

ÚTMUTATÓ

Útmutató az anyagoknak a REACH- és a CLP-rendelet szerinti azonosításához és megnevezéséhez

2023. december
3.0 verzió



JOGI NYILATKOZAT

A dokumentum célja a felhasználók támogatása a REACH és a CLP-rendelet szerinti kötelezettségeik teljesítésében. Felhívjuk azonban a felhasználók figyelmét arra, hogy a REACH- és a CLP-rendelet szövege jelenti az egyetlen hiteles jogi hivatkozást, továbbá a jelen dokumentumban foglalt információk nem minősülnek jogi tanácsadásnak. Az információ felhasználása kizárólag a felhasználó felelőssége. Az Európai Vegyianyag-ügynökség nem vállal felelősséget az ebben a dokumentumban foglalt információk bármilyen jellegű felhasználásáért.

Útmutató az anyagoknak a REACH- és a CLP-rendelet szerinti azonosításához és megnevezéséhez

Hivatkozási szám: ECHA-23-H-07-EN
Kat. szám: ED-09-23-444-HU-N
ISBN: 978-92-9468-310-6
DOI: 10.2823/87416
A közzététel dátuma: 2023. december
Nyelv: HU

© Európai Vegyianyag-ügynökség, 2023
Fedőlap © Európai Vegyianyag-ügynökség

Ha kérdései vagy észrevételei vannak ezzel a dokumentummal kapcsolatban, kérjük, (a hivatkozási szám és a megjelenési dátum feltüntetésével) az információigénylő űrlapon nyújtsa be azokat. Az információigénylő űrlap az ECHA honlapjának Kapcsolatfelvétel oldalán keresztül érhető el, amely a következő címen található:

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

Európai Vegyianyag-ügynökség

Levelezési cím: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finnország
Elérhetőség: Telakkakatu 6, 00150, Helsinki, Finnország

BEVEZETÉS

Ez a dokumentum ismerteti az anyagok REACH- és CLP-rendelet szerinti megnevezésének és azonosításának módját. Az útmutató egy sorozat része, amely abban kíván segítséget nyújtani valamennyi érdekelt fél számára, hogy felkészülhessen a REACH- és CLP-rendeletben meghatározott kötelezettségeknek való megfelelésre. A sorozatot alkotó dokumentumok részletes iránymutatással szolgálnak egy sor olyan alapvető REACH- és CLP-rendelet szerinti eljáráshoz, illetve néhány konkrét tudományos és/vagy technikai módszerhez, amelyekhez az iparnak vagy a hatóságoknak a REACH- és a CLP-rendelet értelmében folyamodniuk kell.

Az útmutató dokumentumok tervezetei az Európai Bizottság szolgálatai által vezetett, valamennyi érdekelt fél közreműködésével folytatott REACH végrehajtási projektek (RIP-ek) keretein belül kerültek kidolgozásra és megvitatásra. Az érdekelt felek a következők: a tagállamok, az ipar és a nem-kormányzati szervek (NGO-k). Ezek az útmutató dokumentumok az Európai Vegyianyag-ügynökség weboldalán (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>) keresztül érhetők el. A jövőben további útmutatók is elérhetők lesznek a weboldalon, amikor elkészül azok végleges vagy frissített változata.

DOKUMENTUMELŐZMÉNYEK

Változat	Megjegyzés	Időpont
1. változat	Első kiadás	2007. június
1.1. változat	<p>Helyesbítések:</p> <ul style="list-style-type: none"> - A CLP-rendeletre (2008. december 16-i 1272/2008/EK rendelet) történő hivatkozások beillesztése a dokumentum címében és a fejezetek címében. - Az útmutató alkalmazási körének tisztázása érdekében kiegészítő információ feltüntetése. A dokumentum egészében a szükségtelen információk eltávolítása. - Szükség szerint a CLP-rendeletre történő hivatkozások beillesztése a szövegben. - A „TGD” kifejezés „útmutató”-ra történő módosítása a dokumentum egészében. - A „készítmény” kifejezés „keverék” -re történő módosítása a dokumentum egészében. - A „pont” kifejezés „szakasz”-ra történő módosítása a dokumentum egészében. - Az „előzetes regisztrálás” kifejezés „(késői) előzetes regisztrálás”-ra történő módosítása a dokumentum egészében. - Az AAS és CLP rövidítések beillesztése, valamint a RIP és a TGD eltávolítása. - Az ötvözet, az EK-jegyzék és a IUCLID leírásának módosítása. Az EK-szám, listaszám, keverék és bejelentett anyag fogalmának meghatározása. A „készítmény” fogalmának törlése. - A 3.2. szakasz felülvizsgálata a tartalom egyértelművé tétele érdekében. - A 3.3. szakasz felülvizsgálata a tartalom egyértelművé tétele érdekében, a CLP-rendelet szerinti kötelezettségekre való tekintettel. - A 4.2.2.1. szakasz módosítása oly módon, hogy az összetevők feltüntetésének módja a koncentráció százalékos jelöléséről abc-sorrendre változzon, így a relatív összetétel nem vezethető le a lista szerinti sorrendből. 	2011. november (kizárólag angol nyelven)

	<ul style="list-style-type: none"> - A 4.2.3. szakaszban a kristályrács fogalmát a kristály váltotta fel. - A 4.3.1.2.3. szakasz felülvizsgálata a tartalom egyértelművé tétele érdekében. - Az Adatbenyújtási kézikönyv 18. rész: Az anyag azonosító adatainak bejelentése az IUCLID 5-ben a REACH szerinti regisztráláshoz c. dokumentumra történő hivatkozás feltüntetésre került. - Az 5. szakasz felülvizsgálata a tartalom egyértelművé tétele érdekében. - A 6. szakaszban az előzetes regisztrálás helyett a (késői) előzetes regisztrálás meghatározása. - Az 1. függelékben a hibás hiperhivatkozások frissítése. - A 2. függelék 4.3. szakaszának törlése, mivel annak tartalma megtalálható a kapcsolódó weboldalon. 	
1.2. változat	<p>Helyesbítés</p> <p>A „bevezetett anyag” definíciója megfelel az az 1354/2007/EK tanácsi rendelettel bevezetett és helyesbített 1907/2006/EK rendeletben szereplő definíciónak (HL L 36., 2009.2.5, 84. o.). Felhívjuk a figyelmet, hogy az 1.1 és 1.2 változatok változtatásai egyetlen 1.2 változatban szerepelnek a nem angol nyelvű verziók esetében.</p>	2012. március
1.3. változat	<p>Helyesbítés</p> <p>Két hiányzó szerkezeti képlet került beillesztésre a 7.6. fejezetben.</p>	2014. február
1.4. változat	<p>Helyesbítések:</p> <ul style="list-style-type: none"> - A dokumentum újraformázása az aktuális vállalati azonosítókkal összhangban. - A IUCLID korábbi verzióján alapuló technikai útmutatásokat tartalmazó 8. fejezet törlése. - A 7.5. szakaszban a krisztobalit és a kvarc leírásának helyesbítése és a 2000/30/EK irányelvre való hivatkozás törlése. - A 8. fejezetre és az Adatbenyújtási kézikönyvekre történő hivatkozások eltávolítása és az új ECHA kézikönyvekre történő hivatkozások beillesztése. - A III. függelék törlése és az információk áthelyezése a 	2016. június

	<p>dokumentumelőzményekhez.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Hibás linkek és szerkesztői hibák javítása. 	
2.0 verzió	<p>A részleges frissítés a következőkre korlátozódik:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Egy új, az anyagazonosítási profil koncepciójának leírását tartalmazó III. függelék hozzáadása. - Az 1. fejezet új szöveggel való kiegészítése az új III. függelék bevezetése érdekében. - A gépelési és szerkesztési hibák kijavítása. 	2016. december
2.1 verzió	<p>Helyesbítés a III. függelék 2. ábráján szereplő példák szövegében található tipográfiai hibák és az összetételre vonatkozó információkban található hibák kijavítása érdekében.</p>	2017. május
3.0 verzió	<p>Frissítés az alábbiak szerint:</p> <ul style="list-style-type: none"> - A 2022. március 24-i (EU) 2022/477 bizottsági rendelettel bevezetett módosításokkal való összhang megteremtése. - A (késői) előzetes regisztrációra való hivatkozások törlése. - Gépelési és szerkesztési hibák javítása. - Az ECHA támogató oldalaihoz és a „Kérdések és válaszok”-hoz vezető linkek hozzáadása - A III. függelék 5. bekezdésének (az IUCLID 5-ről az IUCLID 6-ra való átmenetről) törlése. 	2023. december

Tartalomjegyzék

1. ÁLTALÁNOS	9
1.1. Célkitűzések.....	9
1.2. Hatály	10
1.3. Az útmutató szerkezete	11
2. FOGALOMMEGHATÁROZÁSOK ÉS RÖVIDÍTÉSEK.....	12
2.1. Rövidítések	12
2.2. Meghatározások	14
3. AZ ANYAGOK REACH- ÉS CLP-RENDELET SZERINTI AZONOSÍTÁSÁNAK KERETE ...	17
3.1. Az anyag fogalmának meghatározása.....	17
3.2. Numerikus azonosítók	17
3.2.1. EK-jegyzék.....	17
3.2.2. Listaszámok	19
3.3. Az anyagok azonosításának követelményei a REACH- és CLP-rendeletben.....	19
4. ÚTMUTATÓ AZ ANYAGOKNAK A REACH- ÉS A CLP-RENDELET SZERINTI AZONOSÍTÁSÁHOZ ÉS MEGNEVEZÉSÉHEZ	23
4.1. Bevezetés	23
4.2. Jól meghatározott összetételű anyagok	29
4.2.1. Egy összetevőből álló anyagok.....	30
4.2.2. Több összetevőből álló anyagok	33
4.2.3. Meghatározott kémiai összetételű anyagok és egyéb fő azonosítók.....	36
4.3. UVCB anyagok.....	37
4.3.1. Az UVCB anyagokkal kapcsolatos általános útmutató	38
4.3.2. Az UVCB anyagok specifikus fajtái.....	47
5. KRITÉRIUMOK AZ ANYAGOK AZONOSSÁGÁNAK ELLENŐRZÉSÉRE.....	56
6. AZ ANYAG AZONOSÍTÓ ADATAI A MEGKERESÉSEN BELÜL	62
7. PÉLDÁK.....	63
7.1. Dietil-peroxi-dikarbonát.....	63
7.2. ZOLIMIDIN	64
7.3. IZOMEREK KEVERÉKE	64
7.4. AH illatanyag.....	68
7.5. Ásványok.....	74
7.6. A Lavandin grosso illóolaja	77
7.7. Krizantémolaj és izolált izomerei	83
7.8. Fenol, izopropilált, foszfát	87

7.9. Kvarterner ammóniumvegyületek	88
7.10. Ásványolaj	92
7.10.1. Benzin keverékáram (C4-C12)	92
7.10.2. Gázolajok (ásványolaj)	93
7.11. Enzimek.....	94
7.11.1. Szubtilizin	94
7.11.2. α -amiláz.....	96
I. FÜGGELÉK - TÁMOGATÓ ANYAGOK.....	98
II. FÜGGELÉK – TECHNIKAI ÚTMUTATÓ ANYAGAZONOSÍTÁSI PARAMÉTERENKÉNT	102
III. FÜGGELÉK – AZ ANYAG AZONOSÍTÁSA ÉS AZ ADATOK KÖZÖS BENYÚJTÁSA....	119

Táblázatok jegyzéke

táblázat1: Rövidítések.....	12
táblázat2: Fogalom meghatározások	14
táblázat3: Az anyagnak a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakaszában szereplő azonosító adatai	21
4.. táblázat: A fő azonosítók csoportosítása a jól meghatározott hasonló anyagok különböző típusait bemutató példák esetén	24
táblázat5: A fő azonosítók csoportosítása az UVCB anyagok különböző típusait bemutató példák esetén	25

Ábrajegyzék

1. ábra: Az útmutató megfelelő fejezeteihez és függelékeihez irányító kulcs különböző anyag típusok esetén.....	28
2. ábra (következő oldal): A potenciális regisztrálók által teendő lépések vázlatos áttekintése a regisztrálási kötelezettségeik meghatározásától (1) az egyetlen anyaguk azonosítási profiljának meghatározásán át (4) a regisztrációjuk benyújtásáig, ami az anyagaik regisztrálására vonatkozó kötelezettségek formális teljesítését jelenti (8).	125
3. ábra: Az anyagazonosítási profil meghatározásának szemléltető vázlata (2. ábra, 4. lépés) egy UVCB típusú anyag esetében, amelyet egyes jogi személyek forrás- és folyamatleírásaiból származó forrás- és folyamatdeszkriptorok alapján azonosítottak.	129

1. Általános

A REACH-rendelet (1907/2006/EK rendelet) a vegyi anyagok regisztrálására, értékelésére, engedélyezésére és korlátozására vonatkozó rendszert állít fel, és létrehozta az Európai Vegyianyag-ügynökséget (ECHA) a rendelet végrehajtása céljából.¹

A CLP-rendelet (1272/2008/EK rendelet) az anyagok és keverékek osztályozásáról, címkézéséről és csomagolásáról szóló új európai rendelet.² A jogszabály Európa szerte a vegyi anyagok egy új osztályozási és címkézési rendszerét vezeti be, melynek alapja az ENSZ globálisan harmonizált rendszere (ENSZ GHS).

A REACH-rendelet középpontjában az anyagok állnak. A REACH eljárások megfelelő működéséhez nélkülözhetetlen az anyagok megfelelő, pontos és egyértelmű azonosítása. Ennek az anyagok azonosításáról és megnevezéséről szóló útmutatónak a célja az ipar, a tagállamok és az Európai Vegyianyag-ügynökség támogatása.

Jelen útmutató alapja az anyagoknak a vegyi anyagokra vonatkozó korábbi jogszabályok (67/548/EGK és 98/8/EGK irányelv) szerinti azonosításával kapcsolatos tapasztalat. Az anyagoknak a REACH-rendelet és az anyagok osztályozásáról, címkézéséről és csomagolásáról szóló rendelet (CLP) szerinti azonosításával kapcsolatos jelenlegi gyakorlat képezi azonban a jelen útmutató pontosításának alapját. Ezen túlmenően, adott esetben, az Európai Unión kívüli egyéb kémiai rendszerekkel kapcsolatos megközelítések is figyelembevételre kerültek.

Jelen dokumentum tartalmazza az anyagok különböző típusaira szabott útmutatást.

A jelen útmutató a REACH- és a CLP-rendelet hatálya alá tartozó anyagok azonosítására és megnevezésére alkalmazandó.

1.1. Célkitűzések

Jelen útmutató célja, hogy útmutatást adjon a gyártók és importőrök számára az anyag azonosító adatainak a REACH- és a CLP-rendelet keretein belül történő rögzítéséhez és bejelentéséhez. Az útmutató az anyag azonosításának kulcsfontosságú részeként útmutatást ad az anyagok megnevezési módjával kapcsolatban. Útmutatást ad továbbá arra vonatkozóan, hogy az anyagok azonosnak tekinthetők-e a REACH és a CLP összefüggésében, valamint arra vonatkozóan, hogyan valósítható meg az „egy anyag, egy regisztráció” (OSOR) elv az anyagazonosítási profil (SIP) meghatározásával. Az azonos anyagazonosítási profillal rendelkező azonos anyagok azonosítása jelentőséggel bír a megkeresések, az adatmegosztás, az adatok közös benyújtása, az osztályozási és címkézési jegyzékbe történő bejelentés, valamint az osztályozás és címkézés harmonizálása tekintetében.

Az anyagok azonosítását lehetőleg iparági szakértők végezzék. Az iparágon belül az anyagok azonosítására vonatkozóan kevés tapasztalattal rendelkező felek részére jelen útmutató

¹ A vegyi anyagok regisztrálásáról, értékeléséről, engedélyezéséről és korlátozásáról, az Európai Vegyianyag-ügynökség létrehozásáról, az 1999/45/EK irányelv módosításáról, valamint a 793/93/EGK tanácsi rendelet, az 1488/94/EK bizottsági rendelet, a 76/769/EGK tanácsi irányelv, a 91/155/EGK, a 93/67/EGK, a 93/105/EK és a 2000/21/EK bizottsági irányelv hatályon kívül helyezéséről szóló, 2006. december 18-i 1907/2006/EK európai parlamenti és tanácsi rendelet („REACH”).

² Az anyagok és keverékek osztályozásáról, címkézéséről és csomagolásáról, a 67/548/EGK és az 1999/45/EK irányelv módosításáról és hatályon kívül helyezéséről, valamint az 1907/2006/EK rendelet (EGK vonatkozású szöveg) módosításáról szóló, 2008. december 16-i 1272/2008/EK európai parlamenti és tanácsi rendelet („CLP”).

függelékeként azonosítási paraméterekkel kapcsolatos, kiegészítő útmutató található.

Ezen túlmenően a jelen útmutató felsorolja néhány releváns, az anyag azonosító adatainak jellemzését és ellenőrzését elősegítő eszköz linkjét.

Az anyag azonosító adatainak a REACH- és a CLP-rendelet szerinti eljárások keretében a IUCLID-ben történő rögzítésével kapcsolatos további útmutatás az ECHA alábbi linken keresztül elérhető kézikönyveiben található: <http://echa.europa.eu/manuals>.

1.2. Hatály

A REACH-rendelet 1. cikke értelmében a rendelet az önmagukban, keverékekben és árucikkekben előforduló anyagok gyártására, behozatalára, forgalmazására, valamint felhasználására vonatkozik. A keverékek és árucikkek önmagukban nem tartoznak a REACH-rendelet hatálya alá.

A REACH-rendelet 10. cikkével összhangban a regisztráláshoz az anyag azonosító adatainak a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakaszában előírt paraméterek szerinti rögzítése szükséges (lásd táblázat3). Hasonló paraméterek (mint a REACH-rendelet VI. mellékletének 2.1.-2.3.4. szakaszában előírtak) szükségesek az anyag azonosító adatainak a CLP-rendelet 40. cikkének (1) bekezdése szerinti bejelentés céljából történő rögzítéséhez. A jelen útmutató az anyag REACH- és a CLP-rendelet szerinti jogi meghatározásának hatálya alá tartozó anyagok megfelelő azonosítását helyezi a középpontba, és útmutatást nyújt a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakasza szerinti anyagazonosítási paraméterekről. Az anyag azonosításával kapcsolatban megadott információknak minden anyagra vonatkozóan elegendőnek kell lenniük az anyag azonosításához. Egy vagy több anyagazonosítási paraméter is elhagyható, amennyiben az információ megadása technikailag nem lehetséges vagy nem tűnik tudományosan indokoltnak. Ilyen esetekben az indokokat egyértelműen jelezni kell, és azoknak tudományosan megalapozottnak kell lenniük.

Az anyag azonosításának módja az anyag típusától függ. Ebből kifolyólag a jelen útmutató felhasználóját az anyagtypustól függően különböző fejezetekhez irányítjuk.

A 67/548/EGK irányelv keretein belül alkalmazott EK-jegyzékek (EINECS, ELINCS és az NLP-lista) az anyagok azonosításának fontos eszközei. Az e jegyzékek REACH-rendelet szerinti szerepével kapcsolatos útmutatás a 3.2. alpontban található.

A REACH- és a CLP- rendelet (valamint ebből eredően a jelen útmutató) hatálya alá tartozó anyagok jellemzően az anyag gyártásának részeként a kémiai reakciók eredményei, és több, különböző összetevőt is tartalmazhatnak. A REACH- és a CLP-rendeletben meghatározott anyagok közé tartoznak a természetben előforduló anyagokból vegyi úton származtatott vagy izolált anyagok is, amelyek állhatnak egyetlen elemből vagy molekulából (pl. tiszta fémek vagy egyes ásványok) vagy több összetevőből (pl. illóolajok, szulfid fémérc olvasztásakor keletkező nyers fémek). A más közösségi jogszabályok hatálya alá tartozó anyagok azonban sok esetben mentesülnek a REACH-rendelet szerinti regisztrálás alól (lásd a REACH-rendelet 2. cikkét). A REACH-rendelet IV. mellékletében felsorolt anyagok és a REACH-rendelet V. mellékletében meghatározott bizonyos kritériumoknak megfelelő anyagok szintén mentesülnek a regisztrálás alól. Meg kell jegyezni, hogy bár az anyag mentesülhet a regisztrálás alól, ez nem feltétlenül jelenti azt, hogy az anyag mentesül a REACH-rendelet egyéb címei vagy a CLP-rendelet követelményei alól is.

A REACH előírja, hogy az azonos anyag regisztrálói közösen állapodjanak meg az anyagra

vonatkozó bizonyos információk közös benyújtásáról (OSOR-elv)³. Egy ilyen elv megvalósítása során tisztázni kell, hogyan határozta meg a regisztráló az anyagazonosítási profilját.

1.3. Az útmutató szerkezete

A háttér-információk, mint pl. a jelen útmutató célkitűzései és hatálya az 1. fejezetben található, az alkalmazott rövidítések és fogalommeghatározások a 2. fejezetben kerülnek bemutatásra. Az anyagok REACH-rendelet szerinti azonosításának kereteire vonatkozó releváns információk, pl. az anyag fogalmának meghatározása és a jogszabályban szereplő tájékoztatási követelmények, a 3. fejezetben található.

Az anyagok azonosításához és megnevezéséhez kapcsolódó gyakorlati útmutató a 4. fejezetben található.

- A 4.1. alpont ismerteti a „jól meghatározott” és a „nem jól meghatározott” anyagok közötti különbséget; és ezen a két főcsoporton belül különböző anyagtipusokat lehet megkülönböztetni, amelyek mindegyike saját, specifikus útmutatóval rendelkezik az anyag azonosítása tekintetében. Egy kulcsfontosságú diagram kerül bemutatásra, amely a felhasználót ahhoz a megfelelő fejezethez irányítja, ahol a specifikus anyagtipusra vonatkozó azonosítási útmutató található.
- A következő fejezetekben minden anyagtípus tekintetében magyarázattal és példákkal kiegészített szabályok formájában konkrét iránymutatás található.

Az 5. fejezet annak ellenőrzésére vonatkozóan ad iránymutatást, hogy az anyagok azonosnak tekinthetők-e. Az anyag azonosító adataira a megkeresési folyamattal kapcsolatban vonatkozó iránymutatás a 6. fejezetben található.

Továbbá, a 7. fejezetben részletes példák találhatóak a 4. fejezetben lévő gyakorlati útmutató felhasználásával

Az I. függelék felsorolja néhány, az anyagok azonosító adatainak jellemzését és ellenőrzését elősegítő, releváns eszköz linkjét.

A II. függelék további háttér-információval szolgál az anyagok azonosítási folyamata során használt egyedi anyagazonosítási paraméterek tekintetében, mint pl. a nómenklátúra szabályok, EK-számok és CAS-számok, az összegképlet és a szerkezeti képlet jelölése, valamint az analitikai módszerek tekintetében.

A III. függelék tájékoztatást nyújt az anyagazonosítási profil koncepciójáról, a közös benyújtási kötelezettségek szempontjából való jelentőségéről, valamint meghatározásának és jelentésének módjáról.

³Az ugyanazon anyagra vonatkozó adatok közös benyújtásával kapcsolatos részletes információkat Az *adatmegosztásról szóló útmutató* tartalmazza.

2. Fogalommeghatározások és rövidítések

2.1. Rövidítések

A jelen útmutatóban előforduló legfontosabb rövidítések felsorolása és magyarázata itt található: táblázat1.

táblázat1: Rövidítések

Rövidítés	Jelentés
AAS	Atomabszorpciós spektrometria
AISE	Szappan-, mosó- és tisztítószer-, valamint háztartásiszer-gyártók nemzetközi szövetsége
CAS	Vegyianyag-nyilvántartási Szolgálat
CLP	Az anyagok és keverékek osztályozásáról, címkézéséről és csomagolásáról szóló 1272/2008/EK rendelet
EINECS	Létező Kereskedelmi Vegyi Anyagok Európai Jegyzéke
EK	Európai Bizottság
ELINCS	Törzskönyvezett Vegyi Anyagok Európai Jegyzéke
ENCS	Létező és Új Vegyszerek Jegyzéke (Japán)
ESIS	Európai Vegyianyag-információs Rendszer
EU	Európai Unió
GC	Gázkromatográfia
GHS	Vegyianyagok osztályozásának és címkézésének globálisan harmonizált rendszere
HPLC	Nagyteljesítményű folyadékkromatográfia
InChI	IUPAC nemzetközi kémiai azonosító
INCI	Kozmetikai Összetevők Nemzetközi Nevezéktana
IR	Infravörös
ISO	Nemzetközi Szabványügyi Szervezet
IUBMB	Nemzetközi Biokémiai és Molekuláris Biológiai Szövetség
IUCLID	Egységes Nemzetközi Kémiai Információs Adatbázis
IUPAC	Az Elméleti és Alkalmazott Kémia Nemzetközi Uniója
m/m	Tömegszázalék
MS	Tömegspektroszkópia
NLP	Polimernek már nem minősülő anyag

NMR	Mágneses magrezonancia
ppm	részecske/millió
REACH	Vegyipolitikai anyagok regisztrálása, értékelése, engedélyezése és korlátozása
SIEF	Anyaginformációs cserefórum
SIP	Anyagazonosítási profil
SMILES	Molekulák egyszerűsített egy sorban történő beviteli rendszere
TSCA	A mérgező anyagok ellenőrzéséről szóló törvény (USA)
UV/VIS	Ultraibolya és látható abszorpciós spektroszkópia
UVCB	Ismeretlen szerkezetű vagy változó összetételű, összetett reakcióban keletkezett vagy biológiai eredetű anyag
XRD	Röntgendiffrakció
XRF	Röntgen fluoreszcenciás spektroszkópia

2.2. Meghatározások

A jelen útmutatóban használt legfontosabb fogalom meghatározások felsorolása és leírása itt található: táblázat2.

Ezek a fogalom meghatározások figyelembe veszik a REACH- és a CLP-rendeletben használt fogalom meghatározásokat. Ebből adódóan néhány fogalom a 67/548/EGK irányelvben alkalmazottól eltérő módon kerül meghatározásra.

táblázat2: Fogalom meghatározások

Fogalom meghatározás	Leírás
Adalékanyag	Olyan anyag, amelyet szándékosan, az anyag stabilizálása érdekében adtak hozzá az anyaghoz. ⁴
Alkotóelem	Szándékosan, a keverék létrehozása céljából hozzáadott anyag.
Anyag*	Olyan természetes állapotban előforduló vagy gyártási folyamatból származó kémiai elem és vegyületei, amely az anyag stabilitásának megőrzéséhez szükséges adalékanyagot és az alkalmazott folyamatból származó szennyezőt is tartalmazhat, de nem tartalmaz olyan oldószert, amely az anyag stabilitásának befolyásolása vagy összetételének megváltoztatása nélkül elkülöníthető.
Árucikk*	Olyan tárgy, amely az előállítás során a funkcióját a kémiai összetételnél nagyobb mértékben meghatározó különleges formát, felületet vagy alakot kap.
Bejelentett anyag*	Olyan anyag, amelyre vonatkozóan bejelentést nyújtottak be, és amelyet a 67/548/EGK irányelvvel összhangban forgalomba lehet hozni.
Egy összetevőből álló anyag	Általános szabályként olyan, összetétele alapján meghatározott anyag, amelyben egy fő összetevő legalább 80%-ban (m/m) van jelen.
EK-jegyzék	Bár a REACH-rendeletben jogilag nem kerül meghatározásra, az EK-jegyzék a vegyi anyagok korábbi uniós szabályozási keretéből származó alábbi három független és jogilag engedélyezett európai anyagjegyzéket egyesíti magában: EINECS, ELINCS és az NLP-jegyzék (polimernek már nem minősülő anyagok). Az EK-jegyzékben szereplő bejegyzések egy kémiai névből és egy számból (EK-név és EK-szám), a CAS-számból, a molekulaképletből (amennyiben rendelkezésre áll) és (bizonyos típusú anyagoknál) leírásból állnak.

⁴ Más területeken az adalékanyag egyéb funkciókkal is rendelkezhet, pl. pH-szabályozó vagy színezék. A REACH-rendeletben és ebben az útmutatóban az adalékanyag stabilizátort jelent.

EK-szám	Az EK-szám az EK-jegyzékben szereplő anyagok numerikus azonosítója.
Fő összetevő	Az anyag olyan – adalékanyagtól és szennyezőtől különböző – összetevője, amely az anyag jelentős részét alkotja, és amelyet ezért felhasználnak az anyag elnevezésében és az anyag részteles azonosítása során.
Gyártás*	Anyagok előállítása vagy kitermelése természetes állapotban.
Intermedier*	<p>Kémiai feldolgozás céljából gyártott és annak során felhasznált vagy másik anyaggá való átalakítás céljából kémiai feldolgozás (a továbbiakban: <i>szintézis</i>) során felhasznált anyag:</p> <p>(a) a <u>nem elkülönített intermedier</u> olyan intermedier, amelyet a szintézis során nem távolítanak el szándékosan (kivéve mintavétel céljából) abból a berendezésből, amelyben a szintézis végbemegy. Az ilyen berendezés a reaktort, kiegészítő berendezéseit és azokat a berendezéseket foglalja magában, amelyekben az anyag(ok) a folytonos vagy szakaszos folyamat során áthalad(nak), valamint a reakció következő lépése érdekében az egyik tartóedényből a másikba való átjuttatáshoz használt csőrendszert, de nem foglalja magában azokat a tartályokat és más tartóedényeket, amelyekben az anyago(ka)t a gyártás után tárolják;</p> <p>(b) a <u>telephelyen elkülönített intermedier</u> olyan intermedier, amely nem felel meg a nem elkülönített intermedier kritériumainak, és amelynek esetében az intermedier gyártására és az adott intermedierből az egyéb anyag(ok) szintézisére egyazon – egy vagy több jogi személy által üzemeltetett – telephelyen kerül sor;</p> <p>(c) a <u>szállított elkülönített intermedier</u> olyan intermedier, amely nem felel meg a nem elkülönített intermedier kritériumainak, és amelyet más telephelyek között szállítmányoznak vagy beszállítanak;</p>
IUCLID	Egységes Nemzetközi Kémiai Információs Adatbázis Az IUCLID egy adatbáziskezelő-rendszer, amely a vegyi anyagokra vonatkozó adatok kezelésére szolgál.
Kémiaileg nem átalakított anyag*	Olyan anyag, amelynek kémiai szerkezete – kémiai folyamatot vagy kezelést vagy fizikai ásványtani átalakítást, például a szennyezők eltávolítását követően is – változatlan marad.
Keverék*	A kettő vagy több anyagot tartalmazó keverék vagy oldat.
Kromatográfias ujjlenyomat	Az anyag összetételének az összetevők jellegzetes eloszlása alapján történő jellemzése egy analitikai kromatogramon.

Listaszám	Az Ügynökség által kiadott szám. A REACH-IT által automatikusan generált szám. Minden beérkező, érvényes benyújtáshoz (pl. PPORD, megkeresések, regisztrálások, osztályozási és címkézési bejelentések) hozzárendelésre kerül.
Monomer*	Olyan anyag, amely képes kovalens kötést alkotni további hasonló vagy különböző molekulákkal a meghatározott folyamatban használt, érintett polimerképző reakció feltételei szerint.
Összetevő	Az anyagban jelen lévő önálló vegyi anyag-fajta, amely egyedi kémiai azonosító adatokkal jellemezhető.
Ötvözet*	Olyan makroszkopikus méreteken homogén fém anyag, amely két vagy több olyan módon kombinált elemből áll, amely nem teszi lehetővé azok mechanikus eszközzel való szétválasztását. Az ötvözetek speciális keverékeknek számítanak.
Polimer*	Monomer egységek egy vagy több típusának sorozatával jellemzett molekulákból álló anyag. Az ilyen molekulákat széles molekulatömeg-tartományban kell elosztani, amelyben a molekulatömeg különbségét elsősorban a monomer egységek számának különbsége okozza. A polimer a következőkből áll: (a) legalább három monomer egységet tartalmazó molekulák egyszerű súlytöbbsége, amelyek legalább egy másik monomer egységhez vagy egyéb reagenshez kovalens kötéssel kapcsolódnak; (b) az azonos molekulatömegű molekulák kevesebb, mint egyszerű súlytöbbsége. Ennek a meghatározásnak az összefüggésében a „monomer egység” a polimerben található monomer anyag kötött formáját jelenti.
Szennyező	A gyártott anyagban nem szándékosan jelenlévő összetevő. Származhat például a kiinduló anyagokból, vagy a gyártási folyamat során végbemenő másodlagos vagy nem teljes reakciók eredménye is lehet. Jóllehet jelen van a végső anyagban, nem szándékosan adták hozzá az anyaghoz.
Természetben előforduló anyag*	Feldolgozatlan vagy kizárólag kézzel, mechanikusan vagy gravitációs úton, vízben való oldással, úsztatással, centrifugálással, vízgőz-desztillációval, vagy kizárólag víz eltávolítása céljából hevítéssel feldolgozott, vagy levegőből – bármilyen módon – kivont, a természetben előforduló anyag.
Több összetevőből álló anyag	Általános szabályként az olyan, összetétele alapján meghatározott anyag, amelyben egynél több összetevő van jelen legalább 10%-os (m/m), de 80%-nál (m/m) kisebb koncentrációban.

* A REACH-rendelet 3. cikke szerinti fogalom meghatározások.

3. Az anyagok REACH- és CLP-rendelet szerinti azonosításának kerete

A REACH- és a CLP-rendeletek tartalmazzák az anyag fogalmának meghatározását, valamint a REACH-rendelet felsorolja az anyag regisztrálás céljából történő azonosításához szükséges anyagazonosítási paramétereket (VI. melléklet, 2. szakasz).

Ez a fejezet ismerteti az anyag REACH- és CLP-rendelet szerinti meghatározását (3.1. alpont), bemutatja a korábbi vegyi anyagokra vonatkozó szabályozási keret szerinti EK-jegyzék használatának módját (3.2. alpont), valamint további háttér-információkkal szolgál a REACH-rendeletben előírt, az anyag azonosítására vonatkozó követelmények tekintetében (3.3. alpont).

3.1. Az anyag fogalmának meghatározása

Az anyag fogalmát a REACH-rendelet (3. cikk 1. pontja) és a CLP-rendelet (2. cikk 7. pontja) határozza meg:

„anyag”: olyan természetes állapotban előforduló vagy gyártási folyamatból származó kémiai elem és vegyületei, amely az anyag stabilitásának megőrzéséhez szükséges adalékanyagot és az alkalmazott folyamatból származó szennyezőt is tartalmazhat, de nem tartalmaz olyan oldószert, amely az anyag stabilitásának befolyásolása vagy összetételének megváltoztatása nélkül elkülöníthető.

Az anyag fogalmának REACH- és CLP-rendelet szerinti meghatározása megegyezik a veszélyes anyagokról szóló irányelv 7. módosításában (a 67/548/EGK irányelvet módosító 92/32/EGK irányelvben) szereplő anyagfogalommal. Mindkét esetben a definíció túlmutat az egyetlen molekulaszervezet által meghatározott tiszta kémiai vegyületen. Az anyag fogalma különböző összetevőket foglal magában, mint pl. a szennyezőket.

3.2. Numerikus azonosítók

3.2.1. EK-jegyzék

A vegyi anyagok korábbi szabályozási kerete három különálló jegyzéket hozott létre, melyek a következők: Létező Kereskedelmi Vegyi Anyagok Európai Jegyzéke (EINECS), Törzskönyvezett Vegyi Anyagok Európai Jegyzéke (ELINCS) és a polimernek már nem minősülő anyagok (NLP-k) jegyzéke.

Az európai piacon 1971. január 1-je és 1981. szeptember 18-a között forgalmazott anyagokat

a Létező Kereskedelmi Vegyi Anyagok Európai Jegyzéke (EINECS)^{5, 6, 7}tartalmazza.

Ez a jegyzék kb. 100 000 anyagot tartalmaz, melyek azonosítói a kémiai nevük (és bizonyos anyagok esetén a leírás), a CAS-szám és egy hét számjegyből álló azonosító, az ún. EINECS-szám. Az EINECS-számok mindig 2-vel vagy 3-mal kezdődnek (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Az EINECS-be bejelentett anyagok egy ellenőrző lépésen mennek keresztül, amely igazolja az anyag jegyzékbe történő felvételét.

Az 1981. szeptember 18. után bejelentett és forgalomba hozott anyagok az Törzskönyvezett Vegyi Anyagok Európai Jegyzékében (ELINCS)⁶ szerepelnek. Ez a jegyzék (lista) tartalmazza a 67/548/EGK irányelvvel és annak módosításaival összhangban 2008. május 31-ig bejelentett valamennyi anyagot. Ezek az anyagok az ún. „új anyagok”, mivel ezeket 1981. szeptember 18-án nem forgalmazták a közösségi piacon. Az ELINCS-számot az Európai Bizottság adta az anyaghoz a tagállamok illetékes hatóságai (MSCA-k) által végzett felülvizsgálatot követően. Az EINECS-szel ellentétben az ELINCS bejegyzései nem tartalmazzák a CAS-számot, hanem az MSCA által kiosztott bejelentési számot, a kereskedelmi nevet (amennyiben rendelkezésre áll), az osztályozást és osztályozott anyagok esetén az IUPAC nevet. Az ELINCS-számok is hétjegyűek, melyek mindig 4-essel kezdődnek (4xx-xxx-x).

A polimereket nem kellett bejelenteni az EINECS-be, azokra a 67/548/EGK irányelv⁸ különös szabályai vonatkoztak⁹. A „polimer” fogalmát a 67/548/EGK irányelv 7. módosítása (92/32/EGK irányelv) határozta meg részletesebben. E meghatározás alkalmazásának következményeként néhány, az EINECS bejelentési szabályai szerint polimernek tekintett anyag a 7. módosítás értelmében a továbbiakban *már nem* volt polimernek tekinthető. Mivel minden, az EINECS-ben nem szereplő anyag bejelentése kötelező volt, ezért az összes „*polimernek már nem minősülő anyagot*” (NLP-t) elméletileg bejelentették. A Miniszterek Tanácsának világos állásfoglalása szerint azonban ezeket a polimernek már nem minősülő anyagokat nem kell visszamenőlegesen bejelenteni. A Bizottságot felkérték, hogy állítsa össze a polimernek már nem minősülő anyagok listáját (az NLP-listát). Ennek a listának azokat az anyagokat kellett tartalmaznia, amelyeket 1981. szeptember 18-a (a 67/548/EGK irányelv 6. módosításának, azaz a 79/831/EGK irányelvnek a hatályba lépése) és 1993. október 31-e (a 67/548/EGK irányelv 7. módosításának, azaz a 92/32/EGK irányelv hatályba lépése) között az EU piacán forgalmaztak, és amelyek teljesítették azt a követelményt, hogy az EINECS bejelentési szabályai szerint polimernek minősültek, de a 7. módosítás értelmében többé már nem tekinthetők polimernek. Az NLP-lista nem teljes. Az NLP-listán szereplő anyagokat a kémiai név, a CAS-szám és egy hét számjegyű szám, az ún. NLP-szám azonosítja. Az NLP-

⁵Az EINECS alapja az Európai Központi Lista (**E**uropean **C**ORE **I**NVENTORY, ECOIN), amelyhez az ipar további anyagokról tehetett bejelentéseket (az anyagok EINECS-be történő bejelentésének kritériumai alapján). Az ECOIN az európai piacon vélhetően forgalmazott vegyi anyagokat tartalmazó különböző listák (pl. TSCA) összevonásával készült. Az EINECS 1990. június 15-én került közzétételre, és több mint 100 000 anyagot tartalmaz. A jegyzék használata során számos hibát fedeztek fel (nyomtatási hibákat, pl. helytelen kémiai nevet, szerkezetet vagy CAS regisztrációs számot). Emiatt 2002. március 1-jén helyesbítést tettek közzé.

⁶ ECB (2005) A 67/548/EGK irányelv hatodik és hetedik módosításának (79/831/EGK és 92/32/EGK irányelvek) végrehajtására vonatkozó határozatok kézikönyve. Nem bizalmas változat. EUR 20519 EN. Frissített változat: 2005. június.

⁷ Geiss F., Del Bino G., Blech G. és mások 1992., The EINECS Inventory of existing chemical substances on the EC market. Tox Env Chem, 37. kötet, 21-33. oldal.

⁸ ECB, 2003., Notification of new chemical substances in accordance with Directive 67/548/EEC on the classification, packaging and labelling of dangerous substances (Az új vegyi anyagok bejelentése a veszélyes anyagok osztályozásáról, csomagolásáról és címkézéséről szóló 67/548/EGK irányelv szerint). Polimernek már nem minősülő anyagok listája. EUR 20853 EN.

⁹ Rasmussen K., Christ G. és Davis JB., 1998., Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC (A polimerek regisztrációja a 67/548/EGK irányelvvel összhangban), Tox Env Chem, 67. kötet, 251-261. oldal.

szám mindig 5-tel kezdődik (5xx-xxx-x).

Ennek a három listának – EINECS, ELINCS és NLP-lista – az összefoglaló neve az EK-jegyzék. Az összes, ebben a jegyzékben szereplő anyag rendelkezik az Európai Bizottság által adott EK-számmal (az EK-számmal kapcsolatos, részletes információkat a II. függelék tartalmazza).

Az ezekkel az anyagokkal kapcsolatos információk megtalálhatók az Európai Vegyianyag-ügynökség weboldalán (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>). Az Ügynökség kezeli és teszi közzé a regisztrált anyagok listáját is (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Az EK-jegyzéket a gyártók és az importőrök az anyaguk EK-számának megállapításához használhatják.

3.2.2. Listaszámok

A REACH-IT rendszer kialakításakor az ECHA előnyösnek gondolta, hogy minden olyan benyújtott, technikailag teljes dokumentációhoz (előzetes regisztrálások, PPORD, megkeresések, regisztrálások, osztályozási és címkézési bejelentések stb.) automatikusan egy számot rendeljen, amely tekintetében EK-szám nem került meghatározásra (a listaszámok hozzárendelésének kritériumait lásd az alábbiakban). Ez technikailag megkönnyítette az e benyújtásokban szereplő anyagok kezelését, további feldolgozását és azonosítását. Ezeknek az ún. „listaszámoknak” ugyanolyan numerikus formátuma van, mint az EINECS-, ELINCS- és NLP-számoknak, csak más számjegyekkel kezdődnek.

A listaszámok numerikus formátuma megegyezik az EINECS, az ELINCS és az NLP bejegyzések listaszámainak formátumával. A listaszámokat és a hozzájuk kapcsolódó anyagazonosításokat túlnyomó többségükben nem ellenőrizték azok pontossága, érvényessége szempontjából, és a tekintetben, hogy betartásra kerültek-e a jelen útmutatóban szereplő szabályok.

Ki kell emelni azonban, hogy fennállhat annak a lehetősége, hogy ugyanazon anyaghoz különböző listaszámok kerülnek hozzárendelésre, amennyiben azon anyag tekintetében különböző azonosítók használatosak (pl. név). Következésképpen az is lehetséges, hogy egy EINECS-, ELINCS- vagy NLP-listán szereplő anyaghoz listaszámot rendelnek. Ez akkor fordulhat elő, ha az ECHA-hoz a REACH-IT-en keresztül benyújtott bejelentésben az EK-jegyzékben szereplőtől eltérő anyagnevet használnak.

A listaszámok kezdődhetnek például 6-os, 7-es, 8-as vagy 9-es számmal (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

Fontos megjegyezni, hogy néhány EINECS-bejegyzés esetében az anyag leírása meglehetősen terjedelmes, és esetlegesen a REACH-rendelet 3. cikkének 1. pontja szerint több anyagazonosítót is magába foglal. Ilyen esetekben a potenciális regisztráló felszólításra kerül, hogy pontosabban írja le az adott anyagot (pl. IUPAC-név és egyéb rendelkezésre álló azonosítók segítségével). A regisztrálónak mindazonáltal fel kell tüntetnie, hogy az anyag melyik EINECS-bejegyzéshez tartozik. Ilyen esetekben az Európai Vegyianyag-ügynökség mérlegeli, hogy helyénvaló-e az adott anyaghoz listaszámot rendelni.

3.3. Az anyagok azonosításának követelményei a REACH- és CLP-rendeletben

A REACH-rendelet értelmében, ha regisztrálás szükséges, akkor az anyag azonosító adataira vonatkozó információkat a VI. melléklet 2. szakaszában foglaltak szerint kell megadni. Ezeknek az információknak minden anyagra vonatkozóan megfelelőnek és elegendőnek kell lenniük az anyag azonosításához. A VI. melléklet 1. megjegyzése értelmében, ha egy vagy több, az anyag azonosító adataira vonatkozó információ megadása technikailag nem

megoldható, vagy nem tűnik tudományosan indokoltnak, az indokokat egyértelműen jelezni kell.

Ehhez hasonlóan, ha a CLP-rendelet szerint bejelentés szükséges (CLP-rendelet 40. cikk), akkor meg kell adni a REACH-rendelet VI. mellékletének 2.1-2.3.4. szakaszaiban előírt, az anyag azonosítására vonatkozó információkat. Ezeknek az információknak minden anyag vonatkozásában megfelelőnek kell lenniük az anyag azonosításához. A VI. melléklet 1. megjegyzése értelmében, ha egy vagy több, az anyag azonosító adataira vonatkozó információ megadása technikailag nem megoldható, vagy nem tűnik tudományosan indokoltnak, az indokokat egyértelműen jelezni kell.

A REACH-rendelet VI. melléklete szerinti anyagazonosítási paraméterek áttekintése itt található: táblázat3.

táblázat3: Az anyagnak a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakaszában szereplő azonosító adatai

Az anyagnak a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakaszában szereplő azonosító adatai	
2.	<p>AZ ANYAG AZONOSÍTÁSA</p> <p><i>Az ebben a szakaszban megadott információknak minden anyagra vonatkozóan elegendőnek kell lenniük az anyag azonosításához. Ha az alábbi tételek közül egy vagy több vonatkozásában az információ megadása technikailag nem lehetséges vagy nem tűnik tudományosan indokoltnak, az indokokat egyértelműen jelezni kell.</i></p>
2.1	Az egyes anyagok neve és bármely más azonosítója”;
2.1.1	<i>Az IUPAC-nevezéktan szerinti megnevezés(ek). Ha nem áll rendelkezésre, más nemzetközi kémiai név (nevek)”;</i>
2.1.2	<i>Egyéb nevek (szokásos név, kereskedelmi név, rövidítés)</i>
2.1.3	<i>EK-szám, azaz az EINECS-, ELINCS- vagy NLP-szám, vagy az Ügynökség által adott szám (ha rendelkezésre áll és megfelelő)”;</i>
2.1.4	<i>CAS-név és CAS-szám (ha rendelkezésre áll)</i>
2.1.5	<i>Egyéb azonosító kód, például vámaazonosító szám (ha rendelkezésre áll)”;</i>
2.2	Az egyes anyagok molekula- és szerkezeti képletére vagy kristályszerkezetére vonatkozó információk”;
2.2.1	<i>Molekula- és szerkezeti képlet (beleértve a Smiles-kódot és más megjelenítést, ha rendelkezésre áll) és a kristályszerkezet(ek) leírása”;</i>
2.2.2	<i>Az optikai aktivitásra és a (sztereo-)izomerek tipikus arányára vonatkozó információ (ha rendelkezésre áll és megfelelő)</i>
2.2.3	<i>Molekulatömeg vagy molekulatömeg-tartomány</i>
2.3.	Az egyes anyagok összetétele
2.3.1	<i>Tisztasági fok (%), ha alkalmazandó</i>

2.3.2	<p><i>Az összetevők és a szennyeződések nevei</i></p> <p><i>Ismeretlen vagy változó összetételű anyag, összetett reakciótermékek vagy biológiai anyagok (UVCB) esetében:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – a legalább 10 %-os koncentrációban jelen levő összetevők nevei, – a 10 %-osnál nagyobb koncentrációban jelen levő ismert összetevők nevei, – az egyedileg nem azonosítható összetevők esetében az összetevők csoportjainak leírása kémiai jellemzők alapján, – az eredet vagy forrás és a gyártási folyamat leírása.
2.3.3	<p><i>Az összetevők, az egyedileg nem azonosítható összetevők csoportjai és a 2.3.2. pontban meghatározottak szerinti szennyeződések jellemző koncentrációja és koncentrációtartománya (százalékban)</i></p>
2.3.4	<p><i>Az adalékanyagok nevei, jellemző koncentrációja és koncentrációtartománya (százalékban)</i></p>
2.3.5	<p><i>Az anyag azonosításához sajátosan szükséges valamennyi kvalitatív analitikai adat, például ultraibolya, infravörös, magmágneses rezonancia, tömegspektrum vagy diffrakciós adatok</i></p>
2.3.6	<p><i>Az anyag azonosításához sajátosan szükséges valamennyi kvantitatív analitikai adat, például kromatográfiai, titrimetriás, elemanalízis- vagy diffrakciós adatok</i></p>
2.3.7	<p><i>Az anyag azonosításához (azon belül az összetevői, adott esetben szennyeződései és adalékanyagai azonosításához és mennyiségének meghatározásához) szükséges analitikai módszerek vagy megfelelő bibliográfiai hivatkozások leírása. A leírásnak tartalmaznia kell a követett kísérleti protokollokat és a 2.3.1–2.3.6. pont szerint jelített eredmények megfelelő értelmezését. Ennek az információnak elegendőnek kell lennie ahhoz, hogy a módszereket reprodukálni lehessen.</i></p>
2.5	<p><i>Az anyag azonosítása szempontjából releváns bármely egyéb rendelkezésre álló információ”;</i></p>

4. Útmutató az anyagoknak a REACH- és a CLP-rendelet szerinti azonosításához és megnevezéséhez

4.1. Bevezetés

Az azonosításra és megnevezésre vonatkozó szabályok az egyes anyagtípusok esetén eltérőek. Gyakorlati okokból a jelen útmutató úgy épül fel, hogy a felhasználót minden anyagtípus vonatkozásában közvetlenül ahhoz a fejezethez irányítja, ahol a számára megfelelő iránymutatás található. Ezért az alábbiakban néhány magyarázat kerül feltüntetésre az egyes anyagtípusok tekintetében, végezetül egy kulcsfontosságú ábra, amely a megfelelő fejezet megtalálásában segít.

Az anyag azonosításának legalább a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakaszában (lásd táblázat3) felsorolt anyagazonosítási paramétereken kell alapulnia. Ezért minden anyagot a megfelelő azonosítási paraméterek kombinációjával kell azonosítani:

- Az IUPAC- és/vagy más név és egyéb azonosítók, pl. CAS-szám, EK-szám (VI. melléklet, 2.1. szakasz);
- A molekula- és szerkezeti képletére vonatkozó információk (VI. melléklet, 2.2. szakasz);
- A kémiai összetétel (VI. melléklet, 2.3. szakasz);

Az anyag teljes mértékben azonosítható a kémiai összetétele, azaz a kémiai azonosító adatai és az egyes összetevők összetétele alapján. Bár ez a közvetlen azonosítás a legtöbb anyag esetén lehetséges, bizonyos anyagok esetén azonban nem kivitelezhető vagy a REACH- és a CLP-rendelet hatályán belül nem elegendő. Ezekben az esetekben egyéb vagy kiegészítő anyagazonosítási információk szükségesek.

Így az anyagok két fő csoportba sorolhatók:

1. „Jól meghatározott anyagok”: Mennyiségében és minőségében meghatározott összetétellel rendelkező anyag, amely megfelelően azonosítható a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakasza szerinti azonosító adatok alapján.
2. „UVCB anyagok”: Ismeretlen szerkezetű vagy változó összetételű, összetett reakcióban keletkezett vagy biológiai eredetű anyag. Ezek az anyagok nem elegendő mértékben azonosíthatók a fenti adatok alapján.

A jól meghatározott anyagok összetételének változékonyságát a fő összetevő(k) koncentráció-tartományának(tartományainak) alsó és felső határértéke határozza meg. Az UVCB anyagok esetén a változékonyság relatív nagy és/vagy kis mértékben előrejelezhető.

Ismeretes, hogy lesznek határesetek is a jól meghatározott anyagok (sok összetevőből álló, egyenként széles skálájú reakciótermék) és az UVCB anyagok (változó, kis mértékben előrejelezhető összetételű reakciótermékek) között. A regisztráló felelőssége az anyagot a legmegfelelőbb módon azonosítani.

Az azonosítás és a megnevezés szabályai eltérőek az egy fő összetevőből álló „jól meghatározott anyagok” és az egynél több fő összetevőből álló „jól meghatározott anyagok” esetén. És az „UVCB” anyagokon belüli különböző anyagtípusokra eltérő azonosítási és megnevezési szabályok alkalmazandók.

A fő azonosítók a különböző anyagtípusok néhány példáján keresztül bemutatva itt találhatóak:

4. éstáblázat5. Ezek a példák úgy kerültek csoportosításra, hogy az anyag azonosításának hasonlóságai és különbségei könnyen felismerhetők legyenek.

4. A táblázat5 nem jelenti az összes lehetséges anyagtípus széleskörű listáját. Az anyagok azonosítási és megnevezési szabályok szerinti alábbi csoportosítása nem tekinthető az anyagok

hivatalos osztályozási rendszerének, hanem inkább gyakorlati segítségnyújtásnak a specifikus szabályok megfelelő alkalmazásához és a jelen útmutatón belüli megfelelő útmutató megtalálásához.

4.. táblázat: A fő azonosítók csoportosítása a jól meghatározott hasonló anyagok különböző típusait bemutató példák esetén

Közös jellemzők	Példák vagy reprezentáns anyagok	Fő azonosítók
A kémiai összetétel alapján jól meghatározott anyagok [4.2. alpont]	Egy összetevőből álló anyagok, pl. - benzol (95%) - nikkel (99%) [4.2.1. alpont]	Kémiai összetétel: egy fő összetevő $\geq 80\%$: - A fő összetevő kémiai azonosító adatai (kémiai név, CAS-szám, EK-szám stb.) - Jellemző koncentráció, valamint alsó és felső határértékek
	Több összetevőből álló anyagok, pl. meghatározott reakciótermékek, mint pl. 2-, 3-, és 4-klórtoluol reakcióterméke (30% mindegyik) [4.2.2. alpont]	Kémiai összetétel: fő összetevők keveréke (reakciótermék), mindegyik $\geq 10 - < 80\%$: - Minden fő összetevő kémiai azonosító adatai - Jellemző koncentrációk, valamint alsó és felső határértékek minden összetevő és maga a reakciótermék tekintetében
	A kémiai összetételnél bővebben meghatározott anyagok, pl. Grafit és gyémánt [4.2.3. fejezet]	Egy összetevőből vagy több összetevőből álló anyagokra jellemző kémiai összetétel ÉS Egyéb fizikai vagy jellemző paraméterek: pl. kristálmorfológia, (geológiai) ásványi összetétel stb.

táblázat5: A fő azonosítók csoportosítása az UVCB anyagok különböző típusait bemutató példák esetén

Közös jellemzők		Példák vagy reprezentáns anyagok	Fő azonosítók		
			Forrás	Folyamat	Egyéb azonosítók
UVCB anyagok (Ismeretlen szerkezetű vagy változó összetételű, összetett reakcióban keletkezett vagy biológiai reakcióban keletkezett anyagok) [4.3. fejezet]	Biológiai anyagok (B)	Biológiai anyagok extraktumai pl. természetes illatanyagok, természetes olajok, természetes színezékek és festékek	- Növény- vagy állatfajok és családok - Növények/állatok részei	- Extrakció - Frakcionálás, bepárlás, izolálás, tisztítás, stb. - <u>Származtatás*</u>	- Ismert vagy generikus összetétel - Ismert összetétel - Hivatkozás a standardokra - Színindex
		Összetett biológiai makromolekulák, pl. enzimek, proteinek, DNS vagy RNS részek, hormonok, antibiotikumok			- Standard enzim mérőszám - Genetikai kód - Sztereo konfiguráció - Fizikai tulajdonságok - Funkció/Aktivitás - Struktúra - Aminosav-szekvencia
	Fermentálási termékek antibiotikumok, biopolimerek, enzimek, vinasz (cukorerjesztési termékek), szoforolipidek stb.	- Tápoldat - Alkalmazott mikroorganizmus	- Fermentálás - Termékek izolálása - Tisztítási lépések	- Terméktípusok: pl. antibiotikumok, biopolimerek, proteinek stb. - Ismert összetétel	
Kis mértékben meghatározott, összetett vagy változó	Kis mértékben előrejelezhető és/vagy változó összetételű reakciókeverékek	Kiinduló anyagok	- Nyersolaj - Szén/tőzeg - Ásványi gázok - Ásványok	<u>Kémiai reakció típusa</u> , pl. észterezés, alkilezés, hidrogénezés	- Ismert összetétel - Ismert összetétel - Hivatkozás a standardokra
		- Frakciók vagy párlatok, pl. ásványolajok - Agyag, pl. bentonit - Kátrányok			- Frakcionálás, desztillálás - <u>Frakciók átalakítása</u> - Fizikai feldolgozás - Maradékok

	összetétel ú kémiai és ásványi anyagok (UVC)				Standard index
		Koncentrátumok vagy olvadékok, pl. fémes ásványok vagy különböző olvasztási vagy kohászati folyamatok maradékai, pl. salakok	Ércek	- Olvasztás - Hőkezelés - Különböző kohászati folyamatok	- Ismert vagy generikus összetétel - Fémek koncentrációja

* Az aláhúzott eljárások új molekulák szintézisét jelzik

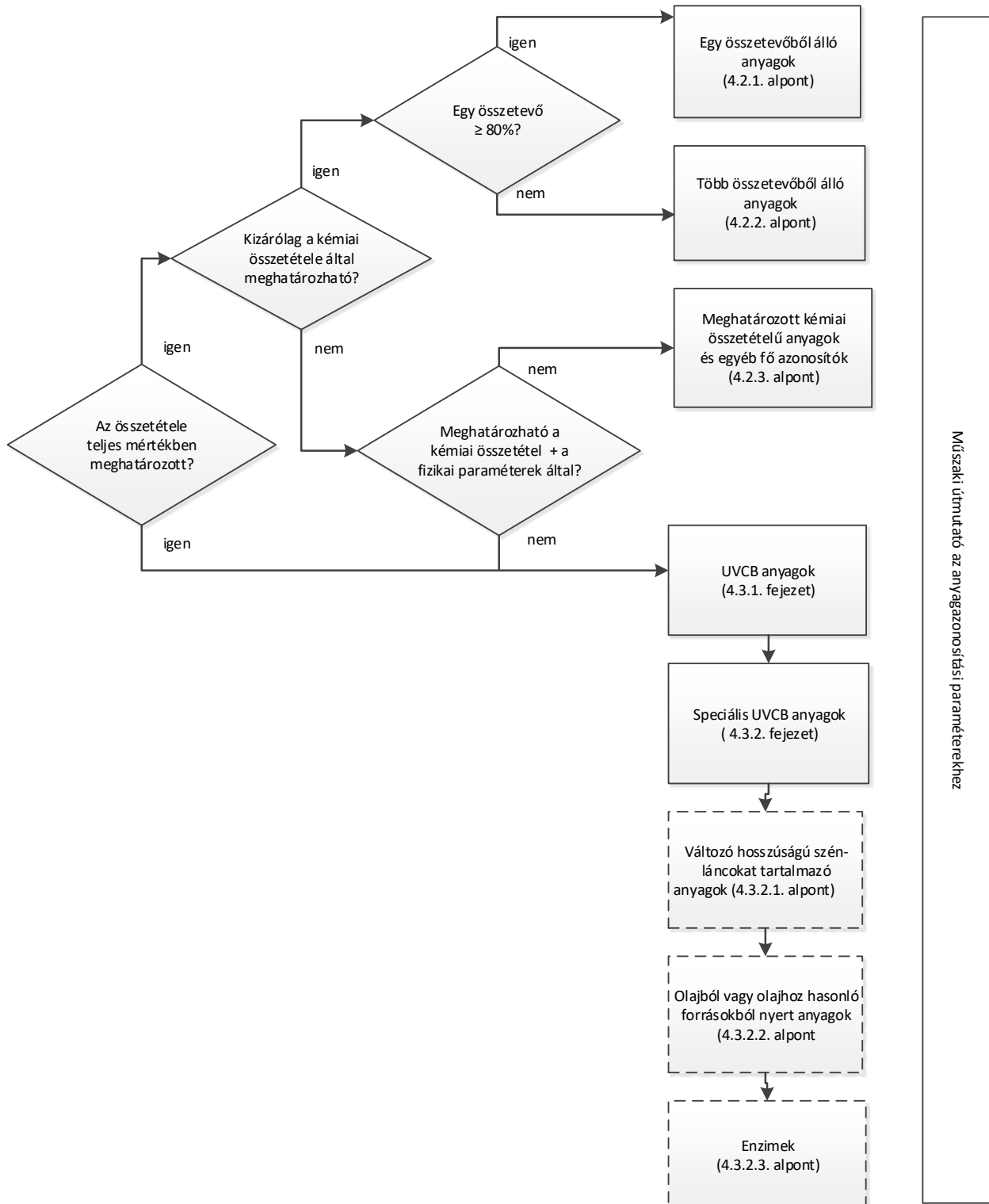
Ez a fejezet olyan alfejezetekre tagolódik, amelyek specifikus útmutatást tartalmaznak a különböző típusú anyagok azonosításához. A megfelelő fejezetek kulcsa itt található: 1.

A 1 kulcsa azon a kritériumon alapszik, hogy vannak „ökölszabályok”. A regisztráló felelőssége a leginkább megfelelő fejezet kiválasztása és az anyag azonosító adatainak az adott anyagra vonatkozó szabályokkal és kritériumokkal összhangban történő feljegyzése.

Az alapszabály, hogy az anyagokat lehetőség szerint a kémiai összetétel és az összetevők azonosítása alapján kell meghatározni. Kizárólag abban az esetben, ha ez technikailag nem megvalósítható, van szükség egyéb azonosítókra, ahogyan az a különböző UVCB anyagok esetén korábban meghatározásra került.

Amennyiben a regisztráló eltér a jelen útmutató anyagazonosítási szabályaitól és kritériumaitól, akkor azt meg kell indokolnia. Az anyag azonosításának átláthatónak, követhetőnek kell lennie, és biztosítania kell a konzisztenciát.

1. ábra: Az útmutató megfelelő fejezeteihez és függelékeihez irányító kulcs különböző anyagtípusok esetén



Az anyag és adott esetben a szennyeződések, valamint az adalékanyagok azonosításához használt analitikai módszerek leírását és/vagy a megfelelő bibliográfiai hivatkozásokat fel kell tüntetni (REACH-rendelet VI. melléklet, 2.3.5., 2.3.6. és 2.3.7. szakaszok). Ennek az információnak elegendőnek kell lennie ahhoz, hogy a módszereket reprodukálni lehessen. Az analitikai technikák alkalmazásának jellemző eredményeit is meg kell adni.

4.2. Jól meghatározott összetételű anyagok

A jól meghatározott kémiai összetételű anyagok nevét a fő összetevő(k) szerint határozzák meg. Néhány anyagtípus esetén a kémiai összetétel önmagában nem elegendő a jellemzéshez. Ezekben az esetekben a kémiai szerkezetre vonatkozó kiegészítő fizikai paramétereket is meg kell adni az anyag azonosításához.

Általános szabályként a cél az összetétel 100%-os lefedése, és valamennyi összetevő teljes körű kémiai azonosítást igényel, beleértve a szerkezeti információt is. A kémiai összetételük révén meghatározott anyagok esetén a következőket kell megkülönböztetni:

- Fő összetevő: Az anyag olyan – adalékanyagtól és szennyezőtől különböző – összetevője, amely az anyag jelentős részét alkotja, és amelyet ezért felhasználnak az anyag elnevezésében és az anyag részteles azonosítása során.
- Szennyező: A gyártott anyagban nem szándékosan jelenlévő összetevő. Származhat például a kiinduló anyagokból, vagy a gyártási folyamat során végbemenő másodlagos vagy nem teljes reakciók eredménye is lehet. Jóllehet jelen van a végső anyagban, nem szándékosan adták hozzá az anyaghoz.
- Adalékanyag: Olyan anyag, amelyet szándékosan, az anyag stabilizálása érdekében adtak hozzá az anyaghoz.

Minden, az egy vagy több összetevőből álló anyagban lévő, nem fő összetevőt (kivéve az adalékanyagokat) szennyeződésnek kell tekinteni. Habár bizonyos ágazatokban általánosan elfogadott gyakorlat, hogy a „nyomok” meghatározást használják, a jelen útmutatóban csak a „szennyeződések” fogalom szerepel.

A különböző összetevőknek eltérő azonosítási követelményei vannak:

- A fő összetevők hozzájárulnak az anyag megnevezéséhez, és minden fő összetevőt pontosan meg kell határozni;
- A szennyeződések nem járulnak hozzá az anyag megnevezéséhez, de minden egyes szennyeződést pontosan azonosítani kell.
- Az adalékanyagok hozzájárulnak az anyag összetételéhez (de a megnevezéséhez nem), és mindig pontosan azonosítani kell őket.
- A fő összetevők, a szennyeződések és az adalékanyagok pontos azonosításának tartalmaznia kell az IUPAC-nevet, a kémiai nevet, a szerkezeti képletet, az EK-számot és adott esetben a CAS-számot.

Néhány konvenció használatos az egy összetevőből és a több összetevőből álló anyagok megkülönböztetése érdekében:

- Az egy összetevőből álló anyag olyan anyag, amelyben egy összetevő legalább 80%-os (m/m) koncentrációban van jelen, és amely legfeljebb 20% (m/m) szennyeződést tartalmaz.

Az egy összetevőből álló anyag megnevezése az egy fő összetevő alapján történik;

- A több összetevőből álló anyag olyan anyag, amelyben egynél több összetevő van jelen általában legalább 10%-os (m/m), de 80%-nál (m/m) kisebb koncentrációban.

A több összetevőből álló anyag két vagy több fő összetevő reakciótömegeként kerül megnevezésre.

A fent említett szabályok iránymutatásként szolgálnak. Az attól való eltérés átfogó indoklás esetén lehetséges.

Általában az 1 tömegszázalékot elérő vagy azt meghaladó koncentrációban jelen lévő szennyeződések meg kell határozni. Az osztályozás és/vagy PBT-értékelés¹⁰ szempontjából releváns szennyeződések azonban minden esetben, a koncentrációtól függetlenül meg kell határozni. Általános szabály, hogy az összetételre vonatkozó információknak 100%-os mértékben teljesnek kell lenniük.

A REACH-rendelet, a CLP-rendelet és a jelen útmutató értelmében az adalékanyagok az anyag stabilitásának megőrzéséhez szükséges ágensek. Az adalékanyagok tehát az anyag lényegi összetevőjét alkotják, és az anyagmérlegben figyelembe kell venni azokat. A REACH-rendeletben és a jelen útmutatóban szereplő definíciók kivül az „adalék” szó szándékosan hozzáadott más funkciókkal rendelkező anyagokra is használatos, pl. pH-szabályozókra vagy színezékekre. Ezek a szándékosan hozzáadott anyagok nem képezik önmagukban az anyag részét, és ezért nem veszik azokat figyelembe az anyagmérlegben.

A keverékek a REACH- és a CLP- rendelet meghatározása értelmében az anyagok szándékos keverékei, és így azok nem tekintendők több összetevőből álló anyagoknak.

Az egy összetevőből álló anyagokra vonatkozó specifikus útmutatás a 4.2.1. alpontban, a több összetevőkből álló anyagra vonatkozó a 4.2.2. alpontban található. A kiegészítő információkat igénylő anyagokra (pl. bizonyos ásványokra) vonatkozó útmutató a 4.2.3. alpontban kerül bemutatásra.

4.2.1. Egy összetevőből álló anyagok

Az egy összetevőből álló anyag olyan anyag, amelyet mennyiségi összetétele határoz meg, és amelyben egy fő összetevő legalább 80%-ban (m/m) van jelen.

Megnevezési konvenciók

Az egy összetevőből álló anyag megnevezése a fő összetevő alapján történik. Főszabály szerint a nevet angol nyelven kell megadni az IUPAC-nómenklatúra szabályai szerint (lásd I. függelék). Ezt ki lehet egészíteni más, nemzetközileg elfogadott megjelöléssel.

Azonosító adatok

Az egy összetevőből álló anyagot a kémiai név és a fő alkotóelem minden egyéb rendelkezésre álló azonosítója (beleértve a molekula- és szerkezeti képletet vagy a kristályszerkezetet) alapján azonosítják. Az egy összetevőből álló anyag bármely szennyeződését és/vagy adalékanyagát azonosítani kell. Meg kell adni a fő összetevő, a szennyeződések és/vagy adalékanyagok jellemző koncentrációját (koncentrációit) és koncentráció-tartományát (tartományait). Mindezeket az információkat analitikai adatokkal kell alátámasztani.

Példa				
Fő összetevő	Koncentráció (%)	Szennyező	Koncentráció (%)	Az anyag azonosító adatai
m-xilol	91	o-xilol	5	m-xilol
o-xilol	87	m-xilol	10	o-xilol

Általában a fő összetevő *kevesebb, mint* 80%-ban van jelen, és teljes körű meghatározása

¹⁰ A PBT-értékelésre vonatkozó további információk és a releváns kritériumok megtalálhatók az Útmutató a tájékoztatási követelményekhez és a kémiai biztonsági értékeléshez c. dokumentum R.11.: PBT-értékelés című fejezetében.

szükséges az összes fent említett adatok segítségével. A fő alkotóelem és a szennyeződések tipikus koncentrációi összegének 100%-nak kell lennie. Az 1%-nál *nagyobb* koncentrációban jelen lévő szennyeződések nevvel és azonosítóval együtt kell megadni. Az osztályozás és/vagy PBT-értékelés szempontjából releváns szennyeződések¹¹ mindig ugyanazon azonosítók szerint kell meghatározni, függetlenül azok koncentrációjától.

A 80 tömegszázalékos szabály helyes alkalmazása érdekében a szándékosan hozzáadott anyagokat, mint pl. a pH-szabályozókat vagy színezékeket az anyagmérlegben figyelmen kívül kell hagyni.

A „80%-os szabály” kerül alkalmazásra az új anyagok bejelentésénél (67/548/EGK irányelv) és a REACH-ben alkalmazandó. A 80 tömegszázalékos szabálytól való eltérést indoklással kell alátámasztani. Az indokolt eltérés lehetséges példái a következők:

- Amennyiben a fő összetevő 80 tömegszázaléknál kisebb koncentrációban van jelen, de igazolható, hogy az anyag ugyanazon fizikai és kémiai tulajdonságokkal és ugyanazzal a veszélyességi profillal rendelkezik, mint más, egy összetevőből álló, ugyanazon azonosító adatokkal rendelkező anyagok, amelyek megfelelnek a 80 tömegszázalékos szabálynak.
- A fő összetevő és a szennyeződések koncentrációtartománya meghaladja a 80 tömegszázalékos kritériumot, és a fő összetevő csak esetenként éri el a 80 tömegszázalékot vagy marad az alatt.

Példák									
Anyag	Fő összetevő	Koncentráció felső határa (%)	Jellemző koncentráció (%)	Koncentráció alsó határa (%)	Szennyező	Koncentráció felső határa (%)	Jellemző koncentráció (%)	Koncentráció alsó határa (%)	Az anyag azonosító adatai
1	o-xilol	90	85	65	m-xilol	35	15	10	o-xilol
2	o-xilol m-xilol	90 35	85 15	65 10	p-xilol	5	4	1	o-xilol

A fő összetevő és a szennyeződés koncentráció-tartományának köszönhetően az 1-es és a 2-es anyag több összetevőből, két fő összetevőből, o-xilolból és m-xilolból álló vagy egy összetevőből álló anyagnak tekinthető. A megoldás ebben az esetben az, hogy mindkét anyagot egy összetevőből álló anyagnak kell tekinteni, amelynek az az oka, hogy az o-xilol jellemzően 80 tömegszázalékot meghaladó mértékben van jelen.

Analitikai információk

Az egy összetevőből álló anyag összetevőinek és szennyeződéseinek azonosításához elegendő minőségi adatot kell szolgáltatni. Különböző spektroszkópiai eljárások is megfelelőek lehetnek az anyag azonosításának megerősítésére, például az ultraibolya és a látható abszorpciós spektroszkópia (UV/Vis), az infravörös spektroszkópia (IR), a nukleáris mágneses magrezonancia spektroszkópia (NMR) és a tömegspektroszkópia (MS). A szerves anyagok vagy a kristályszerkezettel kimutatható/mérhető szerves és/vagy fémszerves anyagok esetében a legtöbb esetben előnyösebb a röntgendiffrakció (XRD) használata.

Az anyag összetételének megerősítéséhez detektálási technikával párosított mennyiségi módszereket, például kromatográfias technikákat – gázkromatográfiát (GC) vagy nagy teljesítményű folyadékkromatográfiát (HPLC) – kell alkalmazni. Szerves anyagok esetében megfelelőbb lehet a röntgendiffrakció (XRD), a röntgen fluoreszcenciás spektroszkópia (XRF),

¹¹ A PBT-értékelésre vonatkozó további információk és a releváns kritériumok megtalálhatók az Útmutató a tájékoztatási követelményekhez és a kémiai biztonsági értékeléshez c. dokumentum R.11.: PBT-értékelés című fejezetében.

az atomabszorpciós spektrometria (AAS), az induktív csatolt plazma optikai emissziós spektrometria (ICP-OES) vagy az induktív csatolt plazma tömegspektrometria (ICP-MS). Adott esetben egyéb elfogadott összetevő-elválasztási technikákat is alkalmazni kell.

Az analitikai módszerek leírásának tartalmaznia kell az alkalmazott kísérleti protokollokat és a jelentett eredmények értelmezését.

Az analitikai módszerek folyamatos fejlődésen és fejlesztésen mennek keresztül. Ezért a regisztráló felelőssége, hogy megfelelő elemzési adatokat szolgáltatson.

4.2.2. Több összetevőből álló anyagok

A több összetevőből álló anyagot annak mennyiségi összetétele határozza meg, amelyben több összetevő van jelen legalább 10 tömegszázalékos, de 80 tömegszázaléknál kisebb koncentrációban. A több összetevőből álló anyag egy gyártási folyamat eredménye.¹²

A REACH-rendelet a gyártott anyag regisztrálását írja elő. Amennyiben több összetevőből álló anyag kerül gyártásra, akkor a több összetevőből álló anyagot kell regisztrálni.^{13 14} Eseti alapon kell eldönteni, hogy az anyag gyártási folyamatának különböző lépései mennyire tartoznak bele a „gyártás” fogalmába. Nem szükséges az anyagot önmagában vizsgálni, ha az anyag veszélyességi profilja elegendő mértékben leírható az egyes összetevőkre vonatkozó információk segítségével.

Megnevezési konvenciók

A több összetevőből álló anyag megnevezése az anyagot önmagában alkotó fő összetevők reakció tömegeként történik, azaz nem a gyártáshoz szükséges kiinduló anyagok reakció tömegeként. Az általános formátum a következő: „[fő összetevők nevei] reakció tömege”. Ajánlott az összetevők neveit betűrendben feltüntetni, valamint az „és” kötőszóval egymástól elválasztani. Kizárólag a jellemzően legalább 10%-ban jelen lévő fő összetevők járulnak hozzá a megnevezéshez. A nevet főszabály szerint angol nyelven kell megadni, az IUPAC-nómenklatúra szabályai szerint. Ezt ki lehet egészíteni más, nemzetközileg elfogadott megjelöléssel.

Azonosító adatok

A több összetevőből álló anyagot a kémiai név és az anyag mint olyan minden egyéb rendelkezésre álló azonosítója, valamint az összetevők kémiai azonossága (beleértve a molekula- és szerkezeti képletet vagy a kristályszerkezet(ek)et is) alapján azonosítják. A több összetevőből álló anyag bármely szennyeződését és/vagy adalékanyagát azonosítani kell. Meg kell adni az összetevők, a szennyeződések és/vagy adalékanyagok jellemző koncentrációját (koncentrációit) és koncentráció-tartományát (tartományait). Mindezeket az információkat analitikai adatokkal kell alátámasztani.

Példa				
Fő összetevők	Koncentráció (%)	Szennyező	Koncentráció (%)	Az anyag azonosító adatai
m-xilol	50	p-xilol	5	M-xilol és o-xilol reakció tömege
o-xilol	45			

A több összetevőből álló anyagok esetén a kémiai összetétel ismert, és több fő összetevő is releváns az anyag azonosítása szempontjából. Ezen kívül az anyag kémiai összetétele jellemző értékeként és tartományokként előre látható. A fő összetevőt teljes mértékben, az összes releváns paraméter segítségével azonosítani kell. A fő összetevők jellemző koncentrációjának ($\geq 10\%$) és a szennyeződések jellemző koncentrációjának ($< 10\%$) összege 100% kell, hogy legyen.

¹² A keverék és a több összetevőből álló anyag közötti különbség abban áll, hogy a keveréket úgy állítják elő, hogy két vagy több anyagot elegyítenek anélkül, hogy kémiai reakció következne be. A több összetevőből álló anyag kémiai reakció eredménye.

¹³ Számos anyag mentesül a REACH-rendelet szerinti regisztrálás alól (pl. a IV. mellékletben felsorolt anyagok).

¹⁴ Ez a megközelítés nem alkalmazható számos specifikus anyagra, mint pl. ásványokra (további információk a 7.5. alpontban találhatóak).

A több összetevőből álló anyag helyes azonosítása érdekében a szándékosan hozzáadott anyagokat, mint pl. a pH-szabályozókat vagy színezékeket az anyagmérlegben figyelmen kívül kell hagyni.

Az 1%-nál nagyobb koncentrációban jelen lévő szennyeződések névvel és minden rendelkezésre álló azonosítóval együtt kell megadni. Az osztályozás és/vagy PBT-értékelés szempontjából releváns szennyeződések mindig ugyanazon azonosítók szerint kell meghatározni, függetlenül azok koncentrációjától.

Példa								
Fő összetevő	Koncentráció felső határa (%)	Jellemző koncentráció (%)	Koncentráció alsó határa (%)	Szennyező	Koncentráció felső határa (%)	Jellemző koncentráció (%)	Koncentráció alsó határa (%)	Az anyag azonosító adatai
anilin	90	75	65	fenantrén	5	4	1	Anilin és naftalin reakció tömege
naftalin	35	20	10					

Jelen útmutató szabályai értelmében ez egy több összetevőből álló anyag. Habár az egy összetevő koncentrációtartománya meghaladja a 80%-ot, ez csak esetenként fordul elő, és a jellemző összetétel 80% alatt van.

Ha egy több összetevőből álló anyag fő összetevője 10 tömegszázaléknál kisebb vagy 80 tömegszázaléknál nagyobb vagy azzal egyenlő arányban van jelen, az eltérést indokolni kell. Az indokolt eltérés egyik lehetséges példája a következő:

- Az összetevő csak alkalmanként van jelen 10 tömegszázaléknál kisebb vagy 80 tömegszázaléknál nagyobb vagy azzal egyenlő arányban.

Például, ha egy anyag két összetevőt tartalmaz, az egyiket 85%-ban, a másikat 10%-ban, a többi szennyeződés. Mindkét összetevő hozzájárul az anyag kívánt technikai hatásához, és szükséges ahhoz. Ebben az esetben annak ellenére, hogy az egyik összetevő 80%-ot meghaladó koncentrációban van jelen, az anyag két összetevőből álló anyagként írható le.

Analitikai információk

A több összetevőből álló anyag összetevőinek és szennyeződéseinek azonosításához elegendő minőségi adatot kell szolgáltatni. Különböző spektroszkópiai módszerek is megfelelőek lehetnek az anyag azonosításának megerősítésére, például az ultraibolya és a látható abszorpciós spektroszkópia (UV/Vis), az infravörös spektroszkópia (IR), a nukleáris mágneses magrezonancia spektroszkópia (NMR) és a tömegspektroszkópia (MS). A szerves anyagok vagy a kristályszerkezettel kimutatható/mérhető szerves és/vagy fémszerves anyagok esetében a legtöbb esetben előnyösebb a röntgendiffrakció (XRD) használata.

Az anyag összetételének megerősítéséhez detektálási technikával párosított mennyiségi módszereket, például kromatográfiai technikákat – gázkromatográfiát (GC) vagy nagy teljesítményű folyadékkromatográfiát (HPLC) – kell alkalmazni. Szerves anyagok esetében megfelelőbb lehet a röntgendiffrakció (XRD), a röntgen fluoreszcenciás spektroszkópia (XRF), az atomabszorpciós spektrometria (AAS), az induktív csatolt plazma optikai emissziós spektrometria (ICP-OES) vagy az induktív csatolt plazma tömegspektrometria (ICP-MS). Adott esetben egyéb elfogadott összetevő-eltávolítási technikákat is alkalmazni kell.

Az analitikai módszerek leírásának tartalmaznia kell az alkalmazott kísérleti protokollokat és a jelentett eredmények értelmezését.

Az analitikai módszerek folyamatos fejlődésen és fejlesztésen mennek keresztül. Ezért a regisztráló felelőssége, hogy megfelelő elemzési adatokat szolgáltatson.

A több összetevőből álló anyag egyes összetevőinek regisztrálása

Az anyag azonosító adatainak a regisztrálás céljából történő rögzítése során általában a több összetevőből álló anyagokra vonatkozó megközelítést kell követni (azaz a több összetevőből álló anyagok regisztrálásának módját). Ettől a megközelítéstől való eltérésként az egyedi összetevők is regisztrálhatók indokolt esetben. Az egységesen előírt azonosítástól (és esetleg regisztrálástól) való eltérés lehetősége az anyagok egyedi összetevői alapján történő azonosítása céljából a következő esetekben áll fenn:

- ha nem csökkennek a tájékoztatási követelmények;
- elegendő meglévő adat áll rendelkezésre az egyedi összetevők regisztrálásának módjához, azaz ez a módszer alapesetben nem vezethet kiegészítő (gerinces állatokon végzett) vizsgálatokhoz a szabványos megközelítéshez viszonyítva;
- az egyes összetevők regisztrálása sokkal hatékonyabb helyzetet eredményez (azaz elkerülhető általa számos, ugyanolyan összetevőkből álló anyag regisztrálása);
- az egyes reakciótömegek összetételére vonatkozó információk rendelkezésre állnak.

A rugalmasság lehetőségével nem szabad visszaélni pusztán az adatkövetelmények elkerülése érdekében. Évi 1200 tonna (t/év) mennyiségű több összetevőből álló anyag „(C+D)” esetén például, ahol az összetétel 50% C és 50% D, ez a megközelítés két regisztráláshoz vezetne a következő információkkal:

„C” anyag

- 600 tonna
- Az 1000 tonnát meghaladó mennyiségre vonatkozó adat követelmények teljesítendő (X. melléklet)

„D” anyag

- 600 tonna
- Az 1000 tonnát meghaladó mennyiségre vonatkozó adat követelmények teljesítendő (X. melléklet)

Ezt a módszert kell összevonni az egy jogi személyhez kapcsolódó ugyanazon anyagból használt mennyiség REACH-rendelet szerinti összesítésével. A javaslat célja a következő adatkövetelmények elérése:

- az összes egyéni összetevő mennyiségének összegzése (az anyagban lévő mennyiségek alapján)
- az adott összetevőt tartalmazó anyag legmagasabb mennyiségére hivatkozni

A tájékoztatási követelményeket a legnagyobb eredmény alapján kell meghatározni. A mennyiség bejelentéséhez az egyes összetevők mennyiségeinek összegét kell figyelembe venni. Az alábbiakban egyszerűsített példák találhatók e megközelítés gyakorlati alkalmazásának szemléltetésére:

1. sz. példa

A „C+D+E” több összetevőből álló anyag egy jogi személy gyártásának eredménye, amelyből adódóan különböző anyagok keletkeznek:

- 1. anyag: 50% C és 25% D és 25% E, 1100 t/év
- 2. anyag 50% C és 50% D, 500 t/év

Ebben az esetben is a reakciótermékből kell kiindulni: a két anyagot több összetevőből álló anyagként kell regisztrálni. Amennyiben az egyes összetevők külön regisztrálásának

megközelítés kerül alkalmazásra,¹⁵ akkor a következő történik:

A „D” anyag bejelentése a következőt jelenti:

- Mennyiség: $(25\% * 1100) + (50\% * 500) = 525$ t/év

A tájékoztatási követelmények meghatározásakor a legszigorúbb követelményt kell alapul venni. Ebben az esetben: >1000 t/év, mivel a több összetevőből álló „C+D+E” anyag összes mennyisége meghaladja az évi 1000 tonnát.

Megjegyzés: ebben a példában a „C” és „E” anyagokat is ennek megfelelően regisztrálni kell.

példa

A „G+H+I” több összetevőből álló anyag egy jogi személy gyártásának eredménye, amelyből adódóan különböző anyagok keletkeznek:

- 3. anyag 65% G és 15% H és 20% I, 90 t/év
- 4. anyag 60% G és 40% H, 90 t/év

„G” anyag bejelentése:

- Mennyiség: $(65\% * 90) + (60\% * 90) = 112,5$ t/év

A tájékoztatási követelmények meghatározásakor a legszigorúbb követelményt kell alapul venni. Ebben az esetben: >100 t/év, mivel a „G” összetevő teljes mennyisége meghaladja az évi 100 tonnát.

Megjegyzés: ebben a példában a „H” és „I” anyagokat is ennek megfelelően regisztrálni kell.

Az említett tájékoztatási követelmények megállapításán kívül egy másik megfontolás a (gerinces állatokon) elvégzendő új vizsgálatok száma. A stratégiáról való döntés meghozatala előtt a potenciális regisztrálóknak figyelembe kell venniük, hogy elegendő már létező (gerinceseken végzett) vizsgálat áll-e rendelkezésre, és hogy a javasolt rugalmasság kevesebb vagy több új (gerinces állatokon végzett) vizsgálatot fog vezetni. Azt a stratégiát kell választani, amely elkerüli az újabb (gerinces állatokon végzett) vizsgálatokat.

Kétségek felmerülése esetén az általános út az anyag azonosító adatainak a regisztrálás céljából történő rögzítéséhez a gyártott anyag azonosítása.

4.2.3. Meghatározott kémiai összetételű anyagok és egyéb fő azonosítók

Néhány, a kémiai összetételével azonosítható anyag (pl. a szeretlen ásványok) esetén további pontosításra van szükség saját azonosításának biztosítása érdekében. Ezek az anyagok lehetnek egy összetevőből álló, illetve több összetevőből álló anyagok, azonban az előző alpontokban bemutatott anyagazonosítási paramétereken kívül egyéb fő azonosítók is szükségesek az anyag azonosításának egyértelmű rögzítéséhez.

Példák

Néhány egyedi szerkezetű, nemfémes (természetes vagy mesterséges) ásványi anyag esetében is szükség van a morfológiai és a kristálytani összetételre az anyag egyértelmű azonosítása érdekében. Erre példa a kaolin (CAS 1332-58-7), amely kaolinitből, kálium-alumínium-szilikátból, földpátból és kvarcból tevődik össze.

¹⁵ A példa a tájékoztatási követelmények megállapításának és a mennyiségek bejelentésének illusztrálására szolgál. Nem tér ki arra, hogy indokolt-e ez a megközelítés ebben az esetben.

A „nanoformákban” lévő anyagokra vonatkozó konkrét REACH-kötelezettségeknek való megfelelésre vonatkozó útmutatást az *Appendix for nanoforms applicable to the Guidance on Registration and Substance Identification*¹⁶(A regisztrálásról és az anyagazonosításról szóló útmutatóhoz tartozó nanoformákra vonatkozó függelék) tartalmazza. A dokumentum kifejezetten a nanoformák azonosításával és jellemzésével kapcsolatos kérdésekre terjed ki.

Megnevezési konvenciók

Elméletileg ugyanazok a megnevezési szabályok követendők az egy összetevőből álló anyagok (lásd a 4.2.1. alpontot) és a több összetevőből álló anyagok (lásd a 4.2.2. alpontot) esetében.

A szervesetlen ásványi anyagok esetében az összetevők tekintetében használhatók az ásványtani nevek. Például az apatit egy több összetevőből álló anyag, összetevői foszfát ásványok, amelyeket általában hidroxilapatitnak, fluorapatitnak és klórapatitnak neveznek, a kristályban lévő OH⁻, F⁻, illetve Cl⁻ ionok magas koncentrációjára utalva. A három leggyakoribb összetevőből álló keverék képlete: Ca₅(PO₄)₃(OH, F, Cl). Egy másik példa az aragonit, amely a kalcium-karbonát egyik kristálmódosulata.

Azonosító adatok

Ezen anyagok azonosítása és megnevezése az egy összetevőből álló anyagokra (lásd a 4.2.1. alpontot), illetve a több összetevőből álló anyagokra (lásd a 4.2.2. alpontot) vonatkozó szabályok szerint történik. Egyéb specifikus fő azonosítási paraméterek hozzáadása az adott anyagtól függ. Az egyéb fő azonosítók lehetnek például a spektrális adatokkal megadott elemi összetétel, a röntgendiffrakció (XRD) révén meghatározott kristályszerkezet, infravörös abszorpciós csúcsok, expanziós index, kationcserélő kapacitás, illetve más fizikai és kémiai tulajdonságok.

Ásványok esetében fontos az elemi összetétel eredményeinek a spektrális adatokkal történő kombinálása az ásványtani összetétel és a kristályszerkezet meghatározása érdekében. Ebben az esetben ezt alátámasztják a jellemző fizikai-kémiai tulajdonságok, úgymint a (röntgendiffrakció révén meghatározott) kristályszerkezet, az alak, a keménység, a duzzadóképeség, a sűrűség és/vagy a fajlagos felület.

Egyes ásványok tekintetében megadhatók további specifikus, fő azonosítók példái is, mivel az ásványoknak jellemző fizikai-kémiai tulajdonságai vannak, amelyek lehetővé teszik azonosításuk kiegészítését, pl. a talkum nagyon kis keménysége, a bentonit duzzadóképesége, a kovaföld alakjai, a barit nagyon nagy sűrűsége és a fajlagos felület (nitrogén adszorpció alapján).

Analitikai információk

A fő kritérium az, hogy minden szükséges információt meg kell adni az anyag szerkezetének megerősítése érdekében. Ugyanazon analitikai adatokat kell megadni az egy összetevőből álló anyagok (lásd a 4.2.1. alpontot) és a több összetevőből álló anyagok (lásd a 4.2.2. alpontot) esetén.

4.3. UVCB anyagok

Az ismeretlen szerkezetű vagy változó összetételű, összetett reakcióban keletkezett vagy biológiai eredetű anyagokat (**U**nknown or **V**ariable composition, **C**omplex reaction products

¹⁶ A regisztrálásról, valamint az anyagazonosításról szóló útmutatóhoz kapcsolódó függelék a nanoanyagokról itt található: <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

or **B**iological materials^{17, 18, 19}), más néven UVCB anyagokat kémiai összetételük révén nem lehet kielégítő módon azonosítani, mivel:

- Az összetevők száma viszonylag nagy, és/vagy
- Az összetétel jelentős mértékben ismeretlen, és/vagy
- Az összetétel változékonysága viszonylag nagy és kis mértékben előrejelezhető.

Következésképpen az UVCB anyagok azonosítása tekintetében a kémiai összetételükkel kapcsolatban ismerteken kívül másfajta adatokra is szükség van.

Az 5. táblázatban (táblázat5) látható, hogy az UVCB anyagok különböző fajtáira vonatkozó fő azonosítók az anyag forrásához vagy az alkalmazott folyamathoz kapcsolódnak; vagy az „egyéb fő azonosítók” (pl. a „kromatográfiai vagy egyéb ujjlenyomatok”) egy csoportjába tartoznak. Az itt (táblázat5) megadott azonosítók száma és fajtái a típusok változékonyságát mutatják be, nem tekintendőek átfogó összefoglalásnak. Abban az esetben, ha pl. egy komplex reakciótermék vagy egy biológiai eredetű anyag kémiai összetétele ismert, akkor az anyagot egy vagy több összetevőből álló anyagként kell azonosítani. Egy adott anyag UVCB-ként történő azonosítása azzal jár, hogy a forrásban vagy a folyamatban bekövetkező bármely lényeges változás valószínűleg egy másik anyagot eredményez, amelyet újra regisztrálni kell. Amennyiben egy reakciókeverék „több összetevőből álló anyagként” kerül azonosításra, akkor az anyag lehet eltérő forrású, és/vagy készülhet eltérő folyamattal, amíg a végleges anyag összetétele a meghatározott tartományon belül marad. Ezért ilyen esetekben nincs szükség új regisztrálásra.

Az UVCB anyagokkal kapcsolatos általános útmutató a 4.3.1. alpontban, míg a változó szénlánc-hosszúságú anyagokkal, az olajból vagy olajhoz hasonló forrásokból származó anyagokkal és az enzimekkel, mint az UVCB anyagok különböző fajtáival kapcsolatos, specifikus útmutató a 4.3.2. alpontban található.

4.3.1. Az UVCB anyagokkal kapcsolatos általános útmutató

Az útmutató jelen alpontja általános útmutatást nyújt arról, hogyan használhatók az anyag azonosítása érdekében bizonyos fő azonosítók a REACH-rendelet VI. mellékletében (2. szakasz) meghatározott anyagazonosítási paraméterek mellett.

A kémiai összetételre vonatkozó adatok

Az UVCB anyagok vagy nem határozhatók meg egyértelműen az összetevők IUPAC-nevei segítségével, mivel nem minden összetevő azonosítható; vagy specifikus információk hiányában általánosan határozhatók meg, mivel a pontos összetétel változó. Az összetevők és a szennyeződések közötti különbségtétel hiányából eredően a „fő összetevők” és a „szennyeződések” meghatározásai nem tekintendőek relevánsnak az UVCB anyagok tekintetében.

Mindazonáltal meg kell adni minden ismert, a kémiai összetételre és az összetevőkre vonatkozó adatot. Az összetétel leírása gyakran megadható általánosabb módon, például „egyenes láncú zsírsavak C8-C16” vagy „alkohol etoxilátok C10-C14 alkohol és 4-10 etoxiliát egységekkel”. Továbbá a kémiai összetétellel kapcsolatos adatok megadhatók a jól ismert

¹⁷ Rasmussen K., Pettauer D., Vollmer G. és társai, 1999., Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. Tox Env Chem, 69. kötet, 403-416. oldal.

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. UVCB Substances.

hivatkozás-minták vagy szabványok alapján; sok esetben ezek mellett indexek és meglévő kódok is alkalmazhatók. Az összetétellel kapcsolatos egyéb általános információ lehet az úgynevezett „ujjlenyomat”, amely pl. egy olyan kromatográfiás vagy spektrális kép, amely jellemző csúcs-kombinációt tartalmaz.

UVCB anyag esetén a $\geq 10\%$ koncentrációban jelen lévő összes összetevőt és a 10%-nál kisebb koncentrációban jelen lévő összes többi ismert összetevőt az angol nyelvű IUPAC-névvel, a jellemző koncentrációkkal és koncentrációtartományokkal kell megadni.

Ezenkívül, ha rendelkezésre áll, minden egyes összetevőre vonatkozóan meg kell adnia egy numerikus azonosítót (CAS-szám és/vagy EK- vagy listaszám).

Az egyedileg nem azonosítható összetevőket kémiai jellegük alapján csoportokban kell leírni. Ebben az esetben minden csoport esetében meg kell adni legalább a kémiai nevet, a jellemző koncentrációt és koncentrációtartományt. Ezen túlmenően, amennyiben rendelkezésre áll, molekuláris és szerkezeti információ is meg kell adnia.

Az anyag osztályba sorolás és/vagy PBT-értékelés²⁰ tekintetében releváns összetevőit koncentrációjuk mértékétől függetlenül minden esetben ugyanazokkal az azonosítókkal kell meghatározni.

Az osztályozás szempontjából nem releváns ismeretlen összetevőket lehetőség szerint kémiai jellegük általános leírása révén kell meghatározni. Az adalékanyagokat a jól meghatározott anyagok esetében leírtakhoz hasonló módon, teljes körűen meg kell határozni.

A fő azonosítási paraméterek – név, forrás és folyamat

Mivel a kémiai összetétel önmagában nem elegendő az anyagok azonosítására, az anyagokat a nevükkel, az eredetükkel vagy forrásukkal, valamint a gyártási folyamat leírásával kell azonosítani. Az anyag más tulajdonságai szintén fontos azonosítók lehetnek, vagy mint releváns általános azonosító (pl. a forráspont), vagy mint az anyag adott csoportjára jellemző nagyon fontos tulajdonság (pl. az enzimek esetében a katalitikus aktivitás).

1. Megnevezési konvenciók

Az UVCB anyagok neve általában tartalmazza a forrást és a folyamatot, az általános formátum: először a forrás, azt követően a folyamat (ok).

- A biológiai eredetű anyag a fajok nevével kerül azonosításra.
- A nem biológiai eredetű anyag a kiinduló anyaggal kerül azonosításra.
- A folyamatok új molekulák szintézise esetén a kémiai reakció típusával, vagy a finomítás lépéseinek megnevezésével kerülnek megadásra, pl. extrakció, frakcionálás, töményítés vagy maradékként.

Példák	
EK-szám	EK-név
296-358-2	Levendula, Lavandula hybrida, extraktum, acetilezett
307-507-9	Levendula, Lavandula latifolia, extraktum, szulfurált, palládium só

²⁰A PBT-értékelésre vonatkozó további információk és a releváns kritériumok megtalálhatók az Útmutató a tájékoztatási követelményekhez és a kémiai biztonsági értékeléshez c. dokumentum R.11.: PBT-értékelés című fejezetében.

Reakciótermékek esetében ettől eltérő formátum szerepel az EK-jegyzékben, például

- EINECS: A fő kiinduló anyag, a többi kiinduló anyag reakcióterméke(i)
- ELINCS A kiinduló anyag(ok) reakcióterméke(i)

Példák	
EK-szám	EK-név
232-341-8	Salétromos sav, reakciótermékek 4-metil-1,3-benzol-diamin hidrokloriddal
263-151-3	Zsírsavak, kókusz, reakciótermékek dietiléntriamminnal
400-160-5	A következők reakciótermékei: tallolaj zsírsavak, dietanolamin és bórsav
428-190-4	A következők reakciótermékei: 2,4-diamino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-il)etil]-1,3,5-triazin és cianursav

A jelen iránymutatást tartalmazó dokumentációban a reakciótermék(ek) nevének általános formátuma: „[A kiinduló anyagok nevének] reakcióterméke(i)”. A nevet főszabály szerint angol nyelven kell megadni, az IUPAC-nómenklatúra szabályai szerint. Ezt ki lehet egészíteni más, nemzetközileg elfogadott megjelöléssel. Ajánlott a „reakció” szót a reakció adott típusának általános megnevezésével helyettesíteni, pl. észterezés vagy sóképzés stb. (az iránymutatást lásd a négy specifikus UVCB-alcsoportnál az alábbiakban).

2. Forrás

A forrás két csoportra osztható:

2.1. Biológiai eredetű források

A biológiai eredetű anyagokat a nemzetség, a faj és a család megnevezésével kell megadni, például *Pinus cembra*, Pinaceae jelentése *Pinus* (nemzetség), *cembra* (faj), Pinaceae (család), valamint adott esetben a tenyészet és a genotípus segítségével. Szükség esetén meg kell adni az anyag extrahálásához használt szövetet vagy szerv-részt, például csontvelő, hasnyálmirigy; vagy szár, mag vagy gyökér.

Példák	
EK-szám	EK-név
283-294-5	<p>Saccharomyces cerevisiae, extraktum</p> <p>EK-leírás</p> <p>Az extraktumok és az azokból fizikai módosítással nyert származékok, úgymint a tinktúrák, szilárd fázisok, az anyagon kívül egyebet nem tartalmazó minták, illóolajok, oleorezinek, terpének, terpénmentes frakciók, párlatok, maradékok, stb., amelyek a</p>

	Saccharomyces cerevisiae, Saccharomycelaceae nevű anyagból származnak.
296-350-9	Arnica mexicana, extraktum EK-leírás Az extraktumok és az azokból fizikai módosítással nyert származékok, úgymint a tinktúrák, szilárd fázisok, az anyagon kívül egyebet nem tartalmazó minták, illóolajok, oleorezinek, terpének, terpénmentes frakciók, párlatok, maradékok, stb., amelyek az Amica Mexicana, Compositae nevű anyagból származnak.

2.2. Kémiai vagy ásványi források

Kémiai reakciók reakciótermékei esetében a kiinduló anyagokat IUPAC-nevükkel kell megadni angol nyelven. Az ásványi alapanyagokat általános kifejezésekkel kell megadni, pl. foszfát ércek, bauxit, porcelánföld, földgáz, szén, tőzeg.

3. Folyamat

A folyamatokat a kémiai reakció típusával kell megadni, amennyiben új molekulák szintézisét foglalják magukban; vagy a finomítási lépések típusával, pl. extrakció, frakcionálás, töményítés; vagy valamilyen finomítási folyamat maradékként.

Néhány anyag, pl. kémiai származékok tekintetében a folyamatot a finomítás és a szintézis kombinációjaként kell megadni.

3.1 Szintézis

A kiinduló anyagok között lejátszódó bizonyos kémiai vagy biokémiai reakció eredményeképpen jön létre az anyag. Például Grignard-reakció, szulfonálás, enzimatisz hasítás proteázzal vagy lipázzal stb. Számos származtatási reakció is ebbe a típusba tartozik.

Az olyan újonnan szintetizált anyagok tekintetében, amelyeknél nem lehet a kémiai összetételt megadni, a kiinduló anyagok jelentik a fő azonosítót a reakció specifikációjával, azaz a kémiai reakció típusával együtt. A kémiai reakció típusa jelzi, hogy milyen molekulák jelenléte várható az anyagban. A végső kémiai reakciónak különféle típusai vannak: hidrolízis, észterezés, alkilezés, klórozás stb. Mivel ez csak általános információt nyújt a lehetséges előállított anyagokról, sok esetben a kromatográfiás ujjlenyomat is szükséges az anyag teljes körű jellemzéséhez és azonosításához.

Példák

EK-számok	EK-név
294-801-4	Lenolaj, epoxidált, reakciótermékek tetraetilén-pentaminnal
401-530-9	(2-hidroxi-4-(3-propenoxi)-benzofenon és tri-etoxiszilán), valamint (kavasav és metil-tri-metoxiszilán hidrolízis termékének) reakcióterméke

3.2 Finomítás

A természetes vagy ásványi eredetű anyagok sokféleképpen finomíthatók, amelynek során az összetevők kémiai azonossága nem változik, azonban az összetevők koncentrációja igen, pl. a növényi szövetek hideg feldolgozását alkoholos extrakció követi.

A finomítás további meghatározására a folyamatok, például extrakció során kerülhet sor. Az anyagazonosítás a folyamat típusától függ:

- A fizikai módszerekkel, pl. finomítással vagy frakcionálással származtatott anyagok tekintetében meg kell határozni a cut-off tartományt és a frakció paramétereit (pl. molekula méret, láncosság, forráspont, illékonysági tartomány, stb.);
- A töményítéssel származtatott anyagok, pl. kohászati folyamatok termékei, centrifugált csapadékok, szűrési maradékok stb. tekintetében meg kell határozni a töményítési lépést és a keletkező anyagnak a kiinduló anyaghoz hasonlított általános összetételét;

Példák

EK-szám	EK-név
408-250-6	Szerves volframvegyület koncentrátum (volfram-hexaklorid reakcióterméke 2-metilpropán-2-ollal, nonilfenollal és pentán-2,4-dionnal)

- Egy adott reakció maradékai, például a salak, a kátrány és a nehéz párlatok esetében a folyamatot az eredményül kapott anyag általános összetételével együtt kell megadni;

Példák

EK-szám	EK-név
283-659-9	Ón, olvadási maradék EK-leírás Az ón és ötvözeteinek felhasználása és gyártása során keletkező anyag, elsődleges és másodlagos forrásokból nyerik, és újrahasznosított növényi intermediereket tartalmaz. Elsődlegesen ónvegyületekből áll, és tartalmazhat más színesfém maradékot és azok vegyületeit.
293-693-6	Szójaliszt, fehérje extrahálási Maradék EK-leírás Melléktermék, elsődlegesen szénhidrátokat tartalmaz, zsírmentesített szójaliszt etanolos extrakciójakor keletkezik.

- Extraktumok esetén meg kell adni az extrakció módszerét, az extrakcióhoz felhasznált oldószert és az egyéb releváns körülményeket, pl. a hőmérsékletet/hőmérséklet-tartományt.
- Többlépcsős feldolgozás esetén a forrásadatokon kívül meg kell határozni a folyamat minden egyes lépését (általánosságban). Ez a többlépcsős feldolgozás különösen fontos a kémiai származékok esetében.

Példák:

- A növényt először extrahálják, az extraktumot desztillálják és a növényi kivonat desztillált frakcióját használják fel kémiai származék készítésére. Az eredményül kapott anyag tovább tisztítható. A tisztított termék esetenként lehet jól

meghatározott kémiai összetételű, és az anyagot nem szükséges UVCB anyagként azonosítani. Abban az esetben, ha a terméket mégis UVCB anyagnak kell tekinteni, akkor a többlépcsős feldolgozást „egy növényi extraktum desztillált frakciójának tisztított kémiai származékaként” lehet megadni.

- Amennyiben egy extraktum további feldolgozása csak fizikai származtatást foglal magában, az összetétel megváltozik, azonban új molekulák szándékos szintézise nélkül. Mindazonáltal az összetétel megváltozása új anyagot eredményez, pl. egy növényi extraktum párlatát vagy csapadékát.
- Olajtermékek gyártása esetén gyakran alkalmazzák együtt a kémiai származék-készítést és a frakcionálást. Például az olaj desztillálása után végzett krakkolás a kiinduló anyag egy frakcióját hozza létre, valamint új molekulákat is. Ezért ebben az esetben mindkét folyamatot meg kell adni, vagy a desztillátumot kell a krakkolás kiinduló anyagaként meghatározni. Ez különösen az olajszármazékokra vonatkozik, amelyek gyakran folyamatok kombinációjának eredményei. Az ásványolajok azonosítására azonban egy külön specifikus rendszer alkalmazható (4.3.2.2. alpont).

Mivel egy extraktum kémiai származéka nem ugyanazokat az összetevőket tartalmazza, mint az eredeti extraktum, ezért azt attól eltérő anyagnak kell tekinteni. Ennek a szabálynak az lehet a következménye, hogy a név szerinti azonosítás és a leírás eltér a korábbi EINECS-névtől és -leírástól. Az EINECS-jegyzék összeállításakor a különböző folyamatokból származó extraktumok, a különböző oldószerek, sőt a fizikai vagy kémiai származékok is gyakran egyetlen bejegyzés alatt szerepeltek. A REACH-rendelet szerint azonban ezeket az anyagokat különálló anyagként kell regisztrálni.

4. Egyéb anyagazonosítási paraméterek

A kémiai néven, a forráson és a folyamat meghatározásán kívül az UVCB anyagokról minden egyéb fontos adatot meg kell adni a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakasza szerint.

Különösen az UVCB anyagok specifikus fajtái esetében lehetnek más azonosítási paraméterek fontosak. További egyéb azonosítók lehetnek az alábbiak:

- A kémiai összetétel általános leírása;
- Kromatográfiás ujjlenyomat, illetve más típusú ujjlenyomatok;
- Referenciaanyag (pl. ISO);
- Fizikai-kémiai paraméterek (pl. forráspont);
- Szín index száma;
- AISE-szám.

Az alábbiakban specifikus iránymutatás található annak szabályairól és kritériumairól, hogyan kell a megnevezésre, a forrásra és a folyamatra vonatkozó információkat az UVCB anyagok azonosítására alkalmazni a különböző típusú eredetek és eljárások tekintetében. A következő fejezetekben az UVCB anyagok négy altípusa kerül bemutatásra a biológiai eredetű vagy kémiai/ásványi forrás és a folyamatok (szintézis vagy finomítás) kombinációjaként.

Az UVCB anyagok 1. altípusa, ahol a forrás biológiai eredetű, a folyamat pedig szintézis

A biológiai jellegű anyagok (bio)kémiai feldolgozás során módosíthatók olyan összetevők előállítása céljából, amelyek a kiinduló anyagban nem voltak jelen, pl. növényi extraktumok kémiai származékai vagy az extraktumok enzimatisz kezelésének termékei. Például a fehérjéket lehet proteázzal hidrolizálni oligopeptidek előállítása céljából, vagy a fából származó cellulózt lehet karboxilezni karboxi-metil-cellulóz (CMC) gyártása céljából.

A fermentálás termékei is ebbe az UVCB-altípusba tartozhatnak. Például a vinasz a cukor fermentálásának a terméke, amely a cukorhoz képest számos különféle összetevőt tartalmaz.

Ha a fermentálás termékei további tisztításra kerülnek, az anyagok adott esetben teljes körűen azonosíthatóvá válnak a kémiai összetételük alapján, és ezt követően azokat már nem kell UVCB anyagként azonosítani.

Az enzimek az anyagok egy speciális csoportját alkotják, amelyek biológiai alapanyagból extrakcióval és további finomítással állíthatók elő. Bár a forrást és a folyamatot részletesen meg lehetne adni, ez nem hordoz az enzimre nézve specifikus információt. Ezen anyagok tekintetében egy specifikus besorolási, megnevezési és azonosítási rendszert kell alkalmazni (lásd a 4.3.2.3. alpontot).

Az anyagazonosítás tekintetében a folyamat utolsó lépését és/vagy a folyamat egyéb, az anyag azonossága szempontjából releváns lépését kell megadni.

A kémiai folyamat leírásának egy a folyamat típusát (észterezés, lúgos hidrolízis, alkilezés, klórozás, szubsztitúció, stb.), valamint a folyamat releváns körülményeit tartalmazó általános leírásnak kell lennie.

A biokémiai folyamat leírása egy a katalizált reakciót, valamint a reakciót katalizáló enzim nevét magában foglaló általános leírás lehet.

A fermentálással vagy (szövet)tenyésztéssel előállított anyagok esetében meg kell adni a fermentáló fajt, a fermentálás típusát, valamint a fermentálás általános feltételeit (szakaszos vagy folyamatos, aerob, anaerob, anoxikus, hőmérséklet, pH stb.), illetve a folyamat minden további, a fermentáció termékének elkülönítéséhez alkalmazott lépését, pl. centrifugálás, kicsapás, extrakció stb. Ezen anyagok további finomítása esetén keletkezhet frakció, koncentrátum vagy maradék. Ezek a további feldolgozásra kerülő anyagok a folyamat további lépéseinek kiegészítő specifikációjával kerülnek azonosításra.

Az UVCB anyagok 2. altípusa, ahol a forrás kémiai vagy ásványi, a folyamat pedig szintézis

Azokat a kémiai vagy ásványi forrású UVCB anyagokat, amelyek egy új molekulákat szintetizáló folyamatból származnak, „reakciótermékeknek” nevezzük. A kémiai reakciótermékek lehetnek például észterezés, alkilezés vagy klórozás termékei. Az izolált enzimekkel végzett biokémiai reakciók a kémiai reakciók speciális fajtái. Teljes mikroorganizmusokat felhasználó összetett biokémiai szintézissor alkalmazása esetén azonban jobb a keletkezett anyagot fermentációs terméknek tekinteni, és azt a fermentálási folyamattal és a fermentáló fajokkal azonosítani, mint a kiinduló anyagokkal (lásd UVCB anyag 4. altípus).

Nem minden reakciótermék azonosítandó automatikusan UVCB anyagként. Abban az esetben, ha egy reakciótermék meghatározásához elegendő a kémiai összetétel (bizonyos mértékű változékonyság figyelembe vételével), akkor annak a több összetevőből álló anyagként (lásd a 4.2.2. alpontot) történő azonosítását előnyben kell részesíteni. Az anyagot csak abban az esetben kell UVCB anyagként („reakciótermékként”) azonosítani, ha a reakciótermék összetétele nem elegendő mértékben ismert vagy kis mértékben előrejelezhető. A reakciótermék azonosításának alapját a reakció kiinduló anyagai, valamint az a (bio)kémiai folyamat képezi, amelynek során az anyag létrejön.

Példák		
EK-szám	EINECS-név	CAS-szám
294-006-2	Nonán-dikarbonsav, reakciótermékek 2-amino-2-metil-1-propanollal	91672-02-5
294-148-5	Formaldehid, reakciótermékek dietilén-glikollal és fenollal	91673-32-4

A reakciótermékek egyik fő azonosítója a gyártási folyamat leírása. Az anyag azonosítása tekintetében a folyamat utolsó vagy legfontosabb lépését kell megadni. A kémiai folyamatot a folyamat típusához kapcsolódó általános leírással (pl. észterezés, lúgos hidrolízis, alkilezés, klórozás, szubsztitúció stb.) és a folyamat releváns körülményeivel kell megadni. A biokémiai folyamatot a reakció típusával és a reakciót katalizáló enzim nevével kell leírni.

Az UVCB anyagok 3. altípusa, ahol a forrás biológiai eredetű, a folyamat pedig finomítás

Az olyan finomítási folyamat során keletkező, biológiai eredetű UVCB anyagok, amelyek során nem keletkeznek szándékosan új molekulák, lehetnek pl. extraktumok, extraktumok frakciói, extraktumok koncentrátumai, tisztított extraktumok vagy biológiai eredetű anyagok feldolgozási maradékai.

Mihelyt az extraktumot további feldolgozásnak vetik alá, az anyag többé már nem azonos az extraktummal, hanem egy másik anyagnak számít, amely az UVCB anyagok egy másik altípusába tartozik, pl. az extraktum frakciója vagy maradéka. Ezeket az anyagokat a kiegészítő (további) feldolgozás paramétereivel kell meghatározni. Amennyiben az extraktum olyan kémiai vagy biokémiai reakciók során módosul, amelyek során új molekulák (származékok) keletkeznek, az anyag azonosítása az UVCB anyagok 2. altípusára vagy a jól meghatározott anyagokra (4.2. alpont) vonatkozó útmutató alapján történik.

A további feldolgozásnak alávetett extraktumok ezen megkülönböztetése azzal a következménnyel járhat, hogy az anyag új neve és leírása eltér az EINECS-jegyzékben szereplőktől. A jegyzék összeállításakor nem került sor ilyen megkülönböztetésre, ezért az extraktumok különféle oldószerekkel és továbbfeldolgozási lépésekkel kapott összes típusa egyetlen bejegyzés alatt szerepelhet.

Az UVCB anyagok ezen altípusának elsődleges fő azonosítója annak az élőlénynek a családja, nemzetsége és faja, amelyből az anyag származik. Adott esetben meg kell adni az anyag extrakciójához felhasznált szövetet vagy szervet, pl. csontvelő, hasnyálmirigy; vagy szár, magvak vagy gyökerek. Mikrobiológiai eredetű anyagok tekintetében meg kell határozni a törzset és a faj genotípusát.

Amennyiben az UVCB anyag egy másik fajból származik, akkor másik anyagnak kell tekinteni, még abban az esetben is, ha a kémiai összetétel hasonló.

Példák	
EK-szám	EINECS-név
290-977-1	Oxidált bürzsönyfa (<i>Haematoxylon campechianum</i>) extraktum EK-leírás Ezt az anyagot a színindexben a C.I. 75290 oxidált összetételű színindex azonosítja.
282-014-9	Hasnyálmirigy extraktumok, fehérjementesített

A második fő azonosító az anyag feldolgozása, pl. extrakció, frakcionálás, tisztítás vagy töményítés, illetve a maradék összetételét befolyásoló folyamat. Így az eltérő folyamatokkal, pl. különböző oldószerekkel vagy különféle tisztítási lépésekkel finomított extraktumok eltérő anyagokat eredményeznek.

Minél több lépésből áll a finomítás, annál inkább lehetővé válik az anyag kémiai összetétele révén történő meghatározása. Ebben az esetben az eltérő forrásfajok vagy a folyamat eltérő módosításai nem vezetnek automatikusan különböző anyaghoz.

A biológiai eredetű anyagok egyik fő azonosítási paramétere a releváns folyamatok leírása. Az extraktumok esetében az extrakciós folyamatot olyan részletességgel kell leírni, amely az anyag azonosítása tekintetében releváns. Legalább a felhasznált oldószert meg kell határozni.

Abban az esetben, ha az anyag gyártása során további lépések kerülnek alkalmazásra, úgymint a frakcionálás vagy a töményítés, meg kell adni a folyamat releváns lépéseinek kombinációját, pl. az extrakció és a frakcionálás kombinációját a cut-off tartománnyal együtt.

Az UVCB anyagok 4. altípusa, ahol a forrás kémiai vagy ásványi, a folyamat pedig finomítás

A nem biológiai eredetű anyagok, vagyis azok az ásványok, ércek, szén, földgáz vagy nyersolaj, illetve ezek származékai, vagy egyéb vegyipari alapanyagok, amelyek szándékos kémiai reakciók nélküli feldolgozás eredményei, lehetnek (tisztított) frakciók, koncentrátumok vagy ezen folyamatok maradékai.

A szén és a nyersolaj desztillációs és gázosítási folyamatok során kerül felhasználásra az anyagok széles skálájának előállítására érdekében, pl. ásványolajok, fűtőgázok stb., illetve maradékok is, úgymint a kátrány és a salak. Nagyon gyakran a desztillált vagy más módon frakcionált termék azonnal továbbfeldolgozásra kerül, amely során kémiai reakciók is érik. Ilyen esetekben az anyagazonosítást az UVCB anyag 2. altípusára vonatkozó útmutatót követve kell elvégezni, mivel a folyamat relevánsabb az azonosítás tekintetében, mint a forrás.

Az ásványolajok esetében speciális azonosító rendszer kerül alkalmazásra (lásd a 4.3.2.2. alpontot). Az e rendszerbe tartozó anyagok frakciókat és kémiai reakciótermékeket tartalmaznak.

Az UVCB anyag 4. altípusába tartozó egyéb anyagok tartalmazhatnak érceket, érckoncentrátumokat, valamint változó mennyiségű, kohászati feldolgozással extrahálható fémeket tartalmazó salakot.

Az ásványokat, mint például a bentonitot vagy a kalcium-karbonátot fel lehet dolgozni pl. savas oldással és/vagy kémiai kicsapással vagy ioncserélő oszlopokon. Ha a kémiai összetétel teljes mértékben meghatározásra kerül, az ásványokat a 4.2. alpont megfelelő részében leírt iránymutatás szerint kell azonosítani. Amennyiben az ásványok csak mechanikus módszerekkel, pl. őrléssel, szitálással, centrifugálással, flotációval stb. kerülnek feldolgozásra, akkor is a bányászott ásványokkal megegyezőnek tekintendők. A gyártási folyamat során előállított ásványok – az azonosítás céljából²¹ – a természetben előforduló megfelelőjükkel megegyezőnek tekinthetők, feltéve, hogy az összetétel hasonló, a toxicitási profil pedig ugyanaz.

A nem biológiai eredetű anyagok fő azonosítási paramétere a folyamat releváns lépésének(lépéseinek) a leírása.

Frakciók esetében meg kell adni a frakcionálási folyamatot az izolált frakcióra vonatkozó paraméterekkel és cut-off tartománnyal együtt, valamint szükség esetén a folyamat korábbi lépéseinek leírását.

A töményítési lépés tekintetében meg kell adni a folyamat típusát, pl. bepárlás, kicsapás stb., valamint a fő összetevők kiinduló koncentrációja és végső koncentrációja közötti arányt,

²¹A természetben előforduló és a vegyi úton előállított ásványok azonosításának megegyező módszere nem jelenti szükségszerűen azt, hogy a jogi követelmények (pl. a regisztrálás alóli kivételek) is ugyanazok.

továbbá a folyamat korábbi lépésével(lépéseivel) kapcsolatos információkat.

A nem biológiai eredetű maradékok fő azonosítási paramétere annak a folyamatnak a leírása, amelyből a maradék származik. A folyamat lehet bármilyen fizikai reakció, amely során maradék keletkezik, pl. tisztítás, frakcionálás, töményítés.

Analitikai információk

Az UVCB anyagok közé nagyon eltérő típusú anyagok tartoznak, amelyek olyan paraméterekben különböznek egymástól, mint a forrás és a gyártási folyamat. Következésképpen az UVCB anyag összetételére vonatkozó információk megadására alkalmas analitikai módszereket kell benyújtani, és azok esetfüggőek. Ezen túlmenően az ilyen módszerek használatára vonatkozó elképzelések folyamatosan fejlődnek és kiegészülnek. Ezért a regisztráló feladata, hogy megfelelő analitikai adatokat nyújtson be annak érdekében, hogy az anyag azonosítását lehetővé tevő lehető legjobb információk álljanak rendelkezésre.

Az UVCB anyagok jellemzésére számos kvalitatív módszer alkalmazható. Ilyen például az UV/Vis, az infravörös és a tömegspektrometria, a mágneses magrezonancia, a röntgendiffrakció.

Az anyag összetételének jellemzésére ujjlenyomatként felhasználható mennyiségi adatokat, például kromatogramokat vagy diffrakciós adatokat kell szolgáltatni.

Az analitikai módszerek leírásának tartalmaznia kell az alkalmazott kísérleti protokollokat és a jelentett eredmények értelmezését.

4.3.2. Az UVCB anyagok specifikus fajtái

Ez a szakasz az UVCB anyagok specifikus csoportjaival kapcsolatban tartalmaz iránymutatást: különböző hosszúságú szénláncokat tartalmazó anyagok (4.3.2.1.); olajból vagy olajszerű kiinduló anyagokból nyert anyagok (4.3.2.2.); valamint enzimek (4.3.2.3.).

4.3.2.1 Különböző hosszúságú szénláncokat tartalmazó anyagok

Az UVCB anyagok e csoportjába a különböző hosszúságú szénláncokat tartalmazó alkil anyagok közül a hosszú láncúak tartoznak, pl. a paraffinok és az olefinek. Ezek az anyagok származhatnak természetes zsírokból vagy olajokból, vagy szintetikusán állítják elő azokat. A természetes zsírok növényekből vagy állatokból származnak. A növényekből származó, hosszú szénláncú anyagok alapesetben csak páros számú szénláncot tartalmaznak, míg az állati eredetű, hosszú szénláncú anyagok tartalmaznak (valamennyi) páratlan számú láncot is. A szintetikusán előállított, hosszú szénláncú anyagok páros és páratlan számú szénláncot egyaránt tartalmazhatnak.

Azonosítók és megnevezési konvenciók

A csoport olyan anyagokat tartalmaz, amelyeknek egyedi összetevői rendelkeznek egy közös tulajdonsággal: egy vagy több hosszú láncú alkilcsoportot tartalmaznak, sok esetben egy ahhoz csatlakozó funkciós csoporttal. Az összetevők az alkilcsoportjára jellemző alábbi tulajdonságok legalább egyike tekintetében különböznek:

- A szénlánc hossza (a szénatomok száma)
- Telítettség
- Szerkezet (egyenes vagy elágazó)
- A funkciós csoport helyzete

Az összetevők kémiai azonosságának kielégítő leírását és szisztematikus megnevezését az alábbi három deszkriptor használata teszi lehetővé:

- Az **alkil deszkriptor**, amely az alkilcsoport(ok) szénlánc hosszában lévő szénatomok számát írja le.
- A **funkciós deszkriptor**, amely az anyag funkciós csoportját azonosítja, pl. amin, ammónium, karbonsav.
- A **só deszkriptor**, a sók kationja / anionja, pl. nátrium (Na^+), karbonát (CO_3^{2-}), klorid (Cl^-).

Alkil deszkriptor

- A C_{x-y} alkil deszkriptor általában telített, egyenes alkiláncot jelent, amely minden láncosszat tartalmaz az x és y közötti szénatomszám tartományban, például C_{8-12} a C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} és C_{12} szénhidrogéneknek felel meg.
- Jelölni kell, ha az alkil deszkriptor csak páros vagy csak páratlan szénatomszámú alkiláncra vonatkozik, például C_{8-12} (páros számú)
- Jelölni kell, ha az alkil deszkriptor elágazó láncú alkilcsoportokra (is) vonatkozik, például C_{8-12} (elágazó) vagy C_{8-12} (egyenes láncú és elágazó)
- Jelölni kell, ha az alkil deszkriptor telítetlen alkilcsoportokra (is) vonatkozik, például C_{12-22} (C_{18} telítetlen)
- Egy szűk alkiláncossz eloszlás nem része egy szélesnek, és fordítva, például C_{10-14} nem felel meg C_{8-18} -nak
- Az alkil deszkriptor utalhat az alkiláncok forrására is, például kókusz vagy faggyú. A szénláncossz eloszlásának ilyenkor meg kell felelnie az alapanyag eloszlásának.

A fent bemutatott rendszert kell alkalmazni a változó hosszúságú szénláncokat tartalmazó anyagok leírására. A rendszer nem használható a jól meghatározott anyagok esetében, amelyek azonosíthatók egy meghatározott kémiai szerkezettel.

Az UVCB anyagok ezen típusának megnevezése az alkil deszkriptor, a funkciós deszkriptor és a só deszkriptor adatain alapul. Hasznosak lehetnek továbbá a forrásra és a folyamatra vonatkozó adatok az anyag pontosabb azonosítása céljából.

Példák		
Deszkriptorok	Név	
Alkil deszkriptor Funkciós deszkriptor Só deszkriptor	alkiláncossz C_{10-18} zsírsavak (karbonsav) kadmiumsók	zsírsavak (C_{10-18}) kadmiumsók
Alkil deszkriptor Funkciós deszkriptor Só deszkriptor	di- C_{10-18} -alkil-dimetil ammónium klorid	di- C_{10-18} -alkil-dimetil- ammónium-klorid
Alkil deszkriptor Funkciós deszkriptor Só deszkriptor	trimetil-faggyúalkil ammónium klorid	trimetil-faggyúalkil- ammónium-klorid

4.3.2.2 Olajból vagy olajszerű alapanyagból nyert anyagok

Az olajból (ásványolajokból) vagy olajszerű alapanyagokból (pl. szénből) nyert anyagok nagyon komplexek és változók, illetve részben nem meghatározott összetételűek. Ebben az alponban az ásványolajokon keresztül kerül bemutatásra, hogyan azonosítandó az UVCB anyagok e specifikus csoportja. Ugyanez a módszer alkalmazható azonban az olajszerű alapanyagokból, például a szénből származó anyagokra is.

Az olajfinomító iparban felhasznált kiinduló anyag lehet nyersolaj vagy olyan specifikus finomítói anyagáram, amely egy vagy több folyamat során keletkezett. A végtermékek összetétele függ a gyártáshoz felhasznált nyersolajtól (mivel a nyersolaj összetétele a származási hely függvényében változik), valamint a későbbi finomítási folyamatoktól. Ezért az ásványolajok összetételében van egy természetes, a feldolgozási eljárástól független változatosság.¹⁷

1. *Megnevezési konvenciók*

Az ásványolajok azonosítása tekintetében ajánlott a meglévő nomenklatúra rendszer szerinti megnevezés megadása.²² Ez a név rendszerint tartalmazza a finomítási eljárást, az anyagáram forrását és az általános összetételt vagy jellemzőket. Amennyiben az anyag 5 tömegszázaléknál nagyobb arányban tartalmaz 4-6 tagú kondenzált gyűrűből álló aromás szénhidrogéneket, ezt az adatot fel kell tüntetni a leírásban. Az EINECS-számmal rendelkező ásványolajok esetében az EK-jegyzékben szereplő megnevezést kell használni.

2. *Azonosító adatok*

Az ásványolajokat azonosító fogalmak és meghatározások általában tartalmazzák az anyagáram forrását, a finomítási folyamatot, az általános összetételt, a szénatomszámot, a forrási tartományt vagy más megfelelő fizikai jellemzőket, valamint a legnagyobb arányban jelen lévő szénhidrogénfajta.²²

Meg kell adni a REACH-rendelet VI. mellékletének 2. szakaszában szereplő azonosítókat. Ismert tény, hogy az olajanyagok gyártása során a cél a teljesítményre, nem pedig az összetételre vonatkozó specifikációk teljesítése. Ezért az olyan jellemzők, mint a megnevezés, a szénlánc hossz tartománya, a forráspont, a viszkozitás, a küszöbértékek és más fizikai tulajdonságok az ásványolajok lehető legegységesebb azonosítása érdekében általában hasznosabbak, mint az összetételre vonatkozó adatok.

Bár a kémiai összetétel az UVCB anyagoknak nem elsődleges azonosítója, az összes, 10%-ot elérő vagy azt meghaladó koncentrációjú összetevőt és a 10% alatti koncentrációjú ismert összetevőket meg kell adni, és az összetételt olyan általános fogalmakkal kell leírni, mint például a molekulatömeg-tartomány, az alifás vagy aromás jelleg, a hidrogénezés foka és egyéb lényeges adatok. Ugyanazokkal a paraméterekkel kell leírni azokat az alkotóelemcsoportokat is, amelyek egyedileg nem azonosíthatók. A névvel és a jellemző koncentrációjával kell továbbá azonosítani minden olyan kisebb koncentrációjú összetevőt, amely befolyásolja a veszélyességi osztályozást.

4.3.2.3 Enzimek

Az enzimek előállításuk leggyakrabban mikroorganizmusok fermentálásával történik, azonban alkalmanként növényi vagy állati eredetűek. A fermentálás vagy az extrahálás és az azt követő tisztítási lépések által eredményezett, folyékony enzim-koncentrátum a vízben kívül

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.

aktív enzimfehérjét tartalmaz, valamint a fermentálásból származó maradékokból álló egyéb összetevőket, azaz fehérjéket, peptideket, aminosavakat, szénhidrátokat, lipideket és szervesetlen sókat.

Az enzimfehérjét a fermentálásból vagy az extrahálásból származó egyéb összetevőkkel együtt, azonban az enzimfehérje stabilitásának befolyásolása, valamint összetételének megváltoztatása nélkül leválasztható víz nélkül kell az azonosításra szánt anyagnak tekinteni.

Az enzimanyag jellemzően 10-80 tömegszázalékban tartalmaz enzimfehérjét. A többi összetevő százalékos aránya változó, függ az előállításához felhasznált szervezettől, a fermentációs közegtől, a fermentálási folyamat működési paramétereitől, valamint az alkalmazott további tisztítástól, azonban az összetétel jellemzően az alábbi táblázatban feltüntetett tartományokon belül van:

Aktív enzimfehérje	10–80%
Egyéb fehérjék + peptidok és aminosavak	5–55 %
Szénhidrátok	3–40 %
Lipidek	0–5 %
Szervesetlen sók	1–45 %
Összesen	100%

Az enzimanyagot változékonyságának és részben ismeretlen összetételének köszönhetően „UVCB anyagnak” kell tekinteni. Az enzimfehérje az UVCB anyag egyik összetevőjének tekintendő. A nagy tisztaságú enzimek jól meghatározott összetételű (egy összetevőből vagy több összetevőből álló) anyagokként azonosíthatók, és ennek megfelelően azonosítandók.

Az EINECS-jegyzékben az enzimek fő azonosítója a katalitikus aktivitás. Az enzimek további specifikáció nélküli általános bejegyzésként kerülnek felsorolásra, vagy a kiinduló szervezetet, illetve a szubsztrátot jelző specifikus bejegyzéssel szerepelnek.

Példák		
EK-szám	EINECS-név	CAS-szám
278-547-1	Proteináz, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Proteináz, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Elasztáz (sertés hasnyálmirigy)	39445-21-1
262-402-4	Mannanáz	60748-69-8

Egy, az Európai Bizottság által megrendelt, az enzimekkel kapcsolatos tanulmány javaslatot tett az enzimeknek az enzim-nómenklatúra nemzetközi rendszere, az IUBMB (Nemzetközi

Biokémiai és Molekuláris Biológiai Szövetség) szerinti azonosítására.²³ A jelen útmutató ezt a megközelítést veszi át, és az EINECS-hez képest az enzimek szisztematikusabb, részletesebb és átfogóbb azonosítását teszi lehetővé.

1. **Megnevezési konvenciók**

Az enzimek az IUBMB-nómenklatúra konvenciói szerint kerülnek megnevezésre.

Az IUBMB szerinti osztályozás minden egyes enzimtípushoz és katalitikus funkcióhoz egy egyedi, négy számjegyből álló azonosítót rendel (pl. 3.2.1.1 az α -amiláz esetében).²⁴ Minden egyes számjegy különböző aminosav-szekvenciájú és eredetű enzimet takar, az enzimek funkcionalitása azonban azonos. Az IUBMB-nómenklatúrában szereplő megnevezéseket és számokat kell alkalmazni az anyagok azonosítására. Az IUBMB-nómenklatúra az enzimeket hat főcsoportba sorolja:

- 1. Oxidoreduktázok
- 2. Transzferázok
- 3. Hidrolázok
- 4. Liázok
- 5. Izomerázok
- 6. Ligázok

Az alábbi példa az IUBMB-nómenklatúra szerinti bejegyzés bemutatására szolgál:

EC 3.4.22.33

Elfogadott megnevezés: gyümölcs bromelain

Reakció: A peptidkötések tekintetében széles specificitású fehérjék hidrolízise. Bz-Phe-Val-Arg[†]NHMec egy megfelelő szintetikus szubsztrát, azonban nem lép reakcióba a Z-Arg-Arg-NHMec-kel (vö. bromelain törzs)

Egyéb megnevezések: juice bromelain; ananász; bromeláz; bromelin; extranáz; juice bromelain; pineáz; ananász enzim; traumanáz; FA2 gyümölcs bromelain

Megjegyzések: Az *Ananas comosus* nevű enzim az ananász növényből származik. A csirke cisztatin alig gátolja. A pinguinain (korábban EC 3.4.99.18) nevű, bromelainhoz hasonló cisztein endopeptidázt egy rokon növényből, a *Bromelia pinguin*-ből állítják elő. A két enzim abban különbözik egymástól, hogy a pinguinaint a csirke cisztatin [4]²⁵ gátolja. A C1 peptidáz család²⁶ tagja (papain család). Korábban EC 3.4.22.5 volt, és az EC 3.4.22.4 tartalmazza, CAS regisztrációs szám: 9001-00-7

Egyéb adatbázisokra vonatkozó linkek:

²³UBA, 2000., Umweltbundesamt, Ausztria. Collection of Information on Enzymes. Final report. Co-operation between Federal Environment Agency Austria and Inter-University Research Center for Technology, Work and Culture (IFF/IFZ). Contract No B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

²⁴ Az „EK-szám” (EC number \equiv Enzyme Commission number) és az „IUBMB-szám” meghatározásokat gyakran szinonimaként használják. A félreértések elkerülése végett ajánlatos az „IUBMB-számot” használni az IUBMB szerinti négy számjegű kód tekintetében.

Rowan, A.D., Buttle, D.J. és 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>.

[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)

Általános hivatkozások:

Sasaki, M., Kato, T. és 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. és Murachi, T., Purification and characterization of a proteinase from pineapple fruit, fruit bromelain FA2. *J. Biochem.* (Tokyo) 79 (1976) 1223-1234. [PMID: 956152]

Ota, S., Muta, E., Katanita, Y. és 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]

Példák az enzimek IUBMB-rendszer szerinti osztályozásra

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

A proteázok számozása az alábbi kritériumok szerint történik:

3.	Hidrolázok
3.4	Hatás a peptidkötésre (peptidázok), az alábbi alosztályokkal:
3.4.1	α -amino-acil-peptid hidrolázok (jelenleg az EC 3.4.11-ben)
3.4.2	Peptidil-amino-acid hidrolázok (jelenleg az EC 3.4.17-ben)
3.4.3	Dipeptid hidrolázok (jelenleg az EC 3.4.13-ban)
3.4.4	Peptidil peptid hidrolázok (jelenleg átcsoportosítva az EC 3.4-en belül)
3.4.11	Amino-peptidázok
3.4.12	Peptidil-amino-acid hidrolázok vagy acil-amino-acid hidrolázok (jelenleg átcsoportosítva a 3.4-en belül)
3.4.13	Dipeptidázok
3.4.14	Dipeptidil-peptidázok és tripeptidil-peptidázok
3.4.15	Peptidil-dipeptidázok
3.4.16	Szerin-típusú karboxipeptidázok
3.4.17	Metallokarboxipeptidázok
3.4.18	Cisztein-szerű karboxipeptidázok
3.4.19	Omega peptidázok
3.4.21	Szerin endopeptidázok

További azonosított, specifikus enzimek:	
3.4.21.1	kimotripszin
3.4.21.2	kimotripszin C
3.4.21.3	metridin
3.4.21.4	tripszin
3.4.21.5	trombin
3.4.21.6	Xa koagulációs faktor
3.4.21.7	plazmin
3.4.21.8	jelenleg az EC 3.4.21.34 és az EC 3.4.21.35 tartalmazza
3.4.21.9	enteropeptidáz
3.4.21.10	akrozin
3.4.21.11	jelenleg az EC 3.4.21.36 és az EC 3.4.21.37 tartalmazza
3.4.21.12	12 a-Lítikus endopeptidáz
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Ismeretlen katalitikus mechanizmusú endopeptidázok

Példák az EINECS-jegyzékből IUBMB-számokkal kiegészítve

EK-szám	EINECS-név	CAS-szám	IUBMB-szám
278-547-1	Proteináz, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Szubtilizin	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Celluláz	9012-54-8	3.2.1.4

2. Azonosító adatok

Az enzim anyagok azonosítása a bennük lévő enzimfehérje (IUBMB-nómenklatúra) és a fermentálásból származó egyéb összetevők révén történik. Az enzimfehérjén kívül az egyes specifikus összetevők koncentrációja általában nem haladja meg az 1%-ot. Abban az esetben, ha e specifikus összetevők azonosító adatai nem ismertek, akkor azok feltüntethetők csoportosítási módszerrel (pl. fehérjék, peptidek, aminosavak, szénhidrátok, lipidek és

szervetlen sók). Az egyes összetevőket azonban fel kell tüntetni, ha azonosító adataik ismertek vagy koncentrációjuk eléri vagy meghaladja a 10%-ot, vagy relevánsak az osztályozás és címkézés és-vagy a PBT-értékelés²⁷ tekintetében.

Enzimfehérjék

A koncentrátumban lévő enzimfehérjéket az alábbi azonosító adatokkal kell meghatározni:

- IUBMB-szám
- Az IUBMB által megadott megnevezés (szisztémás név, enzimnevek, szinonimák)
- Az IUBMB megjegyzései
- Reakció és reakció típus
- Adott esetben az EK-szám és -név
- CAS-szám és -név, amennyiben rendelkezésre áll

Az enzim által kiváltott reakciót meg kell határozni. Ezt a reakciót az IUBMB határozza meg.

Példa

.alfa.-amiláz: .alfa.-(1-4)-kapcsolt glükóz egységeket tartalmazó poliszacharid + H₂O = malto-oligoszacharidok; 1,4-.alfa.-d-glükózid kapcsolatok endohirdolízise három vagy több 1,4-.alfa.-kapcsolt d-glükóz egységet tartalmazó poliszacharidokban.

Az enzimosztálynak megfelelően hozzá kell rendelni a reakció típust. Ez lehet oxidáció, redukció, elimináció, addíció vagy egy adott reakció neve.

Példa

.alfa.-amiláz: O-glikozil kötés hidrolízise (endohidrolízis).

Az enzimfehérjén kívüli egyéb összetevők

Minden, 10%-ot (m/m) elérő vagy azt meghaladó, illetve az osztályozás és címkézés és-vagy a PBT-értékelés²⁸ tekintetében releváns összetevőt azonosítani kell. A 10%-nál kisebb koncentrációjú összetevők azonosító adatai feltüntethetők kémiai csoportként. Meg kell adni a jellemző koncentrációjukat (koncentrációikat) vagy koncentráció-tartományukat, azaz az alábbiakat:

- (Gliko)proteinek
- Peptidek és Aminosavak
- Szénhidrátok
- Lipidek
- Szervetlen anyagok (pl. nátrium-klorid vagy más szervetlen sók)

Amennyiben nem valósítható meg egy enzim-koncentrátum egyéb összetevőinek kielégítő azonosítása, akkor meg kell adni az előállításához felhasznált szervezet nevét (Nemzetség és adott esetben törzs vagy genotípus) mint az egyéb biológiai eredetű UVCB anyagok esetén.

²⁷ A PBT-értékelésre vonatkozó további információk és a releváns kritériumok megtalálhatók az Útmutató a tájékoztatási követelményekhez és a kémiai biztonsági értékeléshez c. dokumentum R.11.: PBT-értékelés című fejezetében.

²⁸ A PBT-értékelésre és a releváns koncentrációs határértékekre vonatkozó további információ az Útmutató a tájékoztatási követelményekhez és a kémiai biztonsági értékeléshez c. dokumentum PBT-értékelésre vonatkozó fejezetében található.

Adott esetben megadhatók további paraméterek, például funkcionális paraméterek (azaz a pH vagy a hőmérséklet optimumai és tartományai), kinetikai paraméterek (azaz specifikus aktivitás vagy váltásszám), ligandumok, szubsztrátok és termékek, valamint kofaktorok.

5. Kritériumok az anyagok azonosságának ellenőrzésére

Annak ellenőrzése során, hogy a különböző gyártóktól/importőröktől származó anyagok azonosnak tekinthetők-e vagy sem, be kell tartani bizonyos szabályokat. Ezeket az EINECS létrehozásakor alkalmazott szabályokat az anyagok azonosításának és megnevezésének közös alapjaként kell kezelni, és ennek megfelelően találni kell az adott anyag tekintetében potenciális társregisztrálót.^{5, 6, 1629,30} Azok az anyagok, amelyek nem tekintendők azonosnak, szakértői vélemények alapján esetleg szerkezetileg hasonlóknak tekinthetők. Az adatok megosztása mindazonáltal ezen anyagok tekintetében lehetséges, amennyiben az tudományosan indokolt. Ez azonban nem témája ennek az útmutató dokumentumnak, ezzel az *Útmutató az adatok megosztásához* című dokumentum foglalkozik.

- Az egy összetevőből álló anyagokra vonatkozó „≥ 80%” szabály és a több összetevőből álló anyagok meghatározása is alkalmazandó.

Nincs különbségtétel az anyagok technikai, tisztasági vagy analitikai fokozatai között. Ez azt jelenti, hogy „ugyanannak” az anyagnak eltérő tisztasági/szennyeződési profilja lehet annak mértékétől függően. A jól meghatározott anyagoknak azonban tartalmazniuk kell a fő összetevő(ke)t, és csak a gyártási eljárásból származó szennyeződések jelenléte megengedett (a részleteket lásd a 4.2. alpontban), valamint az anyag stabilizálásához szükséges adalékanyagoké.

- A vegyületek hidratált és vízmentes formáit a regisztrálás szempontjából azonos anyagnak kell tekinteni.

Példák			
Név és képlet	CAS-szám	EK-szám	Szabály
Réz-szulfát (Cu · (H ₂ O ₄ S .))	7758-98-7	231-847-6	
Kénsav réz (2+) só (1:1), pentahidrát (Cu·H ₂ O ₄ S · 5 H ₂ O)	7758-99-8		Ezt az anyagot lefedi vízmentes formájának regisztrálása (EK-szám: 231-847-6).

A hidratált és a vízmentes formák kémiai neve és CAS-száma eltérő.

- A savak vagy bázisok és sóik különböző anyagoknak tekintendők.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
201-186-8	Percetsav C ₂ H ₄ O ₃	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak például a

²⁹ Vollmer és társai 1998., Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem, 665. kötet, 113-122. oldal.

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

220-624-9	Nátrium-glikolát C ₂ H ₄ O ₃ . Na	nátriumsójjával (EINECS 220-624-9) Ez az anyag nem tekintendő azonosnak a megfelelő savával (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-klóranilin C ₆ H ₆ ClN	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak például a 2-klóranilin-hidrobromiddal (1:1) (C ₆ H ₆ ClN . HBr)

- Az egyes sók (például a nátrium vagy a kálium) különböző anyagoknak tekintendők.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
208-534-8	Nátrium-benzoát C ₇ H ₅ O ₂ . Na	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak például a káliumsóval (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Kálium-benzoát C ₇ H ₅ O ₂ . K	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak például a nátriumsóval (EINECS 208-534-8)

- Az elágazó vagy egyenes alkilláncok különböző anyagoknak tekintendők.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
295-083-5	Foszforsav, dipentil-észter, elágazó és egyenes láncú	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak az alábbi egyedi anyagokkal: elágazó láncú foszforsav, dipentil-észter, illetve egyenes láncú foszforsav, dipentil-észter.

- Az elágazó csoportokat meg kell adni a megnevezésben. A további információk nélküli alkilcsoportokat tartalmazó anyagok csak az elágazás nélküli, egyenes láncokat tartalmazták, kivéve, ha másképp kerül meghatározásra.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
306-791-1	Zsírsavak, C12-16	Azonos anyagnak csak az egyenes láncú, elágazás nélküli alkilcsoportokat tartalmazó anyagok tekintendők.
279-420-3	Alkoholok, C12-14	
288-454-8	Aminok, C12-18-alkilmetil	

- Azok az anyagok, amelyek esetében az alkilcsoportok nevében további fogalmak szerepelnek, mint például izo, neo, elágazó stb., nem tekintendők az ezen meghatározások nélküli anyagokkal.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
266-944-2	Gliceridek, C ₁₂₋₁₈ Ennek az anyagnak az SDA anyagneve: C12-C18 trilalkil-glicerid és SDA bejelentési száma: 16-001-00	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak a C ₁₂₋₁₈ -izoval. Telített alkilláncú anyag, amely bárhol elágazhat.

- Külön meghatározás hiányában a savakban vagy alkoholokban stb. lévő alkilláncok csak a telített láncokra vonatkoznak. A telítetlen láncokat meg kell határozni, és külön anyagnak kell tekinteni.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
200-313-4	Sztearinsav, tiszta C18H36O2	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak az alábbi anyaggal: olajsav, tiszta, C18H34O2 (EINECS 204-007-1)

- Királis centrummal rendelkező anyagok

Az egy sztereocentrummal rendelkező anyagnak lehet balra és jobbra forgató formája (enantiomerek). Ellenkező megjelölés hiányában feltételezhető, hogy az anyag a két forma egyenlő arányú (racém) elegye.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály

201-154-3	2-klór-propán-1-ol	Az egyedi enantiomerek: (R)-2-klór-propán-1-ol és (S)-2-klór-propán-1-ol nem tekintendők e bejegyzéssel megegyezőnek
-----------	--------------------	--

A racémok is több összetevőből álló anyagnak tekintendők. Ha egy anyagot egyetlen enantiomer formával dúsítottak, a mono- vagy többkomponensű anyagokra vonatkozó szabályokat kell alkalmazni, azaz az izomerek koncentrációtartományától függően az anyag egy, illetve több összetevőből álló anyagnak minősül.

A több sztereocentrumot tartalmazó anyagok 2^n formában létezhetnek (ahol n a sztereocentrumok számát jelenti). Ezeknek a különböző formáknak eltérő fizikai-kémiai, toxikológiai és/vagy ökotoxikológiai tulajdonságai lehetnek. Ezeket külön anyagnak kell tekinteni.

- Szervetlen katalizátorok

A szervetlen katalizátorok keverékeknek tekintendők. Az azonosítás céljából az összetevő fémekeket vagy fémes vegyületeket (használati utasítás nélküli) egyedi anyagnak kell tekinteni.

Példák		
	Név	Szabály
	Kobalt-oxid alumínium-oxid katalizátor	Külön kell azonosítani: - Kobalt(II)-oxid - Kobalt(III)-oxid - Alumínium-oxid - Alumínium-kobalt-oxid

- Az egyforma IUBMB-számmal rendelkező enzim-koncentrátumok különböző, előállításához használt szerkezet alkalmazása ellenére azonos anyagnak tekinthetők, feltéve, hogy veszélyes tulajdonságaik nem mutatnak jelentős különbséget, és ugyanazt az osztályozást biztosítják.

Több összetevőből álló anyagok

A 67/548/EGK irányelv szabályozta az anyagok forgalomba hozatalát. Az anyag gyártási módjának nem volt jelentősége. Ezért a forgalmazott, több összetevőből álló anyagokra akkor vonatkozott az EINECS, ha az összes egyedi összetevő szerepelt az EINECS-jegyzékben; pl. a difluor-benzolok izomer keverékét az 1,2-difluor-benzol (206-680-7), az 1,3-difluor-benzol (206-746-5) és az 1,4-difluor-benzol (208-742-9) EINECS-bejegyzések írták le, maga az izomer keverék nem szerepelt az EINECS-jegyzékben.

Ezzel szemben a REACH-rendelet gyártott anyag regisztrálását írja elő. Eseti alapon kell eldönteni, hogy az anyag gyártási folyamatának különböző lépései mennyire tartoznak bele a „gyártás” fogalmába (pl. a különféle tisztítási vagy desztillálási lépések). Ha egy több összetevőből álló anyag kerül előállításra, akkor azt regisztrálni kell (kivéve, ha az egyedi összetevők regisztrálása lefedi azt, lásd a 4.2.2.4. alpontot); pl. ha a difluor-benzol izomer keverék kerül előállításra, akkor a „difluor-benzol”-t mint izomerkeveréket kell regisztrálni. A több összetevőből álló anyagok tekintetében azonban nem szükséges az anyagot önmagában megvizsgálni, amennyiben az anyag veszélyességi profilja kielégítően leírható az egyedi

összetevőkre vonatkozó információkkal. Ha az 1,2-difluor-benzol, 1,3-difluor-benzol és 1,4-difluor-benzol egyedi izomereket állítják elő, majd azt követően összekeverik, akkor az egyedi izomereket kell regisztrálni, és az izomerek keveréket pedig keverékként figyelembe venni.

Egy A, B és C fő összetevőjű, több összetevőből álló anyag nem tekintendő azonosnak egy A és B fő összetevőjű, több összetevőből álló anyaggal, illetve nem tekintendő az A, B, C és D reakció tömegének sem.

- Egy több összetevőből álló anyag nem tekintendő azonosnak az egyedi összetevőknek csupán egy részhalmazát tartalmazó anyaggal.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
207-205-6	2,5-difluor-toluol	Ez a két anyag nem tekintendő azonosnak a difluor-toluolok izomer keverékével, mivel ez a két anyag az összes lehetséges izomernek csupán egy részhalmazát képezi.
207-211-9	2,4-difluor-toluol	

- Egy több összetevőből álló anyag regisztrálása nem fedi le az egyedi összetevőket.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
208-747-6	1,2-dibróm-etilén	Ez az anyag a cisz és transz izomerek keverékét írja le. Az izomer keverékének regisztrálása nem fedi le az egyedi összetevőket: az (1Z)-1,2-Dibróm-etilént és az (1E)-1,2-Dibróm-etilént.

UVCB anyagok

- Egy szűk összetevő-eloszlású UVCB anyag nem tekintendő azonosnak egy szélesebb összetételű UVCB anyaggal, és fordítva.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
288-450-6	Aminok, C12-18-alkil, acetátok	Az „aminok, C12-14-alkil, acetátok” vagy az „aminok, C12-20-alkil, acetátok” vagy az „aminok, dodecil (C12-alkil), acetátok”, illetve a

		csak páros számú alkilcsoportot tartalmazó anyagok nem tekintendők azonosnak ezzel az anyaggal
--	--	--

- Az egy fajjal/nemzetséggel jellemzett anyag nem tekintendő azonosnak a más fajkból/nemzetségből kinyert anyaggal.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
296-286-1	Gliceridek, napraforgóolaj, di-	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak az alábbiakkal: gliceridek, szója di- (EINECS: 271-386-8) vagy gliceridek, faggyú di- (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Lenolaj, epoxidált	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak az alábbiakkal: lenolaj, oxidált (EINECS: 272-038-8) vagy lenolaj, maleát (EINECS: 268-897-3), vagy ricinusolaj, epoxidált (nem szerepel az EINECS-ben)

- A tisztított extraktum vagy a koncentrátum az extraktumtól eltérő anyagnak tekintendő.

Példák		
EK-szám	Név	Szabály
232-299-0	Repceolaj Extrahált anyagok és fizikailag módosított származékai. Elsődlegesen az alábbi zsírsavak gliceridjeiből áll: erukasav, linolénsav és olajsav. (Brassica napus, Cruciferae)	A „(Z)-dokoz-13-énsav (erukasav)” a „repceolaj” egyik összetevője. Az erukasav nem tekintendő azonosnak a repceolajjal, mivel az erukasav tiszta anyagként a repceolajból kerül izolálásra; az erukasavnak van saját EINECS-bejegyzése (204-011-3). A palmitinsav, olajsav, linolsav, linolénsav, erukasav és eikozánsav izolált keveréke nem tekintendő azonosnak a repceolajjal, mivel ezek az összetevők nem teszik ki a repceolaj egészét.

6. Az anyag azonosító adatai a megkeresésen belül

Az anyagok azonosításának és megnevezésének módjáról a jelen útmutató 4. fejezetében található iránymutatás. Ezt az útmutatót kell követni annak meghatározásához, hogy az anyagok azonosnak tekinthetők-e a REACH- és a CLP-rendelet szerint. Ezt az anyagokkal kapcsolatos megkeresések vonatkozásában az alábbiakban fejtjük ki részletesebben.

A 4. cikk értelmében bármely gyártó vagy importőr – a REACH-rendelet szerinti kötelezettségeinek való megfelelés tekintetében teljes felelősségét megtartva – egy harmadik felet képviselőként nevezhet ki a III. cím szerinti valamennyi folyamathoz, ideértve a más gyártókkal, importőrökkel folytatott megbeszéléseket is.

Az összes anyag esetén a potenciális regisztráló köteles az Ügynökséghez a regisztrálást megelőzően megkeresést intézni annak megállapítása érdekében, hogy ugyanazon anyagra nyújtottak-e már be regisztrálást (REACH-rendelet 26. cikk). Ennek a megkeresésnek a következőket kell tartalmaznia:

- a potenciális regisztráló személyazonossága a VI. melléklet 1. szakaszában meghatározottaknak megfelelően, a felhasználási telephelyek kivételével;
- az anyag azonosító adatai a VI. melléklet 2. szakaszában meghatározottaknak megfelelően;
- mely tájékoztatási követelmények miatt kellene olyan új vizsgálatokat végeznie a potenciális regisztrálónak, amelyek gerinces állatokkal folytatott kísérleteket foglalnának magukban;
- mely tájékoztatási követelmények miatt kellene más új vizsgálatokat végeznie a potenciális regisztrálónak.

A potenciális regisztrálónak az anyag azonosító adatait és megnevezését a jelen dokumentum 4. fejezetében ismertetett szabályok szerint kell benyújtania.

Az Ügynökség megállapítja, hogy ugyanazon anyag korábban már regisztrálásra került-e. Ezt is a jelen útmutató 4. fejezetében ismertetett szabályok szerint kell megtenni. A végeredményt közlik a potenciális regisztrálóval, és értesítik valamennyi korábbi vagy egyéb potenciális regisztrálót.

A megkeresési eljárásról további információk találhatóak az *Útmutató az adatmegosztáshoz* c. dokumentumban és az ECHA ezzel foglalkozó weboldalán:

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

7. Példák

A következő oldalakon szereplő példák célja csupán annak bemutatása, hogyan tudja alkalmazni a felhasználó a jelen útmutatóban leírtakat. Nem jelentenek azonban semmilyen precedenst a REACH-rendeletben előírt kötelezettségek tekintetében.

A fejezetben az alábbi példák szerepelnek:

- A „dietil-peroxi-dikarbonát” példa egy olyan egy összetevőből álló anyagra, amely stabilizáló ágensként is funkcionáló oldószert tartalmaz (lásd a 7.1. alpontot);
- A „zolimidin” példa egy olyan anyagra, amely egy összetevőből vagy több összetevőből álló anyagként is azonosítható (lásd a 7.2. alpontot);
- A gyártási reakció során keletkező „izomerkeverék” a több összetevőből álló anyagok példája (lásd a 7.3. alpontot). Ez az anyag korábban az egyes izomerek EINECS-bejegyzéseiben szerepelt.
- Az „AH illatanyag” példa egy olyan, különböző minőségben előállított anyagra, amely öt, koncentráció-tartománnyal rendelkező összetevő reakciótömegeként írható le (lásd a 7.4. alpontot). Ez egyben példa a 80%-os és a 10%-os küszöbtől való indokolt eltérésre is;
- A nemfémes „ásványokat”, amelyek további fizikai jellemzést tesznek szükségessé, beleértve a montmorillonitot, a jól meghatározott anyagok egyik példáját is, a 7.5. alpont tartalmazza.
- A „levendula illóolaj” példa a növényekből előállított UVCB anyagokra (7.6. alpont);
- A „krizantémolaj és az abból izolált izomerek” olyan biológiai eredetű UVCB anyagok példái, amelyeket további feldolgozásnak vetnek alá (lásd a 7.7. alpontot);
- A „fenol, izopropilált, foszfát” példa egy olyan változó UVCB anyagra, amely nem határozható meg teljes mértékben (lásd a 7.8. alpontot);
- A „kvarterner ammóniumvegyületek” a változó szénlánc-hosszúságú anyagok példái (lásd a 7.9. alpontot);
- Az „ásványolajok” két példáját: egy benzinkeverék anyagáramot és a gázolajakat a 7.10. alpont tartalmazza;
- A lakkáz és az amidáz nevű enzimek azonosításának módjára vonatkozó két példát a 7.11. alpont tartalmazza.

7.1. Dietil-peroxi-dikarbonát

A „dietil-peroxi-dikarbonát” nevű anyagot (EK 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) 18%-os izododekán (EK 250-816-8, CAS 31807-55-3) oldat formájában állítják elő. Az izododekán robbanásveszélyes tulajdonságokkal szembeni stabilizáló ágensként is funkcionál. Az anyag biztonságos kezelését biztosító, lehető legmagasabb koncentráció 27%.

Hogyan kell a fent bemutatott anyagot a regisztrálás céljából azonosítani és megnevezni?

Az anyagok REACH-rendeletben szereplő meghatározása értelmében kizárandók azok az oldószerek, amelyek az anyag stabilitásának befolyásolása vagy összetételének megváltoztatása nélkül elkülöníthetők. Mivel a fenti esetben az izododekán stabilizáló ágensként is funkcionál, és nem különíthető el teljes mértékben az anyag robbanásveszélyes tulajdonságai miatt, ezért az izododekán adalékanyagnak is tekintendő, nem csupán oldószernek. Az anyagot azonban továbbra is egy összetevőből álló anyagnak kell tekinteni. Ezért az anyagot a biztonságos kezelést biztosító, legalacsonyabb mértékű izododekán-koncentrációjú oldatként kell regisztrálni:

Dietil-peroxi-dikarbonát (felső koncentrációs határérték: 27%). Az izodokeként az „adalékanyagok” között kell bejelenteni, és meg kell határozni a stabilizáló funkciót.

7.2. ZOLIMIDIN

A gyártott metanolos oldat „zolimidint” (EK 214-947-4; CAS 1222-57-7, C₁₄H₁₂N₂O₂S) és „imidazolt” (EK 206-019-2; CAS 288-32-4, C₃H₄N₂) tartalmaz. A „metanol” oldószer eltávolítása és a gyártási folyamat optimalizálása után az anyag tisztasági tartománya az alábbiak szerint alakul: 74-86% zolimidin és 4-12% imidazol.

Hogyan kell a fent bemutatott anyagot a regisztrálás céljából azonosítani és megnevezni?

Az anyagok REACH-rendeletben szereplő meghatározása értelmében kizárandók azok az oldószerek, amelyek az anyag stabilitásának befolyásolása vagy összetételének megváltoztatása nélkül elkülöníthetők. Mivel a fenti esetben a metanol nehézségek nélkül elkülöníthető; az oldószertmentes anyagot kell regisztrálni.

Egy anyag általában akkor tekintendő egy összetevőből álló anyagnak, ha egy fő összetevő 80%-ot elérő vagy azt meghaladó koncentrációban van jelen. Egy anyag akkor tekintendő több összetevőből álló anyagnak, ha egynél több fő összetevő 10%-ot elérő vagy azt meghaladó, de 80%-nál kisebb koncentrációban van jelen. A fenti példa határeset, mert az abban szereplő értékek átlépik a küszöbértékeket. Ezért az anyag tekinthető egy összetevőből álló „zolimidin”-nek vagy több összetevőből álló anyagnak, a „zolimidin” és az „imidazol” reakciótömegének.

Ilyen határesetekben az anyag fő összetevőinek jellemző koncentrációja alapján lehet eldönteni, hogyan lehet ezt az anyagot a lehető legjobban leírni, például az alábbiak szerint:

- (1) Ha a zolimidin jellemző koncentrációja 77% és az imidazolé 11%, akkor az anyagot ajánlott a zolimidin és az imidazol reakciótömegének tekinteni;
- (2) Ha a zolimidin jellemző koncentrációja 85% és az imidazolé 5%, akkor az anyagot ajánlott egy összetevőből álló anyagnak, „zolimidin”-nek tekinteni.

7.3. IZOMEREK KEVERÉKE

Az adott anyag a gyártási reakció során keletkezett két izomer keveréke (reakciótömege). Az egyes izomerek bejelentésre kerültek az EINECS-be. A 67/548/EGK irányelv szabályozta az anyagok forgalomba hozatalát. Mivel az anyag gyártási módjának nem volt jelentősége, ezért a keveréket a két egyedi izomer EINECS-bejegyzései írták le. A REACH-rendelet agyártott anyagok regisztrálását írja elő. Eseti alapon kell eldönteni, hogy az anyag gyártási folyamatának különböző lépései mennyire tartoznak bele a „gyártás” fogalmába. Amennyiben az izomerkeverék (a 4.2.2. alpont iránymutatása alapján) több összetevőből álló anyagként kerül regisztrálásra, nem szükséges az anyagot önmagában vizsgálni, ha az anyag veszélyességi profilja elegendő mértékben leírható az egyes összetevőkre vonatkozó információk segítségével.

1. Név és egyéb azonosítók

Példák	
IUPAC-név vagy (az anyag) egyéb nemzetközi kémiai név (neve)	Az alábbiak reakciókeveréke: 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol és 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol
(Az anyag) egyéb nevei	2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol Az etanol, 2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisz- és víz reakciókömege Etanol, 2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisz-(9CI) izomer vegyület
(Az anyag) EK-száma EK-név EK-leírás	Az anyagnak nincsen EK-száma, mivel az izomerek keverékét nem jelentették be az EINECS-be. Az anyagot ugyanakkor az összetevők EINECS-bejegyzései (279-502-9, 279-501-3) már tartalmazták.
(Az anyag) CAS-száma CAS-név	nem áll rendelkezésre nem áll rendelkezésre
(„A” összetevő) EK-szám EK-név EK-leírás	279-502-9 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol /
(„B” összetevő) EK-szám EK-név EK-leírás	279-501-3 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol /
(„A” összetevő) CAS-szám CAS-név	80584-89-0 Etanol, 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisz-
(„B” összetevő) CAS-szám CAS-név	80584-88-9 Etanol, 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisz-
Egyéb azonosító kód Hivatkozás	ENCS-szám 5-5917

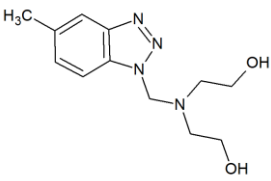
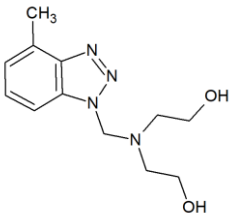
2. Az összetételre vonatkozó információk – fő összetevők

Fő összetevők						
	IUPAC-név	CAS-szám	EK-szám	Mol. képlet Hill-módszer	Jellemző konc. (tömeg%)	Konc. tartomány (tömeg%)
A	Etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisz-	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]bisz-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Fő összetevők	
Egyéb nevek	
A	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol
B	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol

Fő összetevők		
	EK-név	EK-leírás
A	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol	/
B	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]biszetanol	/

Fő összetevők		
	CAS-név	CAS-szám
A	Etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisz-	80584-89-0
B	Etanol, 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisz-	80584-88-9

Fő összetevők			
	Molekulaképlet CAS-módszer	Szerkezeti képlet	SMILES-kód
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Fő összetevők		
	Molekulatömeg [g mol ⁻¹]	Molekulatömeg-tartomány
A	250	/
B	250	/

7.4. AH illatanyag

Az AH illatanyag gamma (izo-alfa) metil-ionont és annak izomereit tartalmazza. Három különböző minőségben kerül előállításra (A, B és C minőség), amelyek az izomerek arányában térnek el egymástól.

Az alábbi táblázat áttekintést nyújt a különböző minőségek összetételéről.

Az AH illatanyag különböző minőségeinek összetétele				
Koncentráció-tartomány [%]	A minőség	B minőség	C minőség	Teljes tartomány
gamma (izo-alfa) metil-ionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (izo-béta) metil-ionon	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa n-metil-ionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma n-metil-ionon	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0,5-4
béta n-metil-ionon	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15	0,5 -15
pszeudo metil-iononok	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3	0,5-3

Az anyag azonosítására több lehetőség van:

- Az „A” minőség legalább 80% gamma (izo-alfa) metil-ionon izomert tartalmaz, ezért egy összetevőből álló anyagnak tekinthető a gamma (izo-alfa) metil-ionon izomer alapján, a többi izomer szennyeződésnek számít.
- A „B” és a „C” minőség 80%-nál kevesebb gamma (izo-alfa) metil-ionon izomert és legalább 10% egyéb izomert tartalmaz. Ezért ezek több összetevőből álló anyagoknak tekinthetők:
 - „B” minőség: a gamma (izo-alfa) metil-ionon (65-75%) és az alfa-n metil-ionon (10-20%) reakció tömege, a többi izomer szennyeződésnek számít.
 - „C” minőség: a gamma (izo-alfa) metil-ionon (50-60%) és az alfa-n metil-ionon (20-30%) reakció tömege, a többi izomer szennyeződésnek számít.

Az összetétel változó, egy izomer időnként 10%-ot elérő vagy azt meghaladó koncentrációban van jelen (ilyenkor alapesetben fő összetevőnek tekintendő), időnként pedig 10%-nál alacsonyabb koncentrációban (ilyenkor alapesetben szennyeződésnek tekintendő).

A különböző minőségeket külön-külön is lehetne regisztrálni. Ez három regisztrálást jelentene. Mindazonáltal indokolt lehet az adatok kereszthivatkozása.

További mérlegelési lehetőségek:

- Egyetlen regisztrálás két alminőséggel rendelkező, egy összetevőből álló anyagként. Ebben az esetben az alminőségek eltérnek a 80%-os szabálytól (lásd a 4.2.1. alpontot);
- Egyetlen regisztrálás 5 izomerből álló, meghatározott reakció tömegként (több összetevőből álló anyag). Ebben az esetben néhány izomer (fő összetevők) eltér a 10%-os küszöbtől, amely megkülönbözteti a fő összetevőket a szennyeződésektől (lásd a

4.2.2. alpontot);

- Egyetlen regisztrálás meghatározott reakciótömegként, amely esetben az összetétel változékonyságát magában foglalja az egyes izomerek teljes tartománya.

Fontos lehet az alábbiak figyelembevétele:

- A három minőség ugyanolyan vagy nagyon hasonló fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkezik.
- A három minőség felhasználása és expozíciós forgatókönyvei hasonlóak.
- Mindhárom minőség veszélyességi osztályozása és címkézése megegyezik, valamint a biztonsági adatlapok és a biztonsági jelentések tartalma azonos.
- A rendelkezésre álló vizsgálati adatok (és a jövőbeni vizsgálatok) magukban foglalják a három minőség változékonyságát.

Ebben a példában az anyagnak 5 izomerből álló, meghatározott reakciótömegként (több összetevőből álló anyag) történő azonosítása kerül bemutatásra. Indoklásra van szükség a 80%-os szabálytól (lásd a 4.2.1. fejezetet) és a 10%-os küszöbtől (a több összetevőből álló anyag meghatározása, lásd a 4.2.2. fejezetet) való eltérés miatt. Mivel mindegyik minőség önmagában kerül előállításra, ezért a három minőség mindegyikének összetételét meg kell határozni a regisztrálási dokumentációban. Hivatalosan azonban legalább két regisztrálásra lehet szükség: (1) Gamma (izo-alfa) metil-ionon és (2) gamma (izo-alfa) metil-ionon és az alfa-n-metil-ionon reakciótömege.

Anyagazonosítás

Az AH illatanyag három különböző minőségben (A, B és C) kerül előállításra, azonos minőségi, azonban eltérő mennyiségi összetétellel. Mindhárom minőség egyetlen, több összetevőből álló anyagra vonatkozó regisztrálási dokumentációban szerepel. Habár ez arra utal, hogy a meghatározást nem alkalmazták szigorúan, mégis indokolt az egyetlen, több összetevőből álló anyagként történő regisztrálás, mivel 1) a rendelkezésre álló vizsgálati adatok magukban foglalják a három minőség változékonyságát, 2) a három minőség nagyon hasonló fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkezik, 3) a három minőség veszélyességi osztályozása és címkézése megegyezik (ezért a biztonsági adatlapok azonosak), valamint 4) a három minőség felhasználása és expozíciós forgatókönyvei hasonlóak (ezért kémiai biztonsági jelentéseik is hasonlóak).

1. Név és egyéb azonosítók

IUPAC-név vagy egyéb nemzetközi kémiai név	Az alábbiak reakciótömege: 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il)but-3-én-2-on; 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-il)but-3-én-2-on; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il)pent-1-én-3-on; 1-(6,6-metil-2-metilén-ciklohex-1-il)pent-1-én-3-on; 1-(2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-il)pent-1-tén-3-on
Egyéb nevek	Metil-Ionon Gamma A Minőség Metil-Ionon Gamma B Minőség Metil-Ionon Gamma C Minőség

EK-szám	nem áll rendelkezésre
EK-név	/
EK-leírás	/
CAS-szám	nem áll rendelkezésre
CAS-név	/

2. Az összetételre vonatkozó információk – fő összetevők

Elméletileg lehetségesek további enantiomerek. Mindazonáltal az alábbi izomerek kerültek analízálásra:

Fő összetevők						
	IUPAC-név	CAS-szám	EK-szám	Mol. képlet Hill- módszer	Min. konc. (tömeg %)	Max. konc. (tömeg%)
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il)but-3-én-2-on	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-il)but-3-én-2-on	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il)pent-1-én-3-on	127-42-4	204-842-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	30
D	1-(6,6-metil-2-metilén-ciklohex-1-il)pent-1-én-3-on	nem áll rendelkezésre	nem áll rendelkezésre	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	4
E	1-(2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-il)pent-1-én-3-on	127-43-5	204-843-7	C ₁₄ H ₂₂ O	0,5	15

Fő összetevők	
Egyéb nevek	
A	alfa-izo-metil-ionon; gamma metil-ionon
B	beta-izo-metil-ionon; delta metil-ionon
C	alfa-n-metil-ionon
D	gamma-n- metil-ionon
E	beta-n- metil-ionon

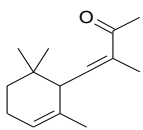
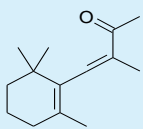
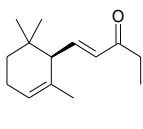
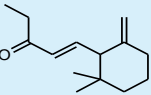
Fő összetevők		
	EK-név	EK-leírás
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il)-3-butén-2-on	/
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-il)-3-butén-2-on	/
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il)pent-1-én-3-on	/
D	1-(2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il)pent-1-én-3-on	/
E	1-(2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-il)pent-1-én-3-on	/

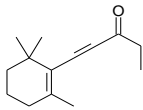
Fő összetevők		
	CAS-név	CAS-szám
A	3-butén-2-on, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il)-	127-51-5
B	3-butén-2-on, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-il)-	79-89-0
C	1-pentén-3-on, 1-[(1R)-2,6,6-trimetil-2-ciklohexén-1-il]-, (1E)-	127-42-4
D	nem áll rendelkezésre	nem áll rendelkezésre
E	1-pentén-3-on, 1-(2,6,6-trimetil-1-ciklohexén-1-il)-	127-43-5

Fő összetevők

	Egyéb azonosító kód	Hivatkozás
A	2714 07.036	FEMA EU Aromaanyagok Jegyzéke
B	07.041	EU Aromaanyagok Jegyzéke
C	2711 07.009	FEMA EU Aromaanyagok Jegyzéke
D	nem áll rendelkezésre	nem áll rendelkezésre
E	2712 07.010	FEMA EU Aromaanyagok Jegyzéke

Fő összetevők

	Molekulaképlet CAS-módszer	Szerkezeti képlet	SMILES-kód
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		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC
----------	-----------------------------------	---	------------------------------

Fő összetevők

	Molekulatömeg / g mol ⁻¹	Molekulatömeg-tartomány
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Összetételre vonatkozó információk – szennyeződések és adalékanyagok

Szennyeződések

	IUPAC-név	CAS-szám	EK-szám	Mol. képlet	Jellemző konc. (tömeg%)	Konc. tartomány (tömeg%)
F						
a nem meghatározott szennyeződések száma: a nem meghatározott szennyeződések teljes koncentrációja:				11 (pszeudo metil-iononok) 0,5 – 3 tömeg%		

Adalékanyagok

	IUPAC-név	CAS-szám	EK-szám	Mol. képlet	Jellemző konc. (tömeg%)	Konc. tartomány (tömeg%)

G	Butilezett hidroxitoluol (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05– 0,15
----------	--------------------------------	----------	-----------	-----------------------------------	-----	------------

4. A különböző minőségekkel kapcsolatos adatok

Az alábbi táblázat a három különböző minőség öt fő összetevőjének tartományait tartalmazza:

Koncentráció-tartomány [%]	A minőség	B minőség	C minőség
gamma (izo-alfa) metil-ionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (izo-béta) metil-ionon	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alfa n-metil-ionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-metil-ionon	0,5–1,5	2 - 4	2 - 4
béta n-metil-ionon	0,5–1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo metil-iononok	0,5–1,5	1 - 3	1 - 3

7.5. Ásványok

Az ásványok a Föld kérgében található szervesetlen összetevők kombinációjaként kerülnek meghatározásra. Jellemző a kémiai összetételük, a kristályos formájuk (az erősen kristályostól az amorfig) és a fizikai és kémiai tulajdonságaik.

Az ásványok mentesülnek a regisztrálás alól, amennyiben megfelelnek a természetben előforduló anyagok definíciójának (REACH-rendelet 3. cikk 39. pont), valamint abban az esetben, ha kémiaileg nem átalakított anyagoknak minősülnek (REACH-rendelet 3. cikk 40. pont). Ez azokra az ásványokra vonatkozik, amelyek kémiai szerkezete – kémiai folyamatot vagy kezelést, vagy fizikai ásványtani átalakítást, például a szennyezők eltávolítását követően is – változatlan marad.

Míg egyes ásványok egyedileg leírhatók kémiai összetételükkel (lásd az egy összetevőből és a több összetevőből álló anyagokra vonatkozó 4.2.1., illetve 4.2.2. alpontokat), addig más anyagok esetében a kémiai összetétel önmagában nem elegendő ezen anyagok egyedi azonosításához (lásd a 4.2.3. fejezetet).

Ellentétben más, egy összetevőből vagy több összetevőből álló anyagokkal, sok ásvány azonosításának a kémiai összetételén és a belső szerkezeten kell alapulnia (pl. ahogy röntgendiffrakcióval megállapításra került), mivel ezek együttesen adják az ásvány lényegét, és határozzák meg annak fizikai és kémiai tulajdonságait.

Hasonlóan más, több összetevőből álló anyaghoz, az ásványok (azaz a szervesetlen összetevők kombinációja) tekintetében is a CAS-számot kell használni az azonosítás részeként. A (szisztematikus ásványtan révén meghatározott) szervesetlen összetevők CAS-számai kerülnek

felhasználásra a különféle összetevők leírása céljából. Abban az esetben, ha egy egyedi szervesetlen összetevő kerülne előállításra (egy összetevőből álló anyag), akkor ennek az anyagnak a CAS-számát kellene használni az anyag azonosítására. Például:

- A kaolin ásvány (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) alapvetően primer és szekunder kaolinitből (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7) áll, amely egy hidratált alumino-szilikát agyag.

Abban az esetben, ha a kaolon egy összetevőjének, pl. a kaoliniteknek az előállításához a kaolint finomítási eljárásnak vetnék alá, akkor az anyag CAS-/EINECS-számai a következők lennének: EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- A bentonit ásvány (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) az EINECS-leírás szerint „A kolloid agyag. Elsődlegesen montmorillonitból áll”, nagy arányban tartalmazza a montmorillonit szervesetlen összetevőt (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), de nem kizárólag ezt.

Abban az esetben, ha tiszta montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) kerülne előállításra, akkor az anyag azonosításához használandó CAS-szám a montmorillonit CAS-száma lenne.

Hangsúlyozandó, hogy a bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) és a montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) nem tekintendő azonos anyagnak.

Végezetül tehát az ásványok megnevezése általában az azokat alkotó szervesetlen összetevők összessége alapján történik. Az ásványok tekinthetők egy, illetve több összetevőből álló anyagoknak is (általános útmutató a 4.2.1. és a 4.2.2. alpontokban található). Egyes ásványokat nem lehet a kémiai összetételükkel egyedileg leírni, hanem elegendő mértékű azonosításuk érdekében kiegészítő fizikai jellemzést vagy feldolgozási paramétereket kell megadni (lásd a 4.2.3. alpontot). Az alábbi táblázat néhány példát tartalmaz.

Ásványok példái

Név	CAS	EINECS	Kiegészítő leírás
Krisztobalit	14464-46-1	238-455-4	O_2Si (kristályszerkezet: köbös/tetragonális)
Kvarc	14808-60-7	238-878-4	O_2Si (kristályrendszer: trigonális/hexagonális)
Kovaföld	61790-53-2	-	Más nevei: diatomit, Kieselgur és celit Leírás: Lágy, szilíciumtartalmú szilárd anyag, kisméretű prehisztorikus vízi növények vázai alkotják. Elsődlegesen kovasavat tartalmaz.
Dolomit	16389-88-1	240-440-2	$CH_2O_3.1/2Ca.1/2Mg$
A földpát csoport ásványai	68476-25-5	270-666-7	Szervetlen anyag, magas hőmérsékleten végzett égetés reakcióterméke, amelynek során változó mennyiségű alumínium-oxid, bárium-oxid, kalcium-oxid, magnézium-oxid, szilícium-oxid és stroncium-oxid homogén és ionos interdiffúziója zajlik le, amelynek eredményeként kristályos mátrix jön létre.
Talkum	14807-96-6	238-877-9	$Mg_3H_2(SiO_3)_4$
Vermikulit	1318-00-9	-	$(Mg_{0.33}[Mg_{2-3}(Al_{0-1}Fe_{0-1})_{0-1}](Si_{2.33-3.33}Al_{0.67-1.67})(OH)_2O_{10}.4H_2O)$

Az ásványok tekintetében szükséges analitikai adatok

Elemi összetétel	A kémiai összetétel általános áttekintést nyújt az ásvány összetételéről, az összetevők számára és azoknak az ásványban lévő arányára való tekintet nélkül. A kémiai összetétel egyezményesen oxidokban kerül kifejezésre.
Spektrális adatok (röntgendiffrakció vagy azzal egyenértékű módszer)	A röntgendiffrakció vagy más technikák az ásványokat azok kristálytani szerkezete alapján tudják azonosítani. Az ásványt azonosító, jellemző röntgendiffrakciós vagy megfelelő egyéb adatokat az analitikai módszer rövid leírásával vagy bibliográfiai hivatkozással kell megadni.
Jellemző fizikai-kémiai tulajdonságok	Az ásványok jellemző fizikai-kémiai tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek lehetővé teszik teljes körű azonosításukat, pl. <ul style="list-style-type: none">- Nagyon kis keménység- Duzzadókéesség- A diatomit alakjai (optikai mikroszkóp)- Nagyon nagy sűrűség- Fajlagos felület (nitrogén adszorpció)

7.6. A Lavandin grosso illóolaja

Az illóolajok növényekből nyert anyagok. Ezért az illóolajok növényi eredetű anyagokként is jellemezhetők.

A növényi eredetű anyagok általában összetett természetes anyagok, növények vagy azok részeinek feldolgozása során olyan folyamatok segítségével keletkeznek, mint például az extrahálás, desztillálás, sajtolás, frakcionálás, tisztítás, töményítés vagy fermentálás. Ezen anyagok összetétele függ a nemzetségtől, a fajtól, a termesztés körülményeitől, az alapanyagok betakarítási időszakától, valamint az alkalmazott feldolgozási technikától.

Az illóolajok a több összetevőből álló anyagok gyakorlata alapján meghatározhatók fő összetevőikkel. Az illóolajok azonban akár több száz összetevőből is állhatnak, amelyek számos tényező függvényében (pl. nemzetség, faj, termesztési körülmények, betakarítási időszak, alkalmazott folyamatok) jelentős mértékben különbözhetnek egymástól. Ezért a fő összetevők leírása sok esetben nem elegendő ezen UVCB anyagok leírásához. Az illóolajokat a növényi forrással és a kezelési folyamattal kell leírni a 4.3.1. alpontban meghatározottak szerint (az UVCB anyagok 3. altípusának alkalmazásával).

Az illóolajok tekintetében sok esetben rendelkezésre állnak ipari szabványok (számos illóolaj tekintetében ISO-szabványok is). Kiegészítésként megadhatók a szabványokkal kapcsolatos információk. Az anyag azonosításának azonban a gyártott anyagon kell alapulnia.

Az alábbi példa a „Lavandin Grosso illóolajat” mutatja be, amely tekintetében rendelkezésre áll ISO-szabvány is (ISO 8902-1999).

1. Nevek és egyéb azonosítók

Forrás

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

Folyamat

Az anyag gyártása céljából alkalmazott (bio-)kémiai reakciók leírása:

A *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) virágzó csúcsainak vízgőz-desztillációja, valamint azt követően a víz elválasztása az illóolajtól;
Az ezt követő elválasztás egy spontán fizikai folyamat, amely alapesetben egy az elválasztott olaj egyszerű elkülönítését lehetővé tevő szeparátorban (egy úgynevezett „firenzei palack”-ban) zajlik le. A desztillálás e szakaszában a hőmérséklet 40 °C körül van.

Név

IUPAC-név vagy egyéb nemzetközi kémiai név	<i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) illóolaja
EK-szám EK-név EK-leírás	297-385-2 Levendula, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extraktum Kivonatok és azok fizikailag módosított származékai, úgymint tinktúrák, konkrétok, abszolútok, illóolajok, olajos gyanták, terpének, terpénmentes frakciók, párlatok, maradékok stb., amelyek a <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae-ből ³¹ kerülnek előállításra.
CAS-szám CAS-név	93455-97-1 Levendula, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extraktum

³¹ A „Labiatae” és a „Lamiaceae” szinonimák.

2. Összetételre vonatkozó információk – ismert összetevők

Ismert összetevők					
	Kémiai név EK CAS IUPAC egyéb	Szám EK CAS	Mol. képlet Hill- módszer	Jellemző konc. tömeg%	Konc. tartomán y tömeg%
A	EK linalil-acetát CAS 1,6-oktadién-3-ol, 3,7- dimetil-, acetát IUPAC 3,7-dimetilokta-1,6-dién-3-il- acetát	EK 204-116-4 CAS 115-95-7	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	33	28 – 38
B	EK linalool CAS 1,6-oktadién-3-ol, 3,7- dimetil- IUPAC 3,7-dimetilokta-1,6-dién-3-ol	EK 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] heptán-2-on, 1,7,7-trimetil- IUPAC 1,7,7-trimetilbiciklo[2.2.1]- 2-heptanon Egyéb kámfor	EK 200-945-0 CAS 76-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	7	6 – 8
D	EK Cineol CAS 2-oxabicyclo [2.2.2]oktán, 1,3,3-trimetil- IUPAC 1,3,3-trimetil-2- oxabicyclo[2.2.2]oktán Egyéb 1,8-cineol	EK 207-431-5 CAS 470-82-6	C ₁₀ H ₁₈ O	5,5	4 – 7

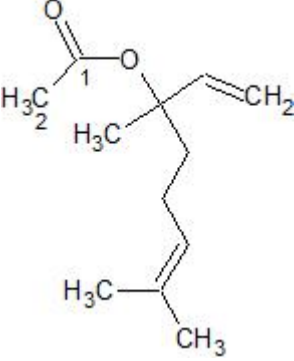
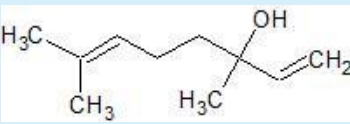
E	<p>EK P-ment-1-én-4-ol</p> <p>CAS 3-Ciklohexén-1-ol, 4-metil-1-(1-metiletil)-</p> <p>IUPAC 1-(1-metiletil)-4-metil-3-ciklohexén-1-ol</p> <p>Egyéb terpinén-4-ol</p>	<p>EK 209-235-5</p> <p>CAS 562-74-3</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	3,25	1,5– 5
F	<p>EK 2-izopropenil-5-metilhex-4-enil acetát</p> <p>CAS 4-hexén-1-ol, 5-metil-2-(1-metiletenil)-, acetát</p> <p>IUPAC 2-(1-metiletenil)-5-metilhex-4-én-1-ol</p> <p>Egyéb (±)-Lavandulol acetát</p>	<p>EK 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	2,25	1,5– 3
G	<p>EK DL-borneol</p> <p>CAS Biciklo[2.2.1]heptán-2-ol, 1,7,7-trimetil-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetilbicyclo[2.2.1]heptán-2-ol</p> <p>Egyéb borneol</p>	<p>EK 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	C ₁₀ H ₁₈ O	2,25	1,5– 3
H	<p>EK Kariofillén</p> <p>CAS Biciklo[7.2.0]undec-4-én, 4,11,11-trimetil-8-metilén-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metilénbicyclo[7.2.0]undec-4-én</p> <p>Egyéb transz-béta-kariofillén</p>	<p>EK 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,75	1– 2,5
I	<p>EK (E)-7,11-dimetil-3-metiléndodeka-1,6,10-trién</p> <p>CAS 1,6,10-dodekatrién, 7,11-dimetil-3-metilén-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-dimetil-3-metilén-1,6,10-dodekatrién</p> <p>Egyéb transz-béta-farnezen</p>	<p>EK 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	C ₁₅ H ₂₄	1,1	0,2– 2

J	EK (R)-p-menta-1,8-dién CAS ciklohexén, 1-metil-4-(1-metileténil)-, (4R)- IUPAC (4R)-1-metil-4-(1-metileténil)-ciklohexén Egyéb limonén	EK 227-813-5 CAS 5989-27-5	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5– 1,5
K	EK 3,7-dimetilokta-1,3,6-trién CAS 1,3,6-otatrién, 3,7-dimetil- IUPAC 3,7-dimetilokta-1,3,6-trién Egyéb cisz-béta-ocimén	EK 237-641-2 CAS 13877-91-3	C ₁₀ H ₁₆	1	0,5– 1,5

10%-ot elérő vagy azt meghaladó ismert összetevők

Ismert összetevők		
	EK-név	EK-leírás
A	linalil-acetát C ₁₂ H ₂₀ O ₂	
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O	

Ismert összetevők		
	CAS-név	Kapcsolódó CAS-számok
A	linalil-acetát C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7
B	linalool C ₁₀ H ₁₈ O	78-70-6

Ismert összetevők			
	Molekulaképlet CAS-módszer	Szerkezeti képlet	SMILES-kód
A	C ₁₂ H ₂₀ O ₂		
B	C ₁₀ H ₁₈ O		

Ismert összetevők		
	Molekulatömeg	Molekulatömeg-tartomány
A	196,2888	/
B	154,2516	/

7.7. Krizantémolaj és izolált izomerei

Egy adott vállalat a krizantémolajat a *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae-ből virágai és levelei összetörését követően víz/etanol (1:10) keverékből álló oldószer hozzáadásával extrahálás útján állítja elő. Az extrahálás után az oldószert eltávolítják, és a „tisztá” kivonatot tovább finomítják, melynek eredménye a kész krizantémolaj.

Továbbá két izomert izolálnak a kivonatból, amely az alábbi összetevők reakciótömege:

Jazmolin I

(Ciklopropán-karbonsav, 2,2-dimetil-3-(2-metil-1-propenil)-, (1S)-2-metil-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopentén-1-il észter, (1R,3R)-; CAS-szám 4466-14-2), és

Jazmolin II

(Ciklopropán-karbonsav, 3-[(1E)-3-metoxi-2-metil-3-oxo-1-propenil]-2,2-dimetil-, (1S)-2-metil-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopentén-1-il észter, (1R,3R)-; CAS-szám 1172-63-0

Ezen kívül a vállalat úgy döntött, hogy a Jazmolin I és II izomer-reakciótömegét szintetizálásnak is aláveti.

A vállalat az alábbi kérdéseket teszi fel:

1. Hogyan azonosítandó a krizantémolaj a regisztrálás céljából?
2. Magában foglalja-e az olaj regisztrálása a Jazmolin I és II izolált izomerek reakciótömegét?
3. Tekinthető-e a két izomer szintetizált keveréke a krizantémolajból izolált izomerek keverékével azonosnak?

1. Hogyan azonosítandó a krizantémolaj a regisztrálás céljából?

A krizantémolaj UVCB anyagnak tekintendő, amely nem azonosítható elegendő mértékben kémiai összetételével (a részletes iránymutatást lásd a 4.3. alpontban). Nélkülözhetetlenek az olyan egyéb azonosítási paraméterek, mint például a forrás és az eljárás. A krizantémolaj biológiai eredetű, azonosításához meg kell határozni azt a fajt, illetve a szervezet azon részét, amelyből kinyerték, valamint a finomítási folyamatot (oldószeres extrahálás). A kémiai összetételt és az összetevők azonosító adatait azonban - amennyiben ismertek - meg kell adni.

Az alábbi adatok tekintendők szükségesnek az anyag elegendő mértékű azonosításához:

Az anyag neve	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; összetört virágokból és levelekből víz:etanol (1:10) keverékével végzett extrahálással nyert olaj
Forrás	
Nemzetség, faj, alfaj	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae
A növénynek az olajhoz felhasznált része	Virágok és levelek

Folyamat				
A gyártás módszere	Összetörés, majd extrahálás			
Az extraháláshoz felhasznált oldószer	Víz:etanol (1:10)			
Az összetételre vonatkozó információk – ismert összetevők, tömeg%				
Az összetevő neve	EK-szám	CAS-szám	Min.%	Max.%
Piretrin I: 2-metil-4-oxo-3-(penta-2,4-dienil)ciklopent-2-enil[1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-krizantemát	204-455-8	121-21-1	30	38
Piretrin II: 2-metil-4-oxo-3-(penta-2,4-dienil)ciklopent-2-enil[1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)-2,2-dimetilciklopropán-karboxilát	204-462-6	121-29-9	27	35
Cinerin I: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oxociklopent-2-enil-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát	246-948-0	25402-06-6	5	10
Cinerin II: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oxociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)-ciklopropánkarboxilát	204-454-2	121-20-0	8	15
Jazmolín I: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát	nincs	4466-14-2	4	10

Jazmolín II: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-én-1-il [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]- 2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát	nincs	1172-63-0	4	10
Az anyag akár 40 további összetevőt is tartalmazhat, amelyek koncentrációja 1% alatt marad.				

Mérlegelhető az anyag jól meghatározott, több összetevőből álló anyagként történő azonosítása, amely hat fő összetevőből áll (a Piretrin I, Piretrin II, Cinerin I, Cinerin II, Jazmolín I és Jazmolín II reakciótömege).

Az anyagot akkor lehetne „természetben előforduló anyagnak” tekinteni, ha a gyártási folyamat csupán „összetörésből” állna, és mentesülne a regisztrálási kötelezettség alól, kivéve, ha a 67/548/EGK irányelv értelmében teljesülnek a veszélyesként történő besorolás kritériumai.

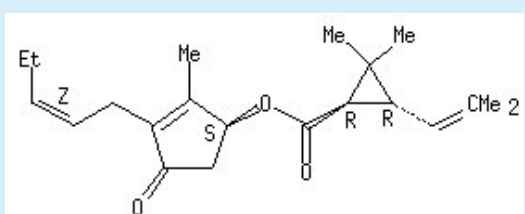
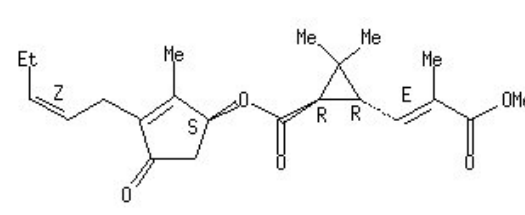
2. Magában foglalja-e az olaj regisztrálása a Jazmolín I és II izolált izomerek reakciótömegét?

A Jazmolín I és II izolált izomerek reakciótömegét a „*Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae olaj” regisztrálása nem tartalmazza, mivel a teljes UVCB anyag nem terjed ki az egyes összetevőkre, és fordítva. A Jazmolín I és II reakciótömege az olajtól eltérő anyagnak tekintendő.

A Jazmolín I és a Jazmolín II reakciótömege több összetevőből álló anyagnak tekinthető (részletes iránymutatást lásd a 4.2.3. alpontban), amely két fő összetevőből áll.

Az alábbi adatok tekintendők szükségesnek az anyag elegendő mértékű azonosításához:

Az anyag IUPAC-neve	Az alábbiak reakciótömege: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát és (2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-én-1-il [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát)			
Egyéb név	A Jazmolín I és a Jazmolín II reakciótömege			
Az anyag tisztasága	95 – 98 tömeg%			
Az összetételre vonatkozó információk – fő összetevők, tömeg%				
Az összetevő neve	EK-szám	CAS-szám	Min.%	Max.%

Jazmolín I: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát	nincs	4466-14-2	40	60
Molekulaképlet				
Szerkezeti képlet Molekulatömeg		C ₂₂ H ₃₀ O ₅ M = 374 g/mol		
Jazmolín II: 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-én-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát	nincs	1172-63-0	35	65
Molekulaképlet				
Szerkezeti képlet Molekulatömeg		C ₂₁ H ₃₀ O ₃ M = 330 g/mol		

3. Tekinthe-e a két izomer szintetizált keveréke (reakciótömege) a krizantémolajból izolált izomerek keverékével azonosnak?

Azon kémiai jól meghatározott anyagok tekintetében, amelyek elegendő mértékben leírhatók az összetevőikkel, nem lényeges, hogy az anyagot egy extraktumból izolálták, vagy egy kémiai eljárással szintetizálták. Ezért a Jazmolín I és Jazmolín II szintetizált reakciótömege azonosnak tekinthető a krizantémolajból izolált izomerkeverékkel, még abban az esetben is, ha az eltérő gyártási folyamat révén keletkezett, feltéve, hogy a keverék tisztasága és a fő összetevők koncentráció-tartománya azonos.

4. Következtetés

Két anyag került azonosításra:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; összetört virágokból és levelekből víz:etanol (1:10) keverékével végzett extrahálással nyert olaj
2. A Jazmolín I és Jazmolín II izomerek reakciótömege, függetlenül az anyag gyártási folyamatától.

Amennyiben a fenti anyagok *kizárólag* növényvédelmi és biocid termékekben kerülnének felhasználásra, akkor azok a REACH-rendelet (15. cikke) szerint regisztrálnak lennének tekintendők.

7.8. Fenol, izopropilált, foszfát

A fenol, izopropilált, foszfát (3:1) egy UVCB anyag, amelyben az izopropilált rész változékonysága nem határozható meg teljes körűen.

1. Név és egyéb azonosítók

IUPAC-név vagy egyéb nemzetközi kémiai név	Fenol, izopropilált, foszfát (3:1)
Egyéb nevek	Fenol, izopropilált, foszfát Fenol, izopropilált, foszfát (3:1) (propilén és fenol 1:1 molaránya alapján)
EK-szám EK-név EK-leírás	273-066-3 Fenol, izopropilált, foszfát (3:1) /
CAS-szám CAS-név	68937-41-7 Fenol, izopropilált, foszfát (3:1)

2. Az összetételre vonatkozó információk – fő összetevők

Fő összetevők					
IUPAC-név	CAS-szám	EK-szám	Mol. képlet Hill-módszer	Jellemző konc. (tömeg%)	Konc. tartomány (tömeg%)
Fenol, izopropilált, foszfát (3:1)	68937-41-7	273-066-3	nem meghatározott		

Fő összetevők	
EK-név	EK-leírás
Fenol, izopropilált, foszfát (3:1)	/
CAS-név	CAS-szám
Fenol, izopropilált, foszfát (3:1)	68937-41-7

7.9. Kvarterner ammóniumvegyületek

Egy adott vállalat az alábbi anyagokat szintetizálja:

„A” anyag

Kvarterner ammóniumvegyületek, di-C₁₀₋₁₈-alkildimetil, kloridok

EK-szám 294-392-2

CAS-szám 91721-91-4

Szénláncossz-eloszlás:

C₁₀ 10%

C₁₁ 5,5%

C₁₂ 12 %

C₁₃ 7,5 %

C₁₄ 18 %

C₁₅ 8 %

C₁₆ 24 %

C₁₇ 7 %

C₁₈ 8 %

„B” anyag

Kvarterner ammóniumvegyületek, di-kókuszosz-alkildimetil, kloridok

EK-szám: 263-087-6

CAS-szám: 61789-77-3

Ezen anyag pontos összetételét a vállalat nem ismeri.

„C” anyag

Didodecil-dimetil-ammónium-bromid

„D” anyag

Didodecil-dimetil-ammonium-klorid

„E” anyag

Az E anyag a didodecil-dimetil-ammonium-bromid és a didodecil-dimetil-ammonium-klorid (a C és a D anyag) reakció tömegeként kerül gyártásra.

„F” anyag

Kvarterner ammóniumvegyületek, di-C₁₄₋₁₈-alkildimetil-ammonium, kloridok

EK-szám: 268-072-8

CAS-szám: 68002-59-5

Szénlánc hossz-eloszlás:

C₁₄ 20 %

C₁₅ 10%

C₁₆ 40 %

C₁₇ 10%

C₁₈ 20 %

„G” anyag

Kvarterner ammóniumvegyületek, di-C₄₋₂₂-alkildimetil, kloridok

Szénlánc hossz-eloszlás (az egy vessző egy kettős kötést, a két vessző egy hármasszoros kötést jelöl):

C₄ 0,5%

C₆ 3,0%

C₈ 6,0%

C₁₀ 10,0%

C₁₂ 12,0 %

C₁₄ 24,0%

C₁₆ 20,0%

C₁₈ 16,0%

C_{18'} 2,0%

C_{18''} 0,5%

C₂₀ 4,0%

C₂₂ 2,0%

Mostanáig a vállalat az anyag megnevezésére csak a „B” anyagot (kvarterner ammóniumvegyületek, di-kókuszcukor-alkildimetil, kloridok, EK-szám 263-087-6, CAS-szám 61789-77-3) használta, mivel ez illeszkedik legjobban az összes anyaghoz („A” anyagtól „G” anyagig). A vállalat szeretné tudni, hogy le lehet-e fedni az összes anyagot („A”-tól „G”-ig) csupán a „B” anyag regisztrálásával.

1. 1. Általános észrevételek

A zsírokból és olajokból, illetve szintetikus szubsztituensekből származtatott szénhidrogének (paraffinok, olefinek) azonosítása szénlánc-hossz-eloszlásuk, eredetük (alkil deszkriptor), egy funkciós csoport (funkciós deszkriptor), pl. az ammónium, valamint az anion/kation (só deszkriptor), pl. a klorid alapján történik. A lánc-hossz-eloszlás, pl. C₈₋₁₈ az alábbiakra utal:

telített

egyenes (nem elágazó)

minden szénatomszámot magában foglal (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈), minthogy egy szűk eloszlás nem foglal magában egy szélesebbet, és fordítva

Máskülönben az alábbiak szerint kellene jelölni:

telítetlen (C₁₆telítetlen)

elágazó (C₁₀ elágazó)

páros számú (C₁₂₋₁₈ páros számú)

A forrással leírt szénláncoknak azt az eloszlást kell magukban foglalniuk, amely a kiinduló anyagban is szerepel, pl. faggyúalkil-aminok:

A faggyúalkil-aminok 99%-ban primer, egyenes láncú alkil-aminok, amelyek szénlánc-hossz-eloszlása a következő (Ullmann, 1985) [az egy vessző egy kettős kötést, a két vessző egy hármas kötést jelöl]:

C12 1%

C14 3%

C14' 1%

C15 0,5%

C16 29%

C16' 3%

C17 1%

C18 23%

C18' 37%

C18'' 1,5%

2. Hogyan azonosítandók az anyagok a regisztrálás céljából?

Minden egyes anyag a „B” anyaggal kerül összehasonlításra (amelyet mostanáig a megnevezésre használtak), annak eldöntése érdekében, hogy a két anyag azonosnak tekinthető-e.

Az „A” és a „B” anyag összehasonlítása

A „B” anyag „kókusz” összetevőjében a következő lánchossz-eloszlás található (Ullmann, 1985) [az egy vessző egy kettős kötést, a két vessző egy hármas kötést jelöl]:

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

Az „A” anyag lánchossz-eloszlása tehát eltér a „B” anyag „kókusz” összetevőjének szénlánchossz-eloszlásától. Mivel a két anyag minőségi és mennyiségi összetétele jelentősen eltér egymástól, ezért nem tekinthetők azonosnak.

A „B” és a „C” anyag összehasonlítása

A „kvarterner ammóniumvegyületek, di-kókusz-alkildimetil, kloridok” megnevezésű „B” anyag eltérő szénlánchosszúságú (C₆-tól C₁₈-ig páros számú, egyenes, telített és telítetlen) összetevők keverékét írja le, míg a „C” anyag csupán egy összetevőből áll, amely egyetlen meghatározott és telített szénlánchosszt (C₁₂) és egy másik aniont (bromidot) tartalmaz. Ezért a „C” anyag nem tekinthető a „B” anyaggal azonosnak.

A „B” és a „D” anyag összehasonlítása

A „kvarterner ammóniumvegyületek, di-kókusz-alkildimetil, kloridok” megnevezésű „B” anyag eltérő szénlánchosszúságú (C₆-tól C₁₈-ig páros számú, egyenes, telített és telítetlen) összetevők keverékét írja le, míg a „D” anyag egy összetevőből áll, amely egyetlen meghatározott és telített szénlánchosszt (C₁₂) és ugyanazt az aniont (kloridot) tartalmazza. A „B” és a „D” anyagok nevei eltérőek, és nem tekinthetők azonos anyagnak, mivel egy bizonyos összetevőt tartalmazó keverék nem fed le egy egyedi összetevőt, és fordítva.

A „B” és az „E” anyag összehasonlítása

Az „E” anyag a „C” és a „D” anyag keveréke. Mindkettő telített szénlánchosszal (C₁₂) rendelkezik, azonban az anionok eltérőek (bromid és klorid). A „kvarterner ammóniumvegyületek, di-kókusz-alkildimetil, kloridok” megnevezésű „B” anyag eltérő szénlánchosszúságú (C₆-tól C₁₈-ig páros számú, egyenes, telített és telítetlen) összetevők keverékét írja le, és anionként kloridot tartalmaz. Az „E” anyag azonban csak C₁₂ szénlánchosszt és kiegészítő anionként bromidot tartalmaz. Ezért a „B” és az „E” anyag nem tekinthető azonosnak. Következésképpen az „E” anyag tekintetében külön regisztrálásra van szükség.

A „B” és az „F” anyag összehasonlítása

A „kvarterner ammóniumvegyületek, di-C₁₄₋₁₈-alkildimetil-ammónium, kloridok” megnevezésű „F” anyag különböző szénlánchosszú (C₁₄-tól C₁₈-ig páros és páratlan számú, egyenes és telített) összetevők keveréke. Az „F” anyag különbözik a „B” anyagtól összetétele,

valamint szénlánc-hossz-eloszlás-tartománya tekintetében. Az „F” anyag szűk szénlánc-hossz-eloszlással rendelkezik, és tartalmazza továbbá a C₁₅ és C₁₇ szénláncokat. Ezért a „B” és az „F” anyag nem tekinthető azonosnak.

A „B” és a „G” anyag összehasonlítása

A „B” és a „G” anyag nagyon hasonlóknak tűnik, mivel a szénlánc-hossz-eloszlásuk csaknem ugyanabban a tartományban van. A „G” anyag azonban tartalmazza továbbá a C₄, C₂₀ és C₂₂ szénlánc-hosszokat is. A „G” anyag szénlánc-hossz-eloszlása szélesebb tartományt ölel fel, mint a „B” anyagé. Ezért a „B” és a „G” anyag nem tekinthető azonosnak.

3. Következtetés

A szénhidrogének (paraffinok, olefinok) csak abban az esetben tekinthetők azonosnak, ha mindhárom deskriptoruk (alkil, funkciós és só) azonos.

A fent bemutatott példákban a deskriptorok minden esetben különbözőek. Ezért kizárólag a „B” anyag regisztrálása nem foglalhatja magában az összes anyagot.

7.10. Ásványolaj

A 4.3.2. fejezetben tárgyalt specifikus UVCB anyagokra vonatkozó iránymutatás felhasználásával az alábbiakban két példa kerül bemutatásra.

7.10.1. Benzin keverékáram (C4-C12)

1. Név és egyéb azonosítók

Név

IUPAC-név vagy egyéb nemzetközi kémiai név	Benzin (nyersolaj), katalitikusan reformált
---	---

Forrás

Az anyagáram forrásának azonosítása vagy leírása	Nyersolaj
---	-----------

Folyamat

A finomítási folyamat leírása	Katalitikus reformálás
Szénatomszám-tartomány	C4-C12

Forráspont-tartomány	30 °C- 220 °C
Egyéb fizikai tulajdonságok, például viszkozitás	7 mm ² /s alatt 40 °C-on (viszkozitás)
EK-szám CAS-szám EK-név/CAS-név EK-leírás/CAS-leírás	273-271-8 68955-35-1 Benzin (nyersolaj), katalitikusan reformált Szénhidrogének komplex elegye, melyet katalitikus reformálási folyamat termékeinek desztillációjával nyernek. Olyan szénhidrogénekből áll, melyek szénatomszáma főleg a C4-C12 tartományban van, és a kb. 30°C-tól 220°C-ig (90°F-től 430°F-ig) terjedő tartományban forr. Viszonylag jelentős arányban tartalmaz aromás és elágazó láncú szénhidrogéneket. Ez a folyadék 10 térfogatszázalék vagy még több benzolt tartalmazhat.

2. Az összetételre vonatkozó információk

Ismert összetevők			
IUPAC-név	CAS-szám	EK-szám	Konc. tartomány (tömeg%)
Benzol	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluol	108-88-3	203-625-9	20-25
Xilol	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2. Gázolajok (ásványolaj)

1. Név és egyéb azonosítók

IUPAC-név vagy egyéb nemzetközi kémiai név	Gázolajok (ásványolaj), nehéz atmoszférikus
---	---

Forrás

Az anyagáram forrásának azonosítása vagy leírása	Nyersolaj
---	-----------

Folyamat

A finomítási folyamat leírása	Atmoszférikus desztilláció
Szénatomszám-tartomány	C7 - C35
Forráspont-tartomány	121°C és 510°C között
Egyéb fizikai tulajdonságok, például viszkozitás	20 mm ² /s alatt 40 °C-on (viszkozitás)
EK-szám CAS-szám EK-név/CAS-név EK-leírás/CAS-leírás	272-184-2 68783-08-4 Gázolajok (ásványolaj), nehéz atmoszférikus Szénhidrogének komplex elegye, melyet a nyersolaj desztillációjával nyernek. Olyan szénhidrogénekből áll, melyek szénatomszáma főleg a C7-C35 tartományban van, és a kb. 121°C-tól 510°C-ig (250°F-től 950°F-ig) terjedő tartományban forr.

2. Kémiai összetétel

Nincs adat.

7.11. Enzimek

A 4.3.2.3. alpontban tárgyalt specifikus UVCB anyagokra vonatkozó iránymutatás felhasználásával az alábbiakban két példa kerül bemutatásra: a szubtilizin (azonosítása az IUBMB-nómenklatúra és az egyéb összetevők segítségével) és az α -amiláz (azonosítása az IUBMB-nómenklatúra és az előállításhoz felhasznált szervezet segítségével).

7.11.1. Szubtilizin

Enzimfehérje	Szubtilizin
IUBMB-szám	3.4.21.62
Az IUBMB által megadott név (Szisztémás név, enzim név, szinonimák)	Szubtilizin; alkaláz; alkaláz 0,6L; alkaláz 2,5L; ALK-enzim; bacillopeptidáz A; bacillopeptidáz B; Bacillus szubtilis alkalin proteináz biopráz; biopráz AL 15; biopráz APL 30; kolisztináz; (lásd a megjegyzéseket is); szubtilizin J; szubtilizin S41; szubtilizin Sendai; szubtilizin GX; szubtilizin E; stb.
Az IUBMB megjegyzései	A szubtilizin egy szerin endopeptidáz, az S8 peptidáz család típuspéldája. Nem tartalmaz cisztein-maradékokat (bár ezek megtalálhatók a homológ enzimekben). A fajvariánsok tartalmazzák a szubtilizin BPN'-t (szubtilizin B-t, szubtiopeptidáz B-t, szubtilopeptidáz C-t, Nagarse-t, Nagarse proteinázt, szubtilizin Novo-t, bakteriális proteináz Novo-t) és a szubtilizin Carlsberg-et (szubtilizin A-t, szubtilopeptidáz A-t, alkaláz Novo-t). A korábbi száma EC 3.4.4.16 volt, és tartalmazta az EC 3.4.21.14. Hasonló enzimeket állítanak elő a különféle <i>Bacillus subtilis</i> törzsek és egyéb <i>Bacillus</i> fajok [1,3].
Reakció	A peptidkötések tekintetében széles specifitású fehérjék hidrolízise, és a P1 nagy semleges gyökének preferenciája. Hidrolizálja a peptid-amidokat.
Reakciótípus	Hidrolázok; Hatás a peptidkötésre (peptidázok); Szerin endopeptidázok
EK-szám	232-752-2
EK-név	Szubtilizin
CAS-szám	9014-01-1
CAS-név	Szubtilizin
Az enzimfehérje koncentrációja	26%

Egyéb összetevők	
Egyéb fehérjék, peptidek és aminosavak	39%
Szénhidrátok	11%
Lipidek	1%
Szervetlen sók	23%
További paraméterek	
Szubsztrátok és termékek	fehérjék vagy oligopeptidek, víz peptidek

7.11.2. α -amiláz

Enzimfehérje	α -amiláz
IUBMB-szám	3.2.1.1
Az IUBMB által megadott név (Szisztémás név, enzim név, szinonimák)	1,4- α -D-glükán-glükánhidroláz; glikogenáz; α -amiláz; alfa-amiláz; endoamiláz; Taka-amiláz A
Az IUBMB megjegyzései	Véletlenszerűen hat a keményítőre, a glikogénre és a kapcsolódó poliszacharidokra és oligoszacharidokra; redukált csoportok szabadulnak fel az α -konfigurációban. Az „ α ” meghatározás a kibocsátott szabad cukorcsoportok kezdeti anomer konfigurációjára vonatkozik, nem pedig a hidrolizált kapcsolatok konfigurációjára.
Reakció	Három vagy több 1,4- α -kötésű D-glükóz egység endohidrolízise három vagy több 1,4- α -et tartalmazó poliszacharidok kapcsolatok endohidrolízise

Reakciótípus	hidrolázok; glikozidázok; glikozidázok, azaz az O- és S- glikozilvegyületeket hidrolizáló enzimek
EK-szám	232-565-6
EK-név	Amiláz, α -
CAS-szám	9000-90-2
Kapcsolódó CAS-számok	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319- 50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (az összes törölve)
CAS-név	Amiláz, α -
Az enzimfehérje koncentrációja	37%
Egyéb összetevők	
Egyéb fehérjék, peptidek és aminosavak	30 %
Szénhidrátok	19 %
Szervetlen sók	14 %
További paraméterek	
Szubsztrátok és termékek	keményítő; glikogén; víz; poliszacharid; oligoszacharid;

I. függelék - Támogató anyagok

A jelen függelék olyan weboldalak, adatbázisok és kézikönyvek listáját tartalmazza, amelyek hasznosak lehetnek a megfelelő IUPAC-, CAS- és EK-nevek, a CAS- és EK-számok, a molekulaképlet és a szerkezeti képlet, beleértve a SMILES-jelölést is, valamint az anyag azonosításához szükséges egyéb paraméterek megtalálásában. A lista nem tartalmazza a kereskedelmi adatbázisokat és útmutatókat.

Általános		
Anyagazonosítási paraméter	Forrás	A forrás leírása
Department of Health and Human Services, USA	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Adatbázisok és eszközök családja, amely segítséget nyújt a felhasználóknak a kémiai adatok keresésében.
Perkin Elmer Informatics	Error! Hyperlink reference not valid. https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice	Ingyenes adatbázis, amely kémiai szerkezeteket, fizikai tulajdonságokat és releváns adatokra vonatkozó hipervivatkozásokat tartalmaz.
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/	Kémiai szoftver; betűrend szerinti terméklista

Név és egyéb azonosítók		
Anyagazonosítási paraméter	Forrás	A forrás leírása
IUPAC-név	https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/	Az IUPAC hivatalos weboldala
	https://iupac.qmul.ac.uk/	IUPAC vegyi anyag-nómenklatúra és ajánlások (az IUPAC felügyelete alatt)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Az IUPAC-nómenklatúra alapvető kiadványai, aktualizálás várható 2006-ban.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Az IUPAC-nómenklatúra alapvető kiadványai, aktualizálás várható 2006-ban.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Az IUPAC-nómenklatúra alapvető kiadványai, aktualizálás várható 2005 júliusában.
IUPAC-név	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Az IUPAC-nómenklatúra alapvető kiadványai
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Az összes vegyületfajtát tartalmazó, bevezető kötet
IUPAC-név	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Kereskedelmi forgalomban lévő, megnevezést szolgáló számítógépes program, amely nagyon hasznos lehet közepesen bonyolult szerkezetek megnevezésére. Kis molekulák tekintetében ingyenes szoftver is hozzáférhető (IUPAC által ajánlott).

	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	IUPAC szerves kémiai nevezéktan (IUPAC-ajánlással)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Szerves vegyületek jóváhagyott triviális és félszisztematikus neveinek teljes körű listája
	http://www.chemexper.com/	A ChemExper Chemical Directory célja a vegyi anyagok közös és ingyenesen hozzáférhető internetes adatbázisának létrehozása. Ez az adatbázis a vegyi anyagokat fizikai jellemzőikkel együtt tartalmazza. Bárki feltehet és letölthet vegyi anyagokkal kapcsolatos adatokat egy webes böngésző segítségével.
IUBMB-nómenklatúra	https://iubmb.qmul.ac.uk/	IUBMB biokémiai nómenklatúra adatbázis (az IUPAC felügyelete alatt)
Egyéb nevek	http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name	Színindex általános nevek, Nemzetközi színindex, negyedik online kiadás
	https://incipedia.personalcarecouncil.org/	INCI (Kozmetikai Összetevők Nemzetközi Nevezéktana, International Nomenclature Cosmetic Ingredients), a Personal Care Products Council (Testápoló Termékek Tanácsának) hivatalos weboldala
	https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges	US EPA (USA Környezetvédelmi Hatósága), változó szénláncosszú anyagok (az alkil-tartományok CX-Y jelöléssel)
Egyéb azonosítók	https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en	CE szabványok, hivatalos európai CE-oldal
EK-szám	https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory	EK-jegyzék: keresés az EINECS-, ELINCS-, NLP-listákon és a 67/548/EGK irányelv I. mellékletében

CAS-szám	http://www.cas.org http://www.chemistry.org	<p>A CAS regisztrációs szolgálat hivatalos weboldala</p> <p>Az American Chemical Society (Amerikai Kémiai Társaság) hivatalos weboldala</p>
----------	--	---

Molekula- és szerkezeti képlet

Anyagazonosítási paraméter	Forrás	A forrás leírása
SMILES	http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html	Ingyenes SMILES generátor
Molekulatömeg és SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html	ACDChemsketch, ingyenes szoftver (kereskedelmi forgalomban is elérhető)
Különböző fizikai-kémiai paraméterek	https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface	Az EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ egy Windows® alapú, a fizikai/kémiai tulajdonságok és a környezeti sors becslésére szolgáló modellekkel rendelkező program, amelynek fejlesztője az EPA Office of Pollution Prevention Toxics (Szennyezés és Mérgezés-megelőzési Hivatal) és a Syracuse Research Corporation (SRC).
Kiegészítő támogatás konkrét anyagok vonatkozásában	Kérdések és válaszok – ECHA Az anyagazonosítás ágazatspecifikus támogatása – ECHA	A konkrét anyagok megnevezésére és jellemzésére vonatkozó megközelítésekkel kapcsolatos támogatás az ECHA honlapján és a Kérdések és válaszok részben található.

II. FÜGGELÉK – TECHNIKAI ÚTMUTATÓ ANYAGAZONOSÍTÁSI PARAMÉTERENKÉNT

Az ebben a függelékben szereplő információk azoknak az útmutató dokumentumokat felhasználóknak szólnak, akik nem ismerik a nomenklatúra technikai szabályait, a különböző regiszter-számok használatát, a molekula- és szerkezeti információk jelölési szabályait, a spektrális adatokat stb.

Rövid általános bemutatást ad az alapelvek összefoglalásával, és a felhasználót teljes körű információkért az eredeti forráshoz kalauzolja.

Ez az áttekintés egy egyszerűsített változat, nem teljes vagy részletekbe menő, és nem kellően részletes a foglalkozásszerű felhasználók számára. Semmiképpen sem tekinthető a hivatalos forrással egyenértékűnek.

1. Az IUPAC-név (nevek) vagy más nemzetközi nomenklatúrában szereplő név (nevek)

A regisztráláshoz az anyag angol IUPAC-nevére vagy más jól meghatározott, nemzetközileg elfogadott névre van szükség.

Az IUPAC-név a nemzetközi standard kémiai nomenklatúra alapján kerül meghatározásra, amelyet egy nemzetközi szervezet, az IUPAC - Az Elméleti és Alkalmazott Kémia Nemzetközi Uniója - határoz meg (megfelelő hivatkozásokért lásd az 1. függelékét). Az IUPAC-nomenklatúra a szerves és szervetlen vegyi anyagok megnevezésének szisztematikus módja. Az IUPAC-nevezéktanban az előtagok, toldalékok és betoldások írják le az anyag funkcionális csoportjainak típusát és anyagbeli helyét.

penta-1,3-dién-1-ol, ebben a példában:

az előtag: **penta-1,3-**

a betoldás: **-di** és

a toldalék: **-ol**

az **en-** a név alapja, a gyökérnév.

A szabályok rendszerének kidolgozása többéves folyamat, és a rendszer folyamatosan változik az új összetevők változatos molekulái és a felismert lehetséges ellentmondások vagy keveredések kezelése érdekében. Az IUPAC által meghatározott szabályok kizárólag jól meghatározott anyagok esetén alkalmazhatók.

Az alábbiakban az IUPAC-név szerkezetére vonatkozó rövid, általános bemutatás szerepel. Részletes segítségnyújtásért kérjük, használja az útmutató 4. fejezetének útmutatóját.

1.1 Szerves anyagok

1. lépés Azonosítsa a C-atomok számát a leghosszabb folytonos szénláncban; ez a szám adja a gyökérnév előtagját, első részét:

Szénatomok száma	Gyökér
1	met-

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

2. lépés Határozza meg a lánc telítettségét; a lánc telítettsége adja a toldalékot, a gyökérvég második részét:

Telítettség	Kötések	Toldalék
Telítetlen	Kettős Hármas	-én -in
Telített	-	-án

Többszörös kettős vagy hármas kötések esetén a kötések számát a „mono”, „di”, „tri” stb. jelölésekkel kell feltüntetni a toldalék előtt:

Pentén 2 db kettős kötéssel: pentadién

3. lépés Kapcsolja össze a gyökérvégvel az előtagot, a betoldást és a toldalékokat.
Megjegyzés: Gyökérvégként használhatók az IUPAC által jóváhagyott triviális és félszisztematikus nevek is:
benzol, toluol stb.

4. lépés Használja az alábbi táblázatot:

- Azonosítsa a szubsztituenseket és/vagy funkciós csoportokat: az 1. lépésben azonosított szénláncához kapcsolódó szénatomokat tartalmazó vagy nem tartalmazó csoportokat;
- Határozza meg a szubsztituensek és/vagy a funkciós csoportok elsőbbségi sorrendjét;
- Írja hozzá az első szubsztituens/funkciós csoporthoz tartozó toldalékot, majd a rákövetkezőket az elsőbbség sorrendjében;
- Írja hozzá az egyéb szubsztituens és funkciós csoportok előtagjait abc-sorrendben.

Sorrend	Csoport	Képlet	Toldalék	Előtag
---------	---------	--------	----------	--------

1	Karbonsav	R-COOH	-oxilsav	Karboxi
2	Észter	R-CO-O-R	-oát	-
3	Amid	R-CONH ₂	-amid	Karbamoil
4	Cianid	R-CN	-nitril	Ciano
5	Aldehid	R-CHO	-al	Oxo
6	Keton	R-CO-R	-on	Oxo
7	Alkohol	R-OH	-ol	Hidroxil
8	Tiol	R-SH	-tiol	Szulfanil
9	Amin	R-NH ₂	-amin	Amino

1.2 Szervetlen anyagok

1.2.1 Egyszerű szervetlen anyagok megnevezése

A szervetlen anyagok megnevezése egy szabályrendszeren alapul (IUPAC Piros könyv, lásd a hivatkozást a 7.1. alpontban), amelyből a legalapvetőbb szabályokat az alábbiakban mutatjuk be:

- 1 Az egy atomos anionok megnevezése az -id toldalékkal történik:

O²⁻: oxid

- 2 Az egyszerű ionos vegyületek megnevezésében először a kation neve, majd az anion neve szerepel. Az 1-et meghaladó töltöttségű kationoknál a töltés száma római számokkal szerepel zárójelben, közvetlenül az elem neve után:

Cu²⁺: réz (II)

- 3 A hidrátok megnevezése ionos vegyületként történik, melyet egy számot jelző előtag és a „-hidrát” toldalék követ. A számot jelző előtag lehet mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, okta-, nona-, deka-:

CuSO₄ · 5H₂O: „réz(II)-szulfát-pentahidrát”

Megjegyzés: a regisztrálás szempontjából egy adott fémsó hidrátjai és adott esetben annak vízmentes formája „azonos anyagnak” tekintendő.

- 4 A szervetlen molekulavegyület megnevezésekor minden elem elé előtagot kell tenni (ld. hidrátok). A legnagyobb elektronegativitású elemet kell utoljára írni, a végén az -id toldalékkal:

CO₂: szén-dioxid, CCl₄: szén-tetraklorid.

- 5 A savakat a vízben való oldásukkor képződő anion szerint kell megnevezni. Több lehetőség áll rendelkezésre:

a. Amennyiben vízben oldva a sav „x”-id nevű anionná disszociál, akkor a sav megnevezése hidro-„x”-id savként történik:

hidrogén-klorid képezi a klorid aniont.

- b. Amennyiben vízben oldva a sav „x”-át („x”-ate) megnevezésű anionná disszociál,

akkor a sav megnevezése angolul „x”-ic acid:

klórsav (chloric acid) kloráttá (chlorate) disszociál vízben.

c. Amennyiben vízben oldva a sav „x”-it megnevezésű anionná disszociál, akkor a sav megnevezése „x”-os sav lesz:

klóros sav klorit anionokra disszociál.

1.2.2 Az ásványok megnevezése

A komplex ásványok általában három vagy több elemből állnak. A legtöbb jelen lévő elem oxigénhez kapcsolódik, és az azonosítás megkönnyítése érdekében a komplex vegyületeket a mineralógusok oxidokból felépített anyagoknak tekintik, amelyek közül néhány bázikus és néhány savas jellegű. A szilikátok esetén például az a gyakorlat alakult ki, hogy azokat vagy számos oxid összegeként vagy a kóvasav sóiként vagy aluminoszilikátként írják le. Értelemszerűen a kalcium ortoszilikát képlete lehet $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$, különálló oxidok elegyeként, vagy Ca_2SiO_4 , mint a H_4SiO_4 ortokóvasav kalcium sója. Ugyanez vonatkozik más komplex ásványi oxidokra is – megnevezésükkor minden oxid előtt előtag van (pl. Ca_3SiO_5 = trikalcium-szilikát = $3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$). Néhány iparágban további egyszerűsítések kerültek bevezetésre a molekulaképlet lerövidítése érdekében. A Portland cementklinker esetén például a $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ (kalcium-ortoszilikát vagy dikalcium-szilikát) rövidítve C_2S , ahol $\text{C}=\text{CaO}$ és $\text{S}=\text{SiO}_2$. Ajánlott standard ásványtani vagy ipari szövegekre hivatkozni, amennyiben komplex ásványtani fázisokat kell megnevezni vagy azonosítani.

1.3 Természetes termékek és kapcsolódó összetevők

A természetes termékek esetében az IUPAC számos szabályt dolgozott ki a szisztematikus megnevezésre. Röviden ez azt jelenti, hogy a természetes forrásokból kivont anyagok megnevezése, hacsak lehet, annak az organizmusnak a család-, nemzetség- vagy fajnevéen alapul, amelyből az anyag kivonásra került:

Egy hipotetikus protein, a *Hypothecalia Exemplare* esetén a nevek a *hypothecalia* és/vagy az *exemplare* szavakon alapulnak, például *Horse Exemplare*.

Amennyiben lehetséges, a név tükrözze a természetes termék ismert vagy valószínű eloszlását. Adott esetben az osztály vagy rend is felhasználható egy olyan anyag megnevezésének alapjaként, mely több rokon családban is előfordul. Az ismeretlen szerkezetű természetes termékek neve ne tartalmazzon semmilyen a szerves nomenklatúrában használatos előtagot, toldalékot és/vagy betoldást:

Horse exemplare kondenzációs terméke, Valarine, az N-terminushoz adva

Sok természetben előforduló anyag jól meghatározott szerkezeti osztályokhoz tartozik, amelyek mindegyike hasonló szerkezetek készletével jellemezhető, azaz mindegyik egy alapszerkezetből származtatható. Ezeknek a természetben előforduló anyagoknak és származékaiknak a szisztematikus neve a megfelelő alapszerkezet nevéen alapul:

Jól ismert alapszerkezetek az alkaloidok, szteroidok, terpenoidok és a vitaminok.

Az alapszerkezetnek tükröznie kell az adott osztály legtöbb anyagára jellemző alapvázat.

A természetben előforduló anyagok vagy származékaik megnevezése az alapszerkezet szerint, előtagok, toldalékok és betoldások hozzáadásával történik, a következő jelentéssel:

- a vázszerkezet módosítása
- a váz atomjainak helyettesítése
- az alapszerkezet nevében foglalt hidrogénezés állapotában bekövetkező változások
- az alapszerkezet hidrogénatomjait helyettesítő atomok vagy csoportok
- az alapszerkezet nevében nem jelzett konfigurációk, vagy a névben jelzetthez képest megváltozott konfigurációk

A tiamin-klorid B₁ vitaminként is ismert

A természetes termékek és kapcsolódó anyagok megnevezésére vonatkozó részletes információkért kérjük, lépjen kapcsolatba az IUPAC-kal (lásd az 1. függelék).

1.4 A nem levezethető IUPAC-név

Amennyiben bizonyos anyagok tekintetében az IUPAC-név nem vezethető le, akkor más, az adott anyagokra nézve specifikus nemzetközi nómenklatúra használható, mint pl.:

- Ásványok és ércek; mineralógiai nevek;
- Ásványolaj
- Színindex általános nevek 3;
- Olajadalékok;
- INCI (Kozmetikai Összetevők Nemzetközi Nevezéktana) 4;
- SDA (Soap and Detergent Association, Szappan és Mosószer Szövetség) felületaktív anyagok nevei 5;
- stb.

2 Egyéb nevek

A REACH-rendelet keretében történő regisztráláskor célszerű minden olyan releváns nevet és/vagy nyilvános azonosítót minden olyan nyelven a megadni, amelyekben az anyagot az EU területén forgalmazzák vagy forgalmazni fogják (pl. kereskedelmi nevek). Ebbe beletartoznak a kereskedelmi nevek, szinonimák, rövidítések stb.

- <http://www.colour-index.com>, Nemzetközi színindex, negyedik online kiadás
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, a Personal Care Products Council (Testápoló Termékek Tanácsának) hivatalos weboldala
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, az American Cleaning Institute (Amerikai Tisztítószeripari Intézet) ACI) hivatalos weboldala.

3 EK-szám az EINECS-ből, ELINCS-ből vagy az NLP-ből (EK-jegyzék)

Az EK-szám, azaz az EINECS-, ELINCS- vagy NLP-szám az anyag hivatalos száma az Európai Unión belül. Az EK szám beszerezhető az EINECS, ELINCS, NLP és az Európai Vegyianyag-ügynökség hivatalos publikációiból.

Az EK-szám 7 számjegyből áll, amelynek formátuma: x₁x₂x₃-x₄x₅x₆-x₇. Az első számjegyet az a lista határozza meg, amelyhez az anyag tartozik:

Lista	Az EK-szám első számjegye
EINECS	2 vagy 3
ELINCS	4
NLP	5

4 CAS-név és CAS-szám

A Chemical Abstracts Service (CAS), az American Chemical Society (Amerikai Kémiai Társaság, ACS) egyik szervezeti egysége, CAS-nevet és -számot rendel minden, a CAS regisztrációs adatbázisba kerülő vegyi anyaghoz. A nevek és a számok egymás utáni sorrendben kerülnek hozzárendelésre az egyes, a CAS tudósai által azonosított anyagokhoz. Minden a CAS-nél regisztrált anyagnak CAS-nómenklatúra szerinti neve van, amelyet az ACS saját nómenklatúra bizottságának javaslatait követően elfogad (lásd a hivatkozásokat az 1. függelékben).

4.1 CAS-név

A CAS-nevet a Chemical Abstract Service adja, és ez nem egyezik meg az IUPAC-névvel. A CAS nómenklatúra alapját egy korlátozott kritérium-rendszer képezi, ezek a kritériumok nem mindig elegendők az anyag nevének származtatásához. Ezért általában ajánlott a Chemical Abstract Service-szel felvenni a kapcsolatot a helyes CAS-név beszerzése érdekében.

A nómenklatúra alapszabályai röviden a következők:

- Ki kell választani az anyag „fő” részét, ez lesz a címszó vagy az alapvegyület.
- A szubsztituensek a címszó/alapvegyület után kerülnek felsorolásra, amelyre fordított sorrendben hivatkoznak.
- Amennyiben több szubsztituens van jelen, azokat betűrendben kell felsorolni (beleértve az előtagokat is):

o-xilol-3-ol azaz benzol, 1,2-dimetil, 3-hidroxi,

4.2 CAS-szám

A CAS-szám a Chemical Abstract Service-től szerezhető be.

A CAS-szám egy minimum 5 számjegyből álló, három részre bontott, egymástól kötőjellel elválasztott szám. A második rész mindig 2 számjegyből, a harmadik rész mindig 1 számjegyből áll:

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

A CAS-szám ellenőrzéséhez egy „ellenőrző összeg” áll rendelkezésre:

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

A CAS-számnak az ellenőrző összeg alapján helyesnek kell lennie.

5 Egyéb azonosító kódok

Egyéb, nemzetközileg elfogadott azonosító kódok is megadhatók, mint pl.:

- Váamazonosító szám
- ENSZ-szám;
- színindexszám;
- Színezékszám.

6 Molekulaképlet, szerkezeti képlet és SMILES

6.1 Molekulaképlet

A molekulaképlet határozza meg az egyes elemeket azok vegyjele segítségével, és azonosítja az összes ilyen, az anyag egy különálló molekulájában található elem atomszámát.

A molekulaképletet a (hagyományos) Hill-rendszer szerint kell megadni, és kiegészítésként a CAS-rendszer szerint, amennyiben ez eltér a Hill-rendszer szerinti képlettől.

A Hill-módszer alkalmazásához a következő lépéseket kell követni:

1. Azonosítsa az elemeket, és sorolja fel a vegyjeleket;
2. Tegye az elemeket a helyes sorrendbe:

a. Széntartalmú anyagok:

A következő sorban minden elem a vegyjelével szerepel:

(1) Szén;

(2) hidrogén;

(3) A többi elem vegyjele betűrendben:

Pentán: C₅H₁₂

Pentén: C₅H₁₀

Pentanol: C₅H₁₂O

b. Szenet nem tartalmazó anyagok:

Minden elem betűrendben szerepel:

Sósav: ClH

3. Minden olyan elem esetén, ahol az atomok száma 1-nél több, az atomok számát alsó indexben kell jelezni a vegyjel után;

4. A fő szerkezethez nem kapcsolódó információkat a molekulaképlet végén, ponttal vagy vesszővel elválasztva adja meg:

Nátrium-benzoát, azaz C₇H₆O₂, nátriumsó

Réz-szulfát-dihidrát, azaz CuO₄S₂H₂O

Amennyiben a Hill-módszer egy adott anyag esetén nem alkalmazható, a molekulaképlet ettől eltérő módon kell megadni, például empirikus képletként, az atomok egyszerű leírásával és a rendelkezésre álló atomok arányával, vagy a Chemical Abstract Service által megadott képlet szerint (lásd az útmutató 4. fejezetét).

6.2 A szerkezeti képlet és a kristályszerkezet leírása

A szerkezeti képlet a molekulák anyagon belüli diszpozíciójának és egymáshoz való

kapcsolatának szemléltetésére szolgál. A szerkezeti képlet jelzi az atomok, ionok vagy csoportok elhelyezkedését és a közöttük lévő kötések jellegét. Ebbe bele tartozik az izoméria, azaz cisz/transz, kiralitás, enantiomerek stb.

A szerkezeti képletet különféle formátumokban lehet megadni: molekulaképlet és/vagy szerkezeti ábra formájában.

- Szerkezeti képlet molekulaképletként

1. Írja le az összes elemet csoportonként és megjelenésük sorrendjében:

n-pentán: CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

2. Adjon meg minden szubsztituenst zárójelben, közvetlenül amögött az atom mögött, amelyhez kapcsolódik:

2-metilbután: CH₃CH(CH₂)CH₂CH₃

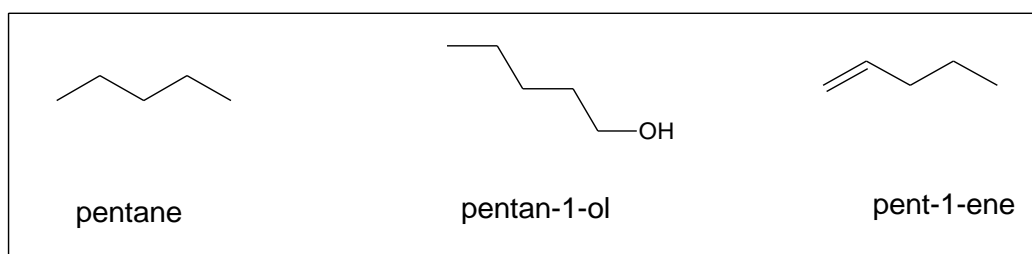
3. Kettős és hármas kötések esetén azokat az érintett elemcsoportok között adja meg:

pent-1-én: CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

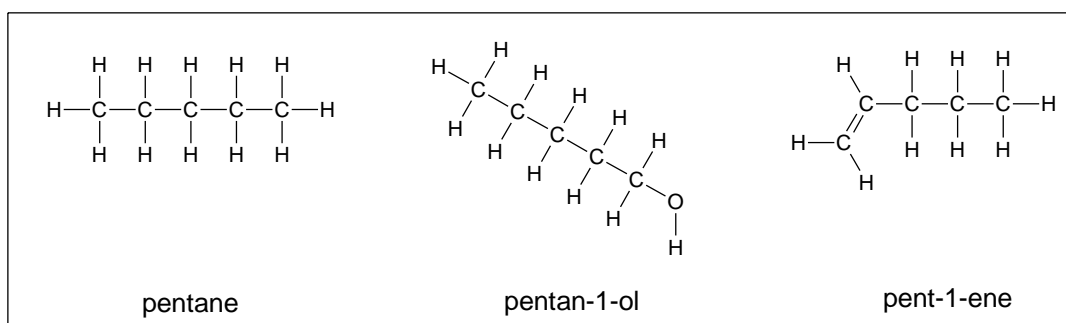
- Szerkezeti képlet szerkezeti ábra formájában

Szerkezeti ábra esetén az elemek és a köztük lévő kötések ábrázolása két- vagy háromdimenziós képen történik. Különböző módszerek ismertek:

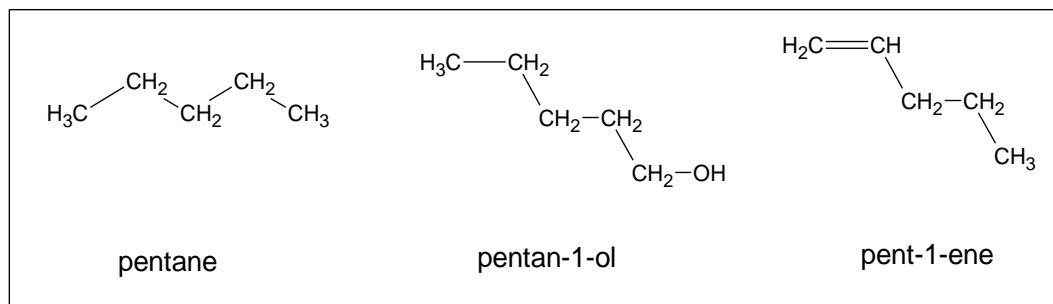
1. Az összes, szén nem tartalmazó elem és a hozzájuk kapcsolódó hidrogén feltüntetése.



2. Az összes elem névvel történő feltüntetése



3. A szén és a hidrogén csoportonként történő feltüntetése (pl. CH₃), az összes, szén nem tartalmazó elem és az összes, szénhez nem kapcsolódó hidrogén megjelenítése.

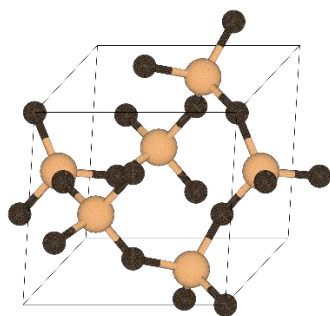


- Szerkezeti képlet molekulaképletként

1. Adja meg a molekulaképletet:

SiO₂

2. Adja meg az anyag kristályszerkezetét.



3. Adja meg az ásványtani és/vagy kristálytani megnevezést a kristályrendszer³² és a kristályosztály alapján:

a-kvarc [*β*-kvarc] / **kristályrendszer:** négyzetes – hatszöges, **kristályosztály:** trigonális-trapezoéder 3 2

6.3 SMILES-jelölés

A SMILES mozaikszó jelentése: Simplified Molecular Input Line Entry Specification (Molekulák egyszerűsített egy sorban történő beviteli rendszere).³³ Ez egy kémiai jelölési rendszer a molekulaszervezet lineáris sorban lévő szimbólumokkal történő leírására. A standard SMILES-rendszerben a molekula neve a szerkezetével rokon értelmű: ez közvetve a molekulaszervezet kétdimenziós képét mutatja. Mivel a kétdimenziós kémiai szerkezet többféle módon ábrázolható, ezért egy molekula tekintetében több helyes SMILES-jelölés is lehetséges. A SMILES alapja a molekulák vegyérték-modelljének bemutatása; ezért nem alkalmas olyan molekulák leírására, amelyek nem ábrázolhatók vegyérték-modellel.

³² köbös/tetragonális/rombos/romboéderez (vagy trigonális)/hexagonális/monoklin/triklin

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.

A SMILES-jelölések alapszimbólumokkal jelölt atomokból, kötésekől, elágazásokat jelölő zárójelekből és a gyűrűs szerkezeteket jelölő számokból épülnek fel. A SMILES-jelölés a molekulaszervezetre a lehetséges királis jelzések grafikonjaként utal. A szerkezetet kizárólag kötések és atomok függvényében leíró SMILES-jelölést általános SMILES-nak nevezik; az izotópos és királis specifikációkkal leírt SMILES-jelölés izomer SMILES-ként ismert.

A SMILES-jelölés különböző alapszabályai röviden:

1. Az atomok vegyjelekkel kerülnek leírásra;
2. Minden atomot, a hidrogén kivételével, függetlenül kell megadni;
 - a. a „szerves részalmaz” elemeit: B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br és I zárójel és a hozzájuk tartozó H nélkül kell megadni, ha a hidrogének (H-k) száma megegyezik a legkisebb normál, a tényleges kötésekkel összhangban lévő vegyértékekkel (vegyértékekkel):

A „szerves részalmaz” elemei	„Legkisebb normál vegyérték”
B	3
C	4
N	3 és 5
O	2
P	3 és 5
S	2, 4 és 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. A „szerves részalmaz” elemeit zárójelbe kell tenni, amennyiben a H-k száma nem egyezik meg a legkisebb normál vegyértékekkel:

Ammóniumkation jelölése: NH₄⁺

- c. A „szerves részalmaz”-ba nem tartozó elemeket zárójelben kell leírni az összes, hozzájuk csatlakozó hidrogén feltüntetésével.

3. Az alifás atomok nagybetűvel; az aromás atomok kis betűvel szerepelnek:

benzol: c1ccccc1, ciklohexán: C1CCCCC1

4. A hidrogént csak a következő helyzetekben kell feltüntetni:

- a. Elektromos töltésű hidrogén, azaz proton [H+];
- b. Másik hidrogénekhez kapcsolódó hidrogének, azaz hidrogénmolekula [H][H];
- c. Több másik atomhoz kapcsolódó hidrogének, pl. hídképző hidrogének;
- d. Izotópos hidrogének felsorolása, pl. deutérium ([2H]);
- e. Amennyiben a hidrogén egy királis atomhoz kapcsolódik.

5. Az alábbiakban a négy alapkötés kerül ismertetésre:

Kötéstípus	SMILES-jelölés
Egyszeri	- (nem szükséges jelölni)
Kettős	=
Hármas	#
Aromás	kisbetűk

6. A szubsztituenseket mögötte, zárójelben kell megadni, közvetlenül az után az atom után, amelyhez kapcsolódik:

2-metilbután: CC(C)CC

- a. A szubsztituensek mindig közvetlenül a releváns atom után szerepelnek; nem következhetnek kettős vagy hármas kötés jelölése után:

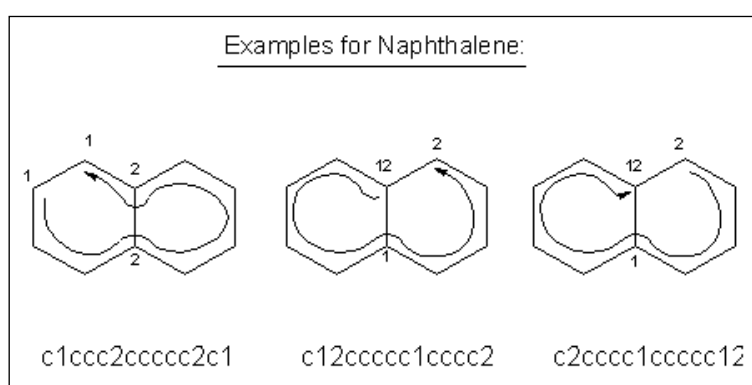
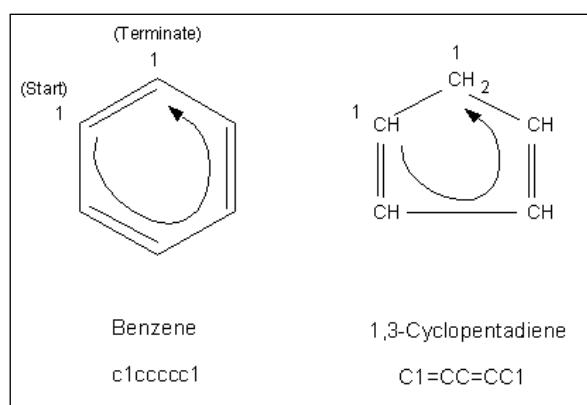
Pentánsav: CCCCC(=O)O

- b. A szubsztituenseken belüli szubsztituensek jelölése megengedett:

2-(1-metiletil)bután: CC(C(C)C)CC

7. Gyűrűs szerkezeteknél az 1-9 számok a gyűrű induló és záró atomjainak jelzésére szolgálnak.

- a. Minden gyűrűnél ugyanaz a szám szolgál az induló és a záró atom jelzésére. Az induló és a záró atomnak kapcsolódnia kell egymáshoz.
- b. A számokat közvetlenül az induló és záró pozíciókat jelző atomokat követően kell feltüntetni.
- c. Az induló vagy záró atom két egymást követő számmal is társítható.



8. A több részből álló vegyületeket egyéni szerkezetekként vagy ionokként kell jelölni és egymástól ponttal elválasztani („.”). Az egymástól ponttal elválasztott („.”), szomszédos atomok nem közvetlenül kapcsolódnak egymáshoz, hanem pl. Van der Waals-kötéssel:

Aminopropén-hidroklorid: C=CC(N).HCl

9. Az izomer konfigurációt a „per-” jelek jelölik: „\” és „/”. Ezek a jelek jelölik a két izomer kötés közötti relatív irányt (cisz=„/”, transz=„\”). A SMILES helyi kiralitást használ, ami azt jelenti, hogy a kiralitást teljes körűen kell meghatározni:

cisz-1,2-dibrómetén: Br/C=C\Br

transz-1,2-dibrómetén: Br/C=C/Br

10. Az enantiomereket vagy a kiralitást a „@” szimbólum jelöli. A „@” szimbólum azt jelöli, hogy a királis atom egymást követő szomszédjai az óramutató járásával ellentétesen kerülnek felsorolásra. Amennyiben a „@@” szimbólumot használják, akkor az atomok az óramutató járásával megegyezően kerülnek felsorolásra. A királis atom és a „@” jel szögletes zárójelben szerepelnek:

2-klór-2-hidroxi-propánsav

meghatározott kiralitással: C[C@](Cl)(O)C(=O)O

11. Az izotóp meghatározásokat az atom vegyjele elé írt, a vonatkozó teljes atomtömeggel megegyező számmal jelöljük. Az atomtömeg kizárólag szögletes zárójelben adható meg:

Szén-13: [13C] és Oxigén-18: [18O]

A SMILES-jelölés meghatározásához különböző eszközök (SMILES generátorok) állnak

rendelkezésre (lásd az 1. függelék).

7 Az optikai aktivitással kapcsolatos információk

Az optikai aktivitás az aszimmetrikus anyagok azon képessége, hogy a síkban polarizált fény síkját elforgatják. Az ilyen anyagok és tükörképek enantiomerekként ismertek, és egy vagy több királis centrummal rendelkeznek. Habár a geometriai elrendezésükben különböznek, az enantiomerek ugyanazon kémiai és fizikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Mivel minden egyes típusú enantiomer másként hat a polarizált fényre, ezért az optikai aktivitás használható annak azonosítására, hogy melyik enantiomer van jelen a mintában, és így az anyag tisztaságának jellemzésére is. Az elforgatás magnitúdója a molekula lényegi tulajdonsága.

Az enantiomerek mindig ellentétes forgatással rendelkeznek: ugyanolyan mértékben polarizálják a fényt, de ellentétes irányba. Az enantiomer keverék optikai aktivitása a két enantiomer arányának jelzője. Az 50-50%-os enantiomer keverék optikai aktivitása 0.

A megfigyelt forgatás függ a koncentrációtól, a kivetta hosszától, a hőmérséklettől és a fényforrás hullámhosszától.

Az optikai aktivitás ezért az aszimmetrikus anyag azonosításának meghatározó paramétere; és ez az egyetlen paraméter, amely megkülönbözteti az anyagot a tükörképétől. Ezért lehetőség szerint meg kell adni az anyag optikai aktivitását.

Az optikai aktivitás alapértékét fajlagos forgatóképességnek nevezik. A fajlagos forgatóképesség meghatározása: a fény megfigyelt forgatása 5896 Angström hullámhossznál, 1 dm-es úthossz, 1 g/ml koncentrációnál. A fajlagos forgatóképesség: a megfigyelt forgatóképesség értéke osztva az út hosszával (dm), szorozva a koncentrációval (g/ml).

Az optikai aktivitás mérésére számos különböző módszer alkalmazható. A leggyakoribbak:

- Optikai forgatás, ahol a mintán áthaladó fénysugár polarizációja síkjának elforgatását mérik;
- Cirkuláris dikroizmus, amely során a mintában a jobbra és a balra polarizált fény elnyelését mérik.

Amennyiben az anyag a fényt jobbra forgatja (az óramutató járásával megegyezően), akkor azt jobbra forgató anyagnak nevezik, jele:+. Amennyiben a fényt balra (az óramutató járásával ellentétesen) forgatja, akkor balra forgató anyagnak nevezik, jele:-.

8 Molekulatömeg vagy molekulatömeg-tartomány

A molekulatömeg az anyag egy molekulájának atomi tömegegységben (amu) vagy moláris tömegben (g/mol) kifejezett mennyisége. A molekulatömeget az anyag molekulaképletéből lehet kiszámítani: ez a molekulát alkotó atomok atomi tömegének összege. Olyan molekulák esetén, mint pl. bizonyos proteinek vagy nem meghatározott reakciókeverékek, amelyek esetén egy adott molekulatömeg nem határozható meg, molekulatömeg-tartomány adható meg.

Az anyagok molekulatömegének meghatározásához különböző módszerek használhatók:

- A gáz halmazállapotú anyagok esetén a molekulatömeg meghatározásához Avogadro törvényét lehet használni, amely kimondja, hogy azonos hőmérsékleti és nyomáskörülmények között a különböző gázok megegyező térfogata azonos számú gázmolekulát tartalmaz.

$$PV = nRT = NkT$$

n = mólok száma

R = univerzális gázállandó = 8,3145 J/mol K

N = a molekulák száma

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

k = R/NA

NA = Avogadro-szám = $6,0221 \times 10^{23}$ /mol

- Folyadékok és szilárd halmazállapotú anyagok esetén a molekulatömeg azok néhány oldószer olvadáspontjára, forráspontjára, gőznyomására vagy ozmózis nyomására gyakorolt hatásának meghatározása révén állapítható meg;
- Tömegspektrometria, kiemelkedően pontos mérési módszer;
- A nagy molekulatömegű komplex anyagok, mint a proteinek vagy vírusok molekulái esetén a molekulatömeg meghatározható például az ülepedési sebesség ultracentrifugában történő mérésével vagy fényszórásos fotometriával;
- Különböző eszközök állnak rendelkezésre a molekulasúlynak az anyag szerkezeti diagramja vagy molekulaképlete alapján történő kiszámítására (lásd az 1. függelék).

9 Az anyag összetétele

Az anyag összetételének, mint a fő összetevők, adalékanyagok és szennyeződések kombinációjának meghatározása minden anyag tekintetében a jelen útmutató 4. fejezetében ismertetett szabályok és kritériumok szerint kell, hogy történjen.

Minden összetevőt, adalékanyagot és szennyeződést megfelelően azonosítani kell a következők segítségével:

- Megnevezés (IUPAC-név vagy egyéb nemzetközileg elfogadott név);
- CAS-szám (amennyiben rendelkezésre áll);
- EK-szám (amennyiben rendelkezésre áll).
- Minden egyéb rendelkezésre álló azonosító

Amennyiben lehetséges, minden egyes összetevőre, összetevőcsoportra, adalékra vagy szennyeződésre vonatkozóan meg kell adni a kereskedelmi tétel (tömeg- vagy térfogat-) százalékában kifejezett jellemző koncentrációt. A megadott értékek összegének 100%-ot kell kitennie. A felső és alsó koncentrációs határértékeket, mint a kereskedelmi forgalomban lévő anyag tartományát mindig meg kell adni.

10 Spektrális adatok

A spektrális adatokra az egy összetevőből álló anyag megadott szerkezetének megerősítése céljából van szükség, vagy annak igazolásához, hogy a reakciókeverék nem készítmény. Többféle módszer használható spektrumként (ultraibolya, infravörös, magmágneses rezonancia vagy tömegspektrum). Nem minden módszer használható minden anyagtípus esetén. Ahol lehetséges, az útmutató útmutatást ad az egyes

anyagtípusok tekintetében megfelelő spektrumról (ECB, 2004; ECB, 2005).

A különböző, jól ismert módszerek esetén a következő információkat kell jelölni magán a spektrumokon vagy a függelékekben:

Ultraibolya-látható (UV-VIS) spektrum

- Az anyag azonosító adatai;
- Oldószer és koncentráció;
- Tartomány;
- A fő csúcsok helyzete (és epsilon értéke);
- Savas hatás;
- Lúgos hatás.

Infravörös spektroszkópia (IR) spektrum

- Az anyag azonosító adatai;
- Közeg;
- Tartomány;
- Eredmények (az azonosítás szempontjából fontos fő csúcsok megadása, pl. az ujjlenyomat-tartomány értékelése).

Magmágneses rezonancia (NMR) spektrum

- Az anyag azonosító adatai;
- Atommag és frekvencia;
- Oldószer;
- Adott esetben belső és külső referencia;
- Eredmények (nevezze meg az anyag azonosítása szempontjából fontos jeleket és az oldószernek, valamint a szennyeződéseknek megfelelő jeleket);
- Az ¹H NMR spektrumok esetén az integrál görbét meg kell adni;
- A gyenge NMR csúcsok intenzitását vertikálisan növelni kell, és a komplex mintákat ki kell terjeszteni.

Tömegspektroszkópia (MS) Spektrum

- Az anyag azonosító adatai;
- Gyorsító feszültség;
- A minta bejuttatásának módja (közvetlen behelyezés, GC-n át stb.);
- Az ionizálás módja (elektronütközés, kémiai ionizálás, gerjesztés stb.);
- A molekulaion (M);
- Az anyag azonosítása szempontjából jelentős fragmensek;
- M/z értékek vagy a szerkezet azonosítása szempontjából fontos csúcsok megjelölése;
- Komplex minták kiterjesztése.

Röntgendiffrakciós tömegspektrometria (XRD) spektrum

- Az anyag azonosító adatai;
- Feszültség,
- Aktuális
- Röntgenforrás és az anyagban jelen lévő kristályos fázis(ok) azonosítását lehetővé tevő bibliográfiai hivatkozások;

Legalább a következő követelményekre szükség van abban az esetben, ha az XRD-módszert használják az anyagban jelen lévő kristályos vagy amorf fázisok azonosítására és mennyiségi meghatározására:

- Az alkalmazott finomítási módszerek és belső standardok leírása;
- A modellezett/referencia diffrakciós minta közötti illeszkedést tükröző érdemi értéket bemutató ábra
- Mért minta, valamint az érdemi értéket bemutató ábra skálája (pl. 0-1 vagy 0-100)

Egyéb tudományosan elfogadott módszerek is használhatók, amennyiben a spektrális adatok megerősítik az anyag azonosságát, pl. belső szerkezetét.

A következő általános követelmények teljesítése szükséges a spektrum világos megértése és/vagy feldolgozása érdekében:

- A minta előkészítésének leírása;
- Jelölje meg a jelentős hullámhosszokat vagy adott esetben más adatokat;
- Adjon meg extra információkat, pl. a kiinduló anyagok spektrumát;
- Adja meg a felhasznált oldószert és/vagy egyéb lényeges részleteket a különböző módszereknél fent jelzett módon;
- Nyújtson be világos másolatokat (inkább, mint az eredetieket) megfelelően jelölt skálákkal;
- Adjon meg információt a felhasznált anyag koncentrációja tekintetében;
- Biztosítsa, hogy a legnagyobb anyagra vonatkozó csúcsok megközelítsék a legnagyobb skálaértéket.

11 Nagy teljesítményű folyadékkromatográfia, gázkromatográfia

Amennyiben az anyag típusa ezt lehetővé teszi, kromatogramot kell benyújtani az anyag összetételének igazolása érdekében. Például egy megfelelő kromatogram alátámasztja a reakciókeverék szennyeződéseinek, adalékanyagainak és összetevőinek jelenlétét. A keverékben lévő anyagok elválasztásának és azonosításának két legismertebb módszere a gázkromatográfia (GC) és a nagy teljesítményű folyadékkromatográfia (HPLC). A két módszer alapja a mozgó és álló fázis közötti interakció, amely a keverék összetevőinek elválásához vezet.

A GC/HPLC kromatogramoknál a következő adatokat kell feltüntetni magán a kromatogramon, vagy a mellékletekben (ECB, 2004; ECB, 2005):

HPLC

- Az anyag azonosító adatai;
- Az oszlop tulajdonságai, mint átmérő, töltet, hossz;
- Hőmérséklet, valamint a hőmérséklet-tartomány is, amennyiben alkalmazásra kerül;
- A mozgó fázis összetétele, valamint a tartomány is, amennyiben alkalmazásra kerül;
- Az anyag koncentráció-tartománya;
- Megjelenítési módszer, pl. UV-VIS;
- Eredmények (az anyag azonossága szempontjából jelentős, fő csúcsok jelölése);

GC

- Az anyag azonosító adatai;
- Az oszlop tulajdonságai, mint átmérő, töltet, hossz;
- Hőmérséklet, valamint a hőmérséklet-tartomány is, amennyiben alkalmazásra kerül;
- Injektálási hőmérséklet;
- Vivőgáz és a vivőgáz nyomása;
- Az anyag koncentráció-tartománya;

- Megjelenítési módszer, pl. MS;
- A csúcsok azonosítása;
- Eredmények (az anyag azonossága szempontjából jelentős, fő csúcsok jelölése).

12 Az analitikai módszerek leírása

A REACH-rendelet *VI. melléklete* előírja a regisztráló számára az anyag azonosításához és adott esetben a szennyeződések és adalékanyagok azonosításához szükséges analitikai módszerek vagy a megfelelő bibliográfiai hivatkozások leírását. Ennek az információnak elegendőnek kell lennie ahhoz, hogy a módszereket reprodukálni lehessen.

III. függelék – Az anyag azonosítása és az adatok közös benyújtása

Az útmutató általános része felvázolja azokat az általános elveket, amelyeket a potenciális regisztrálóknak követniük kell a regisztrálandó anyagaik azonosítása során. Ez a függelék a potenciális regisztrálóknak nyújt gyakorlati útmutatást arra vonatkozóan, hogy közös benyújtás esetén, az anyag azonosító adatainak és az anyagleírásnak a közös meghatározásakor hogyan alkalmazzák az anyagazonosítási elveket a REACH-rendelet „egy anyag, egy regisztráció” (OSOR) elvét követve. A közös benyújtási kötelezettségekről és általában az adatmegosztási folyamatról további információk találhatóak „Az útmutató az adatok megosztásához” című dokumentumban, amely a <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach> címen érhető el. Magától értetődik, hogy ugyanezeket, a fő útmutatóban meghatározott anyagazonosítási elveket kell alkalmazni – az anyag típusától függően – az ugyanazon anyagra vonatkozó közös regisztrálás esetén is.

A REACH-rendelet 11. cikke (1) bekezdésének és 19. cikke (1) bekezdésének első részei valóban előírják az „adatok több regisztráló általi közös benyújtását”. Konkrétabban, ezek a rendelkezések előírják, hogy „amennyiben valamely anyagot a Közösségben egy vagy több gyártó szándékozik gyártani, és/vagy egy vagy több importőr szándékozik behozni” az anyag tulajdonságaira és osztályozására vonatkozó információkat „először egy, a további hozzájáruló regisztrálók jóváhagyásával eljáró regisztráló nyújtja be (a továbbiakban: a vezető regisztráló)”.

Az adatok közös benyújtásáról és megosztásáról szóló (EU) 2016/9 bizottsági végrehajtási rendelet megerősíti és egységesíti ugyanazon anyag több regisztrálójának azon kötelezettségét, hogy bizonyos információkat közösen nyújtsanak be. Az információk közös benyújtása a gyakorlatban megköveteli, hogy az érintett felek megállapodjanak az anyagazonosítás kereteiről és hatályáról. Ezt nevezik anyagazonosítási profilnak vagy SIP-nek. Az anyagazonosítási profilnak meg kell határozni azon anyag kereteit, amelyekre a regisztrálók megállapodása szerint a közösen benyújtott adatok vonatkoznak. Ez azokra a regisztrálókra is vonatkozik, akik esetleg úgy döntöttek, hogy bizonyos információk tekintetében nem vesznek részt a közös benyújtásban.

Így a regisztráció által lefedett anyagazonosítási adatokban való megállapodás a közös benyújtás előfeltétele. Ezért ennek az egyetlen anyagazonosítási profilnak és az ahhoz kapcsolódó adatoknak az átláthatósága központi szerepet játszik a végrehajtásban. Következésképpen az anyag azonosító adatait vagy a SIP-et a vezető regisztrálóknak kell egyértelmű módon bejelentenie az összes többi regisztráló nevében benyújtott dokumentációban, míg az összetételre vonatkozó információkat minden regisztráló egyénileg jelenti be.

Az alábbi

2 egy egyszerű szemléltető példán keresztül bemutatja, hogyan lehet az egyes regisztrálók által az EU-ban gyártott/az EU-ba behozott vegyi anyagok anyagazonosítási profilját meghatározni. Bemutatja a regisztrálandó anyag azonosítását, a különböző összetételek összesítését, az adatok generálását és végül az IUCLID formátumú, regisztrálási dokumentációban történő benyújtását. A példa egy egyszerű, jól meghatározott, egyetlen összetevőből álló anyagra vonatkozik. Összetettebb anyagok esetében a SIP meghatározásának folyamata az ábra 3–5. lépéseinek megismétlését teheti szükségessé.

A potenciális regisztrálók közötti megbeszélések során a SIP-dokumentáció pl. Word-dokumentum vagy Excel munkalap formáját öltheti, amelyben a megállapodás szerinti releváns információkat rögzítik és valamennyi tag és potenciális tag számára

hozzáférhetővé teszik. Egyes ágazati szövetségek a SIP dokumentálása céljából sablonokat bocsátottak rendelkezésre, és ezeket számos regisztráló használta (pl. a Cefic-sablon³⁴). Mások a vonatkozó információkat egész egyszerűen egy Word-dokumentumban vagy az érintett anyag regisztrálása céljából létrehozott konzorcium weboldalán dokumentálták.

2. A regisztráció céljából benyújtott adatoknak megfelelő anyag azonosítási profiljának meghatározása

A több potenciális regisztráló által az általuk közösen benyújtott adatoknak megfelelő anyagazonosítási profil meghatározása során végrehajtható lépéseket egyszerű, jól meghatározott anyagok esetében a

2-n található példa szemlélteti (1–4. lépés).

Minden egyes potenciális regisztráló az általa gyártott/behozott anyagokra vonatkozó kötelezettségeit az anyagnak a REACH-rendelet 3. cikke (1) bekezdésében szereplő definíciója alapján és a jelen útmutató általános részében szereplő anyagazonosítási elvek alkalmazásával határozza meg (a 2. ábra (

2) 1. és 2. lépése).

Ezt követően minden potenciális regisztráló ellenőrizheti, hogy más potenciális regisztrálók esetében is ugyanaz a „név és egyéb azonosítók” szerepelnek (3. lépés). Ettől kezdve a potenciális regisztrálók ezen útmutató általános részének elveit együttesen alkalmazhatják az általuk közösen benyújtott adatoknak megfelelő anyag azonosító adatainak, azaz az anyagazonosítási profil meghatározásához (4. lépés).

A SIP általános módon írja le az anyagot, ide értve az összetételére vonatkozó információkat (beleértve minden egyéb releváns paramétert, mint például a morfológia, pl. fizikai forma, alak), a nevet és egyéb azonosítókat, amelyekre vonatkozóan a közösen benyújtott osztályozási és veszélyességi adatok relevánsak lesznek. A anyagazonosítási profil meghatározásakor nem szabad túlságosan konzervatív megközelítést alkalmazni annak érdekében, hogy ne zárjanak ki versenytársakat a közös benyújtásból.

A SIP közvetlen kapcsolatot hoz létre az anyagra vonatkozó, közösen benyújtandó azonosító adatok és veszélyességi adatok között. Ha elég korán meghatározzák, megkönnyítheti az információ létrehozásának/gyűjtésének szakaszát a regisztrációs kötelezettségek teljesítése során (az „Útmutató az információk követelményekhez és a kémiai biztonsági értékeléshez” című dokumentumban leírtak szerint; a

2 5. lépése annak biztosítása érdekében, hogy a létrehozott vagy gyűjtött adatok az anyag azonosító adatainak teljes körére kiterjedjenek.

Az útmutató központi, 4.2.3. és 4.3. szakaszainak megfelelően az összetettebb anyagok esetében a potenciális regisztrálók az 1–3. lépésben általában további paramétereket és/vagy deskriptorokat (pl. a forrás/folyamat leírása) használnak az összetételre vonatkozó információk tekintetében, és a megállapodás szerintieket be lehet építeni a SIP-be (4. lépés). Egyes esetekben az anyagazonosítás keretei és a közösen benyújtott veszélyességi adatok közötti kapcsolat csak akkor válhat teljesen egyértelművé, ha a

³⁴ A SIP leírása eredetileg a Cefic „Guidance for Lead Registrants” (Útmutató a vezető regisztrálók számára) című kiadványban szerepelt, amely a következő címen érhető el: <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. A regisztrálók által e sablon felhasználásával kidolgozott SIP-ekre vonatkozó példák többek között a REACH-központ honlapján található: <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

rendelkezésre álló veszélyességi adatok egy részét vagy egészét összegyűjtötték. Az anyagazonosítás összetettségétől és az 5. lépésben gyűjtött adatoktól függően a 3. és 5. lépések között szükség szerint ismétlések lehetnek, például ha bizonyos összetételek olyan összetevőket tartalmaznak, amelyek osztályozást és címkézést és/vagy PBT-értékelést vonnak maguk után. Az anyagazonosítás kereteinek megfelelő leírása érdekében a SIP egynél több összetételi profilt is tartalmazhat.

Az anyagazonosítási profilnak olyan általános információkat kell tartalmaznia, amelyek lehetővé teszik a közösen benyújtott adatoknak megfelelő anyagazonosítás kereteinek meghatározását:

- az anyag neve
- az érintett anyag valamennyi regisztrálója által lefedett, egyéb azonosítók (pl. CAS-szám, EK-szám, molekuláris és szerkezeti információk, leírás, amennyiben releváns)
- az összetételre vonatkozó információk:
 - az anyag azonosítása szempontjából releváns összetevők azonosító adatai és a megfelelő koncentrációtartományok,
 - az anyag azonosítása szempontjából releváns stabilizátorok azonosító adatainak általános listája (és adott esetben a vonatkozó koncentrációtartományok),
 - az anyag típusa szempontjából releváns további paraméterek általános listája (pl. egyes UVCB-k forrásfolyamat-deszkriptorai)

Fontos, hogy a közös benyújtás tárgyát képező anyag azonosításának kereteit meghatározó paramétereket valamennyi közösen regisztráló elfogadja, és azokat az anyagazonosítási profilban egyértelműen dokumentálják. Ennek megfelelően bármely új potenciális regisztráló kérelmére az anyagazonosítási profil módosítására vagy kiterjesztésére lehet szükség, amennyiben egyetértenek abban, hogy a közösen benyújtott adatok részben vagy egészben a szóban forgó regisztráló által gyártott vagy behozott anyag tekintetében is relevánsak.

Az anyagazonosítási profil nem eredményezheti a bizalmas üzleti információk regisztrálók közötti megosztását vagy a közös benyújtásból származó ilyen információk harmadik felek számára történő felfedését. Amennyiben a közösen regisztrálóknak az anyagazonosítási profil egyértelmű meghatározása érdekében potenciálisan bizalmas üzleti információkat kellene megosztaniuk – az adatmegosztásról szóló útmutatóban foglaltak szerint – megfontolhatják egy megbízott igénybevételeét.

3. Gyakorlati útmutató az anyagazonosítási profil dokumentálásához

A jól meghatározott és UVCB anyagok azonosításának általános elveit az útmutató általános része vázolja fel. Az alábbiakban gyakorlati útmutatás található arra vonatkozóan, hogyan kell ezeket az elveket együttesen alkalmazni. Az útmutató általános része rendelkezik arról, hogy az általános elvektől el lehet térni. Az ilyen eltérések megkövetelik, hogy a regisztrálók képesek legyenek bizonyítani a közösen benyújtott anyagazonosító adatok és veszélyességi adatok közötti közvetlen kapcsolatot.

3.1 Jól meghatározott anyagok

Ami a jól meghatározott anyagokat illeti, a fő összetevő(k), a koncentrációtartományuk (koncentrációtartományaik) és a szennyeződések meghatározásakor az egy összetevőből álló anyag azonosítása esetén a $\geq 80\%$ (m/m) elvet, a több összetevőből álló anyag azonosítása esetén pedig a $<80\%$ (m/m), $\geq 10\%$ (m/m) elvet kell követni. Ez minden egyes regisztrálóra, és több regisztráló esetén az összes közösen regisztrálóra együttesen vonatkozik az anyagazonosítási profil meghatározásakor. Az anyagazonosítási profilban

elfogadott szennyeződéprofilok bejelentése különösen fontos lenne. Amennyiben az anyagazonosítási profil olyan konkrét szennyeződések tartalmaz, amelyek hatással lehetnek az osztályozásra, a címkézésre és/vagy a PBT-értékelésre, az e szennyeződések által érintett regisztrálóknak ezeket figyelembe kell venniük az adatgyűjtési szakaszban (5. lépés). A vonatkozó VII-XI. melléklet szerinti információkat a REACH-rendelet 11. cikkének (3) bekezdésével összhangban közösen vagy külön-külön is benyújthatják (ún. opt-out lehetőségek). A feltüntetendő koncentrációértékeknek figyelembe kell venniük a közös benyújtásban szereplő koncentrációs tartományt.

Azon anyagoknál, amelyek esetében az anyag egyértelmű azonosításához további paraméterekre van szükség, minden regisztrálóknak követnie kell az ezen útmutató általános részének 4.2.3. fejezetében ismertetett elveket. Mérlegelni kell, hogy e paraméterek változékonysága adott esetben szükségessé tenné-e a közösen benyújtott osztályozási vagy veszélyességi adatok kiigazítását. Az anyagazonosítási profil közös benyújtás vonatkozásában történő meghatározása céljából hasonló megfontolások alkalmazhatók. Szükség lehet például arra, hogy az anyagazonosítási profilba belevegyék azokat a paramétereket (pl. fizikai forma és/vagy morfológiai paraméterek, mint pl. porozitás, részecskeméret, a részecske alakja), amelyek hatással lehetnek a veszélyességi profil meghatározása szempontjából releváns tulajdonságokra (pl. oldhatóság, reaktivitás, inhalációs toxicitás stb.). Ebben az esetben e paramétereknek az anyagazonosítási profil által lefedett általános tartományait átlátható módon kell megadni (pl. az összes regisztrálóra alkalmazandó részecskeméret-tartományok, alakjuk (alakjaik) felsorolása és a felszínkémiák listája). Így biztosítva van az anyagazonosítási profil vonatkozásában közösen benyújtott veszélyességi adatok teljessége.

Hasonlóképpen, a szerves vegyi anyagok kristályos fázisában mutatkozó különbségek az ezekre a fázisokra jellemző, eltérő kockázati profillal kapcsolatos megfontolásokat vonhatnak maguk után (pl. kvarc, krisztobalit, amorf szilícium-dioxid). Figyelembe véve a különböző fázisok tulajdonságai közötti lehetséges különbségeket, ezen anyagok potenciális regisztrálóknak kell mérlegelniük, hogy egyetlen, az összes fázisra kiterjedő közös regisztrációt – a különböző fázisokra jellemző veszélyességi adatokat is beleértve – vagy a különböző fázisokra (azaz különböző anyagokra) különálló közös regisztrációkat nyújtsanak-e be. Az érintett fázisokat mindkét esetben fel kell sorolni az anyagazonosítási profilban, továbbá a VII-XI. melléklet vonatkozó adatainak a regisztráció által lefedett összes fázisra ki kell terjedniük, ezáltal biztosítva, hogy az adatok a teljes anyagazonosítási profilt lefedik.

Meg kell jegyezni, hogy az összetételek eltérő szennyeződé- és/vagy veszélyességi profillal rendelkezhetnek, és ezek a különbségek nem feltétlenül jelentik azt, hogy ezek az összetételek nem regisztrálhatók ugyanabban a regisztrációban.

3.2 UVCB anyagok

Az UVCB anyagok esetében az azonosítás nagyobb kihívást jelenthet, ezért az átlátható dokumentáció nagyon hasznos az anyag azonosító adatairól való megegyezésben a közös regisztrálás során. Minden potenciális regisztrálóknak egyenként figyelembe kell vennie az ezen útmutató általános részében szereplő tanácsokat, majd közösen ugyanazokat az elveket kell alkalmazniuk. Megjegyzendő, hogy a koncentrációtartományoknak az anyagazonosítási profilban történő összevonása nagyon széles koncentrációtartományokat tartalmazó profilhoz vezethet, esetleg olyan mértékben, hogy az már nem tekinthető egyetlen anyagnak.

Az útmutató általános részében leírtak szerint egyes UVCB anyagok azonosításának alapja a forrás és az előállításuk során alkalmazott folyamat, nem pedig közvetlenül az alkotóelemeik azonosító adatai és koncentrációtartományai. Ezekben az esetekben más

deszkriptorok szolgálnak az összetevők azonosító adatainak és a hozzájuk tartozó koncentrációtartományok helyettesítőjeként. A potenciális regisztrálók az anyag azonosításához szükséges mértékben leírhatják a gyártási folyamatot, a forrásra és a folyamatra kitérve. A leírás tartalmazhat minden olyan további paramétert/jellemzőt, amelyet a regisztrálók az anyaguk azonosítása szempontjából fontosnak tartanak (lásd például táblázat5 az útmutató általános részében). A közös regisztrálás céljából a leírásokat csak akkor osztják meg, ha ez szükséges ahhoz, hogy megállapodjanak a regisztrálandó UVCB anyag azonosító adatairól. A potenciális regisztrálók egyénileg és közösen is követhetik az útmutató általános részében ismertetett elveket. Az anyagazonosítási profil így a forrás- és eljárásparaméterek általános jelentését eredményezi úgy, hogy az az egyes regisztrálók összetételeinek teljes körét lefedi. Ezt a 3 szemlélteti.

A forrás és az eljárás alapján azonosított anyagok esetében az útmutató általános részében foglaltak szerint a forrásban vagy az eljárásban bekövetkező bármely jelentős változás valószínűleg eltérő anyagokat eredményezne, amelyeket külön kell regisztrálni. Az ettől az elvtől való eltérések azt jelentenék, hogy a regisztrálók bizonyítani tudják, hogy minden egyes eljárás/forrás kombináció olyan összetételeket eredményez, amelyek ugyanazon közös regisztrálás keretében kezelhetők. A forrásanyagokban, valamint a folyamatban és/vagy folyamatfeltételekben bekövetkező kisebb változások figyelembe vehetők az anyagazonosítási profilban. A regisztrálóknak meg kell állapodniuk abban, hogy az egyes folyamat/forrás kombinációk olyan mértékben hasonló összetételeket eredményeznek, hogy azok egy anyagnak tekinthetők, valamint meg kell győződniük arról, hogy a veszélyességi adatok a SIP összes változata vonatkozásában megfelelőek. Konkrétabban, a regisztrálóknak tudniuk kell igazolni, hogy a közösen benyújtott veszélyességi adatkészlet releváns az összes ilyen összetételre, vagy adott esetben kiegészítették a REACH-rendelet 11. cikkének (3) bekezdése alapján meghatározott összetételekre vonatkozó, külön benyújtott információkkal (opt-out).

Az adatkészlet relevanciájának az egyes folyamat/forrás kombinációk vonatkozásában történő demonstrálása érdekében ezeket a kombinációkat átlátható módon dokumentálni kell az anyagazonosítási profilban, a jelenlegi és jövőbeli közös regisztrálókra alkalmazott felvételi/kizárási kritériumok rögzítése érdekében.

Az UVCB anyagok egyéb típusai esetében (lásd az útmutató általános részének 4.3.2. fejezetét) a potenciális regisztrálók adott esetben összetételi és további deszkriptorok kombinációját használhatják. Egyes olajkémiai anyagok esetében például az összetétel változó az alkotóelemek alkilánc-hosszúság eloszlásának változékonysága miatt, ezért az alkilánc-hosszúság eloszlása az azonosítás során használt további deszkriptor lehet. A SIEF által alkalmazott megközelítést átlátható módon kellene dokumentálni az anyagazonosítási profilban.

3.3 Az anyagazonosítási profil

Az adatokat közösen benyújtó valamennyi regisztráló felelőssége, hogy megállapodjanak az anyaguk azonosításához szükséges paraméterekről és azokat a megfelelő anyagazonosítási profilban átlátható módon dokumentálják. A szokásos anyagazonosítási elvektől való, közösen elfogadott eltéréseket átlátható módon kell dokumentálni. Mivel a SIP tartalmazza a felvételi/kizárási kritériumokat, a SIEF-nek biztosítania kell, hogy az alkalmazott kritériumok átláthatóak legyenek, és hogy az összegyűjtött/generált, vonatkozó VII–XI. melléklet szerinti adatok bizonyíthatóan lefedjék az összes elfogadott összetételi profilt.

Amennyiben a potenciális regisztrálók a 3. cikk (1) bekezdésével összefüggésben egyénileg stabilizáló adalékanyagokat vesznek fel azonosítási profiljukba, ezek azonosítóit

és koncentrációtartományait egyeztetni kell és a SIP-be átlátható módon dokumentálni kell.

Az adatgyűjtési szakaszban figyelembe kell venni az adatoknak a VII–XI. melléklet szerinti tájékoztatási követelmények teljesítése érdekében történő előállításához/gyűjtéséhez használt vizsgálati anyag(ok) relevanciáját. A SIP által lefedett összetételekre vonatkozó reprezentativitásukkal kapcsolatos következtetések indoklását dokumentálni kell, és fel kell tüntetni a technikai dokumentációban. Ez különösen a széles összetételi profilokat lefedő, összetett anyagok esetében lenne fontos.

A potenciális regisztrálók az adatgyűjtés során dönthetnek úgy, hogy az anyagazonosítási profiljuk túlságosan tág, és nem alkalmas az érintett anyag azonosítása szempontjából reprezentatív veszélyességi információk közös benyújtására. Ilyenkor a potenciális regisztrálók dönthetnek úgy, hogy felosztják a SIEF-et, hogy lehetővé tegyék két vagy több anyag külön azonosítását³⁵. Ilyen esetben mindegyik anyagnak saját anyagazonosítási profillal kell rendelkeznie, és az adott anyag azonosítása szempontjából reprezentatív veszélyességi információk mindegyik anyag vonatkozásában külön, közös benyújtás tárgyát kell, hogy képezzék. Azokat az okokat, amelyek miatt egyes veszélyességi információk nem voltak reprezentatívak az anyagazonosítás bizonyos paramétereire szempontjából, minden egyes regisztráció esetében átlátható módon dokumentálni kell a SIP-ben. Az érintett potenciális regisztrálók ebben a szakaszban úgy is dönthetnek, hogy az osztályozást és címkézést, PBT-értékelést stb. magával vonó összetevők és/vagy szennyeződések alapján az összetételi profilokat tovább kell finomítani.

Az anyagazonosítási profilban már megállapodott, de a regisztrációt még nem benyújtott potenciális regisztrálókhoz csatlakozni kívánó potenciális regisztrálóknak mérlegelniük kell, hogy az anyagazonosító adataik a SIP keretein belül vannak-e. Ha nem, akkor megvitatják, illetve megegyeznek a potenciális regisztrálókcal arról, hogy szükséges-e a profilt kiterjeszteni az új tagra vagy megállapodnak abban, hogy az anyag nem illik a profilba.

A SIP-et ki kell igazítani, ha a potenciális regisztráló által regisztrálandó anyag olyan konkrét anyagazonosító paraméterekkel rendelkezik, amelyek megváltoztathatják a közösen benyújtott veszélyességi információk reprezentativitását és ezért konkrét indokolást igényelnek (pl. konkrét szennyeződés, eltérő összetételi arány, eltérő fázis, eltérő részecskeméret stb.). Az átláthatóság érdekében ezt a paramétert a SIP-ben kell megadni.

Egyedi esetekben a potenciális és a meglévő regisztrálók megállapodhatnak abban, hogy a közösen benyújtott veszélyességi információk a SIP elfogadott keretein kívül eső, eltérő anyagazonosítási paraméterek miatt a potenciális regisztráló anyaga szempontjából alapvetően nem reprezentatívak. Ebben az esetben a potenciális regisztrálóknak külön regisztrációt kell benyújtania más, e paramétert tartalmazó anyagazonosítóval rendelkező regisztrálókcal együtt, vagy egyedileg, ha ugyanazon anyag tekintetében nincs más regisztráló.

³⁵ Az EINECS-nek az anyag azonosító adatainak a REACH-rendelet szerinti meghatározásában betöltött szerepével kapcsolatos megfontolások a REACH- és a CLP-rendelet szerinti illetékes hatóságok (CARACAL) 4. ülésén elfogadott CARACAL-dokumentumban található: CA/74/2009 rev.2 „Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)” (Anyagazonosítás és SIEF létrehozása (az EINECS szerepe)).

4. Az anyagazonosítási profil bejelentése a regisztrálási dokumentációban

Ha a potenciális regisztrálók összegyűjtötték/generálták az anyagokra vonatkozóan a VII-XI. mellékletben előírt összes adatot (azaz a 2. ábra (

2) 5. lépése), az adatcsomag készen áll arra, hogy IUCLID formátumban bejelentsék az Ügynökségnek benyújtandó dokumentációkban (azaz a 2. ábra (

2) 6. lépése). A SIP IUCLID formátumban történő bejelentésénél a nevet és egyéb azonosítókat, az összetételre vonatkozó információkat és adott esetben egyéb paramétereket az IUCLID 1.1 és 1.2 szakaszban kell megadni.

Anyagazonosítási profil	Bejelentés az IUCLID-ben
név és egyéb azonosítók	Az összes dokumentáció 1.1. szakasza
az összetételre vonatkozó információk és adott esetben egyéb paraméterek	A vezető regisztráló által benyújtott dokumentáció 1.2. szakasza

Az anyagazonosítási profilban található nevet és egyéb azonosítókat valamennyi dokumentáció 1.1. szakaszában kell megadni. A vezető regisztráló a dokumentációja 1.2. szakaszában a „boundary composition of the substance” (az anyag keret szerinti összetétele) formájában jelenti be a SIP összetételére vonatkozó információkat és más releváns paramétereket.³⁶ A vezető regisztrálónak a 4–14. szakaszban valamennyi VII–XI. melléklet szerinti adatot (egy vagy több információs követelményre vonatkozó, indokolt opt-out hiányában) valamennyi regisztráló nevében is be kell nyújtania.

Minden egyes regisztráló (a vezető regisztrálót is beleértve) saját dokumentációjának 1.2 szakaszában jelenti be az általa kifejezetten gyártott vagy importált anyagra vonatkozó, jogi személy összetételére vonatkozó adatokat. Ez azt jelenti, hogy a vezető regisztráló dokumentációja 1.2 szakaszában bejelenti mind az SIP összetételére vonatkozó információkat, mind a jogi személy összetételére vonatkozó információkat, míg az összes többi regisztráló saját, összetételre vonatkozó információit jelenti be. Minden szabványos regisztrációnak tartalmaznia kell az IUCLID 1.4. szakaszában szereplő vonatkozó analitikai információkat is.

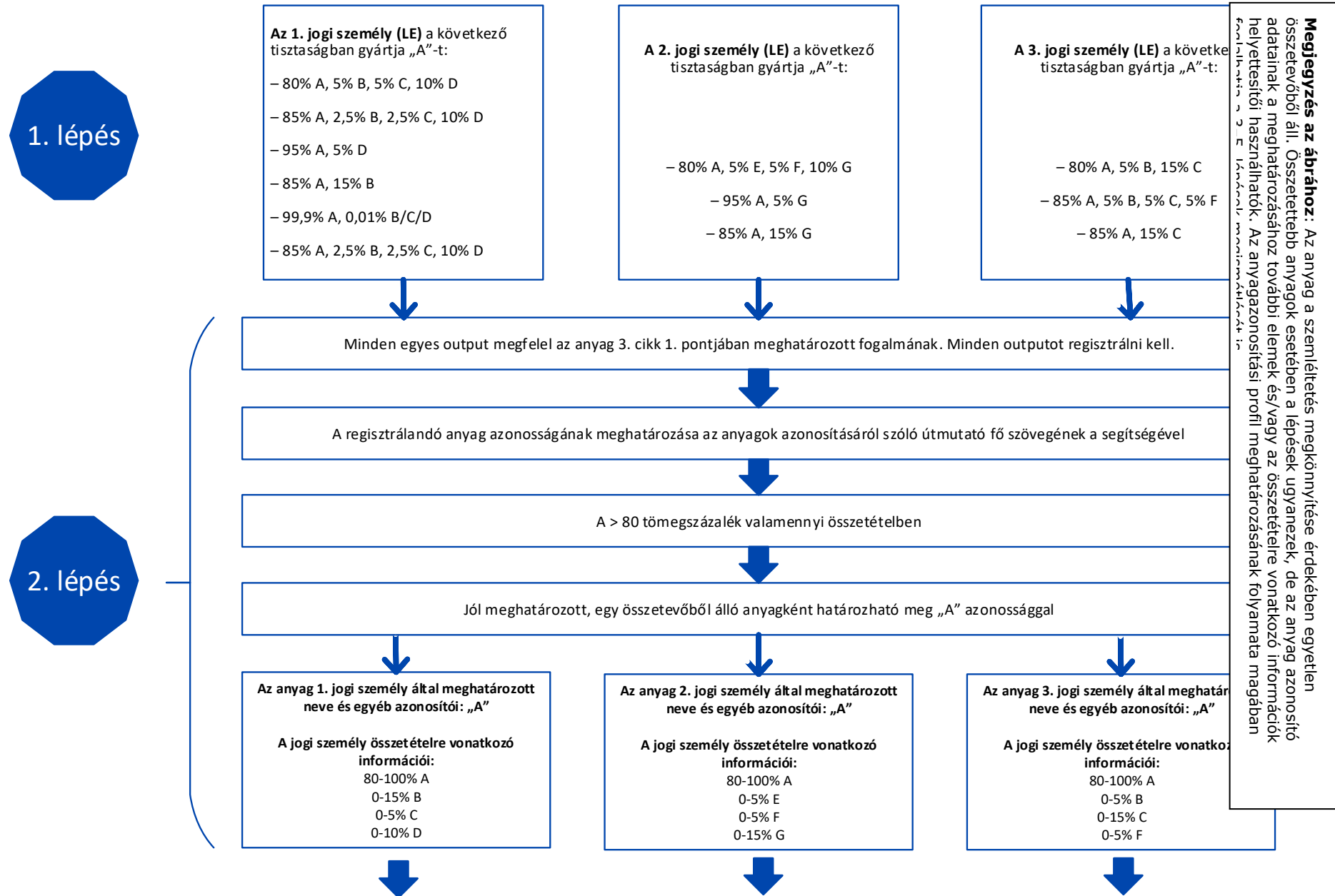
Minden regisztrálónak bizonyítania kell, hogy a SIP „keret szerinti összetétel” része és a VII-XI. melléklet szerinti, (indokolt opt-out hiányában) a vezető regisztráló dokumentációjában benyújtott adatok lefedik az általa kifejezetten gyártott vagy behozott anyagok összetételére vonatkozó információkat.

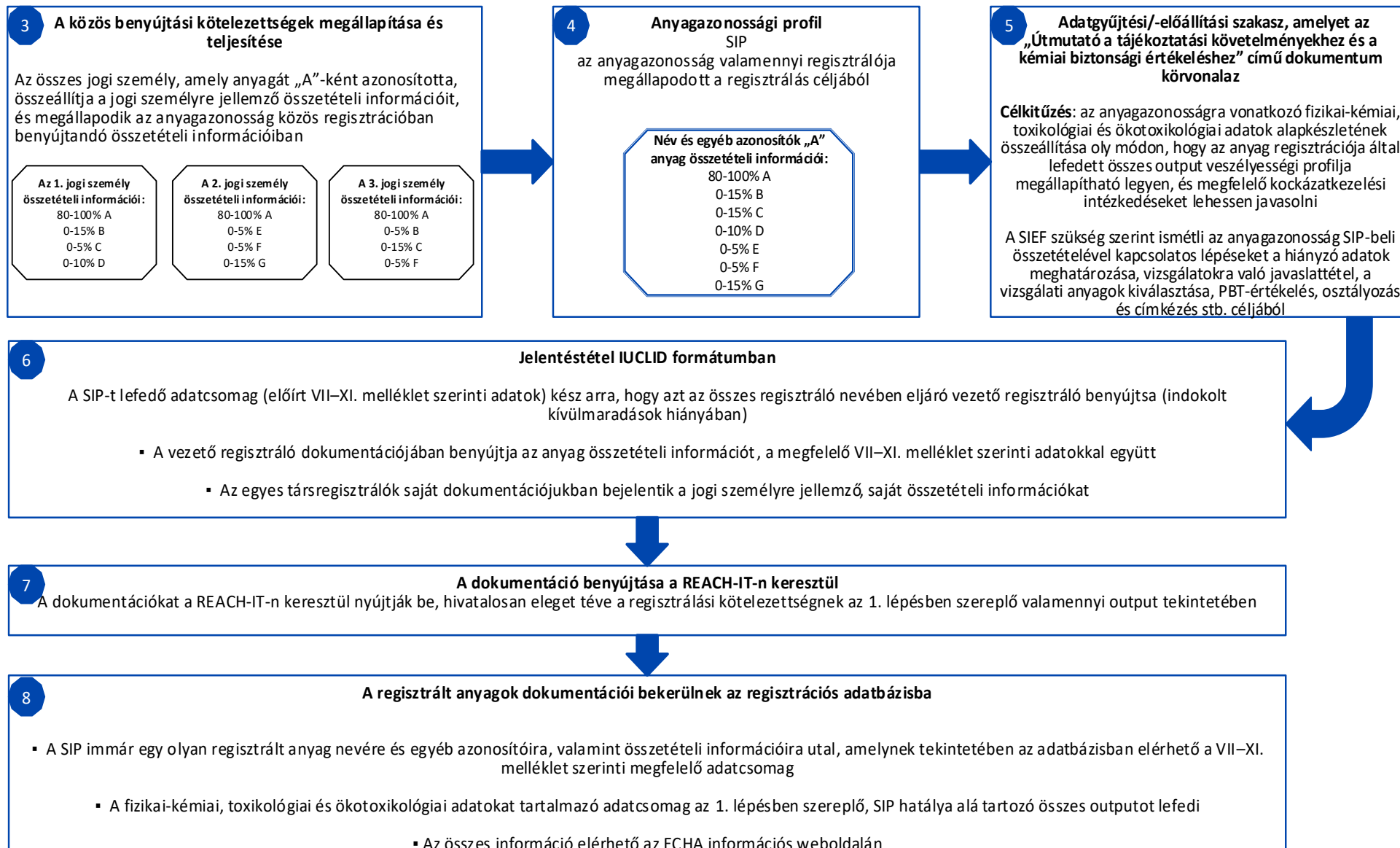
Az IUCLID-kézikönyvekben technikai útmutatások találhatók arra vonatkozóan, hogyan kell az összetételre vonatkozó információkat IUCLID-formátumban bejelenteni (<http://echa.europa.eu/manuals>).

2. ábra (következő oldal): A potenciális regisztrálók által teendő lépések vázlatos áttekintése a regisztrálási kötelezettségeik meghatározásától (1) az egyetlen anyaguk azonosítási profiljának meghatározásán át (4) a regisztrációjuk benyújtásáig, ami az

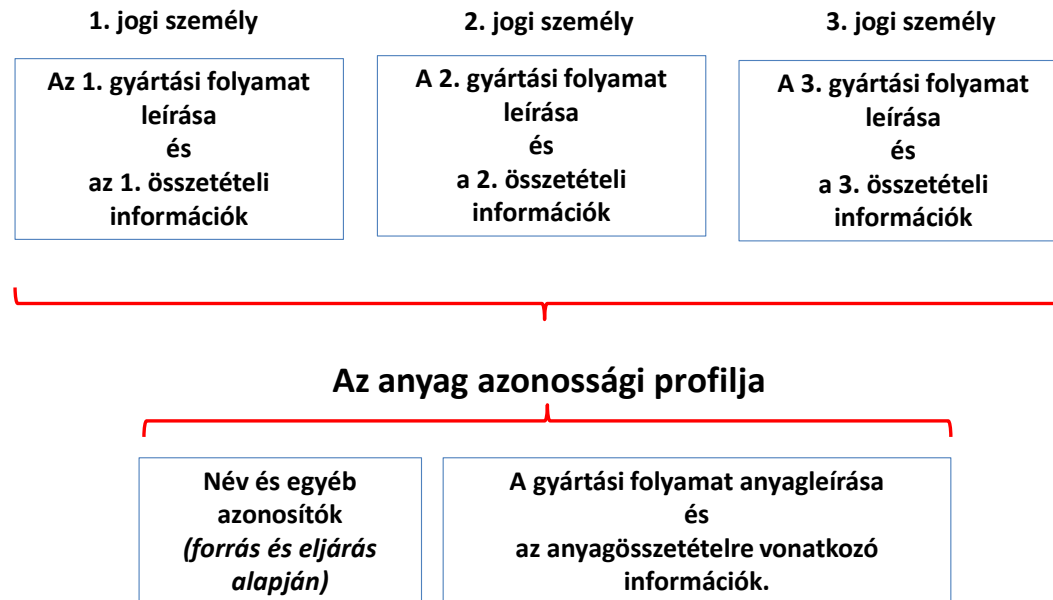
³⁶ Az „anyag keret szerinti összetételének” bevitelére vonatkozó utasítások a „How to prepare registration and PPORD dossiers” (A regisztráció a PPORD-dokumentációk előkészítése) című kézikönyvben található, amely a következő címen érhető el: <http://echa.europa.eu/manuals>.

anyagaik regisztrálására vonatkozó kötelezettségek formális teljesítését jelenti (8).





3. ábra: Az anyagazonosítási profil meghatározásának szemléltető vázlata (2. ábra, 4. lépés) egy UVCB típusú anyag esetében, amelyet egyes jogi személyek forrás- és folyamatleírásaiból származó forrás- és folyamatdeskriptorok alapján azonosítottak.



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