni posebnih pravila i pronalasku odgovarajućih naputaka u ovim Smjernicama.

Tablica 4: Grupiranje glavnih identifikacijskih oznaka za primjere koji predstavljaju različite vrste dobro definiranih sličnih tvari

Zajednička obilježja	Primjeri ili predstavnici	Glavne identifikacijske oznake
Dobro definirane tvari prema kemijskom sastavu [poglavlje 4.2.]	Tvari od jednog sastojka, primjerice - benzen (95 %) - nikal (99 %) [poglavlje 4.2.1.]	Kemijski sastav: jedan osnovni sastojak ≥ 80 %: - kemijski identitet osnovnog sastojka (kemijski naziv, broj CAS ili broj EC i sl.) - tipična koncentracija s gornjom i donjom graničnom vrijednošću
	Tvari od više sastojaka, primjerice definirani reakcijski produkti, kao što je reakcijska masa 2-, 3-, i 4-klortoluena (po 30 % svakog) [poglavlje 4.2.2.]	Kemijski sastav: reakcijska masa osnovnih sastojaka, svaki između ≥10 - <80 %: - kemijski identitet svakog osnovnog sastojka - tipične koncentracije te gornje i donje granične vrijednosti svakog sastojka i reakcijske mase kao takve
	Tvari definirane i drugim parametrima osim kemijskog sastava, primjerice grafit i dijamant [poglavlje 4.2.3.]	Kemijski sastav tvari kao tvari od jednog sastojka ili tvari od više sastojaka i drugi fizikalni parametri ili parametri kojima se opisuju svojstva: primjerice, morfologija kristala, (geološki) mineralni sastav, itd.

Tablica 5.: Grupiranje glavnih identifikacijskih oznaka za primjere koji predstavljaju različite vrste tvari UVCB

Zajednička obilježja	Primjeri ili predstavnici	Glavne identifikacijske oznake			
		Izvor	Postupak	Ostale identifikacijske oznake	
Tvari UVCB (tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složeni reakcijski produkti ili biološki materijali) [poglavlje 4.3.]	Biološki materijali (B)	Ekstrakti bioloških materijala, npr. prirodni mirisi, prirodna ulja, prirodne boje i pigmenti	- Biljna ili životinjska vrsta i obitelj - Dio biljke/životinje	- Ekstrakcija - Frakcioniranje, koncentriranje, izolacija, pročišćavanje, itd. - <u>Derivacija</u> *	- Poznati ili generički sastav - Jedinствени kromatogram i druge analitičke metode - Upućivanje na norme - Indeks boje
		Složene biološke makromolekule, primjerice enzimi, bjelančevine, dijelovi DNK ili RNK, hormoni, antibiotici			- Standardni enzimski indeks - Genetička šifra - Stereokonfiguracija - Fizikalna svojstva - Funkcija/aktivnost - Struktura - Slijed aminokiselina
	Proizvodi fermentacije antibiotici, biopolimeri, enzimi, vinase (proizvodi fermentacije šećera), soforolipidi i sl.	- Medij - Primijenjeni mikroorganizam	- Fermentacija - Izolacija proizvoda - Koraci pri pročišćavanju	- Vrsta proizvoda: npr. antibiotici, biopolimeri, bjelančevine i sl. - Poznati sastav	
Kemijske i mineralne tvari slabo definirano	Reakcijske smjese slabo predvidivog i/ili promjenjivog sastava	Početni materijali	<u>Vrsta kemijske reakcije</u> , npr. esterifikacija, alkilacija, hidrogenacija	- Poznati sastav - Jedinствени kromatogram i druge analitičke metode - Upućivanje na norme	

	g, složenog ili promjenjivog sastava (UVC)	<ul style="list-style-type: none"> - Frakcije ili destilati, npr. naftne tvari - Glina, npr. bentonit - Katrani 	<ul style="list-style-type: none"> - Sirova nafta - Ugljen/treset - Prirodni plinovi - Minerali 	<ul style="list-style-type: none"> - Frakcioniranje, destilacija - <u>Konverzija frakcija</u> - Fizikalna obrada - Ostatci 	<ul style="list-style-type: none"> - Gornje granične vrijednosti - Raspon dužine lanca - Aromatski/alifatski odnos - Poznati sastav - Standardni indeks
		Koncentrati ili taljevine, npr. metalni minerali, ili ostatci različitih talioničkih ili metalurških postupaka, npr. troska	Rude	<ul style="list-style-type: none"> - Taljenje - Toplinska obrada - Različiti metalurški postupci 	<ul style="list-style-type: none"> - Poznati ili generički sastav - Koncentracija metala

* Podcrtani postupci označavaju sintezu nove molekule

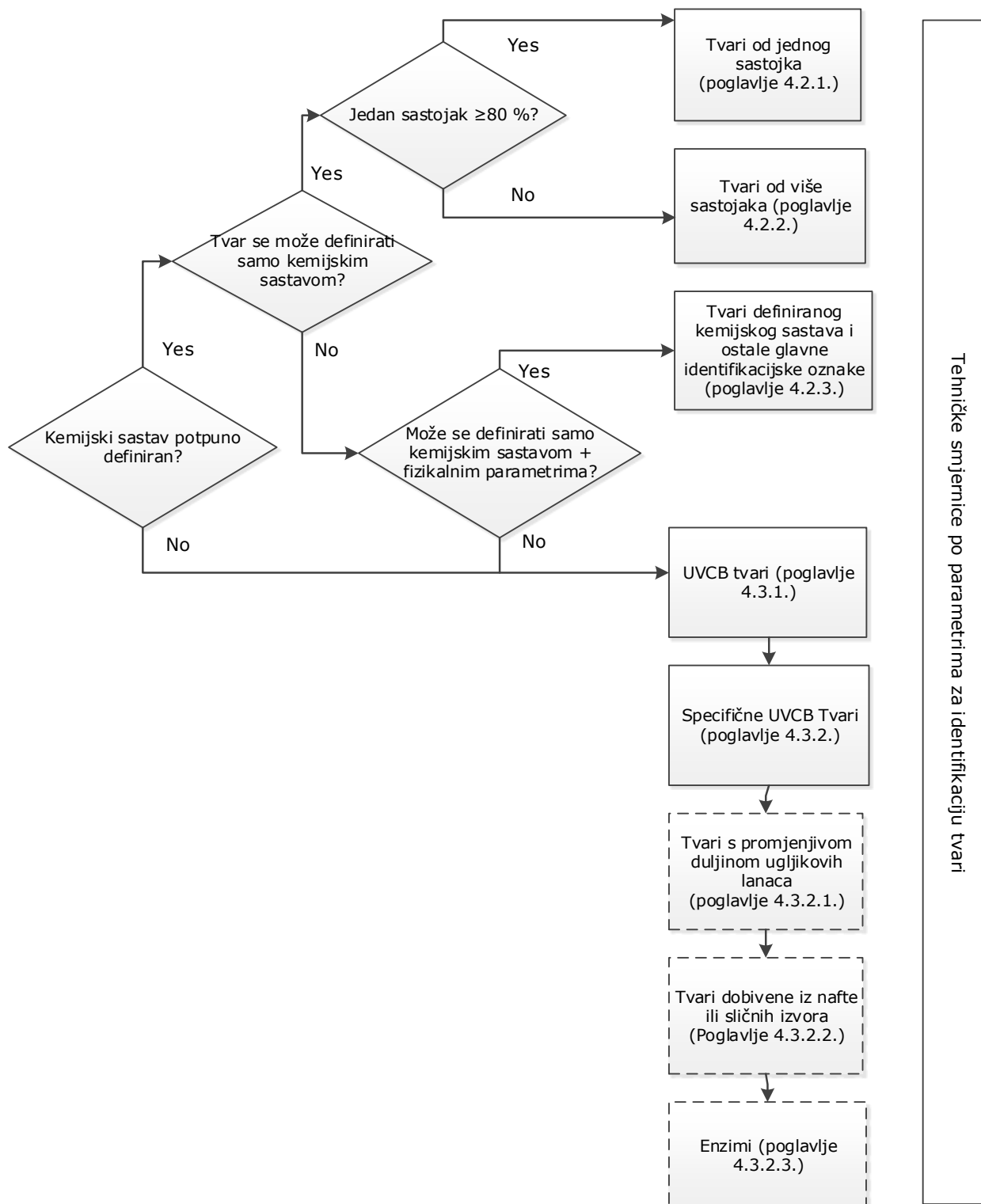
Ovo je poglavlje podijeljeno u potpoglavlja u kojima se nalaze konkretne upute za identifikaciju tvari različitih vrsta. Upućivanje na odgovarajuća poglavlja nalaze se u Slika 1.

Pojašnjenje iz Slika 1 temelji se na jednostavnim praktičnim kriterijima. Podnositelj registracije odgovoran je za izbor najprikladnijeg poglavlja i upis identiteta tvari u skladu s pravilima i kriterijima za tu vrstu tvari.

Osnovno je pravilo da se tvari definiraju u najvećoj mogućoj mjeri kemijskim sastavom i identifikacijom sastojaka. Samo ako je to tehnički neizvedivo treba koristiti ostale identifikacijske oznake, kao što je navedeno za različite vrste tvari UVCB.

Ako podnositelj registracije odstupi od pravila za identifikaciju tvari i kriterija ovih Smjernica, treba to obrazložiti. Identifikacija tvari treba biti transparentna, objašnjiva i dosljedna.

Slika 1: Upućivanje na poglavlja i dodatke ovoga dokumenta koji se odnose na odgovarajuće smjernice ovisno o tipu tvari



Treba navesti opis analitičkih metoda i/ili odgovarajuće bibliografske bilješke za identifikaciju tvari te, prema potrebi, identifikaciju nečistoća i dodataka (aditiva)(Uredba REACH Prilog VI., odjeljci 2.3.5., 2.3.6. i 2.3.7.). Te informacije moraju biti dostatne za reprodukciju metoda. Treba navesti i uobičajene rezultate dobivene primjenom analitičkih tehnika.

4.2. Tvari dobro definiranog sastava

Tvarima dobro definiranog kemijskog sastava daju se nazivi se prema jednom ili više glavnih sastojaka. Kod nekih tvari, sam kemijski sastav nije dovoljan za opis. U takvim slučajevima identifikaciji tvari treba dodati neke druge fizikalne parametre koji se odnose na kemijsku strukturu.

U pravilu bi cilj trebao biti da se obuhvati do 100 % sastava, a svaki sastojak treba potpuno kemijski odrediti, uključujući strukturne informacije. Kod tvari definiranih kemijskim sastavom razlikuju se:

- osnovni sastojak: sastojak koji čini značajan dio te tvari i stoga se koristi u davanju naziva tvari i u njezinoj detaljnoj identifikaciji, a nije dodatak (aditiv) ili nečistoća
- nečistoća: nenamjeren sastojak prisutan u tvari koji proizlazi iz proizvodnog postupka. Može nastati iz početnih materijala ili kao rezultat sekundarnih ili nepotpunih reakcija tijekom proizvodnog postupka. Iako prisutne u konačnoj tvari, nečistoće nisu dodane namjerno
- dodatak (aditiv): tvar koja se dodaje namjerno radi stabilizacije tvari.

Sve sastojke (osim dodataka/aditiva) koji nisu jedan ili više osnovnih sastojaka u tvari od jednog sastojka ili u tvari od više sastojaka, smatra se nečistoćama. Iako se u nekim strukama u praksi upotrebljava izraz „tragovi“, u ovim se Smjernicama upotrebljava samo izraz „nečistoće“.

Na različite sastojke primjenjuju se različiti zahtjevi za identifikaciju:

- osnovni sastojci dio su naziva tvari i svaki osnovni sastojak mora biti precizno identificiran
- nečistoće se ne upotrebljavaju za davanje naziva tvari, no svaku se nečistoću treba precizno identificirati
- dodatci (aditivi) pridonose sastavu tvari (ali nisu dio naziva) i uvijek ih treba precizno identificirati.
- Precizna identifikacija glavnih sastojaka, nečistoća i dodataka (aditiva) mora se sastojati od naziva prema prema nomenklaturi IUPAC, kemijskog naziva, strukturne formule, broja EC i broja CAS, ako su dostupni.

Sljedeća se opća pravila koriste za razlikovanje između tvari od jednog i tvari od više sastojaka:

- tvar od jednog sastojka jest tvar u kojoj je jedan sastojak prisutan u koncentraciji od najmanje 80 % masenog udjela i koja sadrži do 20 % masenog udjela nečistoća.

Tvar od jednog sastojka prima naziv prema tom jednom sastojku.

- Tvar od više sastojaka jest tvar koju čini više sastojaka obično prisutnih u koncentracijama između $\geq 10\%$ i $< 80\%$ masenog udjela.

Tvar od više sastojaka naziva se reakcijskom masom najmanje jednog osnovnog sastojka.

Navedena pravila zamišljena su kao smjernica. Odstupanje je prihvatljivo ako se može jasno opravdati.

Obično treba navesti nečistoće prisutne u koncentraciji $\geq 1\%$. Međutim, nečistoće relevantne

za razvrstavanje i/ili procjenu postojanih, bioakumulativnih i otrovnih (PBT) tvari¹⁰ uvijek treba navesti, bez obzira na koncentraciju. U pravilu informacije o sastavu trebaju biti potpune do 100 %.

Na temelju uredbi REACH i CLP te ovih Smjernica dodatci (aditivi) su agensi nužni za održanje stabilnosti tvari. Dakle, dodatci (aditivi) su bitan sastojak tvari i uzimaju se u obzir prilikom računanja bilance mase. Međutim, izvan definicije iz Uredbe REACH i ovih Smjernica izraz „dodatak” (aditiv) koristi se i za namjerno dodane tvari drugih funkcija, primjerice tvari za reguliranje pH ili bojila. Te namjerno dodane tvari nisu dio same tvari i stoga se ne uzimaju u obzir prilikom računanja bilance mase.

Prema definicijama iz uredbi REACH i CLP, smjese su namjerne mješavine tvari i zbog toga se ne mogu smatrati tvarima od više sastojaka.

Upute koje se odnose na tvari od jednog sastojka nalaze se u poglavlju 4.2.1., a upute specifične za tvari od više sastojaka u poglavlju 4.2.2. Smjernice koje se odnose na tvari za koje su potrebne dodatne informacije (primjerice, neki minerali) nalaze se u poglavlju 4.2.3.

4.2.1. Tvari od jednog sastojka

Tvar od jednog sastojka određuje njezin kvantitativni sastav, u kojem je jedan osnovni sastojak prisutan u koncentraciji od najmanje 80 % (masenog udjela).

Pravila za davanje naziva

Tvari od jednog sastojka daje se naziv prema glavnom sastojku. U načelu naziv treba biti na hrvatskom jeziku i u skladu s pravilima nomenklature IUPAC (vidjeti Dodatak I.). Ostale međunarodno prihvaćene oznake mogu se dodatno navesti.

Identifikacijske oznake

Tvar od jednog sastojka identificira se na temelju kemijskog naziva i svih drugih dostupnih identifikacijskih oznaka (uključujući molekulska i strukturnu formulu ili kristalnu strukturu) glavnog sastojka. Potrebno je identificirati sve nečistoće i/ili dodatke (aditive) tvari od jednog sastojka. Potrebno je navesti tipične koncentracije i raspon(e) koncentracije glavnog sastojka, nečistoća i/ili dodataka (aditiva). Sve te informacije moraju biti potkrijepljene analitičkim informacijama.

Primjer				
Osnovni sastojak	Sadržaj (%)	Nečistoća	Sadržaj (%)	Identitet tvari
m-ksilen	91	o-ksilen	5	m-ksilen
o-ksilen	87	m-ksilen	10	o-ksilen

U pravilu je osnovni sastojak prisutan u koncentraciji > 80 % i mora biti potpuno opisan u skladu sa svim prethodno navedenim parametrima. Zbroj tipičnih koncentracija za glavni sastojak i nečistoće trebao bi iznositi 100 %. Nečistoće prisutne u koncentraciji > 1 % navode se prema nazivu i identifikacijskim oznakama. Nečistoće relevantne za razvrstavanje i/ili

¹⁰ Više informacija o procjeni postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari i relevantnim kriterijima nalazi se u poglavlju R11 Smjernica o zahtjevima obavješćivanja i procjeni kemijske sigurnosti: Procjena postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari

procjenu¹¹ postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari treba uvijek opisati istim identifikacijskim oznakama, neovisno o njihovoj koncentraciji.

Radi ispravne primjene pravila o 80 %, dodane tvari, kao što su tvari za reguliranje pH ili bojila ne smiju biti uključene u bilancu mase.

„Pravilo o 80 %” primjenjuje se na prijavljivanje novih tvari (Direktiva 67/548/EEZ) na temelju Uredbe REACH. Međutim, odstupanja od tog pravila o 80 % treba obrazložiti. Mogući primjeri opravdanog odstupanja jesu sljedeći:

- osnovnog sastojka ima < 80 %, no može se dokazati da tvar ima slična fizikalno-kemijska svojstva i isti profil opasnosti kao ostale tvari od jednog sastojka istog identiteta koje zadovoljavaju pravilo o 80 %
- rasponi koncentracija osnovnog sastojka i nečistoća preklapaju se s kriterijem od 80 % te je koncentracija osnovnog sastojka samo povremeno ≤ 80 %.

Primjeri									
Tvar	Osnovni sastojak	Najveći sadržaj (%)	Uobičajeni sadržaj (%)	Najmanji sadržaj (%)	Nečistoća	Najveći sadržaj (%)	Uobičajeni sadržaj (%)	Najmanji sadržaj (%)	Identitet tvari
1	o-ksilen	90	85	65	m-ksilen	35	15	10	o-ksilen
2	o-ksilen m-ksilen	90 35	85 15	65 10	p-ksilen	5	4	1	o-ksilen

Zbog raspona koncentracija osnovnog sastojka i nečistoće, tvari 1 i 2 mogu se smatrati tvarima od više sastojaka s dva osnovna sastojka, o-ksilenom i m-ksilenom ili tvarima od jednog sastojka. U takvom slučaju odluka je da se obje smatraju tvarima od jednog sastojka, potaknuta činjenicom da je o-ksilen obično prisutan u koncentraciji > 80 %.

Analitičke informacije

Potrebno je pružiti dovoljno kvalitativnih podataka kako bi se potvrdio identitet sastojaka i nečistoća tvari od više sastojaka. Postoji nekoliko prikladnih spektroskopskih metoda za utvrđivanje identiteta tvari, poput apsorbancije svjetlosti u ultraljubičastom i vidljivom spektru (UV/Vis) te u infracrvenom spektru (IR), nuklearne magnetske rezonancije (NMR) ili masene spektroskopije (MS). Za anorganske tvari ili organske i/ili metalno-organske tvari koje se mogu otkriti/izmjeriti kristalnom strukturom, u većini slučajeva prednost se daje uporabi rendgenske difrakcije (XRD).

Moraju se dostaviti kvantitativne metode, kao što su kromatografske tehnike poput plinske kromatografije (GC) ili tekućinske kromatografije visoke djelotvornosti (HPLC), zajedno s tehnikom detekcije, kako bi se potvrdio sastav tvari. Za anorganske tvari prikladnija je rendgenska difrakcija (XRD), rendgenska fluorescencija (XRF), atomska apsorpcijska spektroskopija (AAS), optička emisijska spektroskopija s induktivno spregnutom plazmom (ICP-OES) ili masena spektrometrija s induktivno spregnutom plazmom (ICP-MS). Prema potrebi moraju se koristiti i druge valjane tehnike odvajanja sastojaka.

Opis analitičkih metoda mora uključivati primijenjene eksperimentalne protokole i tumačenje prijavljenih rezultata.

Analitičke metode kontinuirano se razvijaju i unapređuju. Stoga je podnositelj registracije

¹¹ Više informacija o procjeni postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari i relevantnim kriterijima nalazi se u poglavlju R11 Smjernica o zahtjevima obavješćivanja i procjeni kemijske sigurnosti: Procjena postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari

odgovoran za iznošenje odgovarajućih analitičkih podataka.

4.2.2. Tvari od više sastojaka

Tvar od više sastojaka je tvar definirana svojim kvantitativnim sastavom, u kojoj je više osnovnih sastojaka prisutno u koncentraciji $\geq 10\%$ (masenog udjela) i $< 80\%$ (masenog udjela). Tvar od više sastojaka rezultat je proizvodnog postupka¹².

Uredba REACH propisuje registraciju tvari kako je proizvedena. Ako je tvar od više sastojaka proizvedena, treba je kao takvu registrirati^{13 14}. Odluka o tome u kojoj su mjeri različiti koraci u proizvodnji tvari obuhvaćeni definicijom „proizvodnje” donosi se od slučaja do slučaja. Nema potrebe ispitivati tvar kao takvu ako se profil opasnosti tvari može dostatno opisati informacijama o pojedinačnim sastojcima.

Pravila za davanje naziva

Tvari od više sastojaka daje se naziv reakcijske mase osnovnih sastojaka tvari kao takve, odnosno ne na temelju početnih materijala potrebnih za proizvodnju tvari. Opći je oblik sljedeći: „Reakcijska masa [nazivi osnovnih sastojaka]”. Preporučuje se navoditi nazive sastojaka abecednim redom i odvajati veznikom „i”. Samo osnovni sastojci koncentracije obično $\geq 10\%$ dio su naziva. U načelu nazivi trebaju biti na hrvatskom jeziku i u skladu s pravilima nomenklature IUPAC. Ostale međunarodno prihvaćene oznake mogu se dodatno navesti.

Identifikacijske oznake

Tvar od više sastojaka identificira se kemijskim nazivom i svim drugim dostupnim identifikacijskim oznakama tvari kao takve te kemijskim identitetom sastojaka (uključujući molekulska i strukturnu formulu odnosno jednu ili više kristalnih struktura). Potrebno je identificirati sve nečistoće i/ili dodatke (aditive) tvari od više sastojaka. Moraju se navesti tipične koncentracije i raspon(i) koncentracije glavnog sastojka, nečistoća i/ili dodataka (aditiva). Sve te informacije moraju biti potkrijepljene analitičkim informacijama.

Primjer				
Osnovni sastojci	Sadržaj (%)	Nečistoća	Sadržaj (%)	Identitet tvari
m-ksilen	50	p-ksilen	5	reakcijska masa m-ksilena i o-ksilena
o-ksilen	45			

Kod tvari od više sastojaka poznat je kemijski sastav i više je osnovnih sastojaka relevantno za identifikaciju tvari. Nadalje, kemijski je sastav tvari predvidiv kroz uobičajene vrijednosti i raspon. Osnovni sastojci opisuju se u potpunosti svim relevantnim parametrima. Zbroj tipičnih koncentracija osnovnih sastojaka ($\geq 10\%$) i nečistoća ($< 10\%$) treba biti 100 %.

Radi ispravnog identificiranja tvari od više sastojaka, namjerno dodane tvari (poput regulatora pH ili bojila) ne smiju biti uključene u bilancu mase.

Nečistoće prisutne u koncentraciji $\geq 1\%$ treba navesti prema nazivu i svim dostupnim identifikacijskim oznakama. Nečistoće relevantne za razvrstavanje i/ili procjenu postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari treba uvijek opisati istim identifikacijskim oznakama, neovisno o njihovoj koncentraciji.

¹² Razlika između smjese i tvari od više sastojaka je ta što se smjesa dobiva miješanjem dviju ili više tvari bez pojave kemijske reakcije. Tvar od više sastojaka rezultat je kemijske reakcije.

¹³ Neke su tvari izuzete od obveza registracije u skladu s Uredbom REACH (npr. tvari navedene u Prilogu IV.).

¹⁴ Taj pristup ne primjenjuje se na neke specifične tvari, kao što su minerali (više detalja nalazi se u poglavlju 7.5.).

Primjer								
Osnovni sastojak	Najveći sadržaj (%)	Uobičajeni sadržaj (%)	Najmanji sadržaj (%)	Nečistoća	Najveći sadržaj (%)	Uobičajeni sadržaj (%)	Najmanji sadržaj (%)	Identitet tvari
anilin	90	75	65	fenantren	5	4	1	reakcijska masa anilina i naftalena
naftalen	35	20	10					

Na temelju pravila iz ovih Smjernica, radi se o tvari od više sastojaka. Iako je raspon jednog sastojka > 80 %, to se događa samo povremeno, a uobičajeni sastav je < 80 %.

Kad god glavni sastojak tvari od više sastojaka čini ≥ 80 % ili < 10 % masenog udjela, potrebno je navesti obrazloženje za to odstupanje. Mogući primjer opravdanog odstupanja je:

- sastojak samo povremeno čini ≥ 80 % ili < 10 %.

Primjerice, tvar čine dva sastojka, jedan u koncentraciji 85 %, drugi 10 %, a ostatak su nečistoće. Oba sastojka pridonose i bitni su za željeni tehnički učinak tvari. U ovom slučaju, unatoč tome što jednog sastojka ima više od 80 %, tvar se može opisati kao tvar od više sastojaka.

Analitičke informacije

Potrebno je pružiti dovoljno kvalitativnih podataka kako bi se potvrdio identitet sastojaka i nečistoća tvari od više sastojaka. Postoji nekoliko prikladnih spektroskopskih metoda za utvrđivanje identiteta tvari, poput apsorpcije svjetlosti u ultraljubičastom i vidljivom spektru (UV/Vis) ili u infracrvenom spektru (IR), nuklearne magnetske rezonancije (NMR) ili masene spektroskopije (MS). Za anorganske tvari ili organske i/ili metalno-organske tvari koje se mogu otkriti/izmjeriti kristalnom strukturom, u većini slučajeva prednost se daje uporabi rendgenske difrakcije (XRD).

Moraju se dostaviti kvantitativne metode, kao što su kromatografske tehnike poput plinske kromatografije (GC) ili tekućinske kromatografije visoke djelotvornosti (HPLC), zajedno s tehnikom detekcije, kako bi se potvrdio sastav tvari. Za anorganske tvari prikladnija je rendgenska difrakcija (XRD), rendgenska fluorescencija (XRF), atomska apsorpcijska spektroskopija (AAS), optička emisijska spektroskopija s induktivno spregnutom plazmom (ICP-OES) ili masena spektrometrija s induktivno spregnutom plazmom (ICP-MS). Prema potrebi moraju se koristiti i druge valjane tehnike odvajanja sastojaka.

Opis analitičkih metoda mora uključivati primijenjene eksperimentalne protokole i tumačenje prijavljenih rezultata.

Analitičke metode kontinuirano se razvijaju i unapređuju. Stoga je podnositelj registracije odgovoran za iznošenje odgovarajućih analitičkih podataka.

Registracija pojedinačnih sastojaka tvari od više sastojaka

Općenito bi se opisivanje identiteta tvari radi registracije trebalo provoditi kao da se radi o tvari od više sastojaka. Kao odstupanje od tog pristupa mogu se registrirati pojedinačni sastojci ako je opravdano. Odstupanja od standardnog slučaja kako bi se tvari identificirale (i možda registrirale) prema njihovim pojedinačnim sastojcima moguća su pod sljedećim uvjetima:

- zahtjevi obavješćivanja nisu smanjeni
- postoji dovoljno podataka kojima se opravdava pristup registraciji pojedinačnih sastojaka, tj. pristup u pravilu ne podrazumijeva dodatna ispitivanja (na beskralježnjacima) u usporedbi sa standardnim pristupom
- registracija pojedinačnih sastojaka je učinkovitija (izbjegavanjem brojnih registracija tvari od istih sastojaka)
- dane su informacije o sastavu pojedinačnih reakcijskih masa.

Ta se fleksibilnost ne smije zlorabiti za izbjegavanje zahtjeva za dostavu podataka. U slučaju npr. 1200 tona godišnje tvari od više sastojaka „(C + D)“, sa sastavom od 50 % C i 50 % D, taj bi pristup doveo do dviju registracija sa sljedećim informacijama:

tvar C

- tonaža 600
- zahtjevi za podatke koje treba ispuniti za > 1000 tona (Prilog X.)

tvar D

- tonaža 600
- zahtjevi za podatke koje treba ispuniti za > 1000 tona (Prilog X.)

Taj pristup treba kombinirati s obvezom zbrajanja količina iste tvari za svaku pravnu osobu u skladu s Uredbom REACH. Predlaže se da se zahtjeve za podatke utvrdi na sljedeći način:

- zbrojiti sve količine pojedinačnih sastojaka (prema količinama u tvari)
- uputiti na najveću količinu tvari koja ima taj sastojak.

Zahtjeve obavješćivanja treba odrediti na temelju najvišeg rezultata. Kod navođenja tonaže treba uzeti zbroj tonaža svih pojedinačnih sastojaka. Nekoliko pojednostavljenih primjera u nastavku ilustrira praktičnu primjenu ovoga pristupa:

1. primjer

Tvar od više sastojaka „C + D + E“ rezultat je postupka provedenog kod jedne pravne osobe, iz kojeg su proizašle različite tvari:

- tvar 1.: 50 % C i 25 % D i 25 % E, 1100 tona godišnje
- tvar 2.: 50 % C i 50 % D, 500 tona godišnje

U ovom slučaju reakcijski produkt je i početna točka: te dvije tvari treba registrirati kao tvari od više sastojaka. Ako bi se primijenio pristup registracije pojedinačnih sastojaka¹⁵, vrijedilo bi sljedeće:

Opisivanje tvari D u tom bi slučaju značilo sljedeće:

- - tonaža: $(25 \% * 1100) + (50 \% * 500) = 525$ tona godišnje

- zahtjeve obavješćivanja određuje se na temelju najstrožeg zahtjeva. U tom slučaju: >1000 tona godišnje kao ukupna tonaža tvari od više sastojaka „C + D + E“ prekoračuje 1000 tona godišnje.

Napomena: u ovom primjeru, tvari C i E treba registrirati u skladu s time.

2. primjer

Tvar od više sastojaka „G + H + I“ rezultat je postupka provedenog kod jedne pravne osobe, iz kojeg su proizašle različite tvari:

¹⁵ Ovaj primjer samo ilustrira uspostavljanje zahtjeva obavješćivanja i prijavljivanja količina. Ne govori ništa o opravdanosti pristupa.

- tvar 3.: 65 % G i 15 % H i 20 % I, 90 tona godišnje
- tvar 4.: 60 % G i 40 % H, 90 tona godišnje

Opis tvari G:

- - tonaža: $(65 \% * 90) + (60 \% * 90) = 112.5$ tona godišnje

- zahtjeve obavješćivanja određuje se na temelju najstrožeg zahtjeva. U tom slučaju: >100 tona godišnje jer ukupna tonaža sastojka G prekoračuje 100 tona godišnje.

Napomena: u ovom primjeru, tvari H i I treba registrirati u skladu s time.

Osim određivanja navedenih zahtjeva obavješćivanja treba razmotriti i broj novih istraživanja (na kralješnjacima) koje treba provesti. Prije odluke o strategiji, potencijalni podnositelji registracije moraju provjeriti postoje li dostatna istraživanja (na kralješnjacima) i hoće li predložena fleksibilnost zahtijevati manje ili više novih ispitivanja (na kralješnjacima). Treba izabrati strategiju kojom se izbjegava nova ispitivanja (na kralješnjacima).

U slučaju dvojbe, standardni put opisivanja identiteta tvari u svrhu registracije treba uvijek biti identifikacija tvari kako je proizvedena.

4.2.3. Tvari definiranog kemijskog sastava i ostale glavne identifikacijske oznake

Neke tvari (npr. anorganske minerale) koje se može identificirati njihovim kemijskim sastavom treba još opisati i dodatnim identifikacijskim oznakama kako bi dobile vlastitu identifikaciju. To mogu biti tvari od jednog sastojka ili tvari od više sastojaka, no osim parametara identifikacije tvari opisanih u prethodnim poglavljima, potrebne su ostale glavne identifikacijske oznake za jednoznačan opis identiteta tvari.

Primjeri

Neki nemetalni minerali (iz prirodnih izvora ili umjetni) jedinstvene strukture trebaju i morfologiju i mineralni sastav kako bi se tvar jasno identificirala. Kao primjer navodimo kaolin (broj CAS 1332-58-7) sastavljen od kaolinita, kalijeva aluminij silikata, glinenca i kremena.

Smjernice za ispunjavanje posebnih obveza iz Uredbe REACH za tvar u „nanooblicima“ navedene su u *Dodatku za nanooblike koji se primjenjuje uz Smjernice o registraciji i identifikaciji tvari*¹⁶. Navedeni savjeti odnose se na pitanja specifična za nanomaterijale povezana s identifikacijom i karakterizacijom nanooblika.

Pravila za davanje naziva

U načelu se treba pridržavati istih pravila kao kod tvari od jednog sastojka (poglavlje 4.2.1.) ili tvari od više sastojaka (poglavlje 4.2.2.).

Kod anorganskih minerala za sastojke se mogu koristiti mineraloški nazivi. Primjerice, apatit je tvar od više sastojaka, a čini ga skupina fosfatnih minerala koji se obično nazivaju hidroksiapatit, fluorapatit i klorapatit zbog visokih koncentracija OH-, F-, odnosno Cl- iona u kristalu. Formula smjese triju najčešćih vrsta jest $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$. Još je jedan primjer aragonit, jedna od posebnih kristalnih struktura kalcijeva karbonata.

¹⁶ Dodatak za nanooblike koji se primjenjuje uz Smjernice za registraciju i identifikaciju tvari
<https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

Identifikacijske oznake

Ove se tvari identificiraju i nazivaju prema pravilima koja vrijede za tvari od jednog sastojka (poglavlje 4.2.1.) ili tvari od više sastojaka (poglavlje 4.2.2.). Ostali specifični glavni parametri identifikacije dodaju se ovisno o tvari. Primjeri drugih glavnih identifikacijskih oznaka mogu biti elementarni sastav sa spektralnim podacima, kristalna struktura otkrivena rendgenskom difrakcijom (XRD), apsorpcijski vrhovi s infracrvenim zrakama, indeks bubrežnja, kapacitet izmjene kationa ili druga fizikalna i kemijska svojstva.

Kod minerala je važno kombinirati rezultate elementarnog sastava sa spektralnim podacima radi utvrđivanja mineraloškog sastava i kristalne strukture. Potvrda za to nalazi se u karakterističnim fizikalno-kemijskim svojstvima, kao što su kristalna struktura (prikazana rendgenskom difrakcijom), oblik, tvrdoća, kapacitet bubrežnja, gustoća i/ili veličina površine.

Primjeri specifičnih dodatnih glavnih identifikacijskih oznaka mogu se dati za pojedine minerale, budući da minerali imaju karakteristična fizikalno-kemijska svojstva koja omogućuju njihovu potpunu identifikaciju, primjerice: vrlo niska tvrdoća za milovku, kapacitet bubrežnja za bentonit, oblici diatomita, vrlo visoka gustoća barita i veličina površine (adsorpcija dušika).

Analitičke informacije

Osnovni je kriterij da treba dostaviti sve potrebne informacije kako bi se potvrdila struktura tvari. Moraju se navesti iste analitičke informacije kao za tvari od jednog sastojka (poglavlje 4.2.1.) ili tvari od više sastojaka (poglavlje 4.2.2.).

4.3. Tvari UVCB

Tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složeni reakcijski produkti ili biološki materijali (engl. **U**nknown or **V**ariable composition, **C**omplex reaction products or **B**iological materials^{17, 18, 19} ili tvari UVCB), ne mogu se dostatno identificirati s pomoću njihovog kemijskog sastava iz sljedećih razloga:

- broj sastojaka razmjerno je velik i/ili
- sastav je u značajnoj mjeri nepoznat i/ili
- promjenjivost sastava razmjerno je velika ili slabo predvidiva.

Zbog toga su za identifikaciju tvari UVCB potrebne i druge vrste informacija uz podatke o njihovom kemijskom sastavu.

Iz Tablica 5. razvidno je da su glavne identifikacijske oznake različitih vrsta tvari UVCB povezane s podrijetlom (izvorom) tvari i korištenim postupkom ili pripadaju skupini ostalih glavnih identifikacijskih oznaka (npr. „jedinstveni kromatogram ili druge analitičke metode“). Broj i vrsta identifikacijskih oznaka u Tablica 5. ilustriraju promjenjivost vrsta i ne predstavljaju iscrpan pregled. Kada je poznat kemijski sastav, npr. složenog reakcijskog produkta ili tvari biološkog podrijetla, tvar treba identificirati kao tvar od jednog sastojka ili kao tvar od više sastojaka. Posljedica definiranja tvari kao tvari UVCB jest da će svaka značajna promjena izvora ili postupka vjerojatno dati drugačiju tvar koju će trebati ponovno

¹⁷ Rasmussen K, Pettau D, Vollmer G et al. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. Tox Env Chem Vol. 69, pp. 403-416.

¹⁸ US EPA (2005-B) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Combinations of two or more substances: complex reaction products.

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.

registrirati. Ako se reakcijsku smjesu identificira kao „tvar od više sastojaka“, tvar se može dobiti i iz drugih izvora i/ili drugačijim postupcima sve dok je sastav konačne tvari unutar navedenog raspona. Prema tome, nova registracija ne bi bila potrebna.

Opće smjernice za tvari UVCB nalaze se u poglavlju 4.3.1., a specifične upute za tvari s promjenjivom duljinom ugljikovog lanca, tvari dobivene iz nafte ili sličnih izvora i enzima, kao posebne vrste tvari UVCB, u poglavlju 4.3.2.

4.3.1. Opće smjernice za tvari UVCB

U ovom se poglavlju nalaze opće smjernice za uporabu nekih glavnih identifikacijskih oznaka za identifikaciju tvari UVCB, pored parametara identifikacije tvari iz odjeljka 2. Priloga VI. Uredbi REACH.

Informacije o kemijskom sastavu

Tvari UVCB ne može se jednoznačno odrediti nazivom sastojaka prema nomenklaturi IUPAC, budući da se ne mogu identificirati svi sastojci ili ih se može odrediti generički, no bez specifičnih podataka zbog promjenjivosti sastava. Zbog nemogućnosti razlikovanja između sastojaka i nečistoća, izrazi „osnovni sastojci“ i „nečistoće“ nisu relevantni za tvari UVCB.

Međutim, kemijski sastav i identitet sastojaka treba navesti ukoliko su poznati. Opis sastava često se može dati na općenitiji način, na primjer „linearne masne kiseline C8-C16“ ili „alkoholni etoksilati s alkoholima C10-C14 i 4 – 10 jedinica etoksilata“. Uz to, informacije o kemijskom sastavu može se dati na temelju dobro poznatih referentnih uzoraka ili normi, a u mnogo slučajeva mogu se također koristiti indeksi i postojeće šifre. Ostale generičke informacije o sastavu mogu se temeljiti na raznim analitičkim metodama, primjerice kromatografskim ili spektrofotometrijskim slikama koje pokazuju karakteristični raspored vrhova.

Za tvar UVCB svi sastojci prisutni u koncentracijama $\geq 10\%$ i svi ostali poznati sastojci prisutni u koncentracijama $< 10\%$ moraju biti navedeni prema nazivu u nomenklaturi IUPAC na hrvatskom jeziku, u tipičnim koncentracijama i rasponima koncentracije.

Osim toga, za svaki sastojak mora se navesti brojana identifikacijska oznaka ako je dostupna (broj CAS i/ili broj EC ili urudžbeni broj).

Sastojci koji se ne mogu pojedinačno identificirati opisuju se u skupinama na temelju njihove kemijske prirode. U tom slučaju za svaku skupinu mora se navesti barem kemijski naziv, tipična koncentracija i raspon koncentracije. Osim toga, moraju se dostaviti molekulske i strukturne informacije ako su dostupne.

Sastojke relevantne za razvrstavanje i/ili procjenu postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari²⁰ uvijek treba opisati istim identifikacijskim oznakama, neovisno o njihovoj koncentraciji.

Nepoznate sastojke koji ne utječu na razvrstavanje mora se identificirati generičkim opisom njihove kemijske prirode u najvećoj mogućoj mjeri. Dodatke (aditive) mora se potpuno opisati na način sličan onomu koji je opisan u uputama za dobro definirane tvari.

Glavni identifikacijski parametri – naziv, podrijetlo i postupak

Budući da sam kemijski sastav nije dostatan za identifikaciju tvari, tvar se u pravilu mora identificirati uz pomoć naziva, podrijetla ili izvora uz opis proizvodnog postupka. Ostala svojstva tvari mogu također biti važne identifikacijske oznake, bilo kao relevantne generičke identifikacijske oznake (npr. vrelište) ili ključne identifikacijske oznake za specifične skupine

²⁰ Više informacija o procjeni postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari i relevantnim kriterijima nalazi se u poglavlju R11 Smjernica o zahtjevima obavješćivanja i procjeni kemijske sigurnosti: Procjena postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari

tvari (npr. katalitička aktivnost kod enzima).

1. Pravila za davanje naziva

Općenito, naziv tvari UVCB kombinacija je izvora i postupka sljedećeg općeg oblika: najprije izvor zatim postupak, odnosno postupci.

- Tvar dobivena iz bioloških izvora identificira se s pomoću naziva vrste.
- Tvar dobivena iz nebioloških izvora identificira s pomoću početnih materijala.
- Postupci se identificiraju s pomoću vrste kemijske reakcije ako se radi o sintezi novih molekula, ili kao vrsta pročišćavanja, npr. ekstrakcija, frakcioniranje, koncentriranje, ili kao ostatak.

Primjeri	
Broj EC	Naziv EC
296-358-2	Lavanda, ekstrakt Lavandula hybrida, acetiliran
307-507-9	Lavanda, ekstrakt Lavandula latifolia, sumporiran, paladijeva sol

Kod reakcijskih produkata u inventaru EC koriste se različiti formati, npr.:

- EINECS: osnovni početni materijal, reakcijski produkt(i) drugog početnog materijala, odnosno drugih početnih materijala
- ELINCS: reakcijski produkt(i) početnog materijala, odnosno početnih materijala.

Primjeri	
Broj prema inventaru EC	Naziv EC
232-341-8	Dušikasta kiselina, reakcijski produkti s 4-metil-1,3-benzendiamin hidrokloridom
263-151-3	Masne kiseline, koko, reakcijski produkti s dietilentriaminom
400-160-5	Reakcijski produkti masnih kiselina sulfatnog ulja (Tall-ulja), dietanolamina i borne kiseline
428-190-4	Reakcijski produkti: Reakcijski produkt 2,4-diamino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-il)etil]-1,3,5-triazina i cijanurične kiseline

U ovim Smjernicama generički oblik naziva jednog ili više reakcijskih produkata jest „reakcijski produkt(i) [nazivi početnih materijala]”. U načelu nazivi trebaju biti na hrvatskom jeziku i u skladu s pravilima nomenklature IUPAC. Ostale međunarodno prihvaćene oznake mogu se dodatno navesti. Preporučuje se u nazivu zamijeniti riječ „reakcija” specifičnom vrstom reakcije opisanom generički, npr. esterifikacija ili stvaranje soli itd. (vidjeti upute za četiri specifična UVCB podrazreda, u nastavku).

2. Izvor

Izvori se mogu podijeliti u dvije skupine:

2.1. *Biološki izvori*

Tvari biološkog podrijetla treba definirati navođenjem roda, vrste i obitelji, primjerice *Pinus cembra*, *Pinaceae* znači *Pinus* (rod), *cembra* (vrsta), *Pinaceae* (obitelj), i soja ili genotipa, ako su relevantni. Ako je prikladno, treba navesti i tkivo ili dio organizma iz kojeg je tvar ekstrahirana, npr. koštana srž, gušterača ili stabljika, sjemenke, odnosno korijen.

Primjeri	
Broj prema inventaru EC	Naziv EC
283-294-5	Ekstrakt <i>Saccharomyces cerevisiae</i> Opis prema inventaru EC ekstrakti i njihovi fizički promijenjeni derivati, kao što su tinkture, konkreći, apsoluti, eterična ulja, oleorezini, terpeni, frakcije bez terpena, destilati, ostatci i sl., dobiveni iz <i>Saccharomyces cerevisiae</i> , <i>Saccharomycelaceae</i> .
296-350-9	Ekstrakt <i>Arnica mexicana</i> Opis prema inventaru EC ekstrakti i njihovi fizički promijenjeni derivati, kao što su tinkture, konkreći, apsoluti, eterična ulja, oleorezini, terpeni, frakcije bez terpena, destilati, ostatci i sl., dobiveni iz <i>Arnica mexicana</i> , <i>Compositae</i>

2.2. *Kemijski ili mineralni izvori*

Kod reakcijskih produkata kemijskih reakcija, početne materijale treba opisati njihovim nazivom prema nomenklaturi IUPAC na hrvatskom jeziku. Mineralne izvore treba opisati generičkim izrazima, primjerice izrazima fosfatne rude, boksit, kaolin, prirodni plin, ugljen, treset.

3. *Postupak*

Postupci se identificiraju s pomoću vrste kemijske reakcije ako se radi o sintezi novih molekula, ili kao vrsta pročišćavanja, npr. ekstrakcija, frakcioniranje, koncentriranje, ili kao ostatak pročišćavanja.

Kod nekih tvari, npr. kemijskih derivata, postupak se mora opisati ako je kombinacija pročišćavanja i sinteze.

3.1 *Sinteza*

Između početnih materijala dolazi do kemijske ili biokemijske reakcije iz koje nastaje tvar. Primjerice, to je Grignardova reakcija, sulfonacija, enzimsko cijepanje proteazom ili lipazom itd. Mnoge derivacijske reakcije pripadaju ovoj vrsti.

Kod novo sintetiziranih tvari, za koje se ne može dati kemijski sastav, početni su materijali glavna identifikacijska oznaka zajedno s navođenjem reakcije, tj. vrste kemijske reakcije. Vrsta kemijske reakcije otkriva koje bi molekule mogle biti prisutne u tvari. Postoji nekoliko vrsta konačnih kemijskih reakcija: hidroliza, esterifikacija, alkilacija, klorinacija i sl. Budući da se tako daju samo generičke informacije o mogućim proizvedenim tvarima, u mnogim slučajevima za potpuni opis svojstava i identifikaciju tvari bit će potreban i jedinstveni kromatogram.

Primjeri	
Brojevi prema inventaru EC	Naziv EC
294-801-4	Laneno ulje, epoksidirano, reakcijski produkti s tetraetilenpentaminom
401-530-9	Reakcijski produkt (2-hidroksi-4-(3-propenoksi)benzofenona i trietoksisilana) s (produktom hidrolize silicija i metiltrimetoksisilana)

3.2 Pročišćavanje

Pročišćavanje se može primijeniti na mnogo različitih načina na tvari prirodnog ili mineralnog podrijetla, kada se kemijski identitet sastojaka ne mijenja, no promijenjena je njihova koncentracija, npr. hladna obrada biljnog tkiva, potom ekstrakcija alkoholom.

Pročišćavanje se može dalje definirati u postupcima, kao što je ekstrakcija. Identifikacija tvari ovisi o vrsti postupka:

- o kod tvari dobivenih fizikalnim metodama, npr. pročišćavanjem ili frakcioniranjem, treba navesti raspon gornjih graničnih vrijednosti i frakcijski parametar (npr. veličinu molekula, duljinu lanca, vrelište, raspon hlapljivosti itd.)
- o kod tvari dobivenih koncentriranjem, kao što su produkti metalurških postupaka, precipitati centrifugiranja, ostatci na filtru itd., koncentriranje se mora opisati zajedno s generičkim sastavom dobivene tvari u usporedbi s početnim materijalom.

Primjeri	
Broj prema inventaru EC	Naziv EC
408-250-6	Koncentrat organovolframova spoja (reakcijski produkti volframova heksaklorida s 2-metilpropan-2-ol, nonilfenol i pentan-2,4-diona)

- o kod ostataka specifičnih reakcija, kao što su troske, katrani i teški ostatci, postupak se mora opisati zajedno s generičkim sastavom dobivene tvari

Primjeri	
Broj prema inventaru EC	Naziv EC
283-659-9	Kositar, ostatci taljenja Opis prema inventaru EC Tvar dobivena uporabom i proizvodnjom kositra i njegovih legura

	dobivenih iz primarnih i sekundarnih izvora uključujući reciklirane biljne intermedijere. Sastoji se prvenstveno od spojeva kositra i može sadržavati druge rezidualne neželjezne metale i njihove spojeve
293-693-6	Sojina sačma, bjelančevinska ekstrakcija ostatci Opis prema inventaru EC Nusproizvod, koji sadrži prvenstveno ugljikohidrate, proizveden etanolnom ekstrakcijom odmašćene soje.

- Kod ekstrakata treba navesti metodu ekstrakcije, otapalo korišteno pri ekstrakciji i druge relevantne uvjete (kao što je temperatura, odnosno raspon temperature).
- Kod kombiniranih postupaka treba opisati svaki korak (generički) uz informacije o izvoru. Ti kombinirani postupci naročito su relevantni kod kemijskih derivacija.

Primjeri:

- Biljka se najprije ekstrahira, ekstrakt se destilira, a destilirana frakcija biljnog ekstrakta koristi se za kemijsku derivaciju. Dobivena tvar može se dalje pročišćavati. Pročišćeni produkt može u konačnici biti dobro definiran svojim kemijskim sastavom pa nema potrebe identificirati tvar kao UVCB. Ako se produkt i dalje identificira kao tvar UVCB, kombinirani postupak može se opisati kao „pročišćeni kemijski derivat destilirane frakcije biljnog ekstrakta“.
- Ako daljnja obrada ekstrakta uključuje samo fizikalnu izmjenu, sastav će se promijeniti bez namjerne sinteze novih molekula. Ipak, promjena sastava daje drugačiju tvar, npr. destilat ili precipitat biljnog ekstrakta.
- U proizvodnji naftnih proizvoda često se kombiniraju kemijska derivacija i frakcioniranje. Na primjer, destilacija nafte i krekiranje stvaraju frakciju početnog materijala, no i nove molekule. U tom slučaju, obje vrste postupka treba identificirati ili destilat treba navesti kao početni materijal krekiranja. To se naročito odnosi na naftne derivate koji često nastaju kao rezultat kombinacije postupaka. Međutim, može se koristiti poseban specifičan sustav za identifikaciju naftnih tvari (vidjeti poglavlje 4.3.2.2.).

Budući da kemijski derivat ekstrakta ne sadrži iste sastojke kao ekstrakt-roditelj, treba ga smatrati različitom tvari. Posljedica ovoga pravila može biti odstupanje identifikacije s pomoću naziva i opisa od prethodnog naziva i opisa u popisu EINECS. Kada je popis EINECS inicijalno uspostavljen, ekstrakti iz različitih postupaka, različita otapala pa čak i fizikalni ili kemijski derivati često su bili obuhvaćeni zajedno u jednoj stavci. Međutim, u skladu s Uredbom REACH te tvari treba registrirati odvojeno.

4. Ostali parametri za identifikaciju tvari

Osim kemijskog naziva, izvora i opisa postupka, tvar UVCB treba uključivati sve ostale relevantne informacije kako je propisano u odjeljku 2. Priloga VI. Uredbi REACH.

Ostali identifikacijski parametri mogu biti relevantni posebice za specifične vrste tvari UVCB. Ostale dodatne identifikacijske oznake mogu biti:

- generički opis kemijskog sastava
- jedinstveni kromatogram ili druge analitičke metode
- referentni materijal (npr. ISO)
- fizikalno-kemijski parametri (npr. vrelište)
- indeks boje
- broj AISE.

Specifične upute o pravilima i kriterijima za uporabu informacija o nazivu, izvoru i postupku

pri identifikaciji tvari UVCB navedene su u nastavku za različite vrste izvora i postupaka. U sljedećim ulomcima četiri podvrste tvari UVCB opisane su kao kombinacija bioloških ili kemijskih/mineralnih izvora i postupaka (sinteza ili pročišćavanje).

UVCB podvrsta 1, izvor je biološki, a postupak je sinteza

Biološke tvari mogu se mijenjati u (bio)kemijskom postupku kako bi nastali sastojci koji nisu bili prisutni u početnom materijalu, kao što su kemijski derivati biljnih ekstrakata ili produkti enzimske obrade ekstrakata. Primjerice, bjelančevine se može hidrolizirati uz pomoć proteaza kako bi nastali oligopeptidi ili se celulozu iz drveta može karboksilirati kako bi dala karboksimetil celulozu (CMC).

Produkti fermentacije mogu također pripadati ovoj UVCB podvrsti. Na primjer, vinasa je produkt fermentacije šećera koji, u usporedbi sa šećerom, sadrži mnogo različitih sastojaka. Kada se produkti fermentacije dalje pročišćavaju, tvari mogu u konačnici postati takve da ih se može potpuno identificirati njihovim kemijskim sastavom pa ih ne treba više identificirati kao tvari UVCB.

Enzimi su posebna skupina tvari koje se mogu dobiti ekstrakcijom i daljnjim pročišćavanjem iz izvora biološkog podrijetla. Unatoč tome što se izvor i postupak mogu potanko opisati, to ne stvara specifične informacije o enzimu. Za te tvari treba koristiti specifičan sustav razvrstavanja, naziva i identifikacije (vidjeti poglavlje 4.3.2.3.).

Pri identifikaciji tvari treba navesti krajnji postupak i/ili sve ostale postupke relevantne za identitet tvari.

Opis kemijskog postupka mora biti generički opis vrste postupka (esterifikacija, alkalna hidroliza, alkilacija, klorinacija, supstitucija itd.), zajedno s relevantnim okolnostima postupka.

Opis biokemijskog postupka može biti generički opis katalizirane reakcije, zajedno s nazivom enzima koji se koristi kao katalizator u reakciji.

Za tvari proizvedene fermentacijom ili (tkivnim) kulturama određenih vrsta potrebno je navesti vrstu koja fermentira, vrstu i opće uvjete fermentacije (šarža ili kontinuirana, aerobna, anaerobna, anoksična, temperatura, pH itd.), zajedno sa svim daljnjim postupcima koji se primjenjuju za izoliranje produkata fermentacije, npr. centrifugiranje, taloženje, ekstrakcija itd. Ako se te tvari dodatno pročišćavaju, to može rezultirati frakcijom, koncentratom ili ostatkom. Tvari koje prolaze daljnju obradu identificiraju se dodatnim opisom daljnjih postupaka.

UVCB podvrsta 2, izvor je kemijski ili mineralni, a postupak je sinteza

Tvari UVCB dobivene iz kemijskih ili mineralnih izvora, izvedene uz pomoć procesa u kojem se sintetiziraju nove molekule, jesu „reakcijski produkti“. Primjeri kemijskih reakcijskih produkata jesu produkti esterifikacije, alkilacije ili klorinacije. Biokemijske reakcije primjenom izoliranih enzima posebne su vrste kemijskih reakcija. Međutim, ako se složeni biokemijski put sinteze primijeni uporabom cijelih mikroorganizama, bolje je dobivenu tvar smatrati produktom fermentacije i identificirati je uz pomoć fermentacijskog postupka i vrste koja sudjeluje u fermentaciji nego na temelju početnih materijala (vidjeti UVCB podvrstu 4.).

Ne treba svaki reakcijski produkt automatski opisati kao UVCB. Ako se reakcijski produkt može dostatno definirati kemijskim sastavom (uključujući izvjesnu promjenjivost), preporučuje se definiranje tvari kao tvari od više sastojaka (vidjeti poglavlje 4.2.2.). Samo ako je sastav reakcijskog produkta nedostatno poznat ili slabo predvidiv tvar treba identificirati kao tvar UVCB („reakcijski produkt“). Identifikacija reakcijskog produkta temelji se na početnim materijalima za reakciju i na (bio)kemijskoj reakciji u kojoj nastaje tvar.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv prema popisu EINECS	Broj CAS
294-006-2	Nonandioična kiselina, reakcijski produkti s 2-amino-2-metil-1-propanolom	91672-02-5
294-148-5	Formaldehid, reakcijski produkti s dietilen glikolom i fenolom	91673-32-4

Glavna identifikacijska oznaka za reakcijske produkte jest opis proizvodnog postupka. Pri identifikaciji tvari treba navesti krajnju ili najrelevantniju fazu postupka. Opis kemijskog postupka mora biti generički opis vrste postupka (npr. esterifikacija, alkalna hidroliza, alkilacija, klorinacija, supstitucija itd.), zajedno s relevantnim okolnostima postupka. Biokemijski postupak treba opisati vrstom reakcije, zajedno s nazivom enzima koji se koristi kao katalizator u reakciji.

UVCB podvrsta 3, izvor je biološki, a postupak je pročišćavanje

Tvari UVCB biološkog podrijetla, nastale postupkom pročišćavanja u kojem nisu namjerno stvorene nove molekule mogu biti npr. ekstrakti, frakcije ekstrakta, koncentratni ekstrakta, pročišćeni ekstrakt ili ostatci tvari biološkog podrijetla.

Čim se ekstrakt dalje obrađuje, tvar više nije identična ekstraktu, nego je nova tvar koja pripada drugoj UVCB podvrsti, npr. frakcija ili ostatak ekstrakta. Te se tvari mora opisati dodatnim parametrima (daljnje) obrade. Ako se ekstrakt mijenja u kemijskim ili biokemijskim reakcijama, stvarajući nove molekule (derivate), identifikacija tvari obuhvaćena je uputama za tvari UVCB podvrste 2. ili tekstem u poglavlju 4.2. koji se odnosi na dobro definiranu tvar.

Razlikovanje ekstrakata koji prolaze daljnju obradu može za posljedicu imati neusklađenost novog naziva i opisa s onima na EINECS popisu. Kada se uspostavlja taj inventar, takvo razlikovanje nije se radilo pa je moguće da su sve vrste ekstrakata s različitim otapalima i ekstrakti iz različitih postupaka, obuhvaćeni zajedno u jednoj stavci.

Prva glavna identifikacijska oznaka ove podvrste tvari UVCB jest obitelj, rod i vrsta organizma iz kojeg tvar potječe. Ako je prikladno, treba navesti i tkivo ili dio organizma iz kojeg je tvar ekstrahirana, npr. koštanu srž, gušteraču ili stabljiku, sjemenke, odnosno korijen. Kod tvari mikrobiološkog podrijetla treba definirati soj i genotip vrste.

Ako se tvar UVCB dobiva iz različite vrste, smatrat će se drugačijom tvari, čak i ako je sličan kemijski sastav.

Primjeri	
Broj prema inventaru EC	Naziv prema popisu EINECS
290-977-1	Ekstrakt oksidiranog kampeče drveta (Haematoxylon campechianum) Opis prema inventaru EC Ova je tvar identificirana u indeksu boja kao C. I. 75290 oksidirana.
282-014-9	Ekstrakti gušterače, deproteinizirani

Druga glavna identifikacijska oznaka jest obrada tvari, npr. ekstrakcija, frakcioniranje, pročišćavanje ili koncentracija, odnosno postupak koji utječe na sastav ostatka. Dakle, pročišćavanje ekstrakata dobivenih različitim postupcima, npr. korištenjem različitih otapala ili koraka pročišćavanja, dat će različite tvari.

Što je više koraka pročišćavanja, to je vjerojatnija identifikacija tvari na temelju njezinog kemijskog sastava. U tom slučaju, različite vrste izvora ili različite modifikacije postupka ne daju automatski drugačiju tvar.

Glavni identifikacijski parametar za tvari biološkog podrijetla jest opis relevantnih postupaka. Kod ekstrakata detaljnost opisa postupka ekstrakcije mora biti na razini relevantnoj za identificiranje tvari. Mora se navesti barem uporabljeno otapalo.

Kada se za proizvodnju tvari koriste daljnji postupci, kao što je frakcioniranje ili koncentriranje, treba opisati kombinaciju relevantnih koraka, npr. kombinaciju ekstrakcije i frakcioniranja, uključujući i raspon graničnih vrijednosti.

UVCB podvrsta 4, izvor je kemijski ili mineralni, a postupak je pročišćavanje

Tvari nebiološkog podrijetla, tj. one koje same jesu ili potječu iz minerala, ruda, ugljena, prirodnog plina i sirove nafte, ili jesu, odnosno potječu iz drugih sirovina za kemijsku industriju, a nastale obradom bez namjernih kemijskih reakcija mogu biti (pročišćene) frakcije, koncentracije ili ostatci tih postupaka.

Ugljen i sirova nafta koriste se u postupcima destilacije ili otplinjavanja i tako proizvode raznovrsne tvari, npr. naftne tvari i plinove itd., kao i ostatke, kao što su katrani i troske. Vrlo često destiliran ili na drugi način frakcioniran produkt odmah se dalje obrađuje, a obrada može uključivati i kemijske reakcije. U takvim slučajevima identifikaciju tvari treba provesti prema uputama navedenim za tvari UVCB podvrste 2., budući da je postupak relevantniji od izvora.

Za naftne tvari koristi se poseban identifikacijski sustav (vidjeti poglavlje 4.3.2.2.). Tvari obuhvaćene tim sustavom uključuju frakcije i produkte kemijskih reakcija.

Ostale tvari UVCB podvrste 4. mogu uključivati rude, rudne koncentrate i troske koje sadrže različite količine metala koji se mogu ekstrahirati metalurškom obradom.

Minerale, kao što su bentonit ili kalcijev karbonat može se obraditi, npr. otapanjem u kiselini i/ili kemijskom precipitacijom ili u kolonama s ionskim izmjenjivačima. Kada je kemijski sastav potpuno definiran, minerale treba identificirati prema uputama u odgovarajućem dijelu poglavlja 4.2. Ako se minerali obrađuju samo mehaničkim metodama, npr. mljevenjem, sisanjem, centrifugiranjem, flotacijom itd. smatra ih se istima kao minerali koji su iskopani. Minerale proizvedene u proizvodnom postupku može se – u svrhu identifikacije²¹ – smatrati istima kao što su njihovi prirodni ekvivalenti, pod uvjetom da im je sastav sličan, a profil toksičnosti identičan.

Glavni identifikacijski parametar za tvari nebiološkog podrijetla jest opis relevantnih postupaka.

Kod frakcija treba opisati postupak frakcioniranja s parametrima i rasponom graničnih vrijednosti za izoliranu frakciju, zajedno s opisom prethodnih postupaka, kad je to relevantno.

Kod koncentriranja treba navesti vrstu postupka, npr. isparavanje, precipitaciju itd. kao i odnos početne i završne koncentracije osnovnih sastojaka, uz informacije o prethodnim

²¹ Isti pristup identifikaciji minerala koji se pojavljuju u prirodi i onih kemijski proizvedenih ne znači neophodno da su i pravni zahtjevi isti (npr. izuzeća od obveze registracije).

postupcima, odnosno koracima.

Glavni identifikacijski parametar za ostatke nebiološkog podrijetla jest opis postupka iz kojeg je nastao ostatak. Postupak može biti bilo koja fizikalna reakcija koja stvara ostatke, npr. pročišćavanje, frakcioniranje, koncentriranje.

Analitičke informacije

Tvari UVCB uključuju vrlo različite vrste tvari, koje se razlikuju po parametrima kao što su izvor i proizvodni postupak. Stoga bi trebalo dostaviti odgovarajuće analitičke metode za pružanje informacija o sastavu tvari UVCB koje se razlikuju od slučaja do slučaja. Nadalje, uvid u načine primjene takvih metoda kontinuirano se razvijaju i unapređuju. Stoga je podnositelj registracije odgovoran za iznošenje odgovarajućih analitičkih podataka kako bi dostavio najkvalitetnije informacije i omogućio identifikaciju tvari.

Za karakterizaciju tvari UVCB može se upotrijebiti nekoliko kvalitativnih metoda, a primjeri uključuju UV/Vis, infracrvenu i masenu spektrometriju, nuklearnu magnetsku rezonanciju i difrakciju rendgenskih zraka.

Kvantitativni podatci, kao što su kromatogrami ili podatci o difrakciji koji se mogu upotrebljavati za specifikaciju, dostavljaju se radi karakterizacije sastava tvari.

Opis analitičkih metoda mora uključivati primijenjene eksperimentalne protokole i tumačenje prijavljenih rezultata.

4.3.2. Specifične vrste tvari UVCB

U ovom se odjeljku nalaze smjernice za specifične skupine tvari UVCB: tvari s promjenjivom duljinom ugljikova lanca (4.3.2.1.), tvari dobivene iz nafte ili sličnih izvora (4.3.2.2.) i enzime (4.3.2.3.).

4.3.2.1 Tvari promjenjive duljine ugljikova lanca

U ovoj skupini tvari UVCB su dugolančani alkini s promjenjivom duljinom ugljikova lanca, npr. parafini (alkani) i olefini (alkeni). Te se tvari dobivaju derivacijom prirodnih masti ili ulja ili se umjetno proizvode. Prirodne su masti biljnog ili životinjskog podrijetla. Dugolančani ugljikovi spojevi dobiveni iz biljaka obično imaju duljine ugljikovih lanaca s parnim brojem atoma, dok dugolančane tvari dobivene iz životinjskih izvora uključuju i (neke) tvari s duljinom lanca s neparnim brojem ugljikovih atoma. Umjetno proizvedene dugolančane tvari mogu se sastojati od različitih duljina ugljikovih lanaca, s parnim ili neparnim brojem atoma.

Identifikacijske oznake i pravila za davanje naziva

U ovoj su skupini tvari čiji pojedinačni sastojci imaju zajedničko strukturno obilježje: jednu ili više alkilnih skupina u dugom lancu često s pridruženom funkcionalnom skupinom. Sastojci se međusobno razlikuju prema jednoj ili više sljedećih osobina skupine alkilnog lanca:

- duljini ugljikova lanca (broju atoma ugljika)
- zasićenosti
- strukturi (ravnolančanoj ili razgranatoj) i
- položaju funkcionalne skupine.

Kemijski identitet sastojaka može se dostatno opisati i sustavno odrediti uz pomoć sljedećih

triju opisnika (deskriptora):

- **alkilni opisnik** opisuje broj atoma ugljika u lancu alkilne skupine, odnosno skupina.
- **opisnik funkcionalnosti** identificira funkcionalnu skupinu tvari, npr. amini, amonijev ion, karboksilne kiseline.
- **opisnik soli** opisuje katione, odnosno anione svih soli, npr. natrij (Na^+), karbonat (CO_3^{2-}), klorid (Cl^-).

Alkilni opisnik

- U pravilu se alkilni opisnik C_{x-y} odnosi na zasićene, ravnolančane alkilne lance koji sadrže sve duljine od x do y, npr. C_{8-12} odgovara C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} i C_{12} .
- Treba ga navesti ako se alkilni opisnik odnosi samo na parne ili neparne alkilne lance, npr. $\text{C}_{8-12(\text{parni})}$.
- Treba ga navesti ako se alkilni opisnik odnosi (i) na razgranate alkilne lance, npr. C_{8-12} (razgranati) ili $\text{C}_{8-12(\text{ravnolančani i razgranati})}$.
- Treba ga navesti ako se alkilni opisnik odnosi (i) na nezasićene alkilne lance, npr. $\text{C}_{12-22(\text{C}_{18} \text{ nezasićeni})}$.
- Uska raspodjela duljina alkilnog lanca ne obuhvaća široku ni obrnuto, npr. C_{10-14} ne odgovara C_{8-18} .
- Alkilni opisnik može upućivati i na izvor alkilnih lanaca, npr. koko, loj. Međutim, raspored u ugljikovu lancu mora odgovarati izvornome.

Opisani sustav treba koristiti za opis tvari s promjenjivim duljinama ugljikova lanca. Nije prikladan za dobro definirane tvari koje se može identificirati točno određenom kemijskom strukturom.

Informacije o alkilnom opisniku, opisniku funkcionalnosti i opisniku soli osnova su određivanja naziva ove vrste tvari UVCB. Osim navedenoga, informacije o izvoru i postupku mogu poslužiti za precizniju identifikaciju tvari.

Primjeri		
Opisnici	Naziv	
Alkilni opisnik Opisnik funkcionalnosti Opisnik soli	duljine alkilnih lanaca C_{10-18} masne kiseline (karboksilna kiselina) kadmijeve soli	masne kiseline (C_{10-18}) kadmijeve soli
Alkilni opisnik Opisnik funkcionalnosti Opisnik soli	di- C_{10-18} -alkil-dimetil amonij klorid	di- C_{10-18} -alkil- dimetilamonijev klorid
Alkilni opisnik Opisnik funkcionalnosti Opisnik soli	trimetil-lojev alkil amonij klorid	trimetil-lojev alkil-amonijev klorid

4.3.2.2 Tvari dobivene iz nafte ili izvora sličnih nafti

Tvari dobivene iz nafte (naftne tvari) ili sličnih izvora (npr. ugljen) jesu tvari vrlo složenog i

promjenjivog ili djelomično nedefiniranog sastava. U ovom poglavlju naftne tvari služe kao primjer identifikacije te posebne vrste tvari UVCB. Međutim, isti se pristup može primijeniti na ostale tvari dobivene iz sličnih izvora, kao što je ugljen.

Početni materijali koji se koriste u naftno-prerađivačkoj industriji mogu biti sirova nafta ili bilo koji rafinerijski tok dobiven uz pomoć jednog ili više postupaka. Sastav krajnjih proizvoda ovisi o sirovoj nafti korištenoj u proizvodnji (budući da sastav sirove nafte ovisi o mjestu odakle se crpi) i o primijenjenim rafinerijskim postupcima. Stoga u sastavu naftnih tvari postoje prirodne razlike¹⁷, neovisne o postupku.

1. **Pravila za davanje naziva**

Kod identifikacije naftnih tvari preporučuje se dati naziv prema priznatoj nomenklaturi²². Taj se naziv obično sastoji od rafinerijskog postupka, izvora i općeg sastava ili svojstava. Ako tvar sadrži više od 5 % masenog udjela aromatskih ugljikovodika s kondenziranim četveročlanim do šestočlanim prstenima, taj se podatak mora uključiti u opis. Za naftne tvari koje imaju EINECS broj treba koristiti naziv iz inventara EC.

2. **Identifikacijske oznake**

Izrazi i definicije za identifikaciju naftnih tvari obično uključuju izvor, rafinerijski postupak, opći sastav, ugljikov broj, raspon vrelišta ili ostala prikladna fizikalna svojstva, te prevladavajuću vrstu ugljikovodika²².

Treba navesti identifikacijske parametre iz odjeljka 2. Priloga VI. Uredbi REACH. Podrazumijeva se da se naftne tvari proizvode prema specifikacijama koje se odnose na uporabu, a ne na sastav. Stoga su obilježja kao što su naziv, raspon duljine ugljikova lanca, vrelište, viskozitet, granične vrijednosti i ostala fizikalna svojstva obično korisnija za jasno identificiranje naftne tvari nego informacije o sastavu.

Iako kemijski sastav nije primarna identifikacijska oznaka za tvar UVCB, treba navesti sve sastojke u koncentraciji $\geq 10\%$ i poznate sastojke u koncentraciji $< 10\%$, dok sastav treba opisati generički, navodeći npr. raspon molekulske mase, alifatske i aromatske spojeve, stupanj hidrogenacije i ostale osnovne informacije. Skupine sastojaka koje se ne mogu pojedinačno identificirati također treba opisati istim parametrima. Dapače, svaki sastojak niže koncentracije koji ima utjecaj na razvrstavanje opasnosti treba identificirati nazivom i tipičnom koncentracijom.

4.3.2.3 **Enzimi**

Enzimi se najčešće proizvode fermentacijom mikroorganizama, no ponekad su i biljnog ili životinjskog podrijetla. Koncentrirana otopina enzima dobivena fermentacijom ili ekstrakcijom, a potom pročišćavanjem, osim vode sadrži aktivnu bjelančevinu (enzim) i ostale sastojke koje čine ostatci fermentacije, npr. bjelančevine, peptide, aminokiseline, ugljikohidrate, lipide i anorganske soli.

Za potrebe identifikacije, bjelančevinu (enzim), zajedno s ostalim sastojcima dobivenim fermentacijom ili ekstrakcijom, no isključujući vodu, koja može biti odvojena bez utjecaja na stabilnost bjelančevine ili promjenu njezina sastava, treba smatrati tvarima.

Enzim obično sadrži 10-80 % (masenog udjela) bjelančevine. Ostali sastojci prisutni su u različitim postotcima i ovise o organizmu koji se koristio u proizvodnji, fermentacijskom mediju i uvjetima provođenja fermentacije, kao i o daljnjem pročišćavanju, no sastav će

²² US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Candidate list of chemicals substances Addendum I. Generic terms covering petroleum refinery process streams. US EPA, Office of Toxic Substances, Washington DC 20460.

obično biti unutar raspona navedenog u sljedećoj tablici.

Aktivni enzim (bjelančevina)	10 – 80 %
Ostale bjelančevine + peptidi i aminokiseline	5 – 55 %
Ugljikohidrati	3 – 40 %
Lipidi	0 – 5 %
Anorganske soli	1 – 45 %
Ukupno	100 %

Enzim treba identificirati kao tvar UVCB zbog njegove promjenjivosti i djelomice nepoznata sastava. Bjelančevinu (enzim) treba smatrati sastojkom tvari UVCB. Enzimi visoke čistoće mogu se identificirati kao tvari dobro definiranog sastava (tvari od jednog sastojka ili tvari od više sastojaka) te ih u skladu s time treba identificirati.

Glavna identifikacijska oznaka enzima na popisu EINECS jest katalitička aktivnost. Enzimi su navedeni kao generički unosi bez dodatnih specifikacija ili s posebnim unosima koji ukazuju na izvorni organizam ili supstrat.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv prema popisu EINECS	Broj CAS
278-547-1	Proteinaza, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Proteinaza, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Elastaza (svinjska gušterača)	39445-21-1
262-402-4	Mananaza	60748-69-8

Studija o enzimima koju je naručila Europska komisija sugerirala je identifikaciju enzima u skladu s međunarodnim sustavom za nomenklaturu enzima, IUBMB (Međunarodna unija za biokemiju i molekularnu biologiju).²³ Taj je pristup prihvaćen u ovim Smjernicama jer omogućava sustavniju, detaljniju i sveobuhvatniju identifikaciju enzima u usporedbi s popisom EINECS.

²³ UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Collection of Information on Enzymes. Final report. Suradnja između Savezne agencije za okoliš i Međusveučilišnog istraživačkog centra za tehnologiju, rad i kulturu (IFF/IFZ). Ugovor br. B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

1. Pravila za davanje naziva

Enzimima se daju nazivi prema pravilima nomenklature IUBMB.

U sustavu razvrstavanja prema nomenklaturi IUBMB dodjeljuje se jedinstveni četveroznamenasti broj za svaku vrstu enzima i katalitičku funkciju (npr. 3.2.1.1. for α -amilazu)²⁴. Svaki broj može sadržavati enzime promjenjive aminokiselinske sekvencije i podrijetla, no funkcionalnost enzima je identična. Za identifikaciju tvari treba koristiti naziv i broj iz nomenklature IUBMB. Nomenklatura IUBMB obuhvaća šest glavnih skupina enzima:

- 1. oksidoreduktaze
- 2. transferaze
- 3. hidrolaze
- 4. liaze
- 5. izomeraze
- 6. ligaze

Slijedi primjer stavke u nomenklaturi IUBMB:

EC 3.4.22.33

Prihvaćeni naziv: bromelain iz voća

Reakcija: hidrolizira bjelančevine i nema veliku specifičnost za peptidne veze. Bz-Phe-Val-Arg⁺NHMec dobar je sintetski supstrat, a loš supstrat je Z-Arg-Arg-NHMec jer ga enzim ne raskida (c.f. bromelain stabljike).

Ostali nazivi: bromelain iz soka, ananaza, bromelaza, bromelin, ekstranaza, bromelain iz soka, pinaza, enzim ananasa, traumanaza, bromelain iz voća FA2.

Primjedbe: Enzim iz biljke ananasa, *Ananas comosus* ne inhibira pileći cistatin. Druga cisteinska endopeptidaza, male molekulske mase i slične aktivnosti prema supstratu, pingvinain (prethodno EC 3.4.99.18), dobiva se iz srodne biljke, *Bromelia pinguin*, no pingvinain se razlikuje od bromelaina iz voća po tome što ga inhibira pileći cistatin [4].²⁵ U porodici peptidaza C1²⁶ (obitelj papaina). Ranije EC 3.4.22.5 i uključen u EC 3.4.22.4, reg. broj CAS: 9001-00-7.

Poveznice na druge baze podataka:

[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)

Opće reference:

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

Yamada, F., Takahashi, N. and Murachi, T. Purification and characterization of a proteinase

²⁴ Izrazi „broj EC“ (\equiv Enzyme Commission) i „broj IUBMB“ često se koriste kao sinonimi. Kako bi se izbjegle nejasnoće, preporučuje se korištenje izraza „broj IUBMB“ za šifru od 4 broja iz nomenklature IUBMB.

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

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

from pineapple fruit, fruit bromelain FA2. *J. Biochem. (Tokyo)* 79 (1976) 1223-1234. [PMID: 956152]

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

Primjeri razvrstavanja enzima prema sustavu IUBMB

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

Proteaze se numeriraju prema sljedećim kriterijima:

3.	Hidrolaze
3.4	Djeluju na peptidne veze (peptidaze), s podrazredima:
3.4.1	α -amino-acil-peptid hidrolaze (sada u EC 3.4.11)
3.4.2	peptidil-aminokiselinske hidrolaze (sada u EC 3.4.17)
3.4.3	dipeptid hidrolaze (sada u EC 3.4.13)
3.4.4	peptidil peptid hidrolaze (sada u EC 3.4)
3.4.11	aminopeptidaze
3.4.12	peptidil-aminokiselinske hidrolaze ili acil-aminokiselinske hidrolaze (sada u 3.4)
3.4.13	dipeptidaze
3.4.14	dipeptidaze dipeptidil-peptidaze i tripeptidil-peptidaze
3.4.15	peptidil-dipeptidaze
3.4.16	karboksipeptidaze serinskog tipa
3.4.17	metalokarboksipeptidaze
3.4.18	karboksipeptidaze cisteinskog tipa
3.4.19	omega peptidaze
3.4.21	serinske endopeptidaze
	Nadalje, specifični enzimi identificiraju se na sljedeći način:
3.4.21.1	kimotripsin
3.4.21.2	kimotripsin C
3.4.21.3	metridin

3.4.21.4	tripsin
3.4.21.5	trombin
3.4.21.6	koagulacijski faktor Xy
3.4.21.7	plazmin
3.4.21.8	sada u EC 3.4.21.34 i EC 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidaza
3.4.21.10	akrozin
3.4.21.11	sada u EC 3.4.21.36 i EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 α-litična endopeptidaza
...	
3.4.21.105	
3.4.99	endopeptidaze nepoznatog katalitičkog mehanizma

Primjeri iz popisa EINECS s dodanim brojem IUBMB

Broj prema inventaru EC	Naziv prema popisu EINECS	Broj CAS	Broj IUBMB
278-547-1	Proteinaza, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Suptilizin	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Celulaza	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identifikacijske oznake

Enzimi se identificiraju na temelju bjelančevina koje sadrže (nomenklatura IUBMB) i ostalih sastojaka iz fermentacije. Osim bjelančevina, svaki specifičan sastojak obično je prisutan u koncentraciji do 1 %. Ako identitet tih specifičnih sastojaka nije poznat, može ih se naznačiti u skupinama (tj. bjelančevine, peptidi, aminokiseline, ugljikohidrati, lipidi i anorganske soli). Međutim, individualne sastojke treba naznačiti ako su njihovi identiteti poznati ili je njihova koncentracija jednaka ili viša od 10 %, odnosno ako su relevantni za razvrstavanje i označavanje i/ili procjenu postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari²⁷.

²⁷ Više informacija o procjeni postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari i relevantnim kriterijima nalazi se u poglavlju R11 Smjernica o zahtjevima obavješćivanja i procjeni kemijske sigurnosti: Procjena postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari

Enzimske bjelančevine

Identifikacija enzima u koncentratu treba uključiti:

- broj IUBMB
- nazive prema nomenklaturi IUBMB (sustavni naziv, nazivi enzima, sinonimi)
- primjedbe koje daje IUBMB
- reakciju i vrstu reakcije
- broj i naziv EC, prema potrebi
- broj i naziv CAS, ako su dostupni

Treba navesti reakciju koju je enzim izazvao. reakciju je definirao IUBMB

Primjer

α -amilaza: polisaharid koji sadrži α -(1-4)-povezane jedinice glukoza + H₂O = maltooligosaharid, endohidroliza 1,4- α -D-glukoziidne veze u polisaharidima koji sadrže najmanje tri povezane 1,4- α -D-glukoziidne jedinice

Vrstu reakcije treba odrediti prema vrsti enzima. To može biti oksidacija, redukcija, eliminacija, adicija ili naziv reakcije.

Primjer

α -amilaza: hidroliza O-glikozilnih veza (endohidroliza)

Ostali sastojci

Treba identificirati sve sastojke kojih ima ≥ 10 % (masenog udjela) ili su relevantni za razvrstavanje i označavanje i/ili procjenu postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari²⁸. Identitet sastojaka kojih je manje od 10 % može se naznačiti po skupinama. Treba navesti njihovu tipičnu koncentraciju ili raspon koncentracije, tj.:

- (gliko)bjelančevine
- peptidi i aminokiseline
- ugljikohidrati
- lipidi
- anorganske tvari (npr. natrijev klorid ili ostale anorganske soli).

Ako nije moguće dostatno identificirati ostale sastojke enzima, treba navesti organizam (rod i soj ili genotip, ako su relevantni) korišten u proizvodnji kao kod ostalih tvari UVCB biološkog podrijetla.

Može se navesti dodatne parametre ako su dostupni, npr. funkcionalne parametre (tj. optimalni pH ili temperaturu, odnosno njihove raspone), kinetičke parametre (tj. specifičnu aktivnost ili obrtni broj), ligande, supstrate i produkte te kofaktore.

²⁸ Više informacija o procjeni postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari i relevantnim graničnim vrijednostima koncentracije nalazi se u odjeljku 3.2. o procjeni postojanih, bioakumulativnih i otrovnih tvari i procjeni kemijske sigurnosti TGD-a.

5. KRITERIJI ZA PROVJERU ISTOVJETNOSTI TVARI

Prilikom provjere mogu li se tvari različitih proizvođača/uvoznika smatrati istima treba se pridržavati određenih pravila. Ta pravila primijenjena prilikom uspostave popisa EINECS trebaju biti zajednička osnova za identificiranje i davanje naziva tvari pa tako i za pronalazak mogućeg supodnositelja prijave za konkretnu tvar^{5, 6, 16, 29, 30}. Međutim, tvari koje se ne smatraju istima mogu se, na temelju stručne procjene, smatrati strukturno povezanim. U svakom slučaju, zajedničko korištenje podataka o tim tvarima moguće je ako je znanstveno opravdano. Međutim, to nije predmet ovih Smjernica, već se obrađuje u *Smjernicama o razmjeni podataka*.

- Treba primijeniti „pravilo o $\geq 80\%$ ” za tvari od jednog sastojka i definiciju tvari od više sastojaka.

Ne radi se razlika između tehničkih, čistih i analitičkih stupnjeva čistoće tvari. To znači da „ista” tvar može imati različit profil čistoće/nečistoće, ovisno o njegovu stupnju. Međutim, dobro definirane tvari trebaju imati isti osnovni sastojak, odnosno iste osnovne sastojke i jedine dozvoljene nečistoće jesu one dobivene proizvodnim postupkom (vidjeti pojedinosti u poglavlju 4.2.) te dodatci (aditivi) potrebni radi stabiliziranja tvari.

- Za potrebe registracije, hidratizirane i anhidrirane oblike spojeva smatra se istom tvari.

Primjeri			
Naziv i formula	Broj CAS	Broj prema inventaru EC	Pravilo
Bakrov sulfat (Cu · H ₂ O ₄ S)	7758-98-7	231-847-6	
Bakrova(2+) sol sumporne kiseline (1:1), pentahidrat (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Ova tvar obuhvaćena je registracijom njezina anhidriranog oblika (broj EC: 231-847-6)

Hidrirani i anhidrirani oblici imaju različite kemijske nazive i drugačije brojeve CAS.

- Kiseline ili lužine i njihove soli smatra se različitim tvarima.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
201-186-8	peroctena kiselina C ₂ H ₄ O ₃	To nije ista tvar kao, npr. njezina natrijeva sol (EINECS 220-624-9)

²⁹ Vollmer et al. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, p. 113-122.

³⁰ Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, ECB web-site; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999.

220-624-9	natrijev glikolat $C_2H_4O_3 \cdot Na$	To nije ista tvar kao, npr. njoj odgovarajuća kiselina (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-kloroanilin C_6H_6ClN	To nije ista tvar kao, npr. 2-kloroanilin hidrobromid (1:1) ($C_6H_6ClN \cdot HBr$)

- Pojedinačne soli (primjerice, natrijeva ili kalijeva) smatra se različitim tvarima.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
208-534-8	natrijev benzoat $C_7H_5O_2 \cdot Na$	To nije ista tvar kao, npr. kalijeva sol (EINECS 209-481-3)
209-481-3	kalijev benzoat $C_7H_5O_2 \cdot K$	To nije ista tvar kao, npr. natrijeva sol (EINECS 208-534-8)

- Razgranate i ravnolančane alkilne lance smatra se različitim tvarima.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
295-083-5	fosfati dipentil estera, razgranati i ravnolančani	To nije ista tvar kao pojedinačne tvari fosfat razgranatog dipentil estera ili fosfat ravnolančanog dipentil estera

- Razgranate skupine spominju se kao takve u nazivu. Tvari koje sadrže alkilne skupine bez daljnjih informacija obuhvaćaju samo nerazgranate linearne lance ako nije drugačije navedeno.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
306-791-1	masne kiseline, C12-16	Samo tvari s linearnim i nerazgranatim alkilnim skupinama smatra se istom tvari.
279-420-3	alkoholi, C12-14	
288-454-8	amini, C12-18-alkilmetil	

- Tvari s alkilnim skupinama i dodatnim izrazima kao izo, neo, razgranat itd. nisu iste tvari kao one bez tih odrednica.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
266-944-2	gliceridi, C ₁₂₋₁₈ Ova se tvar identificira uz pomoć naziva tvari prema zakonu SAD-a o sapunima i deterdžentima: C12-C18 trialkil glicerid i ima SDA broj: 16-001-00	Ta se tvar ne smatra istovjetnom tvari C ₁₂₋₁₈ -iso sa zasićenim alkilnim lancima koji se granaju na bilo kojem položaju

- Ako nije izričito navedeno, smatra se da alkilni lanci u kiselinama ili alkoholima itd. predstavljaju samo zasićene lance. Nezasićene lance navodi se kao takve i smatra ih se različitim tvarima.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
200-313-4	stearinska kiselina, čista C18H36O2	To nije ista tvar kao oleinska kiselina, čista, C18H34O2 (EINECS 204-007-1)

- Tvari s kiralnim središtima

Tvar s jednim stereocentrom može postojati u lijevo zakrećućem i desno zakrećućem obliku (enantiomeri). Ako nije drugačije određeno, pretpostavlja se da su ta dva oblika u tvari u omjeru 1 : 1 (racemat).

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
201-154-3	2-kloropropan-1-ol	Pojedinačni enantiomeri (R)-2-kloropropan-1-ol i (S)-2-kloropropan-1-ol ne smatra se istim tvarima.

Racemati se smatraju tvarima od više sastojaka. Ako je tvar obogaćena jednim enantiomernim oblikom, primjenjuju se pravila za identifikaciju tvari od jednog sastojka odnosno tvari od više sastojaka, tj. ovisno o rasponima koncentracije izomera, tvar se definira kao tvar od jednog sastojka odnosno tvar od više sastojaka.

Tvari s više stereocentara (kiralnih središta) mogu postojati u 2ⁿ oblicima (gdje je n broj stereocentara). Ti se oblici mogu razlikovati po fizikalno-kemijskim, toksikološkim i/ili ekotoksikološkim svojstvima. Treba ih smatrati različitim tvarima.

- Anorganski katalizatori

Anorganske katalizatore smatra se smjesama. Za potrebe identifikacije, komponente od metala ili metalne sastojke treba smatrati pojedinačnim tvarima (bez navođenja uporabe).

Primjeri		
	Naziv	Pravilo
	katalizator kobaltovog oksida i aluminijska oksida	Treba identificirati odvojeno kao: - kobaltov(II) oksid - kobaltov(III) oksid - aluminijski oksid - aluminijski kobalt oksid

- Enzimi s istim brojem IUBMB mogu se smatrati istom tvari, unatoč uporabi različitih proizvodnih organizama, pod uvjetom da se opasna svojstva ne razlikuju značajno i da osiguravaju isto razvrstavanje.

Tvari od više sastojaka

Direktivom 67/548/EEZ regulirano je stavljanje tvari na tržište. Za odredbe te Direktive način proizvodnje tvari nije bitan. Zbog toga je tvar od više sastojaka koja je stavljena na tržište obuhvaćena popisom EINECS ako su svi pojedinačni sastojci navedeni u popisu, npr. izomerna smjesa difluorobenzena obuhvaćena je stavkama 1,2-difluorobenzen (206-680-7), 1,3-difluorobenzen (206-746-5) i 1,4-difluorobenzen (208-742-9), iako sama izomerna smjesa nije na popisu EINECS.

Za razliku od toga, REACH propisuje registraciju tvari kako je proizvedena. Odluka o tome u kojoj su mjeri različiti koraci u proizvodnji tvari obuhvaćeni definicijom „proizvodnje“ donosi se od slučaja do slučaja (npr. pročišćavanje ili destilacija). Tvar proizvedenu od više sastojaka treba registrirati (osim ako je obuhvaćena registracijom pojedinačnih sastojaka, vidjeti poglavlje 4.2.2.4.), primjerice, proizvedena je izomerna smjesa difluorobenzena, pa se „difluorobenzen“ kao izomerna smjesa mora registrirati. Međutim, nema potrebe ispitivati tvar od više sastojaka kao takvu ako se profil opasnosti tvari može dostatno opisati informacijama o pojedinačnim sastojcima. Ako se pojedinačni izomeri 1,2-difluorobenzen, 1,3-difluorobenzen i 1,4-difluorobenzen proizvedu i umiješaju, kasnije pojedinačne izomere treba registrirati, a izomernu smjesu smatra se smjesom.

Tvar od više sastojaka koju čine osnovni sastojci A, B i C nije ista kao tvar od više sastojaka koju čine sastojci A i B ili kao reakcijska masa A, B, C i D.

- Tvar od više sastojaka nije identična tvari koju čini samo podskup pojedinačnih sastojaka.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
207-205-6	2,5-difluorotoluen	Ove dvije tvari nisu iste kao

207-211-9	2,5-difluorotoluen	smjesa izomera difluorotoluena jer su one samo podskup svih mogućih izomera.
-----------	--------------------	--

- Registracija tvari od više sastojaka ne obuhvaća pojedinačne sastojke.

Primjeri

Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
208-747-6	1,2-dibromoeten	Ova tvar opisuje smjesu cis- i trans-izomera. Pojedinačne tvari (1Z)-1,2-dibromoeten i (1E)-1,2-dibromoeten nisu obuhvaćene registracijom izomerne smjese.

Tvari UVCB

- Tvar UVCB s uskom distribucijom sastojaka ne smatra se jednakom tvari UVCB šireg sastava i obrnuto.

Primjeri

Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
288-450-6	amini, C12-18-alkil, acetati	Tvari „amini, C12-14-alkil, acetati“ ili „amini, C12-20-alkil, acetati“ ili „amini, dodecil (C12-alkil), acetati“ odnosno tvari sa samo parnim alkilnim lancima nisu jednake ovoj tvari.

- Tvar čije svojstvo određuje vrsta/rod nije ista kao tvar izolirana iz druge vrste/roda.

Primjeri

Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
296-286-1	gliceridi, ulje suncokreta di-	To nije ista tvar kao gliceridi, sojin di- (EINECS: 271-386-8), ni ista kao gliceridi, lojev di- (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	laneno ulje, epoksidirano	To nije ista tvar kao laneno ulje, oksidirano (EINECS: 272-038-8), ni ista kao laneno ulje, maleizirano (EINECS: 268-897-3),

		ni ista kao ricinusovo ulje, epoksidirano (nije na popisu EINECS).
--	--	--

- Pročišćeni ekstrakt ili koncentrat smatra se tvari različitom od sirovog (nepročišćenog) ekstrakta.

Primjeri		
Broj prema inventaru EC	Naziv	Pravilo
232-299-0	Ulje iz uljane repice Ekstrakti i njihovi fizikalno promijenjeni derivati. Sastoji se prvenstveno od glicerida masnih kiselina: erukinske, linolenske i oleinske (Brassica napus, Cruciferae)	Tvar „(Z)-doko-13-enoinska kiselina (erukinska kiselina)” sastojak je tvari „ulje uljane repice”. Erukinska kiselina nije isto što i ulje uljane repice budući da je izolirana kao čista tvar iz ulja uljane repice. Erukinska kiselina ima vlastiti broj na popisu EINECS (204-011-3). Izolirana smjesa palmitinske, oleinske, linolenske, linoleinske, erukinske i eikosenoične kiseline nije isto što i ulje uljane repice budući da ti sastojci ne predstavljaju cijelo ulje.

6. Identitet tvari u okviru provjere

Smjernice za identifikaciju i davanje naziva tvarima nalaze se u poglavlju 4. ovoga dokumenta. Tih se smjernica treba pridržavati pri odlučivanju mogu li se tvari smatrati istima za potrebe uredbi REACH i CLP. To je dodatno razrađeno u nastavku za provjeru tvari.

Prema članku 4., svaki proizvođač ili uvoznik može, zadržavajući punu odgovornost za ispunjavanje obveza na temelju Uredbe REACH, imenovati treću osobu kao zastupnika u svim postupcima iz glave III. koji uključuju komunikaciju s drugim proizvođačima ili uvoznicima.

Potencijalni podnositelj registracije tvari mora Agenciji uputiti upit kojim će provjeriti je li za sve te tvari već podnesena registracija (članak 26. Uredbe REACH). Ta se provjera mora sastojati od:

- identiteta potencijalnog podnositelja registracije, kako je predviđeno u odjeljku 1. Priloga VI. Uredbi REACH, osim lokacija uporabe
- identiteta tvari, kako je predviđeno u odjeljku 2. Priloga VI. Uredbi REACH
- zahtjeva obavješćivanja koje ne može ispuniti bez provođenja novih istraživanja na kralješnjacima
- zahtjeva obavješćivanja koje ne može ispuniti bez provođenja drugih novih istraživanja.

Potencijalni podnositelj registracije treba dati informacije o identitetu i nazivu tvari u skladu s pravilima opisanima u poglavlju 4. ovih Smjernica.

Agencija će utvrditi je li tvar već registrirana, a taj je postupak sukladan pravilima navedenima u poglavlju 4. ovih Smjernica. Odluka se dostavlja potencijalnom podnositelju registracije, a informacije o tome svim prethodnim ili drugim potencijalnim podnositeljima registracije.

Više informacija o postupku provjere nalazi se u *Smjernicama za razmjenu podataka* i na posebnoj internetskoj stranici ECHA-e:

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

7. Primjeri

Primjeri na sljedećim stranicama navedeni su radi ilustracije primjene ovih Smjernica. Oni nisu presedani za obveze propisane Uredbom REACH.

Opisani su sljedeći primjeri:

- „dietil peroksidikarbonat“ je primjer tvari od jednog sastojka s otapalom koje djeluje i kao stabilizator (poglavlje 7.1.)
- „zolimidin“ je primjer tvari koja može definirana kao biti tvar od jednog sastojka ili kao tvar od više sastojaka (poglavlje 7.2.)
- „smjesa izomera“ nastala tijekom reakcije u proizvodnji uključena je kao primjer tvari od više sastojaka (poglavlje 7.3.). Ta je tvar prethodno bila obuhvaćena pojedinačnim izomerima na popisu EINECS
- „miris AH“ primjer je tvari proizvedene u različitim verzijama, koje se mogu opisati kao reakcijska masa pet sastojaka različitih raspona koncentracije (poglavlje 7.4.). To je također primjer opravdanog odstupanja od pravila o 80 % i pravila o 10 %
- nemetalni „minerali“, uključujući montmorilonit kao primjer dobro definirane tvari, koja zahtijeva dodatno fizikalno određivanje svojstava, uključeni su u poglavlje 7.5.
- „eterično ulje lavande“ primjer je tvari UVCB dobivene iz biljaka (poglavlje 7.6.)
- „ulje krizantema i iz njega izolirani izomeri“ primjer je tvari UVCB biološkog podrijetla, koja se dalje obrađuje (poglavlje 7.7.)
- „fenol, izopropilirani, fosfat“ primjer je promjenjive tvari UVCB koju se ne može potpuno definirati (poglavlje 7.8.)
- „kvaterni amonijevi spojevi“ primjeri su tvari s promjenjivom duljinom ugljikova lanca (poglavlje 7.9.)
- dva primjera „naftnih tvari“, miješanje benzina i plinskih ulja, nalaze se u poglavlju 7.10.
- na primjerima lakaze i amilaze ilustrirana je identifikacija enzima (poglavlje 7.11.).

7.1. Dietil peroksidikarbonat

Tvar „dietil peroksidikarbonat“ (EC 238-707-3, CAS 114666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) proizvodi se kao 18 %-tna otopina u izododekanu (EC 250-816-8, CAS 31807-55-3). Izododekan djeluje i kao stabilizator protiv eksplozivnih svojstava. Najveća moguća koncentracija koja jamči sigurno rukovanje tvari jest 27 %-tna otopina.

Kako identificirati opisanu tvar i nazvati je za potrebe registracije

Prema definiciji tvari u Uredbi REACH, otapala koja se mogu izdvojiti bez utjecaja na stabilnost tvari ili promjene njezina sastava treba isključiti. Budući da u navedenom slučaju izododekan djeluje i kao stabilizator te se ne može posve izdvojiti zbog eksplozivnih svojstava tvari, mora ga se smatrati dodatkom (aditivom), a ne samo otapalom. Međutim, još uvijek se radi o tvari od jednog sastojka. Stoga, tvar treba registrirati kao otopinu s najnižom koncentracijom izododekana koja jamči sigurno rukovanje:

Dietil peroksidikarbonat (gornja granična koncentracija: 27 %). Izododekan treba navesti pod „Dodatci“ (aditivi) i specificirati njegovu funkciju stabilizatora.

7.2. ZOLIMIDIN

Proizvedena metanolna otopina sadrži „zolimidin“ (EC 214-947-4; CAS 1222-57-7, $C_{14}H_{12}N_2O_2S$) i „imidazol“ (EC 206-019-2; CAS 288-32-4, $C_3H_4N_2$). Nakon uklanjanja otapala „metanola“ i optimiziranja proizvodnog postupka tvar ima raspon čistoće od 74 – 86 % zolimidina i 4 – 12 % imidazola.

Kako identificirati opisanu tvar i nazvati je za potrebe registracije

Prema definiciji tvari u Uredbi REACH, otapala koja se mogu izdvojiti bez utjecaja na stabilnost tvari ili promjene njezina sastava treba isključiti. Budući da se u ovom slučaju metanol može izdvojiti bez poteškoća, treba registrirati tvar bez otapala.

U pravilu se radi o tvari od jednog sastojka ako jednog osnovnog sastojka ima ≥ 80 %. Radi se o tvari od više sastojaka ako više osnovnih sastojka ima između ≥ 10 % i < 80 %. Opisani primjer je granični slučaj jer se granične vrijednosti preklapaju. Stoga se tvar može definirati kao tvar od jednog sastojka, „zolimidinom“, ili tvari od više sastojaka, reakcijskom smjesom „zolimidina“ i „imidazola“.

U takvom graničnom slučaju, na temelju tipične koncentracije osnovnih sastojaka tvari može se izabrati najbolji opis tvari na sljedeći način:

(1) ako je tipična koncentracija zolimidina 77 %, a imidazola 11 %, preporučuje se smatrati tvar reakcijskom masom zolimidina i imidazola

(2) ako je tipična koncentracija zolimidina 85 %, a imidazola 5 %, preporučuje se tvar definirati kao tvar od jednog sastojka, „zolimidinom“.

7.3. Smjesa izomera

Tvar je smjesa (reakcijska masa) dvaju izomera nastala tijekom proizvodne reakcije. Pojedinačni izomeri nalaze se na popisu EINECS. Direktivom 67/548/EEZ regulirano je stavljanje tvari na tržište. Budući da način proizvodnje tvari nije bio važan, smjesa je bila obuhvaćena pojedinačnim izomerima na popisu EINECS. Uredba REACH propisuje registraciju proizvedenih tvari. Odluka o tome u kojoj su mjeri različiti koraci u proizvodnji tvari obuhvaćeni definicijom „proizvodnje“ donosi se od slučaja do slučaja. Ako je smjesa izomera registrirana kao tvar od više sastojaka (prema smjernicama iz poglavlja 4.2.2.), nema potrebe za ispitivanjem tvari kao takve ako se profil opasnosti tvari može dostatno opisati informacijama o pojedinačnim sastojcima.

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Primjeri	
Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv (tvari)	reakcijska masa 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanola i 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanola
Ostali nazivi (tvari)	2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol reakcijska masa etanola, 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- i vode etanola, 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- (9CI) izomerni spoj
Broj (tvari) prema inventaru EC Naziv EC Opis prema inventaru EC	Ne postoji broj EC za tvar jer reakcijska masa nije prijavljena u popis EINECS. Međutim, tvar je bila obuhvaćena informacijama o pojedinačnim sastojcima na popisu EINECS (279-502-9, 279-501-3).
Broj CAS (tvari) Naziv CAS	Nije dostupno Nije dostupno
Broj prema inventaru EC (sastojak A) Naziv EC Opis prema inventaru EC	279-502-9 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol /
Broj prema inventaru EC (sastojak B) Naziv EC Opis prema inventaru EC	279-501-3 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanola /
Broj CAS (sastojak A) Naziv CAS	80584-89-0 etanola, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-
Broj CAS (sastojak B) Naziv CAS	80584-88-9 etanola, 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-
Ostale identifikacijske šifre Referentni broj	ENCS broj 5-5917

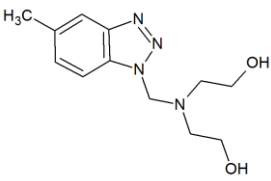
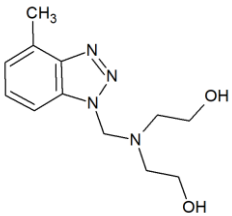
2. Informacije o sastavu – osnovni sastojci

Osnovni sastojci						
	Naziv prema nomenklaturi IUPAC	Broj CAS	Broj prema inventaru EC	Mol. formula Hillova metoda	Uobičajena koncentracija (% masenog udjela)	Raspon koncentracije (% masenog udjela)
A	etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	etanol, 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Osnovni sastojci	
Ostali nazivi	
A	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol
B	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanola

Osnovni sastojci		
	Naziv EC	Opis prema inventaru EC
A	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol	/
B	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanola	/

Osnovni sastojci		
	Naziv CAS	Broj CAS
A	etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0
B	etanol, 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9

Osnovni sastojci			
	Molekulska formula CAS metoda	Strukturna formula	Oznaka SMILES
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Osnovni sastojci		
	Molekulska masa [g mol ⁻¹]	Raspon molekulske mase
A	250	/
B	250	/

7.4. Miris AH

Miris AH sadrži gama (izo-alfa) metil ionon i njegove izomere. Proizvodi se u tri različite verzije (A, B i C), koje se razlikuju po udjelu izomera.

U sljedećoj tablici dan je pregled sastava različitih verzija.

Sastav različitih verzija mirisa AH				
Raspon koncentracije [%]	Verzija A	Verzija B	Verzija C	Svi rasponi koncentracije
gama (izo-alfa) metil ionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (izo-beta) metil ionon	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa-n-metil ionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gama-n-metil ionon	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
beta-n-metil ionon	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5 - 15
pseudo metil iononi	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Postoji nekoliko opcija za identifikaciju tvari:

- **Verzija A** sadrži najmanje 80 % izomera gama (izo-alfa) metil ionona i može se stoga definirati kao tvar od jednog sastojka koja se temelji na izomeru gama (izo-alfa) metil ionona, a ostale izomere smatra se nečistoćama.
- **Verzije B i C** sadrže manje od 80 % izomera gama (izo-alfa) metil ionona i ≥ 10 % drugih izomera. Stoga se mogu smatrati tvarima od više sastojaka:
 - **verzija B:** kao reakcijska masa gama (izo-alfa) metil ionona (65–75 %) i alfa-n-metil ionona (10-20 %), a ostale izomere smatra se nečistoćama.
 - **verzija C:** kao reakcijska masa gama (izo-alfa) metil ionona (50–60 %) i alfa-n-metil ionona (20-30 %), a ostale izomere smatra se nečistoćama.

Sastav je promjenjiv te je ponekad koncentracija izomera ≥ 10 % (u tom se slučaju obično naziva osnovnim sastojkom), a ponekad < 10 % (u tom se slučaju naziva nečistoćom).

Različite verzije moglo bi se odvojeno registrirati. To bi zahtijevalo tri postupka registracije. Međutim, možda bi usporedno čitanje podataka bilo opravdano.

Mogao bi se primijeniti i jedan od sljedećih postupaka:

- jedna registracija kao tvar od jednog sastojka s dvije potkategorije. U tom slučaju potkategorije odstupaju od pravila o 80 % (vidjeti poglavlje 4.2.1.)
- jedna registracija definirane reakcijske mase od 5 izomera (tvar od više sastojaka). U tom slučaju neki izomeri (osnovni sastojci) odstupaju od praga od 10 %, po kojem se osnovni sastojci razlikuju od nečistoća (vidjeti poglavlje 4.2.2.).
- jedna registracija definirane reakcijske mase u kojoj je promjenjivost sastava obuhvaćena potpunim koncentracijskim rasponom svakoga izomera.

Može biti važno uzeti u obzir sljedeće:

- tri verzije imaju ista ili vrlo slična fizikalno-kemijska svojstva
- tri verzije imaju sličnu uporabu i scenarije izloženosti
- sve verzije jednako se razvrstavaju i označavaju s obzirom na opasnost, a sadržaj sigurnosno-tehničkih listova i izvješća o sigurnosti su identični
- dostupni podatci iz ispitivanja (i buduća ispitivanja) obuhvaćaju varijabilnost triju karakteristika.

U ovom primjeru opisana je identifikacija tvari kao definirane reakcijske mase 5 izomera (tvar od više sastojaka). Potrebno je obrazloženje zbog odstupanja od pravila o 80 % (vidjeti poglavlje 4.2.1.) i praga od 10 % (definicija tvari od više sastojaka, vidjeti poglavlje 4.2.2.). Budući da se svaka verzija proizvodi kao takva, u registracijskoj dokumentaciji treba navesti sastav svake od triju verzija. Međutim, formalno bi mogle biti potrebne najmanje dvije registracije: (1) gama (izo-alfa) metil ionon i (2) reakcijska masa gama (izo-alfa) metil ionona i alfa-n-metil ionona.

Identifikacija tvari

Miris AH proizvodi se u tri različite verzije (A, B i C) istoga kvalitativnog, no različitog kvantitativnog sastava. Sve tri verzije opisane su u jednoj registracijskoj dokumentaciji za tvar od više sastojaka. Iako to znači da se definicija strogo ne primjenjuje, opravdana je registracija kao jedne tvari od više sastojaka, budući da 1. dostupni rezultati ispitivanja obuhvaćaju promjenjivost svih triju verzija, 2. sve tri verzije imaju vrlo slična fizikalno-kemijska svojstva, 3. sve tri verzije jednako se razvrstavaju i označavaju s obzirom na opasnost (dakle, sigurnosno-tehnički listovi su identični) i 4. sve tri verzije imaju sličnu uporabu i scenarije izloženosti (dakle, slična izvješća o kemijskoj sigurnosti).

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	reakcijska masa 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-on 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-on [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on 1-(6,6-metil-2-metilenecikloheks-1-il)pent-1-en-3-on 1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on
Ostali nazivi	metil ionon gama verzija A metil ionon gama verzija B metil ionon gama verzija C
Broj prema inventaru EC	Nije dostupno
Naziv EC	/
Opis prema inventaru EC	/
Broj CAS	Nije dostupno
Naziv CAS	/

2. Informacije o sastavu – osnovni sastojci

Teoretski, mogući su dodatni enantiomeri. Međutim, analizirani su sljedeći izomeri:

Osnovni sastojci						
	Naziv prema nomenklaturi IUPAC	Broj CAS	Broj prema inventar u EC	Mol. formula Hillova metoda	Min. konc. (% masenog udjela)	Maks. konc. (% masenog udjela)
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-on	127-51-5	204-846-3	C14H22O	50	85
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-on	79-89-0	201-231-1	C14H22O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
D	1-(6,6-metil-2-metilenecikloheks-1-il)pent-1-en-3-on	Nije dostupno	Nije dostupno	C14H22O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

Osnovni sastojci	
Ostali nazivi	
A	alfa-izo-metil ionon, gama metil ionon
B	beta-izo-metil ionon, delta metil ionon
C	alfa-n-metil ionon
D	gama-n-metil ionon

E	beta-n-metil ionon
----------	--------------------

Osnovni sastojci

	Naziv EC	Opis prema inventaru EC
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-3-buten-2-on	/
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-1-buten-2-on	/
C	[<i>R-(E)</i>]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	/
D	1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	/
E	1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	/

Osnovni sastojci

	Naziv CAS	Broj CAS
A	3-buten-2-on, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-	127-51-5
B	3-buten-2-on, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)-	79-89-0
C	1-penten-3-on, 1-[(1 <i>R</i>)-2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il]-, (1 <i>E</i>)-	127-42-4
D	Nije dostupno	Nije dostupno
E	1-penten-3-on, 1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)-	127-43-5

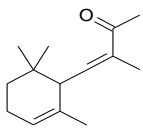
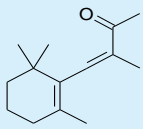
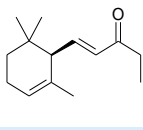
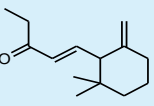
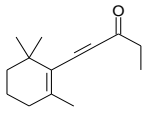
Osnovni sastojci

Ostale identifikacijske šifre

Referenca

A	2714 07.036	FEMA Registar aromatičnih tvari EU-a
B	07.041	Registar aromatičnih tvari EU-a
C	2711 07.009	FEMA Registar aromatičnih tvari EU-a
D	Nije dostupno	Nije dostupno
E	2712 07.010	FEMA Registar aromatičnih tvari EU-a

Osnovni sastojci

	Molekulska formula CAS metoda	Strukturna formula	Oznaka 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>

Osnovni sastojci		
	Molekulska masa/g mol ⁻¹	Raspon molekulske mase
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Informacije o sastavu – nečistoće i dodatci (aditivi)

Nečistoće						
	Naziv prema nomenklaturi IUPAC	Broj CAS	Broj prema inventaru u EC	Molekulska formula	Uobičajena koncentracija (% masenog udjela)	Raspon koncentracije (% masenog udjela)
F						
broj nespecifičnih nečistoća:				11 (pseudo metil iononi)		
ukupna koncentracija nespecifičnih nečistoća:				0,5 – 3 % masenog udjela		
Dodatci (aditivi)						
	Naziv prema nomenklaturi IUPAC	Broj CAS	Broj prema inventaru u EC	Mol. formula	Uobičajena koncentracija (% masenog udjela)	Raspon koncentracije (% masenog udjela)
G	butilirani hidroksitoluen (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05– 0,15

4. Informacije o različitim verzijama

U nastavku su navedeni rasponi pet osnovnih sastojaka u tri različite verzije:

Raspon koncentracije [%]	Verzija A	Verzija B	Verzija C
gama (izo-alfa) metil ionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (izo-beta) metil ionon	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alfa-n-metil ionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gama-n-metil ionon	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4
beta-n-metil ionon	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo metil iononi	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Minerali

Mineral je kombinacija anorganskih sastojaka u obliku u kojem se nalazi u zemljinoj kori, karakterističnog skupa kemijskih sastava, kristalnih oblika (od visoko kristalnog do amornog) i fizikalno-kemijskih svojstava.

Minerali su izuzeti od obveze registracije ako odgovaraju definiciji tvari koja se pojavljuje u prirodi (*članak 3. stavak 39. Uredbe REACH*) i ako nisu kemijski promijenjeni (*članak 3. stavak 40. Uredbe REACH*). To se odnosi na minerale čija kemijska struktura ostaje nepromijenjena i nakon kemijskog postupka ili obrade odnosno fizikalne mineraloške pretvorbe, primjerice radi uklanjanja nečistoća.

Dok se neke minerale može opisati jednoznačno uz pomoć njihova kemijskog sastava (vidjeti poglavlja 4.2.1. i 4.2.2. o tvarima od jednog sastojka i tvarima od više sastojaka), za druge sam kemijski sastav nije dostatan kako bi ih se jednoznačno identificiralo (vidjeti poglavlje 4.2.3.).

Za razliku od drugih tvari od jednog sastojka ili tvari od više sastojaka, identifikacija mnogih minerala mora se temeljiti na kemijskom sastavu i unutarnjoj strukturi (npr. kako je otkrivena rendgenskom difrakcijom) jer oni zajedno predstavljaju bit minerala i određuju njegova fizikalno-kemijska svojstva.

Kod drugih tvari od više sastojaka, broj CAS za minerale koristi se kao dio identifikacije (kombinacija anorganskih sastojaka). Brojevi CAS anorganskih sastojaka (prema definiciji sistematske mineralogije) koriste se za opis različitih sastojaka. Ako bi se proizveo pojedinačni anorganski sastojak (tvar od jednog sastojka), pri identifikaciji te tvari treba koristiti njezin broj CAS. Na primjer:

- mineral kaolin (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) u osnovi se sastoji od primarnih i sekundarnih kaolinita (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7) i zapravo je hidratizirana aluminosilikatna glina.

Ako se kaolin podvrgne postupku pročišćavanja kako bi se proizveo pojedinačni sastojak, npr.

kaoliniti, tada će tvar imati sljedeći CAS, odnosno broj iz popisa EINECS: EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- mineral bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) koji je u popisu EINECS opisan na sljedeći način: „Koloidna glina. Sastoji se prvenstveno od montmorilonita“ sadrži visoki udjel anorganskog sastojka montmorilonita (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), no ne samo njega.

Ako se proizvede čisti montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) pri identifikaciji tvari koristi se broj CAS montmorilonita.

Treba naglasiti da bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) i montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) nisu ista tvar.

Zaključno, mineral obično prima naziv prema jednom ili više anorganskih sastojaka u kombinaciji. Minerali mogu biti tvari od jednog sastojka (opće smjernice potražite u poglavljima 4.2.1. i 4.2.2.). Neke se minerale ne može jednoznačno opisati njihovim kemijskim sastavom i dostatna identifikacija zahtijeva dodatno opisivanje njihovih fizikalnih svojstava ili parametara obrade (vidjeti poglavlje 4.2.3.). Neki su primjeri navedeni u sljedećoj tablici.

Primjeri minerala

Naziv	CAS	EINECS	Dodatni opis
Kristobalit	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (kristalna struktura: kubična/tetragonalna)
Kremen (kvarc)	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (kristalna struktura: trigonalna/heksagonalna)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Poznat i kao diatomit, dijatomejska zemlja, kieselgur i celit. Opis: Mekani silikatni čvrsti materijal koji nastaje nakupljanjem ljuštura algi kremenjašica tijekom milijuna godina. Prvenstveno sadrži silicij.
Dolomit	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Minerali iz skupine feldspata	68476-25-5	270-666-7	Anorganska tvar, reakcijski produkt kristalizacije pri visokoj temperaturi u kojoj su aluminijski oksid, barijev oksid, kalcijev oksid, magnezijev oksid, silicijev oksid i stroncijev oksid u različitim omjerima homogeno i ionski prožeti i tvore kristal.
Milovka (talk)	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

Analiitičke informacije potrebne za minerale

Elementni sastav	Kemijski sastav pruža opći pregled sastava minerala bez obzira na broj sastojaka i njihove udjele u mineralu. Opće je prihvaćeno kemijski sastav izraziti za okside.
Spektralni podatci (rendgenska difrakcija ili ekvivalentni podatci)	Uz pomoć rendgenske difrakcije ili drugih tehnika može se identificirati minerale na temelju njihove kristalne strukture. Trebaju navesti karakterističnu rendgensku difrakciju ili odgovarajuće alternativne podatke na temelju kojih se mineral identificira, zajedno s kratkim opisom analitičke metode ili bibliografskom bilješkom.
Tipična fizikalno-kemijska svojstva	Minerali imaju karakteristična fizikalno-kemijska svojstva koja omogućavaju potpunu identifikaciju, npr. <ul style="list-style-type: none"> - vrlo mala tvrdoća - sposobnost bubrenja - oblici dijamanta (vidljivi uz pomoć optičkog mikroskopa) - vrlo visoka gustoća - veličina površine (adsorpcija dušika)

7.6. Eterično ulje lavandina grosso

Eterična ulja jesu tvari dobivene iz biljaka. Stoga se eterična ulja mogu također opisati kao tvari biljnog podrijetla.

Općenito uzevši, tvari biljnoga podrijetla jesu složene prirodne tvari dobivene obradom biljke ili njezinih dijelova postupcima ekstrakcije, destilacije, prešanja, frakcioniranja, pročišćavanja, koncentriranja ili fermentacije. Sastav tih tvari promjenjiv je i ovisi o rodu, vrsti, uvjetima uzgoja i vremenu žetve izvora, kao i o primijenjenoj tehnici obrade.

Eterična ulja može se definirati uz pomoć njihovih osnovnih sastojaka, kao što je uobičajeno za tvari od više sastojaka. Međutim, eterična ulja može činiti nekoliko stotina sastojaka, koji mogu biti vrlo promjenjivi, ovisno o mnogim čimbenicima (kao što su rod, vrsta, uvjeti uzgoja, vrijeme žetve, primijenjena obrada). Stoga opis osnovnih sastojaka često nije dostatan za opisivanje ovih tvari UVCB. Eterična ulja treba opisati na temelju biljnog izvora i postupka obrade, kao što je opisano u poglavlju 4.3.1. (u dijelu koji se odnosi na tvari UVCB iz podvrste 3.).

U mnogo slučajeva za eterična ulja dostupne su industrijske norme (za mnoga eterična ulja i ISO norme). Informacije o normama može se dodatno navesti. Međutim, identifikaciju tvari treba temeljiti na tvari kako je proizvedena.

Sljedeći primjer opisuje „eterično ulje lavandina Grosso“, za koji postoji ISO norma (ISO 8902-1999).

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Izvor

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

Postupak

Opis (bio)kemijskih reakcijskih procesa korištenih u proizvodnji tvari:

Vodeno-parna destilacija cvjetova biljke *Lavandula hybrida grosso* (Lamiaceae), zatim odvajanje vode od eteričnog ulja

Odvajanje je spontan, fizikalni proces, koji se odvija u separatoru (tzv. firentinska boca) i time omogućava laku izolaciju odijeljenog ulja. Temperatura u ovoj etapi destilacijskog postupka iznosi oko 40 °C.

Naziv

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	Eterično ulje biljke <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
Broj prema inventaru EC Naziv EC Opis prema inventaru EC	297-385-2 Lavanda, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstrakt Ekstrakti i njihovi fizički promijenjeni derivati, kao što su tinkture, konkreتي, apsoluti, eterična ulja, oleorezini, terpeni, frakcije bez terpena, destilati, ostatci i sl., dobiveni iz biljke <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³¹ .
Broj CAS Naziv CAS	93455-97-1 Lavanda, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstrakt

³¹ „Labiatae” i „Lamiaceae” su sinonimi.

2. Informacije o sastavu – poznati sastojci

Poznati sastojci					
	Naziv kemikalije EC CAS IUPAC ostalo	Broj EC CAS	Mol. Formula Hillova metoda	Uobičajen a koncentracija % (masenog udjela)	Raspon koncentracije % (masenog udjela)
A	EC linalil acetat CAS 1,6-oktadien-3-ol, 3,7-dimetil-, acetat IUPAC 3,7-dimetilokta-1,6-dien-3-il acetat	EC 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
B	EC linalool CAS 1,6-oktadien-3-ol, 3,7-dimetil- IUPAC 3,7-dimetilokta-1,6-dien-3-ol	EC 201-134-4 CAS 78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	29,5	24 – 35
C	EC bornan-2-on CAS biciklo[2.2.1] heptan-2-on, 1,7,7-trimetil- IUPAC 1,7,7-trimetilbiciklo[2.2.1]-2-heptanon Ostalo kamfor	EC 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
D	EC cineol CAS 2-oksabicyklo [2.2.2]oktan, 1,3,3-trimetil- IUPAC 1,3,3-trimetil-2-oksabicyklo[2.2.2]oktan Ostalo 1,8-cineol	EC 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7
E	EC p-ment-1-en-4-ol CAS 3-cikloheksen-1-ol, 4-metil-1-(1-metiletil)- IUPAC 1-(1-metiletil)-4-metil-3-cikloheksen-1-ol Ostalo terpinen-4-ol	EC 209-235-5 CAS 562-74-3	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1.5 – 5

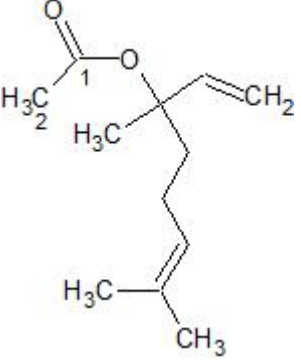
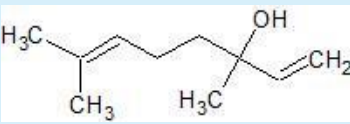
F	<p>EC 2-izopropenil-5-metilheks-4-enil acetat</p> <p>CAS 4-heksen-1-ol, 5-metil-2-(1-metiletenil)-, acetat</p> <p>IUPAC 2-(1-metiletenil)-5-metilheks-4-en-1-ol</p> <p>Ostalo (±)-lavandulol acetat</p>	<p>EC 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5– 3
G	<p>EC dl-borneol</p> <p>CAS biciklo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimetil-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetil biciklo[2.2.1]heptan-2-ol</p> <p>Ostalo borneol</p>	<p>EC 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5– 3
H	<p>EC kariofilen</p> <p>CAS biciklo[7.2.0]undec-4-en, 4,11,11-trimetil-8-metilen-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metilen biciklo[7.2.0]undek-4-en</p> <p>Ostalo trans-beta-kariofilen</p>	<p>EC 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1– 2,5
I	<p>EC (E)-7,11-dimetil-3-metilendodeka-1,6,10-trien</p> <p>CAS 1,6,10-dodekatrien, 7,11-dimetil-3-metilen-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-dimetil-3-metilen-1,6,10-dodekatrien</p> <p>Ostalo trans-beta-farnezen</p>	<p>EC 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2– 2
J	<p>EC (R)-p-menta-1,8-dien</p> <p>CAS cikloheksen, 1-metil-4-(1-metiletenil)-, (4R)-</p> <p>IUPAC (4R)-1-metil-4-(1-metiletenil)cikloheksen</p> <p>Ostalo limonen</p>	<p>EC 227-813-5</p> <p>CAS 5989-27-5</p>	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5– 1,5

K	EC 3,7-dimetilokta-1,3,6-trien CAS 1,3,6-oktatrien, 3,7-dimetil- IUPAC 3,7-dimetilokta-1,3,6-trien Ostalo cis-beta-ocimen	EC 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5- 1,5
----------	--	--	---------------------------------	---	----------

Poznati sastojci ≥ 10 %

Poznati sastojci		
	Naziv EC	Opis prema inventaru EC
A	linalil acetat C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O	

Poznati sastojci		
	Naziv CAS	Povezani brojevi CAS
A	linalil acetat C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Poznati sastojci			
	Molekulska formula CAS metoda	Strukturna formula	Oznaka SMILES
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Poznati sastojci		
	Molekulska masa	Raspon molekulske mase
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Ulje krizanteme i iz njega izolirani izomeri

Tvrtka proizvodi ulje krizanteme koje se ekstrahira nakon drobljenja cvjetova i lišća biljke *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, s otapalom koje čini smjesa vode i etanola u omjeru 1:10. Nakon ekstrakcije otapalo se uklanja i „čisti“ ekstrakt pročišćava se u daljnjim koracima koji daju konačno ulje krizanteme.

Osim toga, iz ekstrakta se izoliraju dva izomera kao reakcijska masa:

jasmolin I

(ciklopropankarboksilna kiselina, 2,2-dimetil-3-(2-metil-1-propenil)-, (1S)-2-metil-4-okso-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopenten-1-il ester, (1R,3R)-; broj CAS 4466-14-2), i

jasmolin II

(ciklopropankarboksilna kiselina, 3-[(1E)-3-metoksi-2-metil-3-okso-1-propenil]-2,2-dimetil-, (1S)-2-metil-4-okso-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopenten-1-il ester, (1R,3R)-; broj CAS 1172-63-0

Nadalje, tvrtka je odlučila sintetizirati izomernu reakcijsku masu jasmolina I i II.

Tvrtka postavlja sljedeća pitanja:

1. Kako identificirati ulje krizanteme za potrebe registracije?
2. Je li reakcijska masa izoliranih izomera jasmolina I i II obuhvaćena registracijom ulja?
3. Može li se sintetizirana smjesa dvaju izomera smatrati istom kao smjesa izomera izoliranih iz ulja krizanteme?

1. Kako identificirati ulje krizanteme za potrebe registracije

Ulje krizanteme je tvar UVCB koja se ne može dostatno identificirati kemijskim sastavom (za detalje vidjeti poglavlje 4.3.). Bitni su drugi identifikacijski parametri, kao što su izvor i postupak. Ulje krizanteme biljnog je podrijetla i treba ga identificirati uz pomoć vrste i dijela organizma iz kojeg se dobiva, te procesa pročišćavanja (ekstrakcija s otapalom). Međutim, kemijski sastav i identitet sastojaka treba dati ukoliko su poznati.

Sljedeće su informacije neophodne za dostatnu identifikaciju tvari:

Naziv tvari	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; ulje dobiveno iz zdrobljenih cvjetova i lišća ekstrakcijom u otopini vode i etanola u omjeru 1:10
Izvor	
Rod, vrsta, podvrsta	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae
Dio biljke iz kojeg se dobiva ulje	Cvjetovi i listovi
Postupak	
Proizvodna metoda	Drobljenje, zatim ekstrakcija

Otapalo koje se koristi pri ekstrakciji	voda:etanol (1:10)			
Informacije o sastavu – poznati sastojci u % (masenog udjela)				
Naziv sastojka	Broj EC	Broj CAS	Min. %	Maks. %
piretrin I: 2-metil-4-okso-3-(penta-2,4-dienil) ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-krizantemat	204-455-8	121-21-1	30	38
piretrin II: 2-metil-4-okso-3-(penta-2,4-dienil) ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)-2,2-dimetilciklopropan karboksilat	204-462-6	121-29-9	27	35
cinerin I: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oksociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	246-948-0	25402-06-6	5	10
cinerin II: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oksociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	204-454-2	121-20-0	8	15
jasmolin I: (2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropan karboksilata)	nema	4466-14-2	4	10
jasmolin II: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	nema	1172-63-0	4	10
Tvar sadrži još najviše 40 sastojaka u koncentracijama manjim od 1 %.				

Također se može razmotriti identificiranje tvari kao dobro definirane tvari od više sastojaka, sa šest glavnih sastojaka (reakcijska masa piretrina I, piretrina II, cinerina I, cinerina II, jasmolina I i jasmolina II).

Da je proizvodni postupak samo „drobljenje“ tvar bi se smatrala „tvari koja se pojavljuje u prirodi“ i bila bi izuzeta od obveze registracije osim ako ispunjava kriterije razvrstavanja kao opasna tvar u skladu s Direktivom 67/548/EEZ.

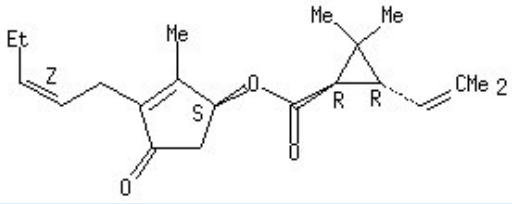
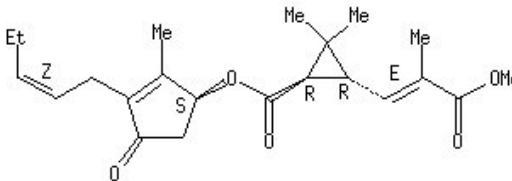
2. Je li reakcijska masa izoliranih izomera jasmolina I i II obuhvaćena registracijom ulja?

Reakcijska masa izoliranih izomera jasmolina I i II nije obuhvaćena registracijom „ulja biljke *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae“ jer pojedinačni sastojci nisu obuhvaćeni cijelom tvari UVCB i obrnuto. Reakcijska masa jasmolina I i II smatra se drugačijom tvari.

Reakcijsku masu jasmolina I i II može se definirati kao tvar od više sastojaka (za detaljnije upute vidjeti poglavlje 4.2.3.) s dva osnovna sastojka.

Sljedeće su informacije neophodne za dostatnu identifikaciju tvari:

Naziv tvari prema nomenklaturi IUPAC	reakcijska masa (2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropan karboksilata) i (2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-en-1-il [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropan karboksilata)			
Drugi naziv	reakcijska masa jasmolina I i jasmolina II			
Čistoća tvari	95 – 98 % (masenog udjela)			
Informacije o sastavu – osnovni sastojci u % (masenog udjela)				
Naziv sastojka	Broj EC	Broj CAS	Min. %	Maks. %
jasmolin I: (2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropan karboksilata)	nema	4466-14-2	40	60

<p>Molekulska formula</p> <p>Strukturna formula</p> <p>Molekulska masa</p>		 <p>C₂₂H₃₀O₅ M = 374 g/mol</p>		
<p>jasmolin II: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-en-1-il [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropan karboksilat</p> <p>Molekulska formula</p> <p>Strukturna formula</p> <p>Molekulska masa</p>	<p>nema</p>	<p>1172-63-0</p>  <p>C₂₁H₃₀O₃ M = 330 g/mol</p>	<p>35</p>	<p>65</p>

3. Može li se sintetizirana smjesa (reakcijska masa) dvaju izomera smatrati istom kao smjesa izomera izoliranih iz ulja krizanteme?

Za kemijski dobro definirane tvari, koje se mogu dostatno opisati njihovim kemijskim sastojcima, nije bitno je li tvar izolirana iz ekstrakta ili sintetizirana u kemijskom procesu. Stoga se sintetizirana reakcijska masa jasmolina I i jasmolina II može smatrati istovjetnom izomernoj smjesi izoliranoj iz biljke *Chrysanthemum*, iako su dobiveni različitim proizvodnim postupcima, pod uvjetom da su čistoća smjese i raspon koncentracije osnovnih sastojaka isti.

4. Zaključak

Identificirane su dvije tvari:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; ulje dobiveno iz zdrobljenih cvjetova i lišća ekstrakcijom u otopini vode i etanola u omjeru 1:10
2. reakcijska masa izomera jasmolina I i II, neovisno o proizvodnom procesu tvari.

Ako bi se prethodno opisane tvari koristile *samo* u zaštiti bilja i u biocidnim proizvodima, smatrale bi se registranima u skladu s Uredbom REACH (članak 15.).

7.8. fenol, izopropiliran, fosfat

Izopropilirani fenol, fosfat (3:1) jest tvar UVCB kod koje se promjenjivost izopropiliranog fenola ne može potpuno definirati.

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)
Ostali nazivi	fenol, izopropiliran, fosfat fenol, izopropiliran, fosfat (3:1) (na temelju omjera propilen : fenol = 1 mol : 1 mol)
Broj prema inventaru EC Naziv EC Opis prema inventaru EC	273-066-3 fenol, izopropiliran, fosfat (3:1) /
Broj CAS Naziv CAS	68937-41-7 fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)

2. Informacije o sastavu – osnovni sastojci

Osnovni sastojci					
Naziv prema nomenklaturi IUPAC	Broj CAS	Broj prema inventaru EC	Mol. formula Hillova metoda	Uobičajena koncentracija (% masenog udjela)	Raspon koncentracije (% masenog udjela)
fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Nije navedeno		

Osnovni sastojci	
Naziv EC	Opis prema inventaru EC
fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)	/
Naziv CAS	Broj CAS
fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)	68937-41-7

7.9. kvaterni amonijevi spojevi

Tvrtka sintetizira sljedeće tvari:

Tvar A

kvaterni amonijevi spojevi, di-C₁₀₋₁₈-alkildimetil, kloridi

Broj prema inventaru EC 294-392-2

Broj CAS 91721-91-4

Raspodjela duljina ugljikova lanca:

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 %

Tvar B

kvaterni amonijevi spojevi, dikoko alkildimetil, kloridi

Broj prema inventaru EC 263-087-6

Broj CAS 61789-77-3

Tvrtki nije poznat precizan sastav ove tvari.

Tvar C

didodecildimetil amonijev bromid

Tvar D

didodecildimetil amonijev klorid

Tvar E

Tvar E proizvodi se kao reakcijska masa didodecildimetil amonijske bromida i didodecildimetil amonijske klorida (reakcijska masa tvari C i D).

Tvar F

kvaterni amonijski spojevi, di-C₁₄₋₁₈-alkildimetil amonij, kloridi

Broj prema inventaru EC 268-072-8

Broj CAS 68002-59-5

Raspodjela duljina ugljikova lanca:

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

Tvar G

kvaterni amonijski spojevi, di-C₄₀₋₂₂-alkildimetil, kloridi

Raspodjela duljina ugljikova lanca (jedan apostrof označava jednu dvostruku vezu, a dvostruki apostrof označava jednu trostruku vezu):

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 %

Trenutačno za određivanje naziva tvrtka koristi samo tvar B (kvaterni amonijski spojevi, dikoko alkildimetil kloridi, broj EC 263-087-6, broj CAS 61789-77-3) jer najbolje odgovara svim tvarima (A do G). Tvrtku zanima je li moguće obuhvatiti sve tvari (A do G) jednom registracijom tvari B.

1. Opće napomene

Ugljikovodike (parafine, olefine) dobivene iz masti i ulja ili sintetske nadomjeske identificira se uz pomoć raspodjele njihovih ugljikovih lanaca ili njihova podrijetla (alkilni opisnik), uz pomoć funkcionalne skupine (opisnik funkcionalnosti), npr. amonij, te aniona, odnosno kationa (opisnik soli), npr. klorid. Raspodjela duljina lanca, npr. C₈₋₁₈, odnosi se na zasićene

ravnolančane (nerazgranate)

sve uključene brojeve ugljika (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈) dok uska raspodjela ne obuhvaća široku ni obrnuto.

Inače treba naznačiti na sljedeći način:

nezasićene (C₁₆nezasićena)

razgranati (C₁₀razgranat)

parni (C₁₂₋₁₈parni)

Ugljikovi lanci koje se opisuje uz pomoć izvora moraju imati raspodjelu koja se javlja kod izvora, npr. lojevi alkilni amini.

Lojevi alkil-amini su 99 % primarni linearni lanci alkil-amina sa sljedećom raspodjelom duljina ugljikova lanca (Ullmann, 1985.) [jedan apostrof označava jednu dvostruku vezu, a dvostruki apostrof označava jednu trostruku vezu]:

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

2. Kako identificirati tvari za potrebe registracije

Svaka se tvar uspoređuje s tvari B (koja se do sada koristila za određivanje naziva) kako bi se odlučilo mogu li se dvije tvari smatrati istovjetnima.

Usporedba tvari A i B

Sljedeća raspodjela duljina ugljikova lanca može se naći za „koko” tvari B (Ullmann, 1985.) [jedan apostrof označava jednu dvostruku vezu, a dvostruki apostrof označava jednu trostruku vezu]:

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

Dakle, raspodjela duljina lanaca tvari A odstupa od raspodjele duljina ugljikovih lanaca „koko” tvari B. Budući da se kvalitativni i kvantitativni sastavi dviju tvari značajno razlikuju, ne mogu se smatrati istovjetnima.

Usporedba tvari B i C

Tvar B „kvaterni amonijevi spojevi, dikoko, alkildimetil, kloridi” opisuje smjesu sastojaka različitih duljina ugljikovih lanaca (C₆ do C₁₈ parni, ravnolančani, zasićeni i nezasićeni), dok tvar C opisuje samo jedan sastojak s jednom definiranom i zasićenom duljinom lanca (C₁₂) s drugačijim anionom (bromid). Stoga se tvar C ne može smatrati istovjetnom tvari B.

Usporedba tvari B i D

Tvar B „kvaterni amonijevi spojevi, dikoko, alkildimetil, kloridi” opisuje smjesu sastojaka različitih duljina ugljikovih lanaca (C₆ do C₁₈ parni, ravnolančani, zasićeni i nezasićeni), dok tvar D opisuje jedan sastojak s definiranom i zasićenom duljinom lanca (C₁₂) i s istim anionom (klorid). Tvari B i D imaju različite nazive i ne mogu se smatrati istom tvari, budući da pojedinačni sastojak nije obuhvaćen smjesom koja sadrži određeni sastojak i obrnuto.

Usporedba tvari B i E

Tvar E je smjesa tvari C i D. Obje imaju zasićene lance C₁₂, no različite anione (bromid i klorid). Tvar B „kvaterni amonijevi spojevi, dikoko, alkildimetil, kloridi” opisuje smjesu sastojaka različitih duljina ugljikovih lanaca (C₆ do C₁₈ parni, ravnolančani, zasićeni i nezasićeni) i s kloridom kao anionom. Međutim, tvar E opisana je samo duljinom ugljikova lanca C₁₂ s bromidom kao dodatnim anionom. Stoga se tvari B i E ne mogu smatrati istovjetnima. Zbog toga je potrebna odvojena registracija tvari E.

Usporedba tvari B i F

Tvar F „kvaterni amonijevi spojevi, di-C₁₄₋₁₈-alkildimetil amonijevi kloridi” jest smjesa sastojaka različitih duljina ugljikovih lanaca (C₁₄ do C₁₈ parni i neparni, ravnolančani i zasićeni). Tvar F razlikuje se u sastavu i rasponu raspodjele ugljikovih lanaca od tvari B. Tvar F ima usku raspodjelu duljine ugljikovih lanaca i uz to C₁₅- i C₁₇- lance ugljika. Stoga se tvari B i F ne mogu smatrati istovjetnima.

Usporedba tvari B i G

Tvari B i G izgledaju vrlo slično, jer je raspodjela ugljikovih lanaca gotovo u istom rasponu. Međutim, tvar G uključuje i duljine ugljikovih lanaca C₄, C₂₀ i C₂₂. Raspodjela duljina ugljikovih lanaca tvari G sadrži širi raspon od tvari B. Stoga se tvari B i G ne mogu smatrati istovjetnima.

3. Zaključak

Ugljikohidrati (parafini, olefini) mogu se smatrati istom tvari kad su sva tri opisnika (alkilni, opisnik funkcionalnosti i opisnik soli) identična.

U prethodno navedenom primjeru opisnici su uvijek različiti. Stoga se tvari ne mogu obuhvatiti jednom registracijom tvari B.

7.10. Naftne tvari

Navodimo dva primjera na temelju smjernica za specifične tvari UVCB opisane u poglavlju 4.3.2.

7.10.1. Miješanje benzina (C4-C12)

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Naziv

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	Nafta (benzin), katalitički izmijenjeni
--	---

Izvor

Identifikacija ili opis izvora proizvodnog toka	Sirova nafta
--	--------------

Postupak

Opis rafinerijskog postupka	Postupak katalitičke izmjene
Raspon ugljikovih atoma	C4-C12
Raspon vrenja ili vrelište	30 °C do 220 °C
Ostala fizikalna svojstva, npr. viskoznost	ispod 7 mm ² /s pri 40 °C (viskoznost)

Broj prema inventaru EC	273-271-8
Broj CAS	68955-35-1
Naziv EC /naziv CAS	Nafta (benzin), katalitički izmijenjeni
Opis prema sustavu EC/CAS	Složeni sastav ugljikovodika proizveden destilacijom proizvoda iz postupka katalitičke izmjene. Sastoji se od ugljikovodika koji imaju broj ugljikovih atoma pretežito u rasponu od C4 do C12 i vriju u rasponu od približno od 30 °C do 220 °C (90 °F do 430 °F). Sadrži razmjerno velik udio aromatskih i razgranatih ugljikovodika. Ovaj tok može sadržavati 10 % ili više volumnog udjela benzena.

2. Informacije o sastavu

Poznati sastojci			
Naziv prema nomenklaturi IUPAC	Broj CAS	Broj prema inventaru EC	Raspon koncentracije (% masenog udjela)
Benzen	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluen	108-88-3	203-625-9	20-25
ksilen	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Plinska ulja (nafta)

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	Plinska ulja (nafta), teška atmosferska
--	---

Izvor

Identifikacija ili opis izvora proizvodnog toka	Sirova nafta
--	--------------

Postupak

Opis rafinerijskog postupka	Atmosferska destilacija
Raspon ugljikovih atoma	C7 - C35
Raspon vrenja ili vrelište	121 °C do 510 °C
Ostala fizikalna svojstva, npr. viskoznost	20 mm ² /s pri 40 °C (viskoznost)
Broj prema inventaru EC Broj CAS Naziv EC /naziv CAS Opis prema sustavu EC/CAS	272-184-2 68783-08-4 Plinska ulja (nafta), teška atmosferska Složeni sastav ugljikovodika dobiven destilacijom sirove nafte. Sastoji se od ugljikovodika koji imaju broj ugljikovih atoma pretežito u rasponu od C7 do C35 i vriju u rasponu od približno 121 °C do 510 °C (250 °F do 950 °F).

2. *Kemijski sastav*

Nema dostupnih informacija

7.11. Enzimi

Navodimo dva primjera za enzimске koncentrate na temelju smjernica za specifične tvari UVCB opisanih u poglavlju 4.3.2.3.: suptilizin (identificiran nomenklaturom IUBMB i drugim sastojcima) i α -amilaza (identificirana nomenklaturom IUBMB i organizmom koji se koristio u proizvodnji)

7.11.1. Suptilizin

Enzimске bjelančevine	Suptilizin
Broj IUBMB	3.4.21.62

Nazivi prema nomenklaturi IUBMB (sustavno ime, naziv enzima, sinonimi)	suptilizin alkalaza, alkalaza 0,6L, alkalaza 2,5L, ALK-enzim, bacilopeptidaza A, bacilopeptidaza B, alkalna proteinaza Bacillus Subtilisa, biopraza, biopraza AL 15, biopraza APL 30, kolistinaza, (vidjeti i primjedbe), suptilizin J, suptilizin S41, suptilizin Sendai, suptilizin GX, suptilizin E, itd.
Primjedbe koje daje IUBMB	Suptilizin je serinska endopeptidaza, tipičan primjer peptidaze iz porodice peptidaza S8 .. Ne sadrži cisteinske ostatke (iako su cisteini nađeni u homolognim enzimima). Verzije suptilizina u različitim vrstama uključuju suptilizin BPN' (također suptilizin B, suptilopeptidazu B, suptilopeptidazu C, nagarazu, proteinazu nagaraze, suptilizin Novo, bakterijsku proteinazu Novo) i suptilizin Carlsberg (suptilizin A, suptilopeptidazu A, alkalazu Novo). Ranije EC 3.4.4.16 i uključen u EC 3.4.21.14. Slične enzime proizvode različiti sojevi <i>Bacillus subtilisa</i> i druge vrste <i>Bacillus</i> [1,3]
Reakcija	Hidroliza bjelančevina pri čemu se kidaju različite peptidne veze, no preferira velike nenabijene ostatke u P1. Hidrolizira peptidne amide.
Vrsta reakcije	hidrolaze Djeluju na peptidne veze (peptidaze) Serinske endopeptidaze
Broj prema inventaru EC	232-752-2
Naziv EC	suptilizin
Broj CAS	9014-01-1
Naziv CAS	suptilizin
Koncentracija bjelančevina u enzimu	26 %
Ostali sastojci	

ostale bjelančevine, peptidi i aminokiseline	39 %
ugljikohidrati	11 %
lipidi	1 %
anorganske soli	23 %
Dodatni parametri	
Supstrati i produkti	bjelančevine ili oligopeptidi, voda peptidi

7.11.2. α -amilaza

Enzimska bjelančevina	α -amilaza
Broj IUBMB	3.2.1.1
Nazivi prema nomenklaturi IUBMB (sustavno ime, naziv enzima, sinonimi)	1,4- α -D-glukan glukanohidrolaza glikogenaza α -amilaza alfa-amilaza: endoamilaza taka-amilaza A
Primjedbe koje daje IUBMB	Nasumično hidrolizira škrob, glikogen i srodne polisaharide i oligosaharide, hidrolizirane (raskidane) skupine oslobađaju se u α -konfiguraciji. Izraz „ α ” odnosi se na početnu anomernu konfiguraciju šećera koji se otpušta, a ne na konfiguraciju veze koja se hidrolizira.
Reakcija	endohidroliza 1,4- α -D-glukozidnih veza polisaharida koji sadrže tri ili više α -D-glukoza međusobno povezanih 1,4- α vezama.
Vrsta reakcije	hidrolaze glikozidaze glikozidaze, tj. enzimi koji hidroliziraju O- i S-glikozilne spojeve

Broj prema inventaru EC	232-565-6
Naziv EC	Amilaza, α -
Broj CAS	9000-90-2
Povezani brojevi CAS	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (svi izbrisani)
Naziv CAS	Amilaza, α -
Koncentracija bjelančevina u enzimu	37 %
Ostali sastojci	
Ostale bjelančevine, peptidi i aminokiseline	30 %
Ugljikohidrati	19 %
Anorganske soli	14 %
Dodatni parametri	
Supstrati i produkti	škrob, glikogen, voda, polisaharidi, oligosaharidi

Dodatak I.- Dodatni materijali

U ovom su Dodatku navedeni mrežna mjesta, baze podataka i priručnici koji mogu pomoći pri pronalaženju odgovarajućih naziva iz baza IUPAC, CAS i EC, brojeva CAS i EC, molekulskih i strukturnih formula, uključujući i oznake SMILES, te drugih parametara potrebnih za identifikaciju tvari. Komercijalne baze podataka i slični izvori nisu uključeni.

Općenito		
Parametar identifikacije tvari	Izvor	Opis izvora
U.S. Department of Health and Human Services (Ministarstvo zdravlja i socijalne skrbi SAD-a)	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Skupina baza podataka i alata s pomoću kojih korisnici mogu tražiti informacije o kemikalijama
Perkin Elmer Informatics	Error! Hyperlink reference not valid. https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	Besplatna baza podataka o kemijskim strukturama i fizikalnim svojstvima, s poveznicama na relevantne informacije
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Chemical software; Accord Alphabetical Product Listing

Naziv i ostale identifikacijske oznake		
Parametar identifikacije tvari	Izvor	Opis izvora
Naziv prema nomenklaturi i IUPAC	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	Mrežno mjesto nomenklature IUPAC
	https://iupac.qmul.ac.uk/	Nomenklatura kemikalija IUPAC i preporuke (po ovlaštenju i pod nadzorom IUPAC-a)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) (Nomenklatura organske kemije (Plava knjiga)) Pergamon, 1979. [ISBN 0-08022-3699]	Glavne publikacije koje se odnose na nomenklaturu IUPAC, novo izdanje očekuje se 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) (Vodič kroz IUPAC-nomenklaturu organskih spojeva (preporuke, 1993.) (dodatak Plavoj knjizi) Blackwell Science, 1993. [ISBN 0-63203-4882]	Glavne publikacije koje se odnose na nomenklaturu IUPAC, novo izdanje očekuje se 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) (Nomenklatura anorganske kemije (preporuke, 1990.) (Crvena knjiga)) Blackwell Science, 1990. [ISBN 0-63202-4941]	Glavne publikacije koje se odnose na nomenklaturu IUPAC, novo izdanje očekuje se u srpnju 2005.
Naziv prema nomenklaturi i IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992. [ISBN 1-85578-005-4]	Glavne publikacije koje se odnose na nomenklaturu IUPAC
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations (Načela kemijske nomenklature: vodič kroz preporuke IUPAC-a) Blackwell Science, 1998. [ISBN 0-86542-6856]	Knjiga s osnovnim informacijama koja obuhvaća sve vrste spojeva

Naziv prema nomenklatur i IUPAC	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Komercijalni računalni program za davanje naziva koji može biti od velike pomoći pri davanju naziva strukturama umjerene složenosti. Također i besplatan program za male molekule (preporučuje IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Nomenklatura organske kemije IUPAC (preporučuje IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Potpuni popis odobrenih trivijalnih i polusustavnih korijena naziva organskih spojeva
	http://www.chemexper.com/	Namjena ChemExper popisa kemikalija jest kreiranje zajedničke i slobodno dostupne baze podataka o kemikalijama putem interneta. U toj se bazi podataka nalaze fizikalne karakteristike kemikalija. Svatko može unijeti informacije o kemikalijama i dohvatiti informacije uz pomoć internetske tražilice.
Nomenklatura IUBMB	https://iubmb.qmul.ac.uk/	Baza podataka biokemijske nomenklature IUBMB (uz ovlaštenje IUBMB-a)
Ostali nazivi	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Generički nazivi indeksa boje, međunarodni indeks boje, četvrto mrežno izdanje
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (Međunarodna nomenklatura kemijskih sastojaka), mrežno mjesto Vijeća za proizvode za osobnu njegu [SAD-a]
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	Tvari koje sadrže promjenjive duljine ugljikova lanca (alkilni rasponi izraženi CX-Y oznakama) Agencije SAD-a za zaštitu okoliša (US EPA)
Ostale identifikacijske oznake	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	Europske norme, mrežno mjesto Europskog odbora za normizaciju (CEN)

Broj EC	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	Inventar EC: omogućava pretraživanje popisa EINCES, ELINCS, NLP i <i>Priloga I.</i> Direktivi 67/548/EEZ
Broj CAS	http://www.cas.org	Mrežno mjesto zbirke podataka o kemikalijama pri CAS-u
	http://www.chemistry.org	Mrežno mjesto Američkog kemijskog društva

Molekulska i strukturna formula

Parametar identifikacije tvari	Izvor	Opis izvora
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html	Besplatni generator oznaka iz sustava SMILES
Molekulska masa i sustav SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html	ACDChemsketch, besplatan programski paket za crtanje kemijskih struktura uz pomoć računala (dostupan i uz plaćanje)
Nekoliko fizikalno-kemijskih parametara	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ je skup modela za procjenu fizikalno-kemijskih svojstava i sudbine tvari u okolišu na temelju programa Windows® koji su razvili Ured za zaštitu od zagađenja i toksikologiju američke Agencije za zaštitu okoliša i Syracuse Research Corporation (SRC).
Dodatna podrška za određene tvari	Pitanja i odgovori - ECHA Specifična podrška za identifikaciju tvari prema sektorima - ECHA	Podrška pri davanju naziva i karakterizaciji određenih tvari dostupna je na ECHA-inom mrežnom mjestu te u pitanjima i odgovorima.

Dodatak II. – Tehničke upute za identifikaciju tvari prema pojedinačnim parametrima

Informacije u ovom Dodatku namijenjene su korisnicima koji nisu upoznati s pravilima određivanja naziva, korištenja brojeva s različitim popisa, kao ni s pravilima zapisivanja molekulskih i strukturnih informacija, korištenja spektralnih podataka itd.

Uvodno se sažeto prikazuju osnovna načela, a potom se korisnika upućuje na odgovarajuće izvore gdje može naći potpune informacije.

Ovo je pojednostavljen prikaz, koji nije ni potpun ni iscrpan, nedostatan detaljan za profesionalnog korisnika. Ni u kojem slučaju ne može ga se smatrati jednakovrijednim službenom izvoru.

1. Naziv(i) prema nomenklaturi IUPAC ili drugoj međunarodnoj nomenklaturi

Kod registracije treba navesti naziv na hrvatskom jeziku prema nomenklaturi IUPAC ili neki drugi međunarodno priznati naziv tvari.

Naziv prema nomenklaturi IUPAC temelji se na međunarodnoj kemijskoj nomenklaturi koju je uspostavila međunarodna organizacija IUPAC (Međunarodna unija za čistu i primijenjenu kemiju) (za odgovarajuće reference vidjeti Dodatak I.). Nomenklatura IUPAC sustavan je način davanja naziva organskim i anorganskim kemijskim tvarima. U nomenklaturi IUPAC za opis vrste i položaja funkcionalnih skupina u tvari koriste se predmetci (prefiksi), dometci (sufiksi) i umetci (infiksi).

U primjeru naziva **penta-1,3-dien-1-ol**:

predmetak je **penta-1,3-**

umetak je **-di**, a

dometak je **-ol**

en- je osnova odnosno korijen naziva.

Pravila su razvijana nekoliko godina i stalno se mijenjaju uzimajući u obzir nove komponente molekulske raznolikosti i moguće uočene nesuglasice ili zabune. Pravila IUPAC-a mogu se koristiti samo za dobro definirane tvari.

U nastavku su navedene opće upute o ustroju naziva prema nomenklaturi IUPAC. Više pojedinosti potražite u poglavlju 4.

1.1 Organska tvar

1. korak Odredite broj ugljikovih atoma u najdužem neprekinutom lancu ugljikovih atoma. Taj broj određuje predmetak, prvi dio korijena naziva:

Broj ugljikovih atoma	Korijen
1	met-
2	et-

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

2. korak Odredite zasićenost lanca: ona određuje dometak, drugi dio korijena naziva:

Zasićenost	Veze	Dometak
Nezasićene	dvostruka trostruka	-en -in
Zasićene	-	-an

U slučaju višestrukih dvostrukih ili trostrukih veza, broj veza naznačuje se izrazima „mono“, „di“, „tri“ itd. prije dometka:

penten s 2 dvostruke veze: pentadien

3. korak Kombinirajte predmetak, dometak i dodatke korijenu naziva

Napomena: Kao korijen se mogu koristiti i trivijalni i polusustavni nazivi koje je odobrio IUPAC:

benzen, toluen, itd.

4. korak Upotrijebite tablicu u nastavku:

- identificirajte supstituente i/ili funkcionalne skupine: ugljikove skupine ili skupine koje ne sadrže ugljikove atome vezane uz lanac ugljikovih atoma identificiran pod 1.
- odredite nomenklaturnu prednost supstituenata i/ili funkcionalnih skupina
- dodajte dometak prvom supstituentu, odnosno funkcionalnoj skupini, pa zatim svima ostalima po prioritetnom redosljedju
- dodajte predmetak ostalim supstituentima i funkcionalnim skupinama abecednim redom.

Prioritetni redosljed	Skupina	Formula	Dometak	Predmetak
1	karboksilna kiselina	R-COOH	-oična kiselina	karboksi

2	ester	R-CO-O-R	-oat	-
3	amid	R-CONH ₂	-amid	karbamoil
4	cijanid	R-CN	-nitril	cijano
5	aldehid	R-CHO	-al	okso
6	keton	R-CO-R	-on	okso
7	alkohol	R-OH	-ol	hidroksil
8	tiol	R-SH	-tiol	sulfanil
9	amin	R-NH ₂	-amin	amino

1.2 Anorganska tvar

1.2.1 Određivanje naziva jednostavnih anorganskih tvari

Nazivi anorganskih tvari temelje se na skupu pravila (vidjeti referencu u poglavlju 7.1. crvene knjige IUPAC-a). Osnovna su pravila prikazana u nastavku:

1 Anioni pojedinačnog atoma dobivaju dometak -id:

O²⁻ je oksid

2 Jednostavni ionski spojevi jesu nazivi s kationom, zatim anionom. Kod kationa naboja >1, naboj se piše rimskim brojkama u okruglim zagradama neposredno iza naziva elementa:

Cu²⁺ je bakar(II)

3 Hidrati dobivaju naziv kao ionski spoj iza kojeg dolazi brojčani predmetak i – hidrat. Brojčani predmetci jesu mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, heksa-, hepta-, okta-, nona-, deka-:

CuSO₄ · 5H₂O je „bakrov(II) sulfat pentahidrat“

Napomena: Za potrebe registracije, hidratizirane i, kad je primjenjivo, anhidrirane oblike određene metalne soli smatra se istom tvari.

4 Kod anorganskih molekulskih spojeva u nazivu svaki element dobiva predmetak (vidjeti hidrate). Više elektronegativan element se piše zadnji, s dometkom – id:

CO₂ je ugljikov dioksid, a CCl₄ je ugljikov tetraklorid

5 Kiseline primaju naziv po anionu koji se stvara kad se kiselina otopi u vodi. Postoji nekoliko mogućnosti:

a Ako pri otapanju u vodi, disocijacijom kiseline nastane anion naziva „x“-id, kiselina prima naziv hidro-„x“-na kiselina:

solna kiselina stvara kloridni anion

b Ako pri otapanju u vodi disocijacijom kiseline nastane anion naziva „x“-at, kiselina prima naziv „x“-na kiselina:

klorična kiselina disocira se u kloratne anione u vodi

c Ako pri otapanju u vodi disocijacijom kiseline nastane anion naziva „x“-it, kiselina prima naziv „x“-asta kiselina:

klorasta kiselina disocira se u kloritne anione

1.2.2 Nazivi mineraloških faza

Složene mineraloške faze obično sadrže kombinaciju najmanje triju elemenata. Većina prisutnih elemenata kombinira se s kisikom i radi jednostavnije identifikacije mineralozi obično smatraju da su složeni spojevi izgrađeni od oksida, od kojih su neki bazični, a drugi kiseli. Primjerice, silikate je uobičajeno predstavljati kao zbroj više oksida ili kao soli silicijeve kiseline ili alumosilicijeve kiseline. Prema tome, kalcijev ortosilikat može se navesti kao $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$, kombinaciju odvojenih oksida ili Ca_2SiO_4 , ili kao kalcijevu sol ortosilicijeve kiseline H_4SiO_4 . Isto vrijedi i za ostale složene mineralne okside – primaju naziv s predmetkom prije svakog oksida (npr. Ca_3SiO_5 = kalcijev silikat = $3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$). U nekim industrijskim sektorima uvedena su daljnja pojednostavljenja kako bi se skratile formule spojeva. Primjerice, cementni klinker Portland, $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ (kalcijev ortosilikat ili dikalcijev silikat) skraćuje se na C_2S , gdje C = CaO i S = SiO_2 . Kada treba odrediti naziv ili identificirati složene mineraloške faze preporučuje se konzultirati stručne tekstove.

1.3 Prirodni produkti i srodne komponente

IUPAC je razvio nekoliko pravila za sustavno nazivlje prirodnih proizvoda. To ukratko znači da se naziv tvari ekstrahirane iz prirodnih izvora temelji, kad god je to moguće, na nazivu obitelji, roda ili vrste organizma iz kojeg se tvar ekstrahira:

Za hipotetsku bjelančevinu, *Hypothecalia Exemplare* nazivi se temelje na *hypothecalia* i/ili *exemplare*, npr. *Horse Exemplare*.

Ako je moguće, naziv treba odražavati poznatu i vjerojatnu raspodjelu prirodnog produkta. Ako je prikladno, razred ili red također se mogu koristiti kao osnova za naziv tvari koja se pojavljuje u više srodnih obitelji. Nazivi prirodnih produkata nepoznate strukture ne smiju imati predmetke, dometke i/ili umetke koji se koriste u organskoj nomenklaturi.

Kondenzacijski produkt *Horse exemplarea*, valarin dodan je na N-kraj.

Mnoge tvari koje se pojavljuju u prirodi pripadaju dobro definiranim strukturnim razredima, od kojih svaki može biti opisan skupom usko povezanih roditeljskih struktura, tj. svaki se može izvesti iz osnovne strukture. Sustavni nazivi tvari koje se pojavljuju u prirodi i njihovih derivata mogu se temeljiti na nazivu odgovarajuće temeljne roditeljske strukture.

Dobro poznate roditeljske strukture su alkaloidi, steroidi, terpenoidi i vitamini.

Temeljna roditeljska struktura treba odražavati osnovni skelet zajednički većini tvari u tom razredu. Tvari koje se pojavljuju u prirodi ili njihovi derivati primaju naziv po roditeljskoj strukturi uz dodatak predmetaka, dometaka ili umetaka koji označavaju:

- promjene strukture skeleta
- zamjenu atoma skeleta
- promjene stupnja hidrogenacije impliciranom u nazivu roditeljske strukture
- atome ili skupine koji supstituiraju atome vodika roditeljske strukture
- konfiguracije koje još nisu implicirane u nazivu roditeljske strukture ili su

promijenjene u odnosu na impliciranu strukturu.

Tiamin klorid poznat je i kao vitamin B₁.

Za detaljnije informacije o sustavnim nazivima prirodnih produkata i srodnih tvari treba kontaktirati IUPAC (vidjeti Dodatak I.).

1.4 Nije moguće izvesti naziv prema nomenklaturi IUPAC

Ako za neke tvari nije moguće izvesti naziv u skladu s nomenklaturom IUPAC, može se koristiti druge međunarodno priznate nomenklature specifične za te tvari, kao što su:

- minerali i rude, mineraloški nazivi
- naftne tvari
- generički nazivi indeksa boje³
- naftni dodatci (aditivi)
- INCI (Međunarodna nomenklatura kozmetičkih sastojaka)⁴
- SDA (Udruga proizvođača sapuna i deterdženata) nazivi za površinski aktivne tvari⁵
- itd.

2 Ostali nazivi

Sve relevantne nazive i/ili javne identifikacijske oznake na svim jezicima pod kojima je tvar na tržištu ili će biti na tržištu EU-a (npr. trgovačke nazive) dobro je uključiti u registraciju u okviru Uredbe REACH. To uključuje trgovačke nazive, sinonime, pokrate i sl.

- <http://www.colour-index.com>, Međunarodni indeks boje, četvrto mrežno izdanje
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, mrežno mjesto Međunarodne nomenklature kozmetičkih sastojaka
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, mrežno mjesto Američkog instituta za čišćenje (ACI)

3 Broj EC s popisa EINECS, ELINCS ili NLP (inventar EC)

Broj EC, tj. broj s popisa EINECS, ELINCS ili NLP, službeni je broj tvari unutar Europske unije. Broj EC može se naći u službenim publikacijama EINECS, ELINCS i NLP ili onima Europske agencije za kemikalije.

Broj EC sastoji se od 7 znamenaka oblika X₁X₂X₃-X₄X₅X₆-X₇. Prva znamenka određena je popisom kojemu tvar pripada:

Popis	Prva znamenka Broj EC
EINECS	2 ili 3
ELINCS	4
NLP	5

4 Naziv CAS i broj CAS

Služba za sažetke i ostale informacije iz područja kemije (Chemical Abstracts Service - CAS), odjel Američkog kemijskog društva (ACS), dodjeljuje naziv i broj CAS svakoj

kemikaliji koja uđe u zbirku podataka pohranjenih u bazi CAS. Nazivi i brojevi dodjeljuju se u slijedu jedinstvenim tvarima koje identificiraju znanstvenici CAS-a. Svaka tvar registrirana pri CAS-u ima naziv u skladu s nomenklaturom CAS, koji ACS usvaja nakon preporuka Odbora za nomenklaturu ACS-a (vidjeti reference u Dodatku I.).

4.1 Naziv CAS

Naziv CAS dodjeljuje Chemical Abstracts Service i razlikuje se od naziva prema nomenklaturi IUPAC. Nomenklatura CAS temelji se na ograničenom skupu kriterija koji nisu uvijek dostatni za izvođenje naziva tvari. Stoga je općenito preporučljivo kontaktirati službu CAS (Chemical Abstracts Service) radi pribavljanja ispravnog naziva CAS.

Ukratko, osnovna pravila nomenklature jesu sljedeća:

- „glavni“ dio tvari izabere se da služi kao glava ili roditelj
- supstituenti su navedeni nakon glave/roditelja, na koju se upućuje obrnutim redoslijedom
- kada ima više supstituenata, navode se abecednim redom (uključujući predmetke):

o-ksilen-3-ol je benzen, 1,2-dimetil, 3-hidroksi

4.2 Broj CAS

Brojeve CAS može se dobiti od Službe za sažetke i ostale informacije iz područja kemije.

Broj CAS sastoji se od najmanje pet znamenki podijeljenih u tri dijela i odvojenih crticama. Drugi se dio uvijek sastoji od dvije znamenke, a treći dio od jedne:

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

Za provjeru broja CAS dostupan je kontrolni zbroj (checksum):

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

Broj CAS mora biti točan na temelju kontrolnog zbroja (checksum):

5 Ostale identifikacijske šifre

Ostale međunarodno prihvaćene identifikacijske šifre mogu se dodatno navesti, npr.:

- broj kupca
- broj UN
- indeks boje
- broj boje.

6 Molekulska formula, strukturna formula i sustav SMILES

6.1 Molekulska formula

Molekulska formula identificira svaku vrstu elementa njegovim kemijskim simbolom i identificira broj atoma svakog takvog elementa koji se nalazi u jednoj zasebnoj molekuli tvari.

Molekulske formule treba navoditi u skladu s (tradicionalnim) Hillovim sustavom te u skladu sa sustavom CAS, ako se razlikuje od formule Hillovog sustava.

Pri primjeni Hillove metode treba poduzeti korake u nastavku:

1. identificirati elemente i navesti kemijske simbole

2. postaviti elemente u ispravan redoslijed:

a. tvari koje sadrže ugljik:

za svaki element navodi se kemijski simbol, sljedećim redoslijedom:

(1) ugljik

(2) vodik

(3) simboli ostalih elemenata abecednim redom:

pentan: C₅H₁₂

penten: C₅H₁₀

pentanol: C₅H₁₂O

b. tvari koje ne sadrže ugljik:

svaki se element navodi abecednim redom:

solna kiselina: ClH

3. Kod svakog elementa koji ima više atoma navesti broj atoma u donjem indeksu kemijskim simbolima

4. Informacije koje nisu povezane s glavnom strukturom dodati na kraju molekulske formule, odvojene točkom ili zarezom:

natrijev benzoat je C₇H₆O₂ , natrijeva sol

bakrov sulfat dihidrat je CuO₄S

Ako se Hillova metoda ne može primijeniti na određenu tvar, molekulska formulu treba navesti na drugačiji način, npr. kao empirijsku formulu, osnovni opis atoma i dostupan omjer atoma, ili formulu koju određuje Chemical Abstract Service (vidjeti poglavlje 4. ovih Smjernica).

6.2 Strukturna formula i opis kristalne strukture

Strukturna je formula potrebna radi predočavanja rasporeda molekula u tvari i njihovih međusobnih odnosa. Ona treba naznačiti smještaj atoma, iona ili skupina i prirodu njihovih veza. To uključuje i izomeriju, tj. cis/trans, kiralnost, enantiomere itd.

Strukturna formula može se navesti u različitim oblicima: u obliku molekulske formule i/ili prikaza strukture.

– *Strukturna formula u obliku molekulske formule*

1. Zapišite sve elemente u grupi i redoslijed pojavljivanja:

n-pentan: CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

2. Svaki supstituent piše se u zagradama, neposredno iza atoma na koji se veže:

2-metilbutan: CH₃CH(CH₂)CH₂CH₃

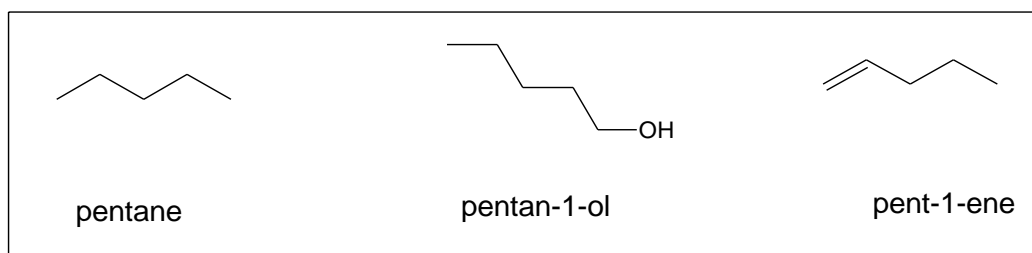
3. Dvostruke ili trostruke veze treba prikazati između skupina elemenata na koje se odnose:

pent-1-en: CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

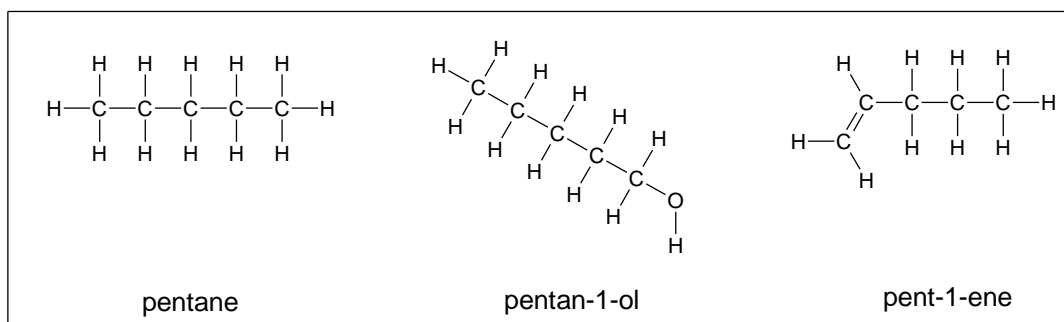
Strukturna formula u obliku prikaza strukture

Elementi i veze između njih prikazuju se kao dvodimenzionalna ili trodimenzionalna slika. Postoji nekoliko metoda:

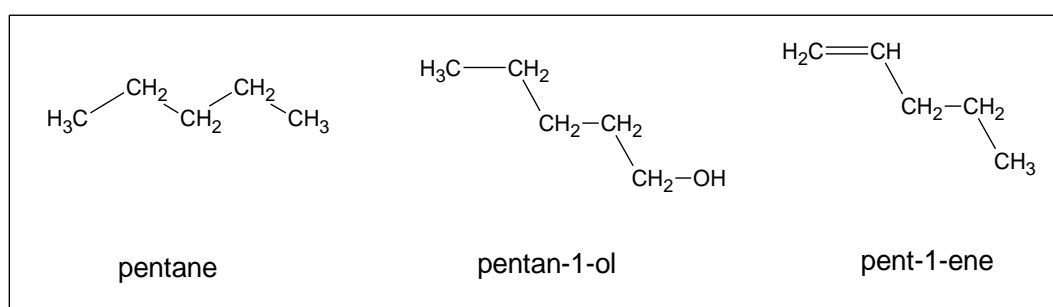
1. Ugljikovi i vodikovi atomi nisu prikazani, no prikazani su svi ostali elementi vezani za ugljikov atom, kao i vodikovi atomi vezani za druge elemente (osim za ugljik)



2. Prikazivanje svih elemenata prema nazivu



3. pent-1-en Prikazivanje ugljika i vodika kao skupina (npr. CH₃), svih elemenata bez atoma ugljika i svih vodika koji nisu vezani na ugljik.

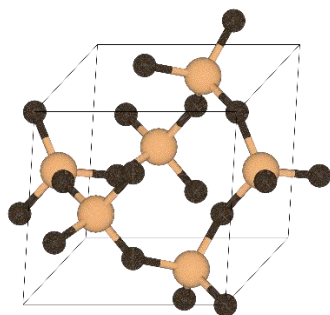


- - *Strukturna formula u obliku molekulske formule*

1. Navedite molekulsku formulu:

SiO₂

2. Navedite kristalnu strukturu tvari



3. Navedite mineraloški i/ili kristalografski naziv na temelju kristalnog sustava³² i razreda kristala:

α-quartz [*β*-quartz] / **kristalni sustav**: trigonalni - heksagonalni, **razred kristala**: trigonalni-trapezoidni 3 2

6.3 Sustav oznaka SMILES

SMILES je akronim za Simplified Molecular Input Line Entry Specification (pojednostavljena molekulska specifikacija ulaznih linijskih podataka).³³ To je sustav oznaka kemikalija za prikazivanje molekulske strukture linearnim nizom simbola. Tipično je u sustavu SMILES naziv molekule istoznačan njezinoj strukturi: neizravno pokazuje dvodimenzionalnu sliku molekulske strukture. Budući da se dvodimenzionalnu kemijsku strukturu može nacrtati na različite načine, postoji nekoliko ispravnih oznaka SMILES za istu molekulu. Osnova je sustava SMILES predstavljanje modela valentnih veza molekule. Stoga nije prikladno opisivati molekule koje se ne može predstaviti modelom valentnih veza.

Oznake SMILES sastoje se od atoma, označenih simbolima za elemente, veza, zagrada, koje pokazuju grananje, i brojeva, koji se koriste za cikličke strukture. Oznaka SMILES označava molekulsku strukturu kao graf s neobveznim naznakama kiralnosti. Oznaka koja opisuje strukturu samo uz pomoć veza i atoma jest generička oznaka SMILES, a oznaka koja ima i podatke o izotopima i kiralnosti jest izomerna oznaka SMILES.

Ukratko, sustav oznaka SMILES temelji se na nekoliko osnovnih pravila:

1. Atome predstavljaju njihovi atomski simboli
2. Svaki atom osim vodika navodi se zasebno
 - a. Elementi u "organskom podskupu" B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br i I pišu se bez uglatih zagrada i bez pridruženog H, sve dotle dok broj vodika odgovara najnižim uobičajenim valencijama u skladu s eksplicitnim vezama:

³² kubičan/tetragonski/ortoromboidni/romboidni (ili trigonalni)/heksagonalni/monoklinski/triklinski

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); 31-36.

Element u „organskom podskupu“	„Najniže uobičajene valencije“
B	3
C	4
N	3 i 5
O	2
P	3 i 5
S	2, 4 i 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Elementi u „organskom podskupu“ pišu se u uglatim zagradama čim broj vodika ne odgovara najmanjoj uobičajenoj valenciji:

amonijev kation je NH₄⁺

- c. Elementi koji nisu u „organskom podskupu“ pišu se u uglatim zagradama i prikazuju se svi na njih vezani vodici.

3. Alifatski atomi pišu se velikim slovima, a aromatski atomi malima:

benzen je c1ccccc1, a cikloheksan je C1CCCCC1

4. Vodik se navodi samo u sljedećim situacijama:

- nabijeni vodik, tj. proton, [H⁺]
- vodici povezani s drugim vodicima, tj. molekularni vodik, [H][H]
- vodici povezani s više atoma, tj. vodikovi mostovi
- izotopi vodika, npr. deuterij ([²H])
- ako je vodik vezan na kiralni atom.

5. U nastavku su prikazane četiri osnovne vrste veza:

Vrsta veze	Sustav oznaka SMILES
Jednostruka	Ne treba prikazivati
Dvostruka	=
Trostruka	#

Aromatska

Mala slova

6. Supstituenti su prikazani u okruglim zagradama, neposredno iza atoma s kojima su povezani:

2-metilbutan je CC(C)CC

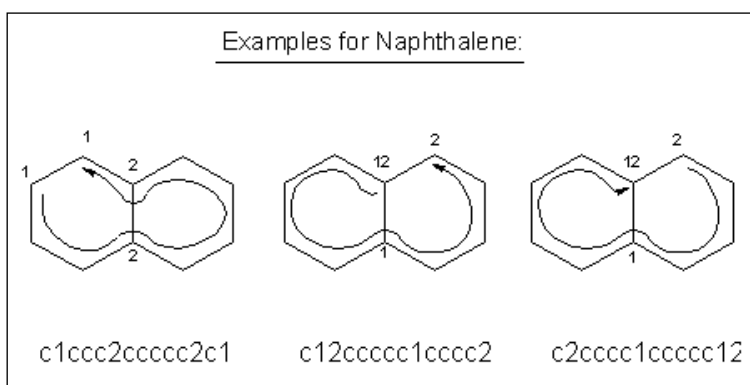
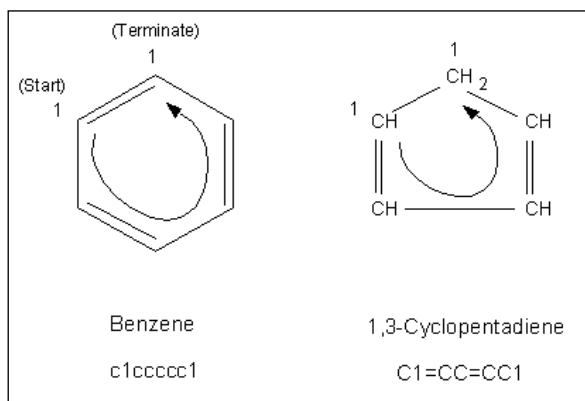
- a. Supstituenti se uvijek prikazuju neposredno iza relevantnih atoma, oni ne mogu doći iza simbola za dvostruku ili trostruku vezu:

pentanska kiselina je CCCCC(=O)O

- b. Dopušteni su supstituenti unutar drugih supstituenata:

2-(1-metiletil)butan je CC(C(C)C)CC

7. Kod prstenastih struktura, brojevi 1 do 9 koriste se za obilježavanje početnog i krajnjeg atoma prstena.
- a. Isti broj koristi se za obilježavanje početnog i krajnjeg atoma u svakom prstenu. Početni i krajnji atom moraju biti povezani.
- b. Brojevi se unose neposredno iza atoma koji obilježavaju početni i krajnji položaj.
- c. Početni ili krajnji atom može biti povezan s dva uzastopna broja.



8. Nepovezani spojevi označavaju se kao pojedinačne strukture ili ioni te se odvajaju točkom („.“). Susjedni atomi odvojeni točkom („.“) nisu izravno povezani, npr. vezani su Van der Waalsovima:

aminopropen hidroklorid je C=CC(N).HCl

9. Izomerna konfiguracija bilježi se kosim crtama „\” i „/”. Ti simboli naznačuju relativni smjer između dviju izomernih veza. (cis = „/” \”, trans = „/” /”). Sustav

SMILES koristi prostorni raspored svakog atoma, što znači da kiralnost mora biti potpuno određena:

cis-1,2-dibromoeten je $\text{Br/C=C}\backslash\text{Br}$

trans-1,2-dibromoeten je Br/C=C/Br

10. Enantiomeri ili kiralnost označavaju se simbolom „@“. Simbol „@“ znači da su susjedi kiralnog atoma koji slijede navedeni u smjeru suprotnom od kretanja kazaljke na satu. Simbol „@@“ znači da su atomi navedeni u smjeru kretanja kazaljke na satu. Kiralni atom i „@“ pišu se u uglatim zagradama:

2-kloro-2-hidroksipropanska kiselina s

navedenom kiralnošću je $\text{C}[\text{C@}](\text{Cl})(\text{O})\text{C}(=\text{O})(\text{O})$

11. Izotopne specifikacije označene su prethodnim atomskim simbolom čiji je broj jednak relevantnoj integralnoj atomskoj masi. Atomska masa može se navesti samo unutar uglatih zagrada:

ugljik-13 je $[\text{13C}]$, a kisik-18 je $[\text{18O}]$

Nekoliko alata (generatora oznaka SMILES) na raspolaganju je za određivanje oznaka SMILES (vidjeti Dodatak I.).

7 Informacije o optičkoj aktivnosti

Optička aktivnost sposobnost je asimetričnih tvari da zakreću ravninu polariziranog svjetla. Takve tvari, i njihove zrcalne slike, nazivaju su enantiomerima i imaju jedno ili više kiralnih središta. Iako se razlikuju u geometrijskom rasporedu, enantiomeri imaju identična kemijska i fizikalna svojstva. Budući da svaka vrsta enantiomera ima drugačiji utjecaj na polarizirano svjetlo, optička aktivnost može poslužiti za identifikaciju enantiomera u uzorku, a time i za određivanje čistoće tvari. Kut zakretanja intrinzično je svojstvo molekule.

Enantiomeri uvijek imaju suprotna zakretanja: polariziraju svjetlo u istoj mjeri, no u suprotnim smjerovima. Optička aktivnost smjese enantiomera stoga je pokazatelj omjera između dvaju enantiomera. Smjesa enantiomera u omjeru 50:50 ima optičku aktivnost 0.

Kut zakretanja ovisi o koncentraciji, duljini kivete, temperaturi i valnoj duljini svjetla.

Stoga je optička aktivnost definirajući parametar za identifikaciju asimetrične tvari i ujedno jedini parametar za razlikovanje tvari od njezine zrcalne slike. Zbog toga treba navesti podatke o optičkoj aktivnosti tvari, ako je to primjenjivo.

Norma optičke aktivnosti jest specifično zakretanje. Specifično zakretanje definira se kao opaženo zakretanje svjetla pri 5896 angstroma, s duljinom puta 1 dm, pri koncentraciji uzorka 1 g/ml. Specifično je zakretanje opaženo zakretanje podijeljeno s duljinom puta (dm), pomnoženo s koncentracijom uzorka (g/ml).

Nekoliko se metoda može primijeniti za mjerenje optičke aktivnosti. Najčešće su sljedeće:

- optičko zakretanje, gdje se mjeri zakretanje ravnine polarizirane zrake svjetla pri prolasku kroz uzorak
- cirkularni dikroizam, gdje se mjeri koliko je uzorak apsorbirao desno ili lijevo polariziranu svjetlost.

Ako tvar zakreće ravninu polarizirane svjetlosti udesno (u smjeru kretanja kazaljke na satu) zove se desnozakrećuća i označava se znakom +. Ako zakreće ravninu polarizirane svjetlosti ulijevo (u smjeru suprotnom od kretanja kazaljke na satu) zove se lijevozakrećuća i označava se znakom -.

8 Molekulska masa ili raspon molekulske mase

Molekulska masa jest masa molekule tvari izražena u jedinicama atomske mase (u) ili kao molarna masa (g/mol). Molekulska masa može se izračunati iz molekulske formule tvari: to je zbroj atomskih masa atoma koji čine molekulu. Kod molekula, kao što su neke bjelančevine ili nedefinirane reakcijske smjese kojima se ne može odrediti molekulska masa, može se navesti raspon molekulske mase.

Nekoliko je metoda moguće primijeniti za određivanje molekulske mase tvari:

- molekulska masa plinovitih tvari može se odrediti uz pomoć Avogadrova zakona, koji kaže da se u jednakim volumenima svih plinova pri istim uvjetima temperature i tlaka nalazi jednak broj čestica molekula plina

$$PV = nRT = NkT$$

n = množina tvari (broj molova)

R = univerzalna plinska konstanta = 8.3145 J/mol K

N = broj molekula

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

k = R/NA

NA = Avogadrov broj = 6.0221×10^{23} /mol

- molekulska masa tekućina i čvrstih tvari može se odrediti iz utjecaja molekulske mase na talište, vrelište, tlak para ili osmotski tlak nekog otapala
- spektrometrija masa, visoko precizna mjerna metoda
- kod molekula složenih tvari visoke molekulske mase, kao što su bjelančevine ili virusi, molekulska se masa primjerice može odrediti mjerenjem brzine sedimentacije u ultracentrifugi ili difraktivnom spektrofotometrijom
- dostupno je nekoliko alata za računanje molekulske mase na osnovi strukturnog dijagrama ili molekulske formule tvari (vidjeti Dodatak I.).

9 Sastav tvari

Za svaku tvar treba navesti sastav kao kombinaciju osnovnih sastojaka, dodataka (aditiva) i nečistoća, u skladu s pravilima i kriterijima navedenima u 4. poglavlju ovih Smjernica.

Svaki sastojak, dodatak (aditiv) ili nečistoću treba ispravno identificirati uz pomoć:

- naziva (prema nomenklaturi IUPAC ili ako ne postoji, prema drugom međunarodno prihvaćenom kemijskom nazivu)
- broja CAS (ako je dostupan)
- broja EC (ako je dostupan)
- svih ostalih dostupnih identifikacijskih oznaka.

Za svaki sastojak, skupinu sastojaka, dodatak (aditiv) ili nečistoću treba navesti tipičnu koncentraciju u postotcima u komercijalnim serijama (po mogućnosti prema masi ili

obujmu), kad je to moguće. Vrijednosti bi u zbroju trebale dati 100 %. Uvijek treba navesti gornje i donje granične vrijednosti koncentracije, kao raspon u komercijalnoj tvari.

10 Spektralni podatci

Spektralni su podatci potrebni kako bi se potvrdila struktura navedena za tvar s jednim sastojkom ili da reakcijska smjesa nije pripravak. Za pribavljanje spektra koriste se različite spektroskopske metode (apsorpcija u ultraljubičastom i infracrvenom spektru, nuklearna magnetska rezonancija ili masena spektroskopija). Nisu sve metode prikladne za sve vrste tvari. Gdje god je to moguće, upućujemo na odgovarajuće vrste spektra za različite tipove tvari (ECB, 2004; ECB, 2005).

Kod nekih od dobro poznatih metoda treba navesti sljedeće informacije na samom spektru ili u prilogima:

Ultraljubičasti/vidljivi spektar

- identitet tvari
- otapalo i koncentraciju
- raspon
- položaj (i vrijednosti molarnog ekstinkcijskog koeficijenta (ϵ)) glavnih vrhova
- utjecaj kiseline
- utjecaj lužine

Infracrveni spektar

- identitet tvari
- medij
- raspon
- rezultate (obilježite glavne vrhove važne za identifikaciju, npr. interpretaciju jedinstvenog kromatograma)

Nuklearna magnetska rezonancija

- identitet tvari
- jezgru i frekvenciju
- otapalo
- interne i vanjske reference, ako je potrebno
- rezultate (označite signale važne za identifikaciju tvari i signale koji odgovaraju otapalu i nečistoćama)
- za ^1H NMR spektre treba navesti integracijsku krivulju
- intenzitet slabih NMR vrhova treba pojačati vertikalno i proširiti složene obrasce

Masena spektroskopija

- identitet tvari
- voltaža ubrzanja
- metoda punjenja (izravno uvođenje, putem plinske kromatografije, itd.)
- način ionizacije (elektronska ionizacija, kemijska ionizacija, ionizacija desorpcijom, itd.)
- molekulski ion (M)
- fragmente značajne za identifikaciju tvari

- M/z vrijednosti ili dodijeljene vrhove važne za identifikaciju strukture
- složene obrasce treba proširiti

Spektar rendgenske difrakcije (XRD) i masene spektroskopije

- identitet tvari
- napon
- jačina struje
- rendgenski izvor i sve bibliografske reference koje omogućuju identifikaciju kristalnih faza prisutnih u tvari

Potrebno je ispuniti barem sljedeće opće zahtjeve u slučaju kada se metoda rendgenske difrakcije koristi za identifikaciju i kvantifikaciju kristalnih ili amorfnih faza prisutnih u tvari:

- opis primijenjenih metoda poboljšanja i korišteni interni standardi
- dobivene vrijednosti koje odražavaju podudarnost između modeliranog/referentnog difrakcijskog uzorka
- izmjereni uzorak i ljestvica za vrijednost postignuća (npr. 0 – 1 ili 0 – 100)

Mogu se koristiti i druge znanstveno priznate metode ako će spektralni podatci potvrditi identifikaciju tvari, npr. unutarnju strukturu.

Potrebno je ispuniti sljedeće opće zahtjeve za jasno razumijevanje i/ili tumačenje spektra:

- opisati pripremu uzorka
- zabilježiti značajne valne duljine ili ostale prikladne podatke,
- pružiti dodatne informacije, npr. spektre početnih materijala
- dati podatke o upotrijebljenom otapalu i/ili druge bitne pojedinosti, kako je prethodno navedeno kod nekih metoda
- dati čiste kopije (umjesto originala) s ispravno obilježenima skalama
- dati informacije o korištenim koncentracijama tvari
- osigurati da se najintenzivniji vrhovi koji se odnose na tvar približe najvišoj oznaci na skali

11 Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti, plinska kromatografija

Kad je prikladno s obzirom na vrstu tvari, treba dati kromatogram kako bi se potvrdio njezin sastav. Primjerice, odgovarajući kromatogram potvrdit će postojanje nečistoća, dodataka (aditiva) i sastojaka reakcijske mase. Dvije najpoznatije metode za odvajanje i identifikaciju smjesa jesu plinska kromatografija (GC) ili tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (HPLC). Te se dvije metode temelje na međudjelovanju pokretne i nepokretne faze, koje dovodi do odvajanja sastojaka u smjesi.

Kod GC/HPLC kromatograma treba navesti sljedeće informacije na samom kromatogramu ili u prilogima (ECB, 2004; ECB, 2005):

Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (HPLC)

- identitet tvari
- podatke o koloni, kao što su promjer, pakiranje, duljina
- temperaturu, također i raspon temperature ako se koristi
- sastav pokretne faze, također i raspon temperature ako se koristi
- raspon koncentracije tvari
- metodu vizualizacije, npr. UV-VIS
- rezultate (obilježite glavne vrhove važne za identifikaciju tvari)

Plinska kromatografija

- identitet tvari
- podatke o koloni, kao što su promjer, pakiranje, duljina
- temperaturu, također i raspon temperature ako se koristi
- temperaturu injektiranja
- plin nosač i tlak plina nosača
- raspon koncentracije tvari
- metodu vizualizacije, npr. MS,
- identifikaciju vrha
- rezultate (obilježite glavne vrhove važne za identifikaciju tvari)

12 Opis analitičkih metoda

U skladu s *Prilogom VI.* Uredbi REACH, podnositelj registracije treba opisati analitičke metode i/ili navesti odgovarajuće bibliografske bilješke za metode korištene pri identifikaciji tvari te, prema potrebi, pri identifikaciji nečistoća i dodataka (aditiva). Te informacije moraju biti dostatne za reprodukciju metoda.

Dodatak III. – Identifikacija tvari i zajednička dostava podataka

U glavnom su dijelu ovih Smjernica opisana opća načela koja potencijalni podnositelji registracije trebaju slijediti pri utvrđivanju svojih tvari koje planiraju registrirati, koje su specifične za pravnu osobu. U ovom Dodatku daju se praktične smjernice potencijalnim podnositeljima registracije o primjeni načela identifikacije tvari prilikom zajedničkog definiranja identiteta i opsega identiteta tvari za zajedničku registraciju u skladu s načelom „jedna tvar - jedna registracija” iz Uredbe REACH. Više informacija o obvezama zajedničke dostave podataka i općenito o postupku razmjene podataka nalazi se u Smjernicama o razmjeni podataka dostupnima na <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

Podrazumijeva se primjena istih načela identifikacije tvari navedenih u temeljnim smjernicama za jedan identitet tvari za zajedničku registraciju, ovisno o vrsti tvari.

Naime, prvim dijelovima članka 11. stavka 1. i članka 19. stavka 1. Uredbe REACH propisuje se zahtjev za „zajedničku dostavu podataka dvaju ili više podnositelja registracije”. Tim se odredbama detaljnije propisuje da za „tvari koje u Zajednici namjerava proizvoditi jedan ili više proizvođača odnosno uvoziti jedan ili više uvoznika”, informacije koje se odnose na svojstva tvari i njezino razvrstavanje dostavlja „prvo jedan podnositelj registracije koji postupa uz suglasnost drugog/ih podnositelja registracije (dalje u tekstu „vodeći podnositelj registracije”).

Provedbenom uredbom Komisije (EU) 2016/9 o zajedničkoj dostavi podataka i razmjeni podataka ponovno se potvrđuje i konsolidira obveza više podnositelja registracije tvari s više identiteta da zajednički dostave određene informacije. U praksi zajednička dostava podataka zahtijeva prethodni dogovor dotičnih stranaka o granicama i opsegu identiteta tvari, što se zove profil identiteta tvari. U profilu identiteta tvari potrebno je odrediti granice tvari koje su podnositelji registracije obuhvatili u zajednički podnesenim podatcima. To se odnosi i na podnositelje registracije koji su se možda izuzeli od određenih zajednički dostavljenih informacija.

Stoga je dogovor o opsegu identiteta tvari obuhvaćene registracijom preduvjet za zajedničku dostavu podataka. Transparentnost u pogledu opsega jedinstvenog identiteta jedne tvari i podataka na koje upućuje ključna je za provedbu. Stoga se opseg tvari ili profila identiteta tvari mora jasno navesti u dosjeu vodećeg podnositelja registracije u ime svih ostalih podnositelja registracije, dok svi podnositelji registracije pojedinačno prijavljuju svoje informacije o sastavu.

Jednostavan ilustrativni primjer načina na koji pojedinačni podnositelji registracije mogu utvrditi profil identiteta tvari za kemikalije koje se u EU-u proizvode/uvoze shematski je prikazan na

Slika 2 u nastavku. Shemom se ilustrira identifikacija tvari koju će se registrirati, objedinjavanje različitih sastava, generiranje podataka i konačno, njihovo podnošenje u formatu baze podataka IUCLID u registracijskom dosjeu. Primjer se odnosi na jednostavnu dobro definiranu tvar od jednog sastojka. Za složenije tvari postupak definiranja profila identiteta tvari može uključivati ponavljanje koraka od 3. do 5. prikazanih na shemi.

Tijekom rasprave među potencijalnim podnositeljima registracije dokumentacija o profilu identiteta tvari može biti u formatu datoteke Word ili Excel tablice u kojoj se relevantne dogovorene informacije bilježe i stavljaju na raspolaganje svim članovima i potencijalnim članovima. Neka industrijska udruženja stavila su na raspolaganje predložke za dokumentiranje profila identiteta tvari kojima se koriste brojni podnositelji registracije

(npr. predložak Europskog vijeća kemijske industrije (Cefic³⁴)). Drugi podnositelji registracije jednostavno dokumentiraju relevantne informacije u datoteci Word ili na mrežnoj stranici konzorcija uspostavljenog za rad na registraciji predmetne tvari.

2. Definiranje identiteta i opsega tvari koja odgovara podacima podnesenima za registraciju

Koraci koje može poduzeti više potencijalnih podnositelja registracije pri definiranju identiteta tvari koji odgovara podacima koje zajednički dostavljaju shematski su prikazani u primjeru navedenom na

Slika 2 (stupci od 1. do 4.) za jednostavne i dobro definirane tvari.

Svaki pojedinačni potencijalni podnositelj registracije određuje svoje obveze za ono što proizvodi/uvozi na temelju definicije tvari iz članka 3. stavka 1. i primjene načela identifikacije tvari u glavnom dijelu ovih Smjernica (koraci 1. i 2. u

Slika 2).

Svaki potencijalni podnositelj registracije tada može provjeriti jesu li drugi potencijalni podnositelji registracije dobili isti „naziv i druge identifikacijske oznake“ (3. korak). Od te početne točke potencijalni podnositelji registracije mogu zajednički primjenjivati načela iz glavnog dijela ovih Smjernica kako bi definirali granice identiteta tvari koje odgovaraju podacima koje zajednički dostavljaju, tj. profil identiteta tvari (4. korak).

Ovaj profil identiteta tvari na općenit način opisuje opseg tvari u smislu informacija o sastavu (uključujući sve druge relevantne parametre kao što su morfologija, npr. fizički oblik, konture), njezin naziv i druge identifikacijske oznake za koje će zajednički dostavljeni podatci o razvrstavanju i opasnostima biti relevantni. Definicija profila identiteta tvari ne bi trebala biti pretjerano uska kako bi se izbjeglo isključivanje konkurenata iz zajedničke dostave podataka.

Ovim se profilom identiteta tvari uspostavlja neraskidiva veza između identiteta tvari i podataka o opasnosti koji se zajednički dostavljaju. Ako se to utvrdi dovoljno rano, može olakšati fazu generiranja/prikupljanja informacija tijekom postupka ispunjavanja obveza registracije (navedenih u Smjernicama o zahtjevima obavješćivanja i procjeni kemijske sigurnosti, 5. korak na

Slika 2 u nastavku) kako bi se osiguralo da dobiveni ili prikupljeni podatci obuhvaćaju puni opseg identiteta tvari.

Kako je navedeno u odjeljcima 4.2.3. i 4.3. temeljnih smjernica, potencijalni podnositelji registracije za složenije tvari obično upotrebljavaju dodatne parametre i/ili opisnike za informacije o sastavu (npr. opis izvora/procesa) u koracima od 1. do 3., a dogovoreni se parametri zatim mogu uključiti u profil identiteta tvari (4. korak). U nekim slučajevima poveznica između granice identiteta tvari i podataka o opasnosti koji se zajednički dostavljaju može postati potpuno jasna tek kada se prikupi dio ili svi dostupni podatci o opasnosti. Koraci od 3. do 5. mogu se ponoviti, ovisno o složenosti identiteta tvari i podataka prikupljenih u 5. koraku, npr. ako određeni sastavi uključuju sastojke koji dovode do razvrstavanja i označavanja i/ili procjene postojanih, bioakumulativnih i otrovnih

³⁴ Profil identiteta tvari izvorno je opisan u dokumentu Europskog vijeća kemijske industrije (Cefic) „Smjernice za vodeće podnositelje registracije“ dostupnom na <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Primjeri profila identifikacije tvari koje su razvili podnositelji registracije na temelju tog predloška nalaze se npr. na mrežnom mjestu centra s informacijama o Uredbi REACH <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

svojstava tvari. Profil identiteta tvari može uključivati više profila sastava za primjereni opis granice identiteta tvari.

Profilom identiteta tvari moraju se pružiti opće informacije koje omogućavaju određivanje granica identiteta tvari u skladu sa zajednički dostavljenim podacima:

- nazivom tvari
- drugim identifikacijskim oznakama (npr. CAS, EC, molekulskim i strukturnim informacijama, opisom prema potrebi) koje podnose svi podnositelji registracije identiteta tvari
- informacijama o sastavu:
 - identitetima sastojaka bitnih za identifikaciju tvari i odgovarajućim rasponima koncentracija
 - općim popisom identiteta stabilizatora bitnih za identifikaciju tvari (i odgovarajućim rasponima koncentracija, ako je primjenjivo)
 - općim popisom dodatnih parametara relevantnih za vrstu tvari (npr. opisnici izvornog postupka za neke tvari UVCB).

Važno je da se svi zajednički podnositelji registracije dogovore o parametrima koji definiraju granice identiteta tvari obuhvaćene zajedničkom dostavom podataka i da ih se jasno dokumentira u profilu identiteta tvari. U skladu s time profil identiteta tvari možda će trebati izmijeniti ili proširiti na zahtjev bilo kojeg novog potencijalnog podnositelja registracije ako se podnositelji registracije slože da su dio podataka ili svi zajednički podneseni podatci također relevantni za tvar koju taj podnositelj registracije proizvodi ili uvozi.

Profil identiteta tvari ne smije dovesti do razmjene povjerljivih poslovnih informacija među podnositeljima registracije ili do otkrivanja takvih informacija iz zajedničkog dosjea trećim stranama. Ako podnositelji zajedničke registracije trebaju razmjenjivati potencijalno povjerljive poslovne informacije kako bi jasno definirali profil identiteta tvari, mogu razmotriti mogućnost angažiranja povjerenika, kako je navedeno u Smjernicama o razmjeni podataka.

3. Praktične smjernice za dokumentiranje profila identiteta tvari

Opća načela identifikacije tvari za dobro definirane tvari i tvari UVCB navedena su u glavnim smjernicama. U nastavku su navedene praktične smjernice za zajedničku primjenu tih načela. Temeljne smjernice predviđaju mogućnost odstupanja od općih načela. Na temelju tih odstupanja podnositelji registracije moraju dokazati neraskidivu vezu između identiteta tvari i zajednički dostavljenih podataka o opasnosti.

3.1 Dobro definirane tvari

Za dobro definiranu tvar potrebno je slijediti načelo $\geq 80\%$ (masenog udjela) za identifikaciju tvari od jednog sastojka i načelo $< 80\%$, $\geq 10\%$ za identifikaciju tvari od više sastojaka prilikom definiranja jednog ili više osnovnih sastojaka i njihovih raspona koncentracije i nečistoća. To se primjenjuje na svakog pojedinačnog podnositelja registracije i na sve podnositelje registracije zajedno pri utvrđivanju profila identiteta tvari. Posebno bi trebalo izvijestiti o profilima nečistoće u sklopu profila identiteta tvari. Ako profil identiteta tvari obuhvaća specifične nečistoće koje bi mogle utjecati na razvrstavanje i označavanje i/ili na procjenu postojanih, bioakumulativnih i otrovnih svojstava, podnositelji registracije na koje se te nečistoće odnose trebali bi ih uzeti u obzir u fazi prikupljanja podataka (5. korak). Relevantne informacije iz priloga od VII. do XI. mogu se dostaviti zajednički ili zasebno, u skladu s člankom 11. stavkom 3. Uredbe REACH (mogućnost izuzeća). Vrijednosti iskazane koncentracije trebale bi obuhvatiti raspon koncentracije u cijeloj zajedničkoj dostavi podataka.

Za tvari za koje su potrebni dodatni parametri za jasno evidentiranje identifikacije tvari, svaki podnositelj registracije trebao bi slijediti načela opisana u poglavlju 4.2.3. glavnog dijela ovih Smjernica. Trebalo bi razmotriti bi li varijabilnost tih parametara prema potrebi dovela do prilagodbe zajednički dostavljenih podataka o razvrstavanju ili opasnosti. Za potrebe utvrđivanja profila identiteta tvari u sklopu zajedničke dostave podataka mogu se primijeniti slična razmatranja. Na primjer, u profil identiteta tvari može biti potrebno uključiti parametre (npr. fizički oblik i/ili morfološke parametre kao što su poroznost, veličina ili oblik čestica) koji mogu utjecati na svojstva relevantna za određivanje profila opasnosti (npr. topljivost, reaktivnost, toksičnost udisanjem itd.). U tom bi slučaju trebalo transparentno navesti generičke raspone tih parametara obuhvaćenih profilom identiteta tvari (npr. rasponi veličine čestica primjenjivi na sve podnositelje registracije, popis njihovih oblika i popis kemijskih svojstava površine). Time se osigurava sveobuhvatnost zajednički podnesenih podataka o opasnostima u odnosu na profil identiteta tvari.

Slično tome, razlike u kristalnoj fazi anorganskih kemikalija mogu potaknuti različita razmatranja profila opasnosti specifična za te faze (npr. kvarc, kristaboli, amorfni silicij). Uzimajući u obzir moguće razlike u svojstvima različitih faza, potencijalni podnositelji registracije za te tvari trebaju razmotriti hoće li podnijeti jednu zajedničku registraciju koja obuhvaća sve faze, uključujući podatke o opasnostima specifične za različite faze, ili će podnijeti različite zajedničke registracije za različite faze (tj. različite identitete tvari). U svakom slučaju, obuhvaćene faze trebale bi biti navedene u profilu identiteta tvari, a relevantni podatci iz priloga od VII. do XI. trebali bi se odnositi na sve faze obuhvaćene registracijom, čime se osigurava da podatci obuhvaćaju puni opseg profila identiteta tvari.

Potrebno je napomenuti da sastavi mogu imati različite profile nečistoća i/ili opasnosti, ali te razlike ne znače nužno da se ti sastavi možda ne mogu registrirati u sklopu iste registracije.

3.2 Tvari UVCB

Identifikacija tvari UVCB može biti zahtjevnija i zbog toga je transparentna dokumentacija vrlo korisna za postizanje dogovora o identitetu tvari za zajedničku registraciju. Svaki potencijalni podnositelj registracije trebao bi razmotriti savjete iz glavnog dijela ovih Smjernica pojedinačno, a zatim bi svi podnositelji registracije trebali zajedno primijeniti ista načela. Imajte na umu da bi agregiranje raspona koncentracije u profilu identifikacije tvari moglo dovesti do profila s vrlo širokim rasponima koncentracije, možda i u toj mjeri da se tvar više ne bi moglo smatrati jednom tvari.

Kao što je navedeno u temeljnim smjernicama, osnova za identifikaciju nekih tvari UVCB jest izvor i postupak koji se upotrebljava u njihovoj proizvodnji, a ne izravno identitet i rasponi koncentracije njihovih sastojaka. U tim slučajevima drugi opisnici služe kao približne vrijednosti za identitete sastojaka i odgovarajuće raspone njihovih koncentracija. Potencijalni podnositelji registracije mogu opisati proizvodni postupak u smislu izvora i postupka u mjeri u kojoj je to potrebno za identifikaciju tvari. Opis može uključivati sve dodatne parametre/karakteristike za koje podnositelji registracije odluče da su relevantni za identitet njihove tvari (vidjeti na primjer Tablica 5. u temeljnim smjernicama). Za potrebe zajedničke registracije opisi se razmjenjuju samo u mjeri u kojoj je to potrebno kako bi se dogovorio opseg identiteta tvari UVCB za registraciju. Potencijalni podnositelji registracije načela navedena u temeljnim smjernicama mogu slijediti samostalno i zajedno. Stoga profil identiteta tvari predstavlja generički opis parametara izvora i postupka kako bi se obuhvatio puni opseg sastava tvari koje podnose pojedinačni podnositelji registracije. To je shematski prikazano na Slika 3.

Kako je navedeno u temeljnim smjernicama, za tvari identificirane na temelju izvora i postupka svaka bi značajna promjena izvora ili postupka vjerojatno dovela do različitog

identiteta tvari koji bi trebalo zasebno registrirati. Odstupanje od tog načela značilo bi da podnositelji registracije mogu dokazati da svaka kombinacija postupka/izvora daje sastave koji se mogu obuhvatiti istom zajedničkom registracijom. Manje razlike u izvornim materijalima i postupku i/ili uvjetima postupka mogu se uzeti u obzir u profilu identiteta tvari. Podnositelji registracije trebaju se usuglasiti oko toga da svaka kombinacija postupka/izvora daje sastave koji su slični u onoj mjeri u kojoj ih je smisleno obuhvatiti jednim identitetom tvari i osigurati da su podatci o opasnosti prikladni za cijeli raspon varijacija profila identiteta tvari. Točnije, podnositelji registracije moraju moći dokazati da je zajednički dostavljeni skup podataka o opasnosti relevantan za sve te sastave ili da je prilagođen zasebno dostavljenim informacijama za određene sastave prema potrebi, u skladu s člankom 11. stavkom 3. Uredbe REACH (izuzeće).

Kako bi se dokazala relevantnost skupa podataka za svaku kombinaciju postupka/izvora, te kombinacije moraju biti transparentno dokumentirane u profilu identiteta tvari kako bi se dokumentirali kriteriji uključivanja/isključivanja koji se primjenjuju na sadašnje i buduće zajedničke podnositelje registracije.

Za druge vrste tvari UVCB (vidjeti poglavlje 4.3.2. glavnih smjernica) potencijalni podnositelji registracije mogu upotrebljavati kombinaciju opisnika sastava i dodatnih opisnika prema potrebi. Na primjer, za neke oleokemijske proizvode sastav je promjenjiv zbog promjenjivosti u raspodjeli duljine alkilnog lanca sastojaka, a distribucija duljine alkilnog lanca može biti dodatni opisnik za identifikaciju. Pristup koji primjenjuje forum SIEF trebao bi se transparentno dokumentirati u okviru profila identiteta tvari.

3.3 Profil identiteta tvari

Odgovornost je svih podnositelja registracije koji zajednički dostavljaju informacije da se dogovore o parametrima potrebnima za identifikaciju njihovih tvari i da ih transparentno dokumentiraju u odgovarajućim profilima identiteta tvari. Odstupanja ili derogacije od zajedničkih uobičajenih načela identiteta tvari trebalo bi transparentno dokumentirati. Budući da se u profilu identiteta tvari dokumentira kriterije uključivanja/isključivanja, forum SIEF trebao bi osigurati transparentnost primijenjenih kriterija te da relevantni prikupljeni/pripremljeni podatci iz priloga od VII. do XI. jasno obuhvaćaju sve dogovorene profile sastojaka.

Ako potencijalni podnositelji registracije pojedinačno uključe stabilizatore u svoj profil identiteta na temelju članka 3. stavka 1., njihove identitete i raspone koncentracija treba dogovoriti i transparentno prijaviti u profilu identiteta tvari.

U fazi prikupljanja podataka trebalo bi razmotriti relevantnost ispitnih materijala korištenih za izradu/prikupljanje podataka kako bi se ispunili zahtjevi obavješćivanja iz priloga od VII. do XI. Obrazloženje zaključaka o reprezentativnosti sastava obuhvaćenih profilom identiteta tvari trebalo bi dokumentirati i uključiti u tehnički dosje, što je posebno relevantno za identitete složenih tvari koji obuhvaćaju široke profile sastava.

Potencijalni podnositelji registracije mogu tijekom prikupljanja podataka utvrditi da je njihov profil identiteta tvari preširok i da ne odgovara svrsi zajedničkog podnošenja informacija o opasnosti koje su reprezentativne za identitet dotične tvari. U tom slučaju potencijalni podnositelji registracije mogu odlučiti podijeliti forum SIEF kako bi odvojeno obradili dvije ili više tvari³⁵. Svaka bi tvar tada imala vlastiti profil identiteta i vlastitu

³⁵ Razmatranja o ulozi popisa EINECS pri utvrđivanju identiteta tvari u skladu s Uredbom REACH mogu se pronaći u CARACAL-ovu dokumentu dogovorenom na 4. sastanku nadležnih tijela za REACH i CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 „Identitet tvari i informacije foruma SIEF (uloga

zajedničku dostavu informacija o opasnosti koje moraju biti posebno reprezentativne za identitet te tvari. Razlozi zbog kojih određene informacije o opasnosti nisu reprezentativne za određene parametre identiteta tvari trebali bi se transparentno dokumentirati u profilu identiteta tvari za svaku zasebnu registraciju. Potencijalni podnositelji registracije u ovoj fazi također mogu utvrditi je li profil sastava potrebno dodatno precizirati na temelju sastojaka i/ili nečistoća koji zahtijevaju razvrstavanje i označivanje, procjenu postojanih, bioakumulativnih i otrovnih svojstava i slično.

Potencijalni podnositelji registracije koji se namjeravaju pridružiti drugim potencijalnim podnositeljima registracije koji su već međusobno uskladili profil identiteta tvari iako registracija još nije podnesena, trebali bi razmotriti jesu li njihove informacije o identitetu tvari unutar granica profila identiteta tvari. Ako to nije slučaj, trebali bi raspraviti i dogovoriti s ostalim potencijalnim podnositeljima registracije je li potrebno proširiti opseg profila kako bi uključili novog člana ili se usuglasiti oko toga da dotične informacije odstupaju od opsega profila.

Prilagodba profila identiteta tvari potrebna je ako tvar koju potencijalni podnositelj registracije treba registrirati ima posebne parametre identiteta koji mogu promijeniti reprezentativnost zajednički dostavljenih informacija o opasnosti i stoga zahtijevaju posebno obrazloženje (npr. specifična nečistoća, različit omjer sastava, različita faza, različita veličina čestica itd.). Radi transparentnosti taj parametar mora biti naveden u profilu identiteta tvari.

U pojedinačnim slučajevima potencijalni i postojeći podnositelji registracije mogu se usuglasiti da zajednički dostavljeni podatci o opasnosti u osnovi nisu reprezentativni za tvar potencijalnog podnositelja registracije zbog odstupanja parametara identiteta tvari koji nisu unutar dogovorenih granica profila identiteta tvari. U tom slučaju potencijalni podnositelj registracije podnosi zasebnu registraciju zajedno s drugim podnositeljima registracije čiji identitet tvari obuhvaća taj parametar ili to čini pojedinačno ako ne postoje drugi podnositelji registracije za isti identitet tvari.

4. Izvješćivanje o profilu identiteta tvari u registracijskom dosjeu

Kada potencijalni podnositelji registracije prikupe/pripreme sve potrebne podatke iz priloga od VII. do XI. za svoju tvar (5. korak na

Slika 2), paket podataka spreman je za prijavu u formatu baze podataka IUCLID u dosjeima za podnošenje Agenciji (6. korak na

Slika 2). Za prijavu profila identiteta tvari u formatu baze podataka IUCLID, naziv i druge identifikacijske oznake, informacije o sastavu i drugi relevantni parametri trebaju biti uneseni u odjeljke 1.1. i 1.2. baze podataka IUCLID.

Profil identiteta tvari	Unos u IUCLID
Naziv i ostale identifikacijske oznake	Odjeljak 1.1. za sve dosjee
informacije o sastavu i drugi parametri prema potrebi	Odjeljak 1.2. koji ispunjava vodeći podnositelj registracije

naziv i druge identifikacijske oznake profila identiteta tvari prijavljuju se u odjeljku 1.1. svih dosjea. Vodeći podnositelj registracije treba navesti informacije o sastavu tvari iz profila identiteta tvari i druge relevantne parametre u odjeljku 1.2. svojeg dosjea u obliku „graničnog sastava tvari”³⁶. Vodeći podnositelj registracije mora dostaviti i sve relevantne podatke iz priloga od VII. do XI. u odjeljcima od 4. do 14. (ako nema opravdanih izuzeća za jedan ili više zahtjeva objavještivanja) u ime svih podnositelja registracije.

Svaki podnositelj registracije (uključujući vodećeg podnositelja registracije) treba u odjeljku 1.2. svojeg dosjea navesti informacije svojeg pravnog subjekta o sastavu tvari koju proizvodi ili uvozi. Drugim riječima, vodeći podnositelj registracije treba u odjeljku 1.2. svojeg dosjea navesti i informacije o sastavu tvari iz profila identiteta tvari i informacije svojeg pravnog subjekta o sastavu tvari, dok svi drugi podnositelji registracije navode svoje posebne informacije o sastavu tvari. Svaka standardna registracija mora sadržavati i relevantne analitičke informacije iz odjeljka 1.4. baze podataka IUCLID.

Svaki podnositelj registracije trebao bi dokazati da su informacije o sastavu tvari koje proizvodi ili uvozi obuhvaćene profilom identiteta tvari, kako je navedeno u „graničnom sastavu”, te da su obuhvaćene podacima iz Priloga od VII. do XI. podnesenima u dosjeu vodećeg podnositelja registracije (kad nema opravdanih izuzeća).

Tehničke upute o tome kako prijaviti informacije o sastavu u formatu baze podataka IUCLID dostupne su u priručnicima o bazi IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

Slika 2 (sljedeća stranica): Shematski pregled koraka koje potencijalni podnositelji registracije trebaju poduzeti, od utvrđivanja svojih obveza registracije (1.) do definiranja profila identiteta tvari za utvrđivanje jedinstvenog identiteta tvari (4.) i konačnog podnošenja registracija u okviru službene obveze registracije tvari (8.).

³⁶ Upute o tome kako unijeti „granični sastav tvari” nalaze se u priručniku „Kako pripremiti dosjee za registraciju i PPORD dosjee”, dostupnom na <http://echa.europa.eu/manuals>.

Faza 1.

Pravna osoba (LE) 1 proizvodi „A” u sljedećim čistoćama:

- 80 % A, 5 % B, 5 % C, 10 % D
- 85 % A, 2,5 % B, 2,5 % C, 10 % D
- 95 % A, 5 % D
- 85 % A, 15 % B
- 99,9 % A, 0,01 % B/C/D
- 85 % A, 2,5 % B, 2,5 % C, 10 % D

Pravna osoba (LE) 2 proizvodi „A” u sljedećim čistoćama:

- 80 % A, 5 % E, 5 % F, 10 % G
- 95 % A, 5 % G
- 85 % A, 15 % G

Pravna osoba (LE) 3 proizvodi „A” u sljedećim čistoćama:

- 80 % A, 5 % B, 15 % C
- 85 % A, 5 % B, 5 % C, 5 % F
- 85 % A, 15 % C

Svaki rezultat ispunjava definiciju tvari prema članku 3. stavku 1.
Svaki rezultat treba registrirati

Upotrijebite temeljne smjernice za identifikaciju tvari da biste utvrdili identitet stvari koju treba registrirati

A > 80 % (masenoga udjela) u svim sastavima

Može se definirati kao dobro definirana tvar od jednog sastojka s identitetom „A”

Faza 2.

Naziv i ostale identifikacijske oznake tvari koje je utvrdio LE 1: „A”

Informacije o sastavu LE-a:

- 80 – 100 % A
- 0 – 15 % B
- 0 – 5 % C
- 0 – 10 % D

Naziv i ostale identifikacijske oznake tvari koje je utvrdio LE 2: „A”

Informacije o sastavu LE-a:

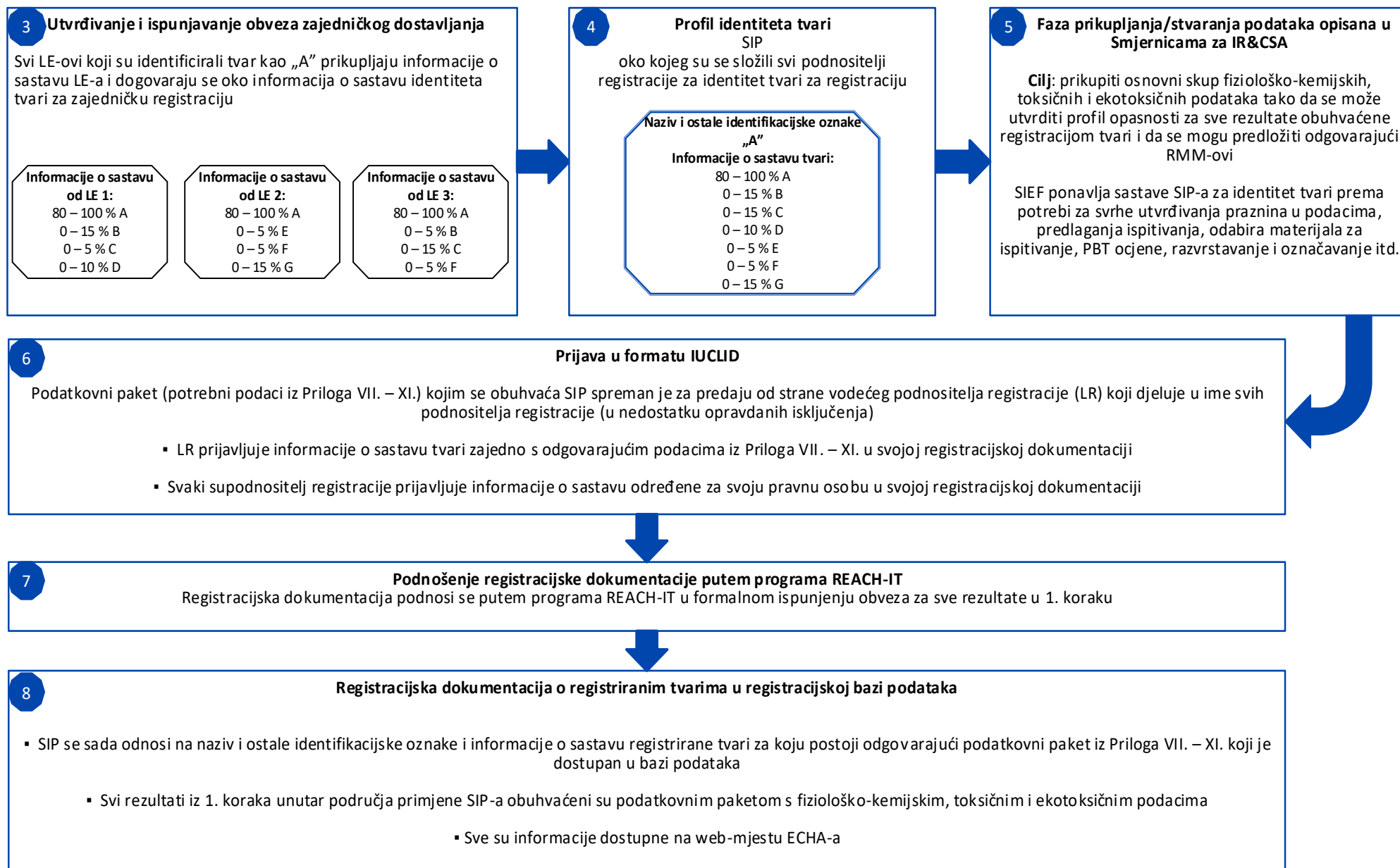
- 80 – 100 % A
- 0 – 5 % E
- 0 – 5 % F
- 0 – 15 % G

Naziv i ostale identifikacijske oznake tvari koje je utvrdio LE 3: „A”

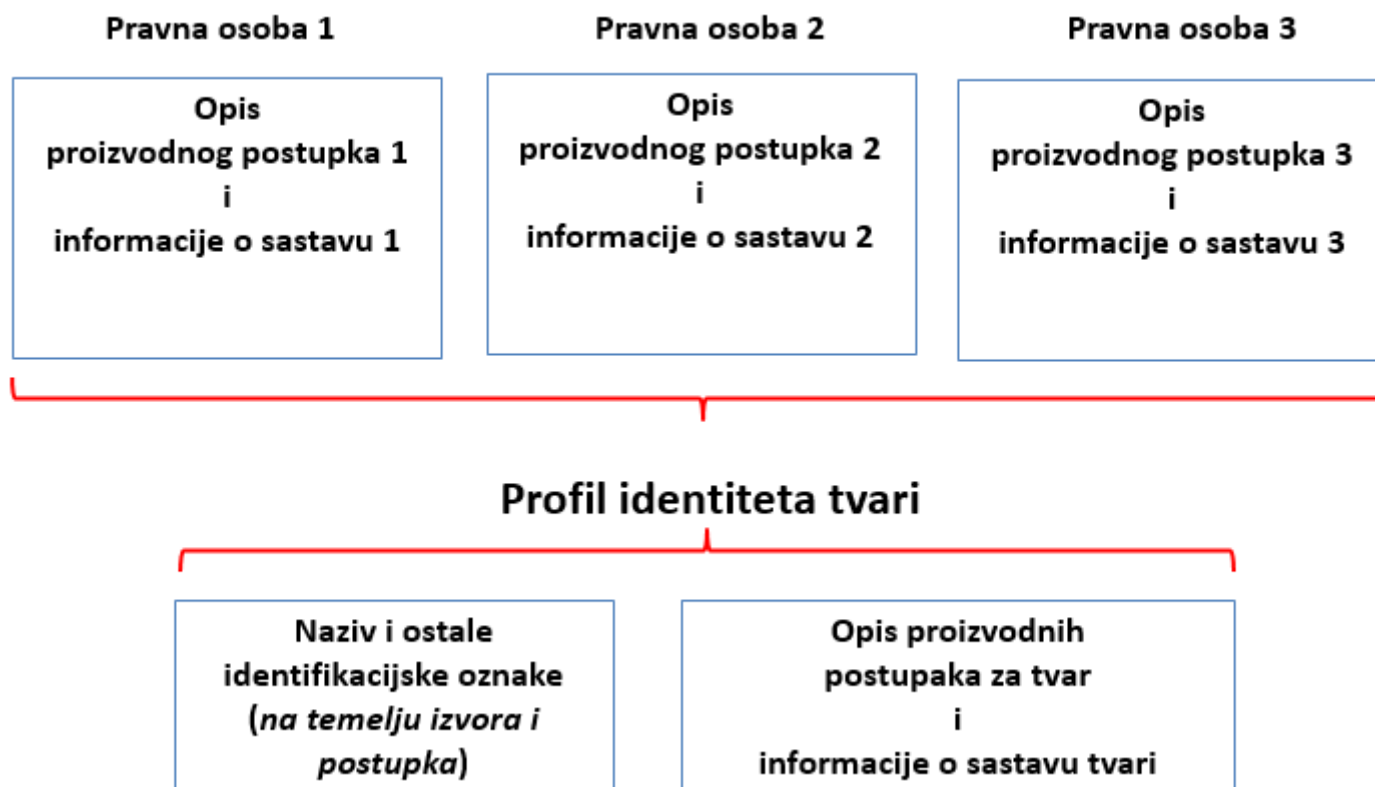
Informacije o sastavu LE-a:

- 80 – 100 % A
- 0 – 5 % B
- 0 – 15 % C
- 0 – 5 % F

Napomena uz sliku: Identitet tvari temelji se na jednoj sastojci za jednoj sastojku vizualizaciju. Za složenije su tvari koraci isti, ali za definiranje identiteta tvari mogu se upotrijebiti dodatni elementi i/ili zamjene za informacije o sastavu. Postupak definiranja profila identiteta tvari može obuhvaćati ponavljanje koraka od 3. do 5.



Slika 3: Ilustrativni shematski prikaz definiranja profila identiteta tvari (4. korak na slici 2.) za tvar UVCB identificiranu na temelju opisnika izvora i postupka iz opisa izvora i postupka pojedinačnog pravnog subjekta.



EUROPEAN CHEMICALS AGENCY
P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://echa.europa.eu)